François-Xavier Coudert

Chargé de recherche au CNRS
33 ans (né le 5 juin 1982)

Institut de Recherche de Chimie Paris
UMR 8247, CNRS & Chimie ParisTech
11 rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris

fx.coudert@chimie-paristech.fr / 06 28 04 58 18
http://coudert.name/

Cursus : formation & expérience professionnelle

- Avril 2013 : **Habilitation à diriger les recherches**, Université Pierre et Marie Curie. Rapporteurs : profs. Gino Baron, Jean-Louis Barrat, Michele Parrinello
- Depuis 2008 : **Chargé de recherche au CNRS** (section 13), à l'Institut de Recherche de Chimie Paris (UMR 8247, Chimie ParisTech & CNRS). **Chargé de recherche de 1ère classe** depuis 2013.
- 2007–2008 : **Post-doctorat à University College London**, Chemistry Department (équipe du prof. Richard Catlow) sous la direction de Caroline Mellot-Draznieks.
- 2004–2007 : **Thèse de doctorat de Chimie de l'Université Paris-Sud 11**, *« L'eau et l'électron hydraté en milieu confiné : des propriétés physico-chimiques à la réactivité »*, sous la direction d'Anne Boutin.
- 2003–2004 : DEA de Physico-Chimie Moléculaire, Université Paris-Sud 11 (rang: 1er).
- 2003 : Stage de recherche de 6 mois à l'Université du Massachussetts (Amherst), dir. Scott Auerbach.
- 2001–2005: Élève de l'École normale supérieure (Paris), département de Chimie.

Production scientifique

- **75 publications** dans des revues internationales à comité de lecture (2033 citations, h-index = 26)
- 9 chapitres d'ouvrages collectifs
- **12 conférences internationales sur invitation** des organisateurs
- 31 interventions orales en conférences internationales, 13 en conférences nationales

Comités de rédaction, organisation de conférences

- Editorial Board, *Adsorption Science & Technology*
- Editorial Advisory Board, *C&EN (Chemical and Engineering News)*, American Chemical Society
- Éditeur invité de 2 numéros spéciaux, dans *Molecular Simulation* (2015) et *Dalton Transactions* (2016)
- Co-organisateur de 4 workshops internationaux, 6 conférences nationales et 4 formations ou écoles

Distinctions

- 2016 : Membre distingué junior de la Société Chimique de France
- 2015 : Prix Jeune Chercheur de la Division de Chimie Physique (SCF / SFP)
- 2012 : Prime d'excellence scientifique (2012)
- 2009 : Prix de la meilleure intervention orale, conférence *Horizons in Hydrogen Bond Research*
- 2008 : Prix du meilleur poster, *British Zeolite Association Conference*

Quelques publications récentes

- "A pressure amplifying framework material with negative gas adsorption transitions", S. Krause, V. Bon, I. Senkovska, U. Stoeck, D. Wallacher, D. M. Többens, S. Zander, R. S. Pillai, G. Maurin, F.-X. Coudert and S. Kaskel, ***Nature*, 2016**, in press, DOI: 10.1038/nature17430
- "Carbon dioxide transport in molten calcium carbonate occurs through an oxo-Grotthuss mechanism via a pyrocarbonate anion", D. Corradini, F.-X. Coudert and R. Vuilleumier, ***Nature Chemistry*, 2016**, in press, DOI: 10.1038/nchem.2450
- "Encoding Complexity within Supramolecular Analogues of Frustrated Magnets", A. B. Cairns, M. J. Cliffe, J. A. M. Paddison, D. Daisenberger, M. G. Tucker, F.-X. Coudert and A. L. Goodwin, ***Nature Chemistry*, 2016**, in press, DOI : 10.1038/nchem.2462
- "Controlled Partial Interpenetration in Metal-Organic Frameworks", A. Ferguson, L. Liu, S. J. Tapperwijn, D. Perl, F.-X. Coudert, S. Van Cleuvenbergen, T. Verbiest, M. A. van der Veen and S. G. Telfer, ***Nature Chem.*, 2016**, 8, 250–257.

