

François-Xavier Coudert

Date de naissance : 05/06/1982

Nationalité française

Email : f.coudert@ucl.ac.uk

<http://www.homepages.ucl.ac.uk/~uccafco/>



Davy Faraday Research Laboratory
K. Lonsdale Building 3rd Floor
Gower Street, University College London
London WC1E 6BT, United Kingdom

Formation et titres universitaires

2004 – 2007	Thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud 11, intitulée « L'eau et l'électron hydraté en milieu confiné : des propriétés physico-chimiques à la réactivité ».
2003 – 2004	DEA de Physico-Chimie Moléculaire de l'Université Paris-Sud 11 (mention Très-Bien, rang : 1 ^{er}).
2001 – 2004	Magistère Interuniversitaire de Chimie, École normale supérieure (Paris) et Université Paris-Sud 11.
2001 – 2005	Élève fonctionnaire stagiaire de l' École normale supérieure (Paris) .

Activités de recherche

depuis juillet 2007	Stage post-doctoral au Davy Faraday Research Laboratory, University College London (directeur : prof. Richard Catlow) sous la direction du Dr Caroline Mellot-Draznieks.
Sept. 2004 – Juin 2007	Thèse au Laboratoire de Chimie Physique (UMR 8000), sous la direction du Dr Anne Boutin.
Jan. – juin 2004	Stage de DEA effectué au Laboratoire de Chimie Physique (UMR 8000), sous la direction du Dr Anne Boutin : <i>Simulation mixte classique-quantique de l'électron hydraté : étude de couples cation-électron</i> .
Jan. – juin 2003	Stage de recherche à l'université du Massachussets (Amherst), sous la direction du prof. Scott M. Auerbach : <i>Proton jump in zeolites: designing a Potential Energy Surface</i> .

Enseignement et responsabilités collectives

Monitorat	Moniteur et allocataire de recherche à l'Université Paris-Sud 11 (UFR des Sciences, département de Chimie) et au CIES de Versailles. 173 heures d'enseignement réparties ainsi : Thermodynamique statistique, 18 h, Préparation à l'agrégation de Chimie Mécanique quantique, 25 h, Pré-doctorat de l'ENS (niveau L3) Thermochimie et théorie cinétique des gaz, 56 h, Licence 1, filière concours ENSI Projet professionnel, 50 h, Licence 1, toutes filières confondues Chimie inorganique, 20 h, Licence 2
Stagiaires	Encadrement de deux stages de licence et de maîtrise de 4 semaines, en avril 2004 et décembre 2006.
International	Encadrement des sessions pratiques du tutoriel européen <i>Quantum Simulation of Liquids and Solids</i> , au Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM), du 6 au 9 novembre 2006.
Livres	Auteur de 7 chapitres d'annales corrigées des concours d'entrée aux Grandes Écoles, éditées par H&K entre 2003 et 2005.
Divers	Représentant élu des doctorants au conseil du Laboratoire de Chimie Physique (UMR 8000). Referee pour le journal <i>Molecular Simulation</i> .

Autres compétences

Langues	Français (langue maternelle) et anglais (couramment).
Informatique	Utilisation professionnelle des outils bureautiques et scientifiques. Programmation en divers langages (C, Fortran, ...), incluant les techniques de parallélisation (OpenMP, MPI).
Activités bénévoles	Co-développeur du compilateur GNU Fortran et créateur du logiciel de dessin moléculaire EasyChem. Tuteur informatique à l'École normale supérieure : animation de formations sur Unix, L ^A T _E X, HTML. Animation et direction de colonies de vacances.

