

Dr. Aurélie PERRIER épouse PERRIER-PINEAU

Née le 25/11/1978 à Jonzac (17)

Mariée, 2 enfants (3 et 6 ans)

Maître de Conférences CN – 5^{ème} échelon
Section C.N.U. 31

UFR de Chimie
Université Paris Diderot Paris 7

&
Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP)
11 rue Pierre et Marie Curie, 75 231 Paris Cedex 05
– France

aurelie.perrier-pineau@univ-paris-diderot.fr

Déroulement de carrière

- Depuis Oct 2014** **Maître de Conférences - Université Paris Diderot, IRCP**
Laboratoire d'affectation : Equipe Chimie Théorique et Modélisation (responsable : Professeur Carlo Adamo), Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP), UMR 8247 (CNRS – Chimie ParisTech) 11 rue Pierre et Marie Curie, 75 231 Paris Cedex 05– France
- Sept 2007- Sept 2014** **Maître de Conférences - Université Paris Diderot, Laboratoire ITODYS**
Laboratoire d'affectation : Interfaces, Traitements, Organisation et Dynamique des Systèmes (I.T.O.D.Y.S.), Université Paris Diderot Paris 7
- Sept 2013- 14* *Délégation CNRS (1 an à mi-temps)*
- Sept 2012- Janv 2013* *Congé pour Recherche et Conversion Thématique (1 semestre)*
- Oct. 2006- Mai 2007** **Contrat post-doctoral - Università degli Studi di Siena, Italia**
Contrat de recherche « Università degli studi di Siena » / « Mitsubishi Chemicals »
« Quantum chemical modeling of a biomimetic photochemical switch »
Direction : Pr. Massimo Olivucci
- 2005-2006** **Attachée Temporaire d'Enseignement et de Recherche- ITODYS, Université Paris 7**
« Etude théorique des propriétés optiques de molécules photochromes greffées sur des nanoparticules d'or »
Direction : Dr. François Maurel

Diplômes

- 2014** **Habilitation à Diriger des Recherches, Université Paris Diderot**
« Contribution à l'étude théorique de systèmes photoactifs : propriétés optiques, réactivité et effets d'environnement »
Soutenance : 27 juin 2014
- 2002-2005** **Thèse – Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire, Université Bordeaux 1**
« Approche Statistico-Dynamique des réactions de désorption moléculaire : application aux systèmes H₂/Pt(111) et H₂/Cu(111) »
Spécialité : chimie – physique, soutenue le 25/11/2005
Directeurs de thèse : Pr. Jean-Claude Rayez et Dr. Laurent Bonnet
Mention Très Honorable
- 2001-2002** **D.E.A. de Chimie Informatique et Théorique, Université Paris VI**
Mention Très Bien
- 2000-2002** **Ingénieur de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris (E.N.S.C.P.)**
- 1996-2000** **DEUG, Licence et Maîtrise de Chimie Physique, Université Bordeaux 1**

Prix et distinctions

- 🔗 **Prix de thèse 2006** attribué par la Division Chimie-Physique (DPC) de la Société Française de Chimie
- 🔗 Sélection et participation au « **Lindau Nobel Laureate Meeting dedicated to Chemistry** », 25-30 Juin 2006, Lindau (Germany)

Activités d'intérêt collectif

🔗 **Participation à des commissions et conseils**

Membre élue du Conseil Scientifique de l'UFR de Chimie, Université Paris Diderot Paris 7 (2009-2014)

🔗 **Membre de la cellule d'organisation des séminaires de l'UFR de Chimie: Séminaires Paris Rive Gauche**

🔗 **Membre de la cellule pédagogique de l'UFR de Chimie de l'Université Paris Diderot**

🔗 **Responsabilité d'instruments scientifiques**

Responsable du cluster informatique de l'ITODYDYS (2008-2014) : 80 processeurs.

Organisation des sessions de formation, formation personnalisée pour les nouveaux utilisateurs, expertise et assistance technique.

