

CURRICULUM VITAE  
Jean-Marie ANDRE

Date de naissance : 31 mars 1944 (Charleroi - Belgique)  
*date of birth* March , 31 , 1944 (Charleroi - Belgium)

Professionnelle : Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix  
*Business* Laboratoire de Chimie Théorique Appliquée  
61, rue de Bruxelles  
B-5000 NAMUR (Belgium)  
Tél. 32-(0)81-724553  
Fax. 32-(0)81-724567

Etat civil : Marié, épouse : Marie-Claude ROELAND (May 2, 43), Dr.Sc.(UCL)  
*Married, spouse*

quatre enfants : Pascale 28-11-69 (Nov.28, 69)  
*four children* licenciée en sciences géographiques (ULg)  
épouse de Michel Van Asten

Damien 05-11-70 (Nov.5, 70)  
licencié en sciences physiques (FUNDP)

Vinciane 07-08-72 (Aug.7, 72)  
épouse de Laurent Fanuel

Renaud 21-12-73 (Dec.21, 73)  
licencié en sciences économiques (UCL)  
époux de Sophie Dulieu

**1. Diplômes Universitaires :**  
*University Degrees*

Licencié en Sciences Chimiques (B.Sc.),  
Université Catholique de Louvain, 1965

Mémoire de licence/B.Sc. thesis :

- Etude comparative des méthodes de Hückel et de l'électron libre  
(*Comparative study of Hückel and free electron models*)

Docteur en Sciences (Ph.D.),  
Université Catholique de Louvain, 1968

Dissertation de doctorat/ Ph.D. thesis :

- Etude théorique de la structure de bandes des systèmes périodiques  
(*Theoretical study of the structure of energy bands in periodic systems*)

Thèse annexe/auxiliary Ph.D. report :

- La stabilité du code génétique (*The stability of the genetic code*)

**2. Occupations professionnelles :**  
*Successive Positions*

1965-1968 :            Boursier IRSIA (doctorat)  
*Ph.D. Research Fellowship from IRSIA*  
Laboratoire de Chimie Quantique,  
Université Catholique de Louvain (Prof. G. Leroy)

1968 :                Boursier post-doctoral OTAN  
*Postdoctoral Research Fellowship NATO*  
IBM Research, San Jose (Prof. E. Clementi)

1968-1970 :        Aspirant FNRS  
*Research Assistant* (National Fund for Scientific  
Research - Belgium)  
Laboratoire de Chimie Quantique,  
Université Catholique de Louvain (Prof. G. Leroy)

1969 :                Chercheur invité  
*World Trade visiting scientist*  
IBM Research, San Jose (Prof. E. Clementi)

1970-1971 :        Chargé de Recherches FNRS  
*Senior Research Assistant* (National Fund for Scientific  
Research - Belgium)  
Laboratoire de Chimie Quantique,  
Université Catholique de Louvain (Prof. G. Leroy)

- 1971-1974 : Chargé de Cours  
*Associate Professor*  
Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur  
Laboratoire de Chimie Théorique Appliquée
- 1974-... Professeur ordinaire  
*Full Professor, with tenure*  
Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur,  
Directeur du Laboratoire de Chimie Théorique  
Appliquée  
*Director of the laboratory of applied theoretical  
chemistry*
- 1983 : Mission scientifique FNRS-FUNDP  
*Visiting Scientist*  
IBM Poughkeepsie
- 1992 : Mission scientifique FNRS-FUNDP  
*Visiting Professor*  
CRS4, Cagliari
- 2001 : Mission scientifique FNRS-FUNDP  
*Visiting Professor*  
Chemistry Department, University of Arizona, Tucson

**3. Production Scientifique :**  
***Scientific work***

7 livres,  
*7 books,*  
Plenum (1975), Reidel (1978), Springer (1980), Reidel (1984), World  
Scientific (1990), Presses Universitaires de Namur (1997)

± 330 articles scientifiques,  
± *330 scientific papers*

± 210 conférences invitées  
± *210 invited lectures*

**4. Distinctions Scientifiques :**  
*Awards, Honors*

1969	Prix Pierre BRUYLANTS Chemici Lovanienses
1969	Prix Jean STAS Académie Royale de Belgique
1970	Prix de l'Académie des Arts, des Sciences et des Belles Lettres du Hainaut
1970	Prix Louis EMPAIN Fondation Universitaire
1979	Prix Agathon de POTTER Académie Royale de Belgique
1981	Membre correspondant de l'Académie Européenne des Sciences, des Arts et des Lettres <i>Corresponding Member of the European Academy of Science, Arts and Letters</i>
1983	Prix triennal de la Société Chimique de Belgique (Société Royale de Chimie)
1984	Annual Medal of the "International Academy of Quantum Molecular Science"
1986	Honorary member of the Polish Chemical Society
1986	Titulaire de la chaire Francqui à titre belge à l' "Universitair Instelling te Antwerpen " sur le sujet "Quantum Theory of Polymers"
1990	Officier de l'Ordre de Léopold <i>Officer of the Order of King Leopold</i>
1991	Prix Francqui Fondation Francqui
1991-2000	Administrateur en charge des questions de recherche Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix <i>Member of the Board of the University of Namur in charge of Research</i>
1991-2000	Membre de la Commission de Chimie-Physique du Fonds national de la Recherche scientifique (FNRS) <i>Member of the Chemical Physics Committee of the Belgian National Science Foundation</i>

- 1992 Membre Correspondant de l'Académie Royale de Belgique, Classe des Sciences  
*Corresponding Member of the Royal Academy of Belgium*
- 1995 Docteur Honoris Causa  
Université de Varsovie
- 1995 Membre titulaire de l'Académie Européenne des Sciences, des Arts et des Lettres  
*Member of the European Academy of Science, Arts and Letters*
- 2000 Membre titulaire de l'Académie Royale de Belgique  
*Member of the Royal Academy of Belgium*
- 2002 Membre de l'Académie internationale des sciences moléculaires quantiques  
*Member of the International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS)*
- 2003-2009 Member of the PESC-ESF committee (Physical and Engineering Standing Committee of the European Science Foundation)
- 2004 Member of the European Academy of Science
- 2007 Vice-directeur de la classe des sciences de l'Académie Royale de Belgique  
  
Concurrent Professor of the Nanjing University  
  
Grand officier de l'ordre de la couronne  
*Great Officer of the Order of the Crown*
- 2008 Président de l'Académie Royale de Belgique  
*President of the Royal Academy of Science*  
Directeur de la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique  
*Director of the Class of Science of the Royal Academy of Belgium*  
  
Administrateur à l'Institut Supérieur de Musique et de pédagogie (IMEP)  
*Member of the Board of the Superior Institute of Music and Pedagogy*

2009

Président du Collège Belgique  
*President of the Collège Belgique*

Member of the *Academia Europaea*

Member of the Board of the International Academy of  
Quantum Molecular Science (IAQMS)

**5. Charges d'enseignement :**  
*Teaching duties*

Mathématiques Appliquées – *Applied Mathematics* (30h),  
2ème candidature en sciences biologiques et géologiques (*Biology and Geology*)

Introduction à l'algèbre linéaire et chimie quantique – *Introduction to linear algebra and quantum chemistry* (45h),  
2ème candidature – Bac 2 en sciences chimiques (*Chemistry*)

Chimie Physique Moléculaire – *Chemical Physics* (45h),  
a) Théorie du spin et orbitales – *Spin and orbitals*  
b) Thermodynamique statistique – *Statistical Thermodynamics*  
1ère licence – Bac 3 en sciences chimiques (*Chemistry*)

Chimie Physique – *Physical chemistry* (30h),  
a) Phénomènes irréversibles et thermodynamique de non-équilibre –  
*Irreversible phenomena and non-equilibrium thermodynamics*  
b) Chimie quantique relativiste – *Relativistic quantum chemistry*  
2ème licence – Master 1 en sciences chimiques (*Chemistry*)

Chimie Quantique – *Quantum chemistry* (15h),  
2ème candidature en sciences mathématiques

Chimie Quantique Avancée – *Advanced quantum chemistry* (15h),  
Introduction à la théorie quantique des polymères – *Introduction to the quantum theory of polymers*  
2ème licence – Master 1 en sciences chimiques (*Chemistry*)

Thermodynamique des systèmes ouverts – *Thermodynamics of open systems*  
(15h),  
2<sup>ème</sup> licence – master 1 en sciences chimiques

