



THÈSE

En vue de l'obtention du DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présentée et soutenue par

Yann GARNIRON

Le 15 novembre 2018

**Développement et implémentation parallèle de méthodes
d'interaction de configurations sélectionnées**

Ecole doctorale : **SDM - SCIENCES DE LA MATIERE - Toulouse**

Spécialité : **Physico-Chimie Théorique**

Unité de recherche :

LCPQ-IRSAMC - Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

Thèse dirigée par

Anthony SCEMAMA

Jury

M. Jean-Philip Piquemal, Rapporteur

M. Philippe Carbonnière, Rapporteur

Mme Nathalie Guihéry, Examineur

M. Nicolas Renon, Examineur

M. Roland Assaraf, Examineur

M. Anthony SCEMAMA, Directeur de thèse