Activités d'expertise

🔗 **Participation à des comités de sélection**

a. 31MCF403 : Chaire d'excellence CNRS, Université de Rouen, UMR 6014 (COBRA) – IRCOF, « Chimie Théorique: Topologie Quantique et Réactivité », 2010

b. 31MCF235 : Université Paris Diderot, Laboratoire ITODYDYS, « Modélisation pour les nanosciences », 2010

c. 31MCF281 : Université Lille 1, Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR), « Chimie quantique et spectroscopie moléculaire », 2011

Expert pour l'ANR (Agence Nationale pour la Recherche), « Nanosciences et nanotechnologies pour les matériaux et les biotechnologies », Appel à projet générique 2014

Expert pour le LabEx CHARMMMAT Axe "matériaux activés" 2014

- **Referee pour plusieurs journaux internationaux à comité de lecture:**

Physical Chemistry Chemical Physics, Dyes and Pigments, Journal of Molecular Modeling, Material Chemistry and Physics, International Journal of Quantum Chemistry, Journal of Chemical Physics, Chemical Physics Letters, New Journal of Chemistry

- **Organisation de manifestations scientifiques :**

- Membre du comité d'organisation de l'école thématique Galerne, Ile d'Oléron, Juin 2014

<http://www.galerie.univ-paris-diderot.fr>

- Membre du comité d'organisation des 14èmes Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF 2014), Paris, Juillet 2014, <http://rctf2014.sciencesconf.org/>

- Co-responsable des séminaires de l'UFR de Chimie : Séminaires « Paris Rive Gauche » (séminaires ayant lieu tous les 3 mois, réunissant environ 100 personnes)

Activités pédagogiques

🔗 **Responsabilités d'enseignement**

1. Licence de Chimie, L2, Université Paris Diderot : responsable des Unités d'Enseignement « Liaison Chimique » (70 étudiants), « Outils mathématiques pour les chimistes OT3b »

2. Responsable des « **relations UFR de Chimie Paris Diderot – Lycées** » (2010-2011 puis 2013-) : dans le cadre du « Plan Réussite en Licence » (PRL), mise en place d'actions vers les lycées.

3. Depuis de la rentrée 2014, co-responsable du Master 1 « **Chimie Paris Cité** »

<http://www.master.chimie.univ-paris-diderot.fr/>

4. Depuis septembre 2012 : **Membre de la cellule pédagogique de l'UFR de Chimie**

↳ **Enseignements dispensés (à l'UFR de Chimie Paris Diderot)**

Pendant la période 2007-2014 :

Chimie Générale L1	TD-TP	2007-2011	40h eq. TD
Liaison Chimique L2	Cours - TD	2010-2014	25h eq. TD
Outils Mathématiques pour le Chimiste L2	TD	2007-2011	25h eq. TD
Algorithmique pour le chimiste L2	Cours-TP-TD	2008-2012	35h eq. TD
Mécanique quantique L2	TD	2008-2014	30h eq. TD
Théorie des groupes L2	TD	2008-2014	15h eq. TD
Projet professionnel L2	TD	2010-2014	15h eq. TD
Liaison Chimique L3	TD - TP	2008-2014	20h eq. TD
Modélisation des surfaces M2	Cours-TD	2008-2011	10h eq. TD

Depuis 2014 :

Chimie Générale L1	Cours - TD	60 h eq. TD
Méthodologie Universitaire L1	TD	16 h eq. TD
Liaison Chimique L2	Cours Magistral - TD	25 h eq. TD
Projet professionnel L2	TD	15 h eq. TD
Mécanique quantique L3	TD	30 h eq. TD
Chimie Théorique et Spectroscopie M1	Cours -TD	20 h eq. TD
« Computational chemistry » M2 « Frontiers in Chemistry »	Cours	15h eq. TD
« Laser chemistry » M2 « Frontiers in Chemistry »	Cours	10 h eq. TD
Tutorat « Théorie des Groupes » ESPCI	TD	5 h eq TD
TP « Label de Chimie Théorique » M2	TP	3 h eq. TD