**6. Contrats de Recherches :**  
**Research Contracts**

- 1982-1985 NATO Research grant "Molecular Design for non-linear optics" with J. Zyss (Paris), G. Berthier (Paris), G. Del Re (Roma)
- 1984-1993 Scientific Computing Facility (Namur SCF), joint project between the "Fonds National de la Recherche Scientifique (Belgian National Fund for Scientific Research)", IBM-Belgium and the "Facultés Universitaires ND de la Paix".
- 1985-1988 EEC ESPRIT Contract n°443 "Molecular Engineering for optoelectronics" with CNET (Montrouge, France), CSF-THOMSON (Corbeville, France), Imperial Chemical Industries-ICI (Manchester, UK)
- 1988-1991 PAI (Pôle d'Attraction Interuniversitaire), programme gouvernemental sur la science des interfaces, *Interuniversity Research Project in Interface Sciences*, collaboration départements de physique et de chimie des Facultés Universitaires ND de la Paix, Université Catholique de Louvain, Katholieke Universiteit Leuven & Universitair Instelling te Antwerpen
- 1989-1992 IBM Belgium Contract Study in Molecular Graphics
- 1989-1992 EEC ESPRIT Contract n°2284 "Optoelectronics with active organic molecules" with CNET (Montrouge, France), CSF-THOMSON (Corbeville, France), CEA (Saclay, France), Imperial Chemical Industries-ICI (Manchester, UK)
- 1990-1994 ELSAM, Electronic Structure of Advanced Materials, Programme gouvernemental d'impulsion en technologie de l'information, partie calcul de puissance, National Program of Impulsion in Information Technology, Large Scale Computation Part, collaboration laboratoire de chimie théorique appliquée et laboratoire de physique du solide des Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix
- 1991-1995 IBM Belgium Contract Study on Computational Chemistry
- 1993-1995 EICOC- European Initiative in Computational Chemistry, in EEC "Capital Humain and Mobility with University of Strasbourg and CRS4-Cagliari (Prof. E. Clementi)
- 1993-1997 Développement de nouveaux matériaux moléculaires à réponses optiques de deuxième et troisième ordre élevées : synthèse, caractérisation théorique et expérimentale et fabrication de composants photoniques, FNRS-FRFC-Loterie Nationale, Crédit 9.4593.92 FNRS-FRFC-Dehousse, Crédit D.4511.93 en collaboration avec l'UMH (Prof. J.L. Brédas), la KUL (Prof. A. Persoons)
- 1994-2002 Contrat de collaboration Solvay sur la catalyse Ziegler-Natta
- 1998-... EEC-COST Action D9 on « Advanced Computational Chemistry of Increasingly Complex System : Development of Quantum Chemical Methods for Studying Molecules in Mixed Condensed Phase Media »
- 2000-2004 Technologie et matériaux polymères innovants préservant l'environnement, TECMAVER, programme de recherches Région Wallonne, Wallonie-développement-université.
- 2002-2007 Participant in the Belgian National Interuniversity Attraction Poles on Supramolecular Chemistry and Supramolecular Catalysis (PAI/IUAP N° P5-03).



**7. Thèses de doctorat :  
Ph.D.thesis**

1975 Simonne VERCRUYSSSEN, épouse DELHALLE

Calcul des propriétés électroniques de polymères stéréoréguliers,  
*A study of the electronic properties of stereoregular polymers.*  
jury : J.M. André, F. Durant, J. Verbist, A.A. Lucas (FNNDP),  
G. Leroy (UCL), Mme A. Pullman (Paris)

1979 Christian DEMANET

Formulation et application d'un procédé original pour le calcul des propriétés électroniques de polymères stéréoréguliers,  
*Formalism and application of an original procedure for the calculation of the electronic properties of stereoregular polymers.*  
jury : J.M. André, J. Delhalle, F. Durant, R. Caudano (FNNDP),  
G. Leroy (UCL), J.L. Calais (Uppsala)

1979 Christian LAMOTTE,

Mise au point et application aux molécules et polymères d'une méthode en orbitales gaussiennes localisées,  
*A FSGO procedure applied to molecules and polymers.*  
jury : J.M. André, J. Delhalle, G. Evrard, A. Lucas (FNNDP)  
G. Leroy (UCL), L. Piela (Varsovie), Ph. Durand (Toulouse)

1979 Jean-Luc BREDAS

Etude non-empirique de polymères stéréoréguliers incluant les contributions électrostatiques à longue portée,  
*A non-empirical study of stereoregular polymers including long-range electrostatic effects.*  
jury : J.M. André, F. Durant, J. Delhalle, A. Lucas (FNNDP),  
G. Leroy (UCL), L. Piela (Varsovie), A. Veillard (Strasbourg)

1980 Joseph LEJEUNE,

Formalisme RHF-LCAO-MO adapté à l'utilisation de bases mixtes STO(nG)/FSGO's et appliqué à l'étude de complexes moléculaires,  
*A RHF-LCAO-MO technique using mixed basis sets STO(nG)/FSGO's in the study of molecular complexes.*  
jury : J.M. André, J. Delhalle, E.G. Derouane, L. Hevesi (FNNDP),  
G. Verhaegen (ULB), G. Berthier (Paris)

- 1981 Daniel VERCAUTEREN,  
Etude non-empirique, LCAO-MO-SCF, d'oxocarbones monocycliques et linéaires, neutres et anioniques,  
*A non-empirical LCAO-MO-SCF study of cyclic or linear oxocarbons.*  
jury : J.M. André, J. Delhalle, E.G. Derouane, M. Griffé, J.P. Vigneron (FNNDP), G. Leroy (UCL), C. Moser (CECAM)
- 1985 Bérengère THEMANS,  
Etude théorique des propriétés électroniques des polymères organiques conducteurs d'électricité.  
*A theoretical study of the electronic properties of highly conducting organic polymers.*  
jury : J.M. André, F. Durant, J.P. Vigneron, J.L. Brédas (FNNDP), G. Smets (KUL), G. Zerbi (Milan)
- 1987 Vincent BODART,  
Calcul de polarisabilités et hyperpolarisabilités de chaînes organiques conjuguées : étude formelle et applications en optique non linéaire,  
*Calculation of polarizabilities and hyperpolarizabilities of conjugated organic chains: a theoretical study and applications in nonlinear optics.*  
jury : J.M. André, J. Delhalle, E.G. Derouane, A.A. Lucas (FNNDP), G. Leroy (UCL), G. Berthier (ENSJF), J. Zyss (CNET)
- 1990 Laurence LEHERTE  
Simulation du comportement de molécules en interaction avec un réseau zéolithique,  
*Simulation of the behaviour of molecules interacting with a zeolitic lattice.*  
jury : J.M. André, E.G. Derouane, J.P. Vigneron (FNNDP), G. Leroy (UCL), M. Allavena (Paris)
- 1992 Magdalena DORY  
Calcul des (hyper)polarisabilités de composés organiques : Elaboration d'une ingénierie moléculaire en optique non linéaire,  
*Calculation of (hyper)polarizabilities of organic compounds: a molecular engineering approach in nonlinear optics.*  
jury : J.M. André, J. B Nagy, J. Delhalle, A.A. Lucas (FUNDP), J.L. Brédas (UMH), J. Morley (ICI)

