



### CURRICULUM VITAE (CVA)

**AVISO IMPORTANTE – El Curriculum Vitae no podrá exceder de 4 páginas. Para rellenar correctamente este documento, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.**

**IMPORTANT – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website**

<b>Fecha del CVA</b>	15/6/2023
----------------------	-----------

#### Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	M. Carmen		
Apellidos	Jiménez Calzado		
Sexo (*)	Mujer	Fecha de nacimiento	
DNI, NIE, pasaporte			
Dirección email		URL Web	<a href="https://personal.us.es/calzado/">https://personal.us.es/calzado/</a>
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0003-3841-7330		

\* datos obligatorios

#### A.1. Situación profesional actual

Puesto	Catedrática de Universidad		
Fecha inicio	04/07/2022		
Organismo/ Institución	Universidad de Sevilla		
Departamento/ Centro	Departamento de Química Física		
País	España	Teléfono	
Palabras clave	Química teórica y computacional. Magnetismo molecular. Transferencia electrónica. Estructura electrónica. Métodos variacionales y perturbativos. Métodos basados en DFT. Hamiltonianos Efectivos. Simulación propiedades magnéticas y validación modelos de spin.		

#### A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora, de acuerdo con el Art. 14. 2.b) de la convocatoria, indicar meses totales)

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
2022-actual	Catedrática de Universidad/ US
2007-2022	Profesora Titular Universidad/ US
2019	Prof. Invitée / U. Toulouse III / Francia
2014	Prof. Invitée / U. Rennes / Francia
2004-2007	Prof. Contratado Doctor /US
1997-2004	Prof. Asociada /US
2000	Beca postdoctoral CE / U. Paul Sabatier / Francia
1999	Contrato postdoctoral TMR CE/ U. Paul Sabatier / Francia
1994-1997	Beca predoctoral FPI /US

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)

#### A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/Pais	Año
Licenciatura en Química	Facultad de Química . U. Sevilla	Junio 1993
Tesina de Grado en Química	Dpto. Química Física. U. Sevilla	Marzo 1995
Doctorado en Química con acreditación de Doctorado Europeo	Dpto. Química Física. U. Sevilla	Mayo 1998

(Incorporar todas las filas que sean necesarias)



