



# 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 30 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