- 1992            Benoît CHAMPAGNE
- Mise au point et applications de méthodes de calcul des polarisabilités de systèmes polymériques,  
*Development and applications of computational methods of polarisabilities of polymeric systems.*  
jury : J.M. André, A.A. Lucas, D. Vercauteren (FUNDP),  
J.L. Brédas (UMH), A. Persoons (KUL), Y. Ohrn (Ufla)
- 1996            Pascal GALET
- Etude théorique de la structure et de l'activité catalytique des zéolithes,  
*Theoretical study of structure and of catalytic activity of zeolites*  
jury : J.M. André, B. Champagne, B.L. Su (FUNDP)  
J.L. Brédas (UMH), L. Piela (Varsovie)
- 1997            Eric PERPETE
- Etude des contributions vibrationnelles aux réponses optiques linéaires et non linéaires de systèmes polymères stéréoréguliers,  
*Study of vibrational contributions to linear and nonlinear optical responses of stereoregular polymers*  
jury : J.M. André, B. Champagne, P. Thiry (FUNDP), J.P. Gaspard (Ulg), B. Kirtman (Santa Barbara)
- 1998            Valérie WATHELET
- Etude théorique de systèmes moléculaires et polymères par les méthodes de la chimie quantique et de la dynamique moléculaire,  
*Theoretical study of molecular and polymer systems by quantum mechanical and molecular dynamics methodologies*  
jury : J.M. André, B. Champagne, G. Evrard, J.P. Vigneron (FUNDP), S. Massida (Cagliari)
- 1998            Denis JACQUEMIN
- Mise au point de méthodes de chimie quantique pour optimiser la géométrie des polymères stéréoréguliers,  
*Development of quantum chemical methods for the geometrical optimization of stereoregular systems*  
jury : J.M. André, R. Caudano, B. Champagne (FUNDP), Y. Ohrn (Ufla), L. Van Quickenborne (KUL)
- 2002            Olivier QUINET
- Elaboration of quantum chemical procedures for determining mixed derivatives  
with respect to Cartesian coordinates and oscillating electric fields ; application to vibrational spectroscopies and nonlinear optical properties.  
jury : J.M. André, B. Champagne, R. Sporcken (FUNDP), D.M. Bishop (Ottawa), J. Liévin (ULB)

2003

Michèle FONTAINE

Apport de la chimie calculatoire à la modélisation de diagrammes de phases,  
*Role of computational chemistry in the modelization of phase diagrams.*

jury : J.M. André, E. Peprète, R. Sporcken (FUNDP), Cl. Adjiman (Imperial  
College London), M. Charlot (Rhodia, Lyon)

2004

Valérie CAVILLOT

Apport de la chimie quantique pour la simulation des spectres d'absorption  
UV/visible des catalyseurs de polymérisation des oléfines,

*Role of quantum chemistry in the simulation of UV/Visible spectra of  
polymerization catalysts.*

jury : J.M. André, B. Champagne, L. Houssiau (FUNDP), Ph. François (BP), F.  
Benvenuti, (Solvay), J. Devaux (UCL)

2004

Maxime GUILLAUME

Theoretical determination of linear and nonlinear optical properties of  
condensed phases : methodology and applications.

jury : J.M. André, B. Champagne, A. Peremans (FUNDP), L. Ducasse  
(Université de Bordeaux), D. Beljonne (UMH)

**8. Conférences plénières et cours sur invitation :**  
*Invited or plenary conferences and lectures*

**1967**

1. Etude théorique des propriétés électroniques de semi-conducteurs organiques,  
Conférence, Société Chimique de Belgique, Louvain, 8.4.67

**1968**

2. Structure électronique et chimie quantique (8h)  
Université d'Alger, Faculté polytechnique, mars 1968  
*Invited Lecture, University of Alger, March 1968.*
3. Etude théorique des propriétés électroniques des systèmes périodiques,  
Séminaire, Institut interfacultaire UCL, Louvain, 28.3.68

**1969**

4. Les méthodes LCAO dans le calcul de la structure de bandes des polymères et des solides,  
Séminaire interfacultaire de physique de l'état solide, Louvain, 27.11.69.

**1970**

5. Les méthodes LCAO dans le calcul de la structure de bandes des polymères et des solides,  
Séminaire interfacultaire de physique de l'état solide, Louvain, 14.1.70.
6. Etude théorique LCAO sur les polymères et les solides,  
Conférence, CECAM, Orsay, 26.3.70  
*Invited Lecture, CECAM, Orsay, March 1970*
7. Hartree-Fock theory for polymers and solids,  
Invited Lecture, CNRS seminar on conformational analysis, Paris, 30.6.70
8. Recent developments in the LCAO theory of solids and polymers,  
Invited Lecture, IBM seminar on selected topics in molecular physics, Ludwigsburg,  
14.10.70
9. Etude de propriétés thermodynamiques par les méthodes "ab initio",  
Société Chimique de Belgique, Louvain, 20.11.70

**1971**

10. Théorie électronique de systèmes périodiques,  
Colloque de Physique, Louvain, 11.2.71
11. Développements récents de la chimie quantique,  
séminaires de chimie, Namur, 20.11.71

**1972**

12. Les électrons et la liaison chimique,  
Congrès des sciences, Namur, 29.8.72

## 1974

13. Ab initio and semi-empirical band structure calculations of polymers,  
Lecture (3 h), NATO Advanced Study Institute on "Electronic Structure of Polymers  
and Molecular Crystals, Namur, 2.09.74
14. Structure électronique des molécules organiques,  
Journée de contact du CIPAM (Centre Interuniversitaire de Physique Atomique et  
Moléculaire), Namur, 17.12.74

## 1975

15. Introduction à la chimie et à la biochimie quantiques  
cours (30h), certificat de biophysique, université de Liège (1975)  
*Invited Professorship (30h), Biophysics certificate, University of Liège (1975)*

## 1976

16. Conception de nouveaux polymères organiques à propriétés conductrices spécifiques,  
Conférence, Université de Liège, Institut de Physique Expérimentale, 26.10.76  
*Invited Lecture, University of Liège, October 1976*

## 1977

17. Structure de bandes et caractéristiques électroniques des polymères,  
Conférence, Institut pour la catalyse, Villeurbanne, 13.05.77  
*Invited Lecture, Institut pour la Catalyse, Villeurbanne (Lyon), May 1977*
18. La nature de la liaison chimique (10h)  
cours de recyclage pour l'enseignement secondaire, Namur, 11/12/13.11.77

## 1978

19. The FSGO model for polymers,  
Invited Lecture, Universität Erlangen-Nurnberg, Erlangen, 20.1.78
20. Etude théorique des propriétés moléculaires  
cours (3h), Ecole UNESCO, Louvain-la-Neuve, mai 1978.  
*Invited Lecture (3h), UNESCO school, University of Louvain, May 1978*
21. Etude théorique de la structure électronique des polymères  
cours (2h), Ecole UNESCO, Louvain-la-Neuve, mai 1978.  
*Invited Lecture (2h), UNESCO school, University of Louvain, May 1978*
22. Electronic structure of polymers  
Invited Lecture, Polish Chemical Society,  
Warsaw University, May 1978
23. Recent development in the theory of polymers  
Invited Lecture, Wroclaw Polytechnical Institute, 13-6-78.
24. Aspects quantiques en chimie macromoléculaire  
Conférence, Université Paul Sabatier, Toulouse, 4-7-78.  
*Invited Lecture, University Paul Sabatier, Toulouse, July 1978.*

25. Théorie quantique et propriétés électroniques des polymères  
Conférence, IXème congrès des chimistes théoriciens d'expression latine, Stresa (Italie), 7-9-78.  
*Invited Lecture, ninth congress of theoretical chemists of latine language, Stresa (Italy), September 1978.*
26. Introduction théorique à la spectroscopie  
Conférence dans la "formation continuée en chimie", Namur, 3-11-78.  
*Invited Lecture, continued formation in chemistry, Namur, November 1978.*

### 1979

27. General Survey of polymer calculations  
Invited Conference, CECAM Workshop, Namur, 12-2-79.
28. De la méthode de Hartree-Fock aux procédés semi-empiriques (9h)  
Ecole d'été UNESCO, Louvain-la-Neuve, Mai 1979.  
*Invited Lecture (9h), UNESCO school, University of Louvain, May 1979*
29. Théorie quantique des polymères  
Conférence, Xème congrès des chimistes théoriciens d'expression latine, Genève, 27-9-79.  
*Invited Lecture, tenth congress of theoretical chemists of latine language, Geneva (Switzerland), September 1979.*

### 1980

30. XPS spectroscopy and band structure calculations in polymers,  
Invited seminar, Allied Chemical Corporation Research Center,  
Organic Materials Science Department, Morristown, NJ, 19-3-80.
31. Band structure calculations and their relations to photoelectron spectroscopy,  
Invited Lecture, 179th American Chemical Society National Meeting,  
Houston, Texas, 23-3-80 au 28-3-80.
32. Travaux récents du laboratoire de Chimie Théorique Appliquée des Facultés N.D. de la Paix,  
Séminaire, Journée du groupe de contact du FNRS (EFOAM), Louvain la Neuve, 16-12-80.