## Parte B. RESUMEN DEL CV

- Natural de Palma del Río (Córdoba), 1970. Casada. Dos hijos (2005,2010).
- Especializada en el tratamiento teórico de sistemas magnéticos moleculares y extendidos y sistemas de valencia mixta, mediante métodos basados en la función de onda (CASSCF, CASPT2, NEVPT2, DDCI), y en el funcional de la densidad (DFT). Amplia experiencia en la evaluación de acoplamientos magnéticos y electrónicos, así como otros parámetros de interacción local, a través de hamiltonianos efectivos, y la racionalización de la naturaleza y amplitud de estas interacciones mediante el análisis de la función de onda y su lectura en base localizada. Amplia variedad de sistemas abordados: orgánicos, inorgánicos e híbridos, moléculas y sólidos cristalinos. Interesada en las transiciones de spin, fotomagnetismo, mecanismos de transición óptica y térmicamente inducidos. Particular interés en la simulación de las propiedades macroscópicas de sistemas magnéticos polinucleares y en la validación de modelos de spin. Involucrada en el desarrollo y aplicación de diversas estrategias computacionales para el tratamiento teórico de sistemas de gran tamaño mediante métodos basados en la función de onda (orbitales localizados, dedicados, técnicas de truncación de espacio de IC,...).
- Adscrita al Dpto. Química Física de la U. Sevilla, donde es Catedrática de Universidad desde Julio. 2022, ha llevado a cabo estancias en distintos laboratorios nacionales y europeos (Tarragona, Toulouse, Cosenza, Ferrara, Bologna, Rennes), estancias postdoctorales en el Laboratoire de Physique et Chimie Quantiques (U. Paul Sabatier, Toulouse) bajo la supervisión de Prof. J.P. Malrieu. Estancias como profesora invitada en dos universidades europeas ( U. Rennes, 2014; U.Toulouse III-IRSAMC, 2019). Investigadora visitante en CINECA (Italia) 2002, financiada mediante proyecto europeo MINOS, movilidad y acceso a infraestructuras de investigación.
- Ha colaborado con otros grupos europeos interesados en los sistemas magnéticos y en su tratamiento teórico tales como los grupos de Prof. Caballol, Dr. De Graaf (Tarragona), (Prof. Illas, Dr. Moreira (Barcelona), Profs. Malrieu, Evangelisti y Maynau (Toulouse), Dr. Angeli, Dra. Ferretti (Ferrara), Prof. Champagne(Namur), Prof. Robert (Strasbourg ), Prof. Ozarowski (Florida) y Dr. Jung (Los Alamos). Con colaboraciones activas con grupos experimentales relevantes a nivel internacional y estrechamente relacionados con las líneas de investigación de este proyecto: Dr. E. Burzurí (IMDEA Nanociencia), Prof. T. Mallah, V. Repain (Francia), Prof. M. Gruber (Alemania), Dr. K.S. Kumar (Alemania).
- Cuatro sexenios de investigación (1994-1999; 2000-2005; 2006-2011; 2012-2017)
- 90 artículos en revistas indexadas en JCR, con índice h 29 y 2955 citas acumuladas (Web of Science). De estos artículos, ha sido corresponding author en 49 de ellos, primer autor en 31 de ellos. Un total de 42 artículos derivan de proyectos nacionales, en los que ha sido IP.
- Certificación positiva en el Programa de Incentivación de la Incorporación e Intensificación de la Actividad Investigadora (Programa I3). Convocatoria 2007
- IP en cinco proyectos del Plan Nacional (CTQ2008-06644-C02-02, CTQ2009-07767,CTQ2015-69019-P, PGC2018-101689-B-I00, PID2021-127674NB-I00) y en un proyecto de I+D+i en el marco del Programa Operativo FEDER Andalucía 2014-2020 (US-1380922).
- Participación como investigadora en proyectos financiados en convocatorias públicas de carácter competitivo, a nivel nacional (5), europeo (6) e internacionales (2)
- Participación continuada en congresos y workshops internacionales, mediante conferencias invitadas (9), comunicaciones orales y posters. Organización de congresos (3) y ciclos de conferencias (2).
- Dirección de TFMs en másteres nacionales y extranjeros. Dirección de la tesis doctoral de J. Zapata-Rivera, actualmente Prof. Titular en la U. de los Andes (Bogotá, Colombia). Dirección de una tesis doctoral en ejecución. Dirección de trabajos fin de grado en Química. Participación frecuente en la evaluación de tesis doctorales en España (8) y Europa (15), como miembro del tribunal y evaluadora externa.
- Responsable del grupo de investigación FQM 399: *Ciencia de Materiales Avanzados: estructura electrónica, propiedades magnéticas, ópticas y eléctricas* del Plan Andaluz de Investigación.
- Supervisora y tutora de formación de estudiantes predoctorales europeos (L. Tenti, U. Ferrara, dos estancias 2015, becas de movilidad, Tesis con Mención Europea avalada por estas estancias, Mejor Tesis



Doctoral de la Escuela de Doctorado de U. Ferrara 2017; J. Jung, Institut de Sciences Chimiques de Rennes, estancia 2014, beca de movilidad, actualmente Investigadora en Los Alamos (USA)).

- Responsable de investigadores postdoctorales, con becas por concurrencia competitiva (N. Montenegro-Pohlhammer, 2019, 2020, CONYCIT; J. Zapata-Rivera, 2014, 2015, 2017, 2021 AUIP, HPC-Europa 3; N.D. Arias-Olivares, 2021, HPC-Europa 3).
- Anfitriona de investigadores seniors (Dr. Daniel Maynau, U.Paul Sabatier- IRSAMC, Francia, 2015; Prof. Dr. Celestino Angeli, U. Ferrara, Italia, 2012; Prof. B. Brena, U. Uppsala, Suecia, 2019).

## Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES (últimos 10 años)-

### C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias (ver instrucciones).

#### 31 artículos entre 2013-2022, AC en 25 de ellos, 29 en Q1.

- Theoretical approach to the one-step versus two-step spin transitions in Hoffman-like Fe(II) metal-organic frameworks. Arias-Olivares, D.; Sánchez de Armas, R. Calzado, C.J. Mater. Today Chem. 30, 101489 (2023). Q1. AC 3/3
- Exploring the potential as molecular quantum-dot cellular automata of a mixed-valence Ru2 complex deposited on a Au(111) surface. Montenegro-Pohlhammer, N.; Palomino, Carlos M.; Calzado, C.J. Inorg. Chem. Front. 10, 2484 (2023). D1. AC 3/3
- Spin-crossover complexes in nanoscale devices: main ingredients of the molecule-substrate interactions, Sánchez-de-Armas, R.; Montenegro-Pohlhammer, N.; Develioglu, A.; Burzuri, E.\*; Calzado, C.J.\* Nanoscale, 13, 18702 – 18713 (2021). Q1. AC. 5/5
- Deposition of the spin crossover FeII–pyrazolylborate complex on Au(111) surface at the molecular level. Montenegro-Pohlhammer, Nicolás; Sánchez-de-Armas, Rocío; Calzado, C. J.\* Chem. Eur. J. 27, 712-723 (2021). Q1. AC. 3/3.4 citas.
- Spin-state-dependent electrical conductivity in single-walled carbon nanotubes encapsulating spin-crossover molecules. Villalva, J.; Develioglu, A.; Montenegro-Pohlhammer, N.; Sánchez-de-Armas, R.; Gamonal, A.; Rial, E.; García-Hernández, M; Ruiz-González, L.; Sánchez Costa, J.\*; Calzado, C. J.\*; Pérez, E. M.\*; Burzuri, E.\* Nat. Commun. 12, 1578 (2021). D1, AC. 10/12. 9 citas.
- Copper-nitroxide based breathing crystals: a unified mechanism of gradual magnetostructural transition supported by quantum chemistry calculations, Sánchez-De-Armas, R.; Cruz Hernández, N; Calzado, C. J.\*, Inorg. Chem. Front. 6, 1228-1237 (2019). Q1. AC 3/3
- Evaluation of the Magnetic Interactions in Salts Containing [Ni(dmit)2]– Radical Anions. Zapata-Rivera, J.; Maynau, D.; Calzado, C.J.\*, Chem. Mater. 29, 4317 (2017). D1. AC 3/3, 9 citas.
- Metal–Metal Interactions in Trinuclear Copper(II) Complexes [Cu<sub>3</sub>(RCOO)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>TEA)<sub>2</sub>] and Binuclear [Cu<sub>2</sub>(RCOO)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>TEA)<sub>2</sub>]. Syntheses and Combined Structural, Magnetic, High-Field Electron Paramagnetic Resonance, and Theoretical Studies. Ozarowski, A.\*; Calzado, C.J.\*, Sharma, R.P., Kumar, S. Jezierska, J., Angeli, C., Spizzo, F., Ferretti, V.\*. Inorg. Chem. 54, 11916 (2015). Q1. AC. 2/8, 52 citas.
- Mechanism of Magnetostructural Transitions in Copper-Nitroxide-Based Switchable Molecular Magnets: Insights from ab Initio Quantum Chemistry Calculations. Jung, J., Le Guennic, B., Fedin, M.V., Ovcharenko, V.I., Calzado, C.J.\*, Inorg. Chem. 54, 6891 (2015). Q1. AC, 5/5, 11 citas
- Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians. Malrieu, J. P., Caballol, R., Calzado, C.J., de Graaf, C., Guihery, N.\* Chem. Rev. 114, 429-492 (2014). D1. 3/5, 264 citas. Highly cited paper.
- On the Controversial Fitting of Susceptibility Curves of Ferromagnetic CuII Cubanes: Insights from Theoretical Calculations. Very Important Paper (VIP). Calzado, C.J.\*, Chem. Eur. J. 19, 1254-1261 (2013). Q1.AC, 1/1, 26 citas.