↳ **Encadrement d'étudiants de licence et DUT**

- David Martins, « *Analyse en Solution et sur Film mince de photochromes Thermiques ou Photochimiques* », **DUT « Mesures Physiques » 2^{ème} année**, avril-juin 2009
- Stéphane Tesson, « *Etude des propriétés spectroscopiques de différents chromophores et de la caféine : étude couplée de la dynamique moléculaire et de la théorie de la fonctionnelle de la densité* », **L2 Chimie**, février-juin 2010
- Damien Devienne, « *Etude théorique des propriétés thermodynamiques et optiques des molécules photochromes* », **L3 Chimie**, avril-juin 2010
- Stéphane Tesson, « *Etude théorique des propriétés structurales et optiques de systèmes hybrides Agrégat métallique d'Or/Molécule photochrome* », **L3 Chimie**, avril-juin 2011, **1 publication**
- Cloé Azarias, « *Etude théorique de nouveaux photochromes présentant un pont cyclopentène substitué* » **L2 Chimie**, juin-juillet 2012
- Benedikt Kloss, « *Theoretical investigation of the Optical and Structural Properties of Gold Cluster-Photochrome Hybrid System* », **L3 Chimie**, avril-juin 2013, **1 publication**
- Cloé Azarias, « *Etude théorique de molécules présentant un transfert de charge photoinduit : propriétés optiques et complexation* », **L3 Chimie**, avril-juillet 2013

Encadrement d'étudiants de master

1. Ismail Hamdi, « *Etude théorique d'un interrupteur optomécanique moléculaire à base de dithiényléthène incorporé dans une matrice polymère* », **Master 2** «Physique des Matériaux », mai-octobre 2013, Faculté des Sciences de Tunis, Tunisie
2. David Steinmetz, « Etude de la complexation du Tellure par l'éthylène glycol », **M1 Chimie**, avril-juillet 2014
3. Jérémy Touzeau, « Performances d'un nouveau jeu de paramètres DFTB pour la description des interactions *or-organique* », **M1 Chimie**, avril-juillet 2014

Encadrement doctoral

1. Rym Boubekri (2007-2010), doctorante à l'ITODYS, Université Paris Diderot

Bourse de l'ED 388 (Université Paris Diderot / Itodys)

« *Dispositifs plasmoniques photocommutables* »

2 publications

2. Arnaud Fihey (2011-2014), doctorant à l'ITODYS, Université Paris Diderot

Bourse de l'ED 388 (Université Paris Diderot / Itodys)

autorisation à diriger une thèse du Conseil Scientifique de l'Université Paris Diderot

« *Description des propriétés électroniques de systèmes hybrides : développement d'approches hybrides* »

5 publications

Participation à des contrats/programmes de recherche

1. ANR « Nanophotoswitch » ANR-07-NANO-025 (2007-2011), Equipe partenaire
« *Nanoscale coupling in multifunctional materials for enhanced photo-switching* »

2. Programme franco-belge PHC (Partenariat Hubert Curien) Tournesol (code projet : 20417UC)
« *Etude théorique de photochromes en étoiles* », ITODYS, Université Paris Diderot – Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix (FUNDP), Namur, Belgique, **2009-2010**.

3. Projets DARI-CINES : responsable du projet c2011086680 « *Etude des propriétés structurales et optiques de composés photochromes modèles greffés sur un agrégat métallique* » (80 000 heures de calcul attribuées en 2011 puis 2012, 250 000 heures en 2013 et 2014)

4. Projet PICS projet International de Coopération Scientifique –PICS - « SIMPTLO » (2013)
« *Modélisation multi-échelle d'un biocapteur* », collaboration réalisée dans le cadre d'un projet International de Coopération Scientifique – collaboration avec le groupe du Prof. B. Wang, University of Wuhan, Wuhan, China

5. ANR « E-Storic » ANR-14-CE05-0002 (2014-2017), Equipe partenaire
« *Dispositifs Moléculaires pour un Stockage Multi-Electronique : vers une Structronique Moléculaire* », Coordinateur : Pr. Philippe Lainé

6. Projet LabEx MiChem

« *New intercalating redox probes for electrochemical real-time PCR: towards a rational and predictive approach for affinity between organometallic molecules and double-strand DNA* »

Collaboration « *Laboratoire d'Electrochimie Moléculaire* » (LEM), Université Paris Diderot – « Equipe Chimie Théorique et Modélisation », IRCP