### 1981

33. Invited Lecture : Recent aspects of the electronic structure of polymers,  
Palm Coast, International symposium on Atomic, Molecular and Solid State Theory ,  
Collision phenomena and computational quantum chemistry, 5-3-81 au 14-3-81.
34. Correlation and energy gaps in polyacetylenes,  
Invited Lecture, Workshop, CECAM, Orsay, 6-7-81 au 10-7-81.
35. Conférence invitée : Aspects de la théorie quantique des polymères,  
XIIème congrès des chimistes théoriciens d'expression latine,  
Barcelona, 28-9-81 au 3-10-81.  
*Invited Lecture, twelfth congress of theoretical chemists of latine language, Barcelona (Spain) September -October 1981.*

## 1982

36. Solution du problème de la particule libre enfermée dans une boîte unidimensionnelle par la technique des fonctions de Green,  
Séminaire, Namur, 23-2-82.
37. Echange et corrélation dans les chaînes unidimensionnelles,  
Séminaire, Laboratoire de physique quantique, Université Paul Sabatier, Toulouse, 29-10-82.  
*Invited seminar, University Paul Sabatier (Toulouse), October 1982.*

## 1983

38. Structure of an ab initio program for polymers,  
Séminaire, Poughkeepsie, IBM D55, 19-7-83.
39. Towards specific ab initio program for polymer calculations,  
lecture (2h), NATO-ASI on "Quantum chemistry of polymers, solid state aspects",  
Braunlage, 25.7-05.08.83.

## 1984

40. Propriétés chimiques des polymères: état actuel et perspectives.  
Société Chimique de Belgique, Fondation Universitaire, Bruxelles, 13-2-84.  
*Invited conference at the occasion of the award of the triennial prize of the Belgian Chemical Society, Brussels (1984).*
41. Theoretical aspects of conductivity in organic polymers.  
Invited Lecture, Polish Chemical Society, Warsaw, 10-4-84.
42. Description of an ab initio system for the determination of the electronic structure of polymers,  
Invited Lecture, University of Warsaw, 11-4-84.
43. Highly conducting polymers. Theoretical analysis.  
Invited Lecture, Polish Chemical Society, Wroclaw Polytechnical Institute, 18-4-84.
44. Théorie quantique des polymères : application aux polymères organiques conducteurs.  
Séminaire, Université de Genève, Faculté des Sciences, 30-5-84.  
*Invited seminar, University of Geneva, May 1984.*
45. Séminaire sur les méthodes quantiques avancées :  
- le problème de corrélation électronique, 12.10.84  
- concepts originaux en interaction de configuration, 26.11.84  
- la méthode d'interaction de configuration en doubles excitations et le problème de consistance de taille, 17.12.84

## 1985

46. Applications modernes de la chimie quantique,  
Séminaire invité, Université de Clermont-Ferrand, 5-11-85
47. Can quantum chemistry be useful for industrial purposes,  
Invited Lecture, Haldor Topsoe Research Laboratories, Lyngby, Danemark, 14-11-85



## 1986

48. Invited communication : " Quantum chemistry of zeolite catalyst", seminar on "mécanismes hétérogènes de la catalyse", CNRS, Institut pour la catalyse, Lyon-Villeurbanne, 01-04/03/86
49. Chaire Francqui au titre belge, (12h)  
*Francqui Chair, Invited lectures (12h)*  
Universitair Instelling te Antwerpen (UIA & RUCA), juin 1986
  - Séance Inaugurale : quantum chemistry of polymers (1h),
  - Structure électronique des polymères organiques conducteurs :
    - approche théorique (1h)
    - solitons, polarons, bipolarons (1h)
    - vers une ingénierie moléculaire (1h)
  - Optoélectronique des polymères organiques
    - approche théorique (1h)
    - vers une ingénierie moléculaire (1h)
  - Détermination des structures de bandes polymériques
    - un modèle simple en orbitales flottantes (1h)
    - le modèle non-empirique complet (2h)
    - les modèles semi-empiriques et de simulation (1h)
  - La corrélation électronique dans les chaînes polymériques (2h)
50. Quantum mechanical molecular design of polymers of interest for their conducting and optoelectronic properties,  
Invited Lecture, 3rd Japan-Belgium Seminar on Polymer Science, Sapporo (Japan), 23-27/08/1986
51. Some aspects of computational polymer quantum chemistry,  
Invited lecture, ACIS-IBM-European center-La Hulpe, 23/09/1986
52. Quantum mechanical approach of conducting properties in conjugated polymers: the structure of bipolaronic defects and the search for small intrinsic energy gaps.  
Invited Lecture, The Nineteenth Conference of the Foundation for Research Conferences in Chemistry, Katata, Ohtsu City (Japan) 9-14/11/1986
53. Quantum chemistry of polymers: electrical and optoelectronic aspects,  
Invited Lecture at the occasion of the award of the honorary membership of the Polish Chemical Society, Polish Chemical Society, Wroclaw, 5-6/12/1986

## 1987

54. Une introduction à la chimie quantique des polymères,  
Séminaire Solvay, ULB, 27/01/1987  
*Invited seminar, University of Brussels, January 27, 1987*
55. La méthode Hartree-Fock,  
Séminaire, FUNDP, Namur, 24/02/87  
3ème cycle interuniversitaire FNRS, Chimie Physique Moléculaire.
56. The role of large oligomers for designing materials of interest for their electrical and optoelectronic properties,  
Invited Lecture, 20th Jerusalem symposium on quantum chemistry and biochemistry, Jerusalem, 11-14/5/1987

57. Some Aspects of Computational Polymer Quantum Chemistry,  
Invited Lecture, Donegani Scientific Workshop n°1, "strategies for computer chemistry"  
Istituto Guido Donegani, Novara (Italie)  
12-13/10/1987

## 1988

58. Conducting and Optical Properties of Polymers : a theoretical approach,  
Invited Lecture, 1988 Sanibel Symposia, St. Augustine, 12-19/03/1988
59. Quelques réflexions sur les fondements théoriques de la liaison chimique,  
Conférence invitée dans le cadre de l'ICAFOC (Institut de formation continuée)  
*Invited lecture, ICAFOC*  
Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, le 26 avril 1988  
Facultés Universitaires ND de la Paix, Namur, le 4 mai 1988
60. New developments in polymer quantum chemistry,  
*Invited seminar*, University of Warsaw, may 17, 1988
61. Théorie quantique des polymères : conductivité, propriétés optiques non linéaires  
*Invited lecture*, Réunion annuelle de la Société Chimique de France  
Nice, France, September 5-8, 1988
62. Structure des polymères et chimie quantique,  
Conférence, Société Française de Chimie, Université de Reims  
*Invited Conference*, University of Reims, November 25, 1988

## 1989

63. Quantum chemistry of the polymeric state,  
Invited Lecture, Istituto Chimica Quantistica Energetica Molecolare, University of Pisa,  
May 9, 1989
64. Structure Electronique des Polymères : Vers une Ingénierie Moléculaire Théorique,  
Conférence Invitée, Séminaire Département de Physique de la Matière Condensée,  
Université de Genève, 31 octobre 1989,  
*Invited Seminar*, University of Geneva, October 31, 1989

## 1990

65. Hartree-Fock, Echange et Corrélation,  
Séminaire dans le cadre du "Programme National d'Impulsion en Technologie de l'Information, Formation en Calcul de Puissance,  
*Seminar in "National Program in Information Technology, Large Scale Computations in Quantum Chemistry and Physics"*  
FUNDP, Namur, 08.01.90

66. Chimie Quantique Appliquée,  
*Applied Theoretical Chemistry*,  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 22-26.01.90  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 22-26.01.90*
- 1° La méthode de Hartree-Fock
  - 2° Un exemple complet: l'atome d'Hélium, effets de base, de relaxation et de corrélation, le théorème du Viriel et la procédure de "scaling"
  - 3° Bases Atomiques Gaussiennes et de Slater
  - 4° La détermination des bases atomiques gaussiennes
  - 5° Les principes de base des procédés semi-empiriques, Hückel Etendu et ZDO (CNDO, INDO & NDDO)
  - 6° Propriétés de modélisation liées à la densité électronique
  - 7° Energies et décomposition des termes énergétiques d'interaction entre distributions électrostatiques
67. Fonctionnelle Densité, Electronégativité et Dureté Moléculaire,  
Séminaire dans le cadre du "Programme National d'Impulsion en Technologie de l'Information, Formation en Calcul de Puissance,  
*Seminar in "National Program in Information Technology, Large Scale Computations in Quantum Chemistry and Physics"*  
FUNDP, Namur, 29.01.90
68. NATO Advanced Research Workshop on "Organic Molecules for Nonlinear Optics and Photonics,  
Invited Lecture: Towards the calculation of polarizabilities in infinite chains,  
La Rochelle (France), August 26-September 1, 1990
69. XIXe Congresso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Expressione Latina (CCTEL),  
*Nineteenth congress of theoretical chemists of latine language*,  
Conférencier invité : La chimie quantique appliquée à l'étude des propriétés électroniques de polymères,  
*Invited Lecturer: Quantum chemistry applied to the study of electronic properties of polymers.*  
Rome (Italie), September 10-13, 1990
70. Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble (CENG), Département de Recherches Fondamentales (DRF),  
Séminaire Invité : Propriétés électroniques de polymères conjugués p et s,  
*Invited Seminar: Electronic Properties of p- and s-conjugated polymers.*  
Grenoble (France), September 14, 1990

