

François-Xavier Coudert
Directeur de recherche au CNRS
Professeur attaché à l'ENS / PSL
40 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@chimieparistech.psl.eu
www.coudert.name

Cursus : formation & expérience professionnelle

- ▶ Depuis 2019 : **Directeur de recherche au CNRS** (section 13), à l'Institut de Recherche de Chimie Paris (UMR 8247, Chimie ParisTech & CNRS)
- ▶ Depuis 2019 : **Professeur attaché à l'ENS / PSL**
- ▶ 2013 : **Habilitation à diriger les recherches**, Université Pierre et Marie Curie.
Rapporteurs : profs. Gino Baron, Jean-Louis Barrat, Michele Parrinello
- ▶ 2008–2019 : **Chargé de recherche au CNRS** (section 13), à l'Institut de Recherche de Chimie Paris.
- ▶ 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 : Stage de recherche de 6 mois à l'Université du Massachussets (Amherst), dir. Scott Auerbach.
- ▶ 2001–2005: Élève de l'École normale supérieure (Paris), département de Chimie.

Production scientifique

- ▶ **153 publications** dans des revues internationales à comité de lecture (13 123 citations, h-index = 60)
- ▶ 9 chapitres d'ouvrages collectifs
- ▶ **31 conférences internationales sur invitation** des organisateurs
- ▶ 54 interventions orales en conférences internationales, 18 en conférences nationales

Comités de rédaction, organisation de conférences

- ▶ Associate Editor, *Communications Chemistry* et *Adsorption Science & Technology* (2016–2019)
- ▶ Editorial Advisory Board, *C&EN (Chemical and Engineering News)*, American Chemical Society
- ▶ Scientific Advisory Board, serveur de preprints *chemRxiv*
- ▶ Éditeur invité de 2 numéros spéciaux, dans *Molecular Simulation* (2015) et *Dalton Transactions* (2016)
- ▶ Co-organisateur de 6 conférences internationales, 6 conférences nationales et 4 formations ou écoles

Distinctions

- ▶ 2018 : International Award for Creative Work, Japan Society of Coordination Chemistry
- ▶ 2017 : Emerging Investigator, *Chemical Communications* (RSC)
- ▶ 2016 : Membre distingué junior de la Société Chimique de France
- ▶ 2015 : Prix Jeune Chercheur de la Division de Chimie Physique (SCF / SFP)
- ▶ 2012 & 2017 : Prime d'excellence scientifique
- ▶ 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

- ▶ "Tunable acetylene sorption by flexible catenated metal–organic frameworks", M. Bonneau, C. Lavenn, J.-J. Zheng, A. Legrand, T. Ogawa, K. Sugimoto, F.-X. Coudert, R. Reau, S. Sakaki, K.-i. Otake and S. Kitagawa, *Nature Chemistry*, **2022**, 14, 816–822.
- ▶ "