Publications et communications

Revues scientifiques internationales à comité de lecture

- « Temperature effect on the absorption spectrum of the hydrated electron paired with a lithium cation in deuterated water », M. Lin, Y. Kumagai, I. Lampre, F.-X. Coudert, Y. Muroya, A. Boutin, M. Mostafavi et Y. Katsumura, *J. Phys. Chem. A*, **111**, 3548–3553 (2007).
- « Dipole moment, hydrogen bonding and IR spectrum of confined water », F.-X. Coudert, R. Vuilleumier et A. Boutin, *ChemPhysChem*, **7**, 2464–2467 (2006).
- « Confinement effect on the hydrated electron behaviour », F.-X. Coudert et A. Boutin, *Chemical Physics Letters*, **428**, 68–72 (2006).
- « Molecular dynamics simulations of electron-alkali cation pairs in bulk water », F.-X. Coudert, P. Archirel et A. Boutin, *Journal of Physical Chemistry B*, **110**, 607–615 (2006).
- « Molecular dynamics simulations of the temperature and density dependence of the absorption spectra of hydrated electron and solvated silver atom in water », A. Boutin, R. Spezia, F.-X. Coudert et M. Mostafavi, *Chemical Physics Letters*, **409**, 219–223 (2005).
- « Theoretical study of neutral dipolar atom in water: structure, spectroscopy and formation of an excitonic state », R. Spezia, F.-X. Coudert et A. Boutin, *Modern Physics Letters B*, **18**, 1327–1345 (2004).
- « Reactivity of an excess electron with monovalent cations in bulk water by mixed quantum classical molecular dynamics simulations », R. Spezia, C. Nicolas, F.-X. Coudert, P. Archirel, R. Vuilleumier et A. Boutin, *Molecular Simulation* **30**, 749–754 (2004).
- « Distribution of sodium cations in faujasite-type zeolite: A canonical parallel tempering simulation study », C. Beauvais, X. Guerrault, F.-X. Coudert, A. Boutin et A. H. Fuchs, *Journal of Physical Chemistry B* **108**, 399–404 (2004).

Contributions à des ouvrages collectifs

- « Dynamique moléculaire mixte classique-quantique de l'électron hydraté », A. Boutin et F.-X. Coudert, in *Réactions ultrarapides en solution — Approches expérimentales et théoriques*, T. Gustavsson et M. Mehran, CNRS Éditions, à paraître (2007).
- *Annales des concours*, sessions 2003, 2004 et 2005, aux éditions H&K : corrigés des épreuves de chimie des concours d'entrée des grandes écoles, enrichis de conseils méthodologiques et de pistes de réflexion.

Communications orales

- Encadrement des sessions pratiques du tutorial CECAM *Quantum Simulation of Liquids and Solids*, du 6 au 9 novembre 2006 à Lyon, organisé par E. J. Meijer, R. Vuilleumier, I. Abrikosov et S. Sergej.
- « Water confined in nanopores : structure, dipole, IR and more » au workshop CECAM *New developments for first principles molecular dynamics simulations in condensed matter and molecular physics*, à Lyon (France), du 15 au 18 mai 2006.
- « Elemental Femtochemistry of a Confined Hydrated Electron » lors de la réunion *Ab initio dynamical simulations in condensed matter*, le 19 avril 2006 à Paris.

Posters

- « Étude par dynamique moléculaire ab initio d'eau adsorbée dans une zéolithe », F.-X. Coudert et A. Boutin, *22^e réunion du Groupe Français des Zéolithes*, du 15 au 17 mars 2006, à La Rochelle (France).
- « Simulation of the hydrated electron and its reactivity towards cations in bulk water », F.-X. Coudert, P. Archirel et A. Boutin, *International School of Solid State Physics – 34th course, Computer Simulations in Condensed Matter : from Materials to Chemical Biology*, du 20 juillet au 1^{er} août 2005, à Erice (Sicile, Italie).
- « Simulation of the hydrated electron and its reactivity towards cations in bulk water », F.-X. Coudert, P. Archirel et A. Boutin, *International Conference on Transient Chemical Structures in Dense Media*, du 14 au 16 mars 2005, à Paris (France).

Autres communications issues de mon travail

- Communication orale par **A. Boutin** : « Propriétés physiques et réactivité de l'électron hydraté en phases liquides et confinée. Simulation moléculaire mixte classique-quantique », aux *13^e Journées d'Études de Chimie sous Rayonnement*, du 28 mai au 1^{er} juin 2006, Le Croisic (France).
- Poster « Simulation of radiolysis in confined water », F.-X. Coudert et **A. Boutin**, *Gordon Research Conference : "Radiation chemistry"*, du 2 au 7 juillet 2006 à Waterville, ME (USA).
- Poster « Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics Studies of a Hydrated Electron and Cation Pairs in Bulk Water », F.-X. Coudert et **A. Boutin**, *24th Miller Conference on Radiation Chemistry*, du 10 au 15 septembre 2005 à la Londe lès Maures (France).