## 1991

71. La place de la chimie quantique des polymères dans la chimie contemporaine,  
*Invited conference at the occasion of the Francqui Prize 1991: The role of the quantum chemistry of polymers in modern chemistry*,  
Département de Chimie, FUNDP, Namur, April 23, 1991
72. Réminiscences, Prospectives et Perspectives d'un Quant-Chimiste des Polymères,  
*Invited Conference at the occasion of the Francqui Prize 1991 : Reminiscences, Prospectives and Perspectives of a Quantum Chemist of Polymers*,  
Faculté des Sciences, FUNDP, Namur, May 7, 1991

73. Invited Lecture: Electronic Properties of Polymers,  
First Canadian Symposium on Computational Chemistry,  
Auberge Chéribourg, Orford (Québec), May 19-22, 1991
74. Simulation des propriétés électroniques des polymères par calculs quantiques,  
*Invited Lecture: Simulation of electronic properties of polymers by quantum calculations,*  
59ème congrès de l'ACFAS (Association Canadienne Française pour l'Avancement des Sciences), Université de Sherbrooke, 22-24 mai 1991
75. Les Polymères dans la Vie Contemporaine  
Connaissance et Vie d'Aujourd'hui, Mol, 25.11.91
76. Calculation of Polarizabilities of Infinite Polymers: Present Status and Perspectives,  
5th Japan-Belgium Seminar on Polymer Science,  
Sendai (Japan), December 3-8, 1991

## 1992

77. Ab Initio Band Structure for Polymers, Part 1. General Theory,  
CRS4, Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori in Sardegna,  
Cagliari (Italy), 13.01.92
78. Ab Initio Band Structure for Polymers, Part 2. Details on Code and Applications,  
CRS4, Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori in Sardegna,  
Cagliari (Italy), 15.01.92
79. Introduction to polymer quantum chemistry and its applications,  
post-graduate lecture, CRS4, Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori in  
Sardegna,  
Cagliari (Italy), 24.02.92
80. Polymer Quantum Chemistry, a link between chemistry and solid state physics  
Société Belge de Physique, Assemblée Générale, Liège, 22 mai 1992
81. Enrico Clementi, Gradus at Parnassum  
Introduction to the «fifth SCF meetings, dedicated to Enrico Clementi», Namur, June  
3, 1992
82. Computational Quantum Chemistry of Polymers  
Fifth SCF meetings, dedicated to Enrico Clementi, Namur, June 3, 1992
82. MOTTECC.Edu, An Educational Approach to MOTTECC  
Contribution in the MOTTECC session at the «SCF meeting dedicated to Enrico  
Clementi», Namur, June 5, 1992
83. Computations of Coupled and Uncoupled Hartree-Fock Polarisabilities of Infinite  
Polymeric Chains,  
Symposium on «Numeric Intensive Computations in Chemistry and Physics»,  
Fondazione IBM Italia & CRS4,  
Cagliari - Setar Hotel - Quartu Santa Elena (Italy), September 21-23, 92

## 1993

84. La Chimie Quantique : un Nouveau Domaine Interdisciplinaire,  
Cercle de Chimie, Namur, 11 mars 1993
85. La Chimie Quantique: de l'Atome d'Hydrogène à un Nouveau Domaine  
Interdisciplinaire,  
Académie Royale de Belgique, Palais des Académies, Bruxelles, 6 novembre 1993

86. Polarisabilité et Instabilités de Hartree-Fock,  
Premier Séminaire Namurois de Chimie Quantique, Saint-Gérard, 20 novembre 1993
87. Polarizabilities and Hartree-Fock Instabilities,  
Université de Mons-Hainaut, UMH, 17 décembre 1993

#### 1994

88. Trends in the computations of polarizabilities in extended systems,  
International Conference on Organic Nonlinear Optics, ICONO'1, Val Thorens  
(France), January 9-13, 1994
89. Modern techniques of computation of the electronic structure of polymers,  
High Performance Computing and Networking, Munich, April 18-20, 1994
90. Introduction à la chimie quantique, applications aux questions biologiques,  
Séminaire de Biophysicochimie moléculaire, Houffalize, 16-18 mai 1994
91. Computer experiments: from molecules to polymers,  
8th International Congress of Quantum Chemistry, ICQC 8, Prague,  
June 19-23, 1994
92. Present status of ab initio calculations of polymeric band structures,  
International workshop on "Electronic structure methods for truly large systems:  
moving to the frontiers in quantum chemistry", Braunlage (Germany),  
August 1-7, 1994
93. Quantum Chemistry and Polymer Chemistry, an overview,  
6ème séminaire belgo-japonais sur les polymères,  
Namur, 17-22 octobre 1994

#### 1995

94. Introduction sur les propriétés électroniques et optiques des polymères  
cours interuniversitaire sur les propriétés optiques des matériaux  
Louvain-la-Neuve, 24 janvier 1995
95. Vibrations et Polarisabilités Moléculaires  
Université de Mons-Hainaut, 13 juin 1995
96. Theoretical Aspects of the Calculation of Polarizabilities of Organic Polymers  
12th Canadian Seminar on Theoretical Chemistry  
Fredericton, August 6-12, 1995
97. Polymères et navette spatiale,  
centre culturel d'Assesse,  
10 novembre 1995

#### 1996

98. Thermodynamique de non équilibre, structures dissipatives, bifurcations, chaos et fractales,  
*Non equilibrium thermodynamics, dissipatives structures, bifurcations, chaos and fractals*  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 15-19.01.96  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 15-19.01.96*

- 1° thermodynamique linéaire, mécanismes isolés
- 2° thermodynamique linéaire, mécanismes couplés
- 3° thermodynamique non linéaire
- 4° bifurcations
- 5° chaos déterministe
- 6° fractales

- 99. Matériaux polymères : du celluloïd à la navette spatiale  
Académie Royale de Belgique, Palais des Académies, Bruxelles, 2 mars 1996
- 100. Hartree-Fock instabilities and Löwdin's Symmetry Dilemma in the Presence of External Electric Fields: A Simple FSGO Illustration  
Foundations of Quantum Theory in Chemistry, Molecular Physics, and Biology, A Symposium in Honor of Per-Olov Löwdin, Sanibel Island, Fla, October 26-29, 1996
- 101. La notion de fractale  
Deuxième Séminaire Namurois de Chimie Quantique, Saint-Gérard, 16 novembre 1996
- 102. Les matériaux polymères  
Lions Club de Namur, Bouge, 21 décembre 1996

### 1997

- 103. L'université face aux défis de la recherche sectorielle et thématique  
Journée d'étude sur «l'orientation thématique ou sectorielle des recherches financées par les pouvoirs publics », Conseil wallon de la Politique Scientifique, Mons, 13 janvier 1997
- 104. Mise en bouche, a tribute to Professor Amand Lucas,  
Seventh SCF meetings, Namur, January 17-19, 1997
- 105. Quantum chemistry and molecular design of materials with high non linear electrical responses, 7th Japan-Belgium Seminar, Shonan Village, Kanagawa, November 2-5, 1997
- 106. Quantum chemical calculations of linear and non linear electronic and vibrational polarizabilities of some organic polymers Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto, November 6-9, 1997
- 107. Multipôles, des mathématiques et de la physique à la chimie  
*Multipoles, from mathematics and physics to chemistry*  
Laboratoire de chimie moléculaire structurale, FUNDP  
24 novembre 1997

### 1998

- 106. La théorie du chaos, exemples en chimie, physique et biologie  
*Theory of Chaos, exemples in chemistry, physics and biology*  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 15-19.01.98  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 15-19.01.98*
- 107. Introduction à la théorie du chaos pour des chimistes  
Université de Mons-Hainaut, 10.03.98
- 108. Discours de réception du Dr. Honoris Causa du Dr. Enrico Clementi,  
FUNDP, 27 mars 1998

- 109. La recherche aux FUNDP,  
Exposé, Après-midi de la recherche, FUNDP, 7 mai 1998
- 110. Electronic and Vibrational Hyperpolarizability of polyenic chains,  
Symposium in honor of Rudolf Zahradnik, Prague, September 6-7, 1998
- 111. Multipôles, des mathématiques et de la physique à la chimie  
*Multipoles, from mathematics and physics to chemistry*  
Institut de Recherches SERVIER, Suresnes - Paris, France  
10 septembre 1998
- 112. Symposium Francqui international, Conjugated Polymers, Oligomers, and  
Dendrimers: From Polyacetylene to DNA, Fondation Francqui, Bruxelles, 21-23  
octobre 1998  
conférence invitée : Nonlinear Hyperpolarizabilities: From oligomers to Polymers.  
Calculation of Electronic, Correlation and Vibrational Contributions.

## 1999

- 113. Le chaos déterministe joue-t'il un rôle en chimie ?  
Laboratoire de recherches SOLVAY, 9 février 1999
- 114. Deterministic chaos and chemistry,  
KULeuven, Leuven, 26 février 1999
- 115. Matériaux polymères : du celluloïd à la navette spatiale "challenger"  
Journées de la chimie, SRC, FUNDP, Namur, 24 avril 1999-05-09
- 116. Non equilibrium thermodynamics, chaos and fractals,  
Cours EU Socrates, University of Warsaw, 8 hours, May 4-7, 1999
- 117. Does chaos play a role in chemistry ?  
University of Warsaw, Department of chemistry, May 6, 1999
- 118. Réflexions sur un quart de siècle d'enseignement de chimie théorique.  
Multimedia et Informatique pour l'Enseignement de la chimie, 9ème MIEC, Bruxelles,  
13 mai 1999
- 119. Réflexions sur un quart de siècle d'enseignement en chimie physique  
FUNDP, 25<sup>ème</sup> anniversaire des la première promotion de licenciés en sciences  
chimiques, 26 juin 1999
- 120. Le chaos déterministe joue-t-il un rôle en chimie ?  
Assemblée générale de la Société Royale de Chimie, Liège, 1 octobre 1999
- 121. Does deterministic chaos play a role in chemistry?  
Académie Bulgare des Sciences, Sofia, October 7, 1999
- 122. Chemistry and chaos  
University of Plovdiv, Plovdiv, October 8, 1999
- 123. Le microcosme quantique, la saga des Nobel est-elle terminée  
Facultés universitaires ND de la Paix, BUMP, 4 novembre 1999
- 124. L'évaluation de la recherche  
Conseil Economique et Scientifique de la Région Wallone, novembre 1999
- 125. Le chaos déterministe joue-t-il un rôle en chimie ?  
Académie Royale de Belgique, leçon publique, 17 décembre 1999

## 2000

- 126. Le chaos déterministe joue-t-il un rôle en sciences ?  
Leçon inaugurale dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour  
Doctorands", FUNDP, 17 janvier 2000

127. Structure musicale et transformation du son ou Exploring aspects in Musics : Concepts and examples,  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 17-25 janvier 2000  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 17-25.01.2000*  
1° Musique et son, (2heures), 18.01.2000  
2° Principes physiques et chimiques à la base de la conception des CD digitaux (1 heure), 19.01.2000  
3° La forme sonate, (2 heures), 19.01.2000  
4° Les chants d'oiseaux & Sciences et composition musicale (2 heures), 20.01.2000
128. Les qualités de la recherche aux FUNDP  
Groupe de Recherche et Développement, 26 janvier 2000
129. Le potentiel d'échange, de Hartree-Fock à la fonctionnelle de la densité via Xa  
FUNDP, séminaire, 16 février 2000
130. La recherche aux Facultés Universitaires ND de la Paix à Namur  
Visite du Ministre S. Kubla, 25 février 2000
131. Modèles théoriques de catalyse par LTM (Late Transition Metals) précurseurs SOLVAY, Séminaire interuniversités, Neder-Over-Hembeek, 7 mars 2000
132. Non equilibrium thermodynamics, chaos and fractals,  
University of Cagliari, Cagliari (Italy) 8 hours, May 2-6, 2000
133. Linear, Cyclic and Möbius Strip Polyacenes: a Theoretical Investigation.  
Xth International Congress of Quantum Chemistry,  
Menton (France), June 5-10, 2000
134. Le chaos déterministe joue-t-il un rôle dans les sciences expérimentales ?  
Conférence inaugurale, XXXVIIIe Congrès pluraliste des sciences,  
Namur, 22-24 août 2000
135. In memoriam Per-Olov Löwdin, a brief outline of instabilities in chemistry,  
P.O. Löwdin funeral and memorial symposium,  
University of Uppsala, Uppsala, October 25-26, 2000
136. Les sciences au XXIe siècle : Perspectives en chimie  
Association Belge des professeurs de physique et de chimie  
Namur, 11.11.2000  
Laboratoire de Chimie Théorique Appliquée, FUNDP, 13.12.2000
137. Polymères conducteurs : l'origine du Prix Nobel de chimie 2000  
Université de Liège, 22.11.2000  
FUNDP, 19.12.2000

## 2001

138. Does Deterministic Chaos Play a Role in Chemistry ?  
Colloquium Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, March 3, 2001
139. Charge and energy transfer in organic systems,  
Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson  
Part I, May 2, 2001  
Part II, May 12, 2001  
Part III, Vibronic (Spin-Boson) Theories, June 21, 2001
40. Les polymères conducteurs, Prix Nobel de Chimie 2000  
Association Belge des professeurs de physique et de chimie  
ULB, 22 août 2001



141. Introduction à la théorie des systèmes périodiques, 2 heures  
7<sup>ème</sup> Ecole d'été de Physico-Chimie Théorique, Aussois, Octobre 1-5, 2001  
Partie I : Théorie  
Partie II : Une application, les polymères conducteurs
142. Introduction à la théorie du chaos, 1 heure  
7<sup>ème</sup> Ecole d'été de Physico-Chimie Théorique, Aussois, Octobre 1-5, 2001
143. Chaos déterministe et Chimie  
Université de Genève, Département de chimie,  
Genève, 10 octobre 2001
144. Transferts électroniques : I. la théorie de Marcus, ses apports et ses perspectives  
Facultés Universitaires ND de la Paix  
Namur, 7 novembre 2001
145. Lectures for Ph. D Students:  
1° on classical semi-classical Marcus theory, 27 novembre 2001  
2° on semi-classical Marcus theory, 29 novembre 2001  
3° Förster & Dexter Energy transfer processes, 4 décembre 2001  
Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, November 27 and 29, 2001
146. On Lagrangian and Hamiltonians, from least action principle to conservation of energy,  
Department of Chemistry, University of Arizona, Tucson, December 7, 2001
147. Intramolecular Electron Transfer in Triarylamine Mixed-Valence Systems  
Communication à la Conference on Organic Nonlinear Optics, ICONO6, Tucson, December 17 2001 (with S. Coropceanu, M. Malagoli & J.L. Brédas)

## 2002

148. Structure musicale et transformation du son ou *Exploring aspects in Music: Concepts and examples*,  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 21-25 janvier 2002  
1. base physique de la gamme de sept notes et du système dodécaphonique de douze demi-tons (2 heures)  
2. origine de la forme sonate classique (2 heures)  
3. processus physiques et chimiques dans la fabrication des CD's (1 heure)  
4. chants d'oiseaux et inspiration musicale (2 heures)  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 21-25.01.2002*
149. Couleurs, lumière et propriétés optiques des matériaux  
Cours Avancés (7 heures) dans le cadre des "Cours de Formation Interdisciplinaire pour Doctorands", FUNDP, 21-25 janvier 2002, dont 4 heures données par J.M. André et 3 heures par B. Champagne  
1. Processus de transferts électroniques et couleurs (1 heure 30)  
2. Introduction à la QED (Electrodynamique quantique) via les phénomènes optiques classiques (2 heures 30)  
*Advanced Lectures (7 hours) "Interdisciplinary post-graduate lectures", FUNDP, 21-25.01.2002*
150. Transferts électroniques : II. de la théorie classique de Marcus à la théorie semi-classique  
Facultés Universitaires ND de la Paix, Namur, 30 janvier 2002