### C.2. Congresos

Seis comunicaciones orales, dos posters y ocho conferencias invitadas y/o plenarias en congresos internacionales en los últimos diez años:



- “*Spin-crossover Fe(II) complex on gold surface: a combined study using wavefunction and DFT-based approaches*”, C.J. Calzado. *Conf.invitada*. Magnetic Molecules on Surfaces, COSMICS virtual Workshop (2021)
- “*Unified mechanism of the magnetostructural transitions in copper-nitroxide based switchable molecular magnets*”. C.J. Calzado, *conf. invitada*. Computation and Understanding in Quantum Molecular Science”(Toulouse, 2019);
- “*Exploring the electronic structure and magnetic properties of molecular devices based on hybrid organic-inorganic systems*”. C.J. Calzado, R. Sánchez-de-Armas, N. Montenegro-Pohlhammer, G. Cardenas-Jiron. Keynote lecture. 5<sup>th</sup> International Conference on Materials Science (Valdivia, Chile, 2019)
- “*Wavefunction analysis of magnetic properties of polynuclear transition metal compounds*”, C. J. Calzado. Ponencia Invitada. 2 h. VII Encuentro Nacional de Químicos Teóricos y Computacionales, IV Escuela Colombina de Teoría y Computación en Ciencias Moleculares. (Barraquilla, Colombia, 2018).
- “*Hybrid organic-inorganic magnetic systems*”. C.J. Calzado. *Conf. Invitada*. Theoretical Studies of Magnetic Systems: Methods and Applications (Toulouse, 2018)
- “*Giant ferromagnetic  $\pi$ - $d$  interaction in iron-phthalocyanine molecule: magnetism in hybrid organic-inorganic systems*”, R. Sánchez-de-Armas, C.J. Calzado, *comunicación oral*, 2<sup>nd</sup> European Conference on Molecular Spintronics, ECMOLS2018, (Peñíscola, 2018).
- “*Mechanisms of spin transitions on copper-nitroxide-based molecular magnets*”. C.J. Calzado, J. Jung, B. Le Guennic, M.V. Fedin, V.I. Ovcharenko, Keynote lecture. 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2016, Castellón)
- “*Theoretical characterization of the all-ferric and mixed-valent states of a biomimetic [2Fe2S] cluster*”, C.J. Calzado, *conf. invitada*. Theoretical Chemistry in Spain told by women (Tarragona, 2013);
- “*Evaluation of magnetic terms in Cu<sub>4</sub>O<sub>4</sub> cubane-like systems*”: C. J. Calzado. *Conf. invitada*. Workshop on Strongly Correlated Systems, Cooperativity and Valence-Bond Theory (Coruña, 2011)

### **C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado,**

**Referencia del proyecto:** PID2021-127674NB-I00. **Entidad financiadora:** MICINN

**Título:** Moléculas magnéticas en interacción con sustratos

**Investigador principal:** C.J. Calzado. **Duración:** 01/00/2022- 31/08/2025.

**Referencia del proyecto:** PGC2018-101689-B-I00 **Entidad financiadora:** MICINN

**Título:** Dispositivos Moleculares desde el Punto de Vista de la Química Cuántica

**Investigador principal:** C. J. Calzado. **Duración:** 01/01/2018- 30/09/2022.

**Referencia del proyecto:** US-1380922 **Entidad financiadora:** Junta Andalucía

**Título:** Sensores Magnéticos Basados en Sólidos Porosos: Mejora de las Propiedades Magnéticas a Través de la Adsorción en El Poro

**Investigador principal:** R. Sánchez de Armas (IP1) C.J. Calzado (IP2). **Duración:** 01/01/2021- 31/12/2022.

**Referencia del proyecto:** CTQ2015-69019-P **Entidad financiadora:** MICINN

**Título:** Transiciones de spin, fotomagnetismo y conductividad en materiales multifuncionales: estructura electrónica, mecanismos de transición y actividad óptica y térmica

**Investigador principal:** Carmen Jiménez Calzado. **Duración:** 01/01/2016- 31/12/2018.

**Referencia del proyecto:** CTQ2009-07767 **Entidad financiadora:** MICINN

**Título:** Modelización ab initio de materiales magnéticos polinucleares: evaluación de interacciones locales y simulación de propiedades colectivas..

**Investigador principal:** Carmen Jiménez Calzado **Duración:** 01/01/2010 - 31/12/2013

**Referencia del proyecto:** MOLMAGRES **Entidad financiadora:** U. Ferrara (Italia).

**Título:** Establishment of an international research group for the study and characterization of molecular magnets

**Investigador principal:** Celestino Angeli (U. Ferrara). **Duración:** 01/12/2013-30/11/2014