- "Remarkable Pressure Responses of Metal–Organic Frameworks: Proton Transfer and Linker Coiling in Zinc Alkyl Gates", A. U. Ortiz, A. Boutin, K. J. Gagnon, A. Clearfield and F.-X. Coudert, ***J. Am. Chem. Soc.*, 2014**, 136, 11540–11545
- "Correlated defect nanoregions in a metal–organic framework", M. J. Cliffe, W. Wan, X. Zou, P. A. Chater, A. K. Kleppe, M. G. Tucker, H. Wilhelm, N. P. Funnell, F.-X. Coudert and A. L. Goodwin, ***Nature Commun.*, 2014**, 5, 4176.

Responsabilités administratives & scientifiques

- Depuis 2015 : Membre du bureau du GDR « Thermodynamique Moléculaire et des Procédés »
- Depuis 2015 : Président du comité des utilisateurs du système d'information, Chimie ParisTech
- Depuis 2014 : Membre nommé du Conseil Scientifique de l'Institut de Chimie (INC) du CNRS
- Depuis 2014 : Membre du bureau de la sous-division « Modélisation et Simulation » de la Division de Chimie Physique de la SCF et SFP
- Depuis 2014 : Trésorier de l'Association Française pour l'Adsorption (AFA)
- Depuis 2014 : Responsable communication scientifique et membre du directoire de l'UMR 8247

Encadrement d'étudiants & enseignement

- 8 doctorants co-dirigés ou co-encadrés
- 5 post-doctorants
- 6 étudiants de niveau M2, 19 stagiaires de niveau L3 et M1
- Enseignements sur la période 2012–2016 :

Établissement	Intitulé	Niveau	Durée	Période
École normale supérieure	Thermodynamique statistique (cours & TD)	L3	32 h	2015–…
Chimie ParisTech	Cours : Thermodynamique statistique	M1	13 h	2011–…
Chimie ParisTech	TD : Modélisation moléculaire	M1	26 h	2009–…
Chimie ParisTech	TD : Programmation	L3	32 h	2012–2013
Label de Chimie Théorique	Cours : Simulation moléculaire	M2	8 h	2009–…

- Intervenant dans des formations et écoles : *MeMoSim 2015* (sous-division « Modélisation et Simulation » de la DCP, 2015), *Dynamique moléculaire ab initio : CPMD/CP2K* (2010), etc.

Contrats industriels, projets ANR & IDEX

- Porteur de 2 contrats avec Air Liquide, Centre de Recherche Claude-Delorme : thèses CIFRE (2009–2012, 2015–2018)
- Porteur de 2 contrats avec EDF R&D, Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement : 2 post-doctorats de 12 mois (2011–2013)
- Partenaire d'un contrat avec Saint Gobain, Centre de Recherches et d'Études Européen : thèse CIFRE (2013–2016)
- Partenaire du projet ANR « Heter'eau » (2006-2009) : financement de 12 mois post-doc
- Partenaire du projet ANR « IMCAT » (2007-2010) : financement de 12 mois post-doc
- Partenaire du projet ANR « SOFT-CRYSTAB » (2010-2014) : financement d'une thèse
- Partenaire du projet IDEX PSL "COOCAR" (2014–2015) : financement d'un post-doctorant (12 mois)
- Porteur du projet IDEX PSL "MECADS" (2015–2016) : financement d'un post-doctorant (12 mois)
- Porteur du projet IDEX PSL "DEFORM" (2015–2018) : financement d'un post-doctorant (18 mois)

Divers

- Langues : français (langue maternelle) et anglais (courant).
- Programmeur expérimenté et versatile (langages de programmation tels que C, C++, Fortran, Python...), formé aux techniques de parallélisation (OpenMP notamment). Contributeur d'une dizaine de projets *open source*. Mainteneur du compilateur GNU Fortran depuis 2005.
- Principal développeur du projet **Domino**, une bibliothèque orientée objet pour prototyper de nouveaux algorithmes de simulation moléculaire.
- Développeur d'applications scientifiques pour iPhone, iPad et Mac OS (500 000 téléchargements).