151. The Symmetry "Anomaly" in Antisymmetrically Disubstituted Benzenes  
42th Sanibel Symposium, St. Augustine, Feb.22-March 1, 2002
152. Transferts d'électrons, la théorie de Marcus, ses succès et ses perspectives.  
UMH, Mons, 21 mars 2002
153. Transferts d'énergie : les mécanismes de Förster et Dexter  
Facultés Universitaires ND de la Paix, Namur, 5 juin 2002
154. Théorie des transferts électroniques (3 heures),  
1° Transfert d'électrons : le modèle classique de Marcus  
2° Transfert d'électrons : du modèle classique au modèle  
semi-classique de Marcus  
3° Transferts d'énergie : les mécanismes de Förster et Dexter  
Université de Bordeaux, 10-13 juin 2002
155. Transferts d'électrons : des polymères conducteurs d'électricité aux diodes organiques  
électroluminescentes  
Académie Royale de Belgique, classe des sciences, juin 2002
156. Chaos in chemistry,  
Fourth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Marly-  
le-Grand (juillet 2002)
157. Quantum Chemistry and Chaos: examples in soliton transport in conjugated polymers  
11<sup>th</sup> Congress on Current Trends in Computational Chemistry, Jackson, Mississippi, 1-  
2 November 2002.

## 2003

158. Le chaos et son rôle en chimie, en physique et en biologie, Séminaire résidentiel,  
FUNDP, Faculté des Sciences, Spa, 20-22 janvier 2003
159. Non-Equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures,  
Chaos and Fractals (8 hours)  
Lectures 1-2 : Irreversible Phenomena and Entropy Production  
Lectures 3-4 : Linear Thermodynamics  
Lectures 5-6 : Nonlinear Thermodynamics  
Lectures 7-8 : Chaos and Fractals  
EC-Erasmus programme, University of Como, February 10-15, 2003
160. Electron transfer in polymer chains  
Invited conference, Xth International Conference on Quantum Chemistry, Bonn, July  
20-26, 2003
161. Transferts d'électrons : des polymères conducteurs aux diodes organiques  
électroluminescentes et à l'électronique moléculaire, Congrès des Sciences, Ulg, 28  
août 2003
162. Transferts d'électrons : des polymères conducteurs aux diodes organiques  
électroluminescentes et à l'électronique moléculaire, Université de Bordeaux, 30  
novembre 2003
163. Quantum Chemistry and Electron Transfer in Polymer Chains: from conducting  
polymers to organic electroluminescent diodes  
9th Japan-Belgium Polymer Seminar, Osaka, Japan, November 9-13, 2003

## 2004

164. Electron Transfer in Polymer Chains: from conducting polymers to photoluminescent diodes  
TACC 2004, Theory and Applications of Computational Chemistry, Gyeongju, February 15-19, 2004
165. Molécules Polymères : du celluloid aux accidents des navettes spatiales "Challenger" et "Columbia"  
Printemps des sciences, FUNDP, Namur, 24 avril, 2004
166. Electronic Structure of Polymers: From Quantum Theory to Applications, Symposium on Electronic Structure Theory, in honour of J.M. André's 60<sup>th</sup> Birthday, Georgia Tech, Atlanta, April 5, 2004
167. Quantum theory of polymers, (8 hours)  
1° Role of a quantum theory of polymers and its relations with photoelectron spectroscopy  
2° LCAO Bloch theory for electronic structure analysis of polymers  
3° Examples of applications of LCAO Bloch theory:  
    a) graphite and Boron nitride  
    b) planar, cyclically belt and Möbius polyacenes  
4° Electronic structure of conducting and semi-conducting polymers  
5° Electron transfer in polymers: Marcus classical theory  
6° Electron Transfer in polymers: Marcus semi-classical theory  
7° Energy transfers in polymers: Förster and Dexter mechanisms  
8° Non-linear optical (NLO) effects in polymers  
Erasmus-Socrates Lectures, Università degli studi dell'Insubria, Como, June 10-15, 2004

## 2005

168. Non-Equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Chaos and Fractals (8 hours)  
Lectures 1-2 : Irreversible Phenomena and Entropy Production  
Lectures 3-4 : Linear Thermodynamics  
Lectures 5-6 : Nonlinear Thermodynamics  
Lectures 7-8 : Chaos and Fractals  
Georgia Institute of Technology, February 28-March 3, 2005
169. Global simulation, Non-equilibrium thermodynamics and theoretical chemistry, a tribute to Enrico Clementi  
44<sup>th</sup> Sanibel symposium, St. Simons Island, Georgia, USA, March 11, 2005
170. Electronic structure of polymers  
I.a. Role of a quantum theory of polymers and its relations with photoelectron spectroscopy  
I.b. Electronic structure of conducting and semi-conducting polymers  
II.a. Electron transfer in polymers: Marcus theory (classical and semi-classical)  
II.b. Energy transfers in polymers: Förster and Dexter mechanisms  
II.c. Let us dream ?  
III.a. Non-linear optical (NLO) effects in polymers  
III.b. Non-equilibrium thermodynamics and quantum chemistry: is there a relationship in the field of material science ?  
Erasmus-Socrates set of lectures (8 hours), University of Warsaw, May 16-20, 2005

- 171. Novel materials  
International Academy of Quantum molecular Science, Menton, July 2-3,2005
- 172. Electronic structure of polymers: from quantum theory to applications  
Invited conference, 40<sup>th</sup> IUPAC congress: innovation in chemistry, Pekin, August 14-18, 2005
- 173. Electron transfer and energy transfer theory  
2 hours, Chinese Academy of Sciences, Institute of Chemistry, Beijing, August 18, 2005
- 174. Global simulation, non equilibrium thermodynamics and theoretical chemistry: does deterministic chaos play a role in (quantum) chemistry ?  
2 hours, Chinese Academy of Sciences, Institute of Chemistry, Beijing, August 18, 2005

## 2006

- 175. Thermodynamique de non-équilibre, structures dissipatives et évolution.  
Session de formation pluridisciplinaire, "qu'est-ce que la vie ?", FUNDP, Namur, 23-27 janvier 2006.
- 176. Electron Transfer in Polymer Chains: From Conducting Polymers to OLED's  
Conférence inaugurale,  
Non Equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Bifurcations, Chaos, Fractals and Quantum Chemistry,  
Conférence de clôture  
International Symposium of Theoretical Chemistry, ISTC 2006  
Alger, University of Sciences and Technology Houari Boumediene  
June 12-15, 2006

## 2007

- 176. Un sixième concerto pour piano de Beethoven ? Itinéraire d'un chercheur chimiste.  
Institut de Musique d'Eglise et de Pédagogie, IMEP, Namur, 14 février 2007
- 177. Non-equilibrium thermodynamics and life: the role of dissipative structures, bifurcations and chaos,  
Comenius University, Bratislava, Slovakia, May 22, 2007  
Matej Bel University, Banska Bystrica, Slovakia, May 24, 2007
- 178. Matériaux polymères et plastiques : avantages et risques, du celluloid à l'accident de la navette spatiale  
International Academy of Quantum Molecular Science et Ville de Menton, Menton, 6 juillet 2007
- 179. Thermodynamique de non-équilibre, structures dissipatives, bifurcations, chaos et évolution : le rôle de la chimie théorique  
QUITEL XXXIII, Congreso de quimicos teóricos de expresión Latina, Universidad de la Habana, La Habana, Cuba, Septemner 15-22, 2007
- 180. Quantum chemistry and non equilibrium thermodynamics: chaos in polyacetylene chains? A tribute to Yngve Ohrn  
ICCMSE 2007, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Symposium in the honour of Yngve Ohrn, Corfu, September 24-30, 2007
- 181. Quantum Chemistry of Polymers  
1. Role of a quantum theory of polymers and its relations with photoelectron

- spectroscopy
2. Electronic structure of conducting and semi-conducting polymers
  3. Electron transfer in polymers: Marcus classical theory
  4. Non-equilibrium thermodynamics and quantum chemistry: is there a relationship in the field of material science ?
  5. Let's dream: Möbius strips vs. linear or cyclic (drum or barrel) polyacenes
  6. Non-linear optical (NLO) effects in polymers
- 8 hours lectures at College Chemistry, Beijing Normal University, October 9, 10, and 11, 2007
182. From Quantum Mechanics to Quantum Computing and Teleportation
    - Part I: Short Stories about One and Two Quanta
    - Part II: Quantum technology, teleportation and computing
 2 hours seminars at the Institute of Semiconductor, Chinese Academy of Sciences, October 12, 2007
  183. Statistical Thermodynamics:
    - I. Application to perfect gas
    - II. Real molecular gases without interactions
    - III. Quantum statistics
    - IV. Equilibrium and rate constants
 8 hours lectures at The Institute of Chemistry of the Chinese Academy of Sciences (ICCAS), Beijing, October 15, 16, 17, 18, 2007
  184. Electronic structure of polymers, from quantum theory to applications,
 1 hour conference in the Molecular Science Forum, The Institute of Chemistry of the Chinese Academy of Sciences (ICCAS), Beijing, October 17, 2007
  185. Electronic structure of polymers: from quantum theory to application
 1 hour conference at the College of Chemistry and Molecular Engineering, East China University of Science and Technology (ECUST), October 19, 2007  
 1 hour conference at the Department of Physics, Fudan University, October 23, 2007
  186. Electronic structure of polymers: from concepts to realizations
 1 hour lecture at the Ceremony of conferring the title of Concurrent Professor of the Nanjing University, October 25, 2007
  187. Statistical Thermodynamics for chemists
    - I. Classical Statistics and Thermodynamics
    - II. Indistinguishability and Quantum Statistics
    - III. Equilibrium and Rate Constants
 3 1/2 hours lectures at Department of Chemistry, Nanjing University, October 26, 28, 2007
  188. From Quantum Mechanics to Quantum Computing and Teleportation
    - Part I: Short Stories about One and Two Quanta
    - Part II: Quantum technology, teleportation and computing
 1 1/2 hours seminars at Department of Chemistry, Nanjing University, October 29, 2007
  189. Electronic Structure of Polymers
    1. Electronic structure of conducting and semi-conducting polymers
    2. Electron transfer in polymers: Marcus classical theory
    3. Electron transfer in polymers: Marcus semi-classical theory
    4. Energy transfers in polymers: Förster and Dexter Mechanisms
 4 hours lectures at the School of Chemistry and Materials Science, Shaanxi Normal University, November 1, 2, 2007
  190. Electronic structure of polymers: from concepts to realizations

- 1 hour conference at the School of Chemistry and Materials Science, Shaanxi Normal University, November 2, 2007
191. 1° Electronic structure of conducting and semi-conducting polymers (1 hour)  
 2° Electron transfer and Marcus classical theory (1 hour)  
 3° Non equilibrium thermodynamics : is there a relation with materials science ? (2 hours)  
 Xiamen University, Chemistry Department, November 9, 2007
192. Foundations of quantum mechanics and trends to specific applications like quantum computing :  
 1. Stories about one and two quanta (1 hour)  
 2. Quantum technology, teleportation and computing (1 hour)  
 Xiamen University, Chemistry Department, November 12, 2007
193. Electronic Structure of Polymers: From Quantum Theory to Applications  
 1 hour lecture at The Hong Kong University of Science and Technology, Department of Chemistry, November 13, 2007

## 2008

192. Un sixième concerto pour piano de Beethoven ? Itinéraire d'un chercheur chimiste.  
 UTAN, Namur, 9 janvier 2008
193. From Quantum Mechanics to Quantum Computing and Teleportation  
 I. Short stories on one and two quanta  
 II. Quantum technology, teleportation and computing  
 Séminaire de l'Ecole doctorale en Science des Matériaux, Service des matériaux nouveaux, UMH, January 25, 2008
194. Non-equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Bifurcations, Chaos and Evolution,  
 FNRS Graduate School on Science and Engineering of Materials, Interfaces, Nanostructures, CMI, FUNDP, February 15, 2008
195. From Quantum Mechanics to Quantum Computing and Teleportation  
 I. Short stories on one and two quanta  
 II. Quantum technology, teleportation and computing  
 Conférence en l'honneur de l'éméritat de Janos BNagy, FUNDP, March 7, 2008
196. Olivier Messiaen, Musicien, Musicien de Dieu ou musicien de la nature,  
 Institut de Musique et de Pédagogie, IMEP, 11 mars 2008
197. Les personnalités de l'Académie internationale des sciences moléculaires quantiques  
 International Academy of Quantum molecular Science, Menton, July 4-6, 2008
198. Simple mathematical Models that lead to Non-equilibrium, Fractal and Möbius Structures  
 WATOC 2008, World Association of Theoretical or Computational Chemists, Sydney, September 14-19, 2008
199. Quelques relations entre Science et Art : impostures intellectuelles, hasards forcés ou sources d'inspiration mutuelle,  
 Académie Royale de Belgique, séance publique de la classe des sciences, 13 décembre 2008

## 2009

200. Le Collège Belgique au Palais des Académies de Bruxelles  
 Discours inaugural, Académie Royale de Belgique, Bruxelles, 20 janvier 2009

201. Le Collège Belgique au Palais provincial de Namur  
Discours inaugural, Palais provincial, Namur, 21 janvier 2010
202. Non-equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Chaos and Evolution  
Georgia Institute of Chemistry, School of Chemistry, Atlanta, March 26, 2009
203. Non-equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Chaos and Evolution  
University of Arizona, Chemistry UAScience Colloquium, May 7, 2009
204. Thermodynamique de non-équilibre, structures dissipatives, chaos et chimie quantique  
Université de Pau (France), 9 juillet 2009
205. Colors, Birds and Music : the contributions of Olivier Messiaen  
Workshop on « Bio-inspired Photonic Structures », San Sebastian (Spain), July 11, 2009
206. Non-equilibrium Thermodynamics, Dissipative Structures, Chaos and Evolution  
Institut international de chimie biologique (IECB), Bordeaux, 15 juillet 2009
207. Thermodynamique de non équilibre, structures dissipatives et chimie quantique : un défi pour les chimistes théoriciens,  
XXXV QUITEL, St Andrès, Colombia, September 18-22, 2008
208. La nature quantique de la matière va-t-elle rendre fous les chimistes  
I. Histoires de quantons solitaires ou en couple.  
II. Calculs quantiques et téléportation : rêve ou réalité ?  
Département de chimie, Université de Namur, 23 octobre et 6 novembre 2009
208. Science et technologie des matériaux polymères : du celluloïd aux accidents des navettes spatiales Challenger et Columbia  
- Altair – Centre d’histoires des Sciences et des Techniques de l’ULB, Bruxelles, 14 novembre 2009  
- Université Paris-Diderot, Paris, 17 novembre 2009
209. Beethoven, le symphoniste : 1<sup>ère</sup> partie, l’affirmation de la forme  
IMEP, Namur, 5 novembre 2009
210. Beethoven, le symphoniste : 2<sup>ème</sup> partie, vers l’élargissement de la forme  
IMEP, Namur, 19 novembre 2009
211. Beethoven, source d’inspiration pour ses suivants  
IMEP, Namur, 3 décembre 2009
212. Mendelssohn, le Mozart du romantisme (conférence pour le bicentenaire de la naissance de Felix Mendelssohn)  
IMEP, Namur, 10 décembre 2009

## 2010

213. Quantum chemistry of Polymers : an overview  
2010 Sanibel Symposium, 50th anniversary, St. Simons, Ga (USA), February 24-March 2, 2010
214. Alban Berg, musicien atonal, dodécaphonique, post-romantique et cryptographe  
IMEP, Namur, 19 avril 2010 :
215. La musique d’Axel North pour le *2001 ou l’Odyssée de l’espace* de Stanley Kubrick : un épisode peu connu de la composition de bandes sonores  
IMEP, Namur, 26 avril 2010
216. Robert et Clara Schumann : leurs concertos pour piano, deux visions du romantisme (conférence pour le bicentenaire de la naissance de Robert Schumann)  
IMEP, Namur, 3 mai 2010
217. Couleurs, oiseaux et musique : l’exemple d’Olivier Messiaen  
IMEP, Namur, 10 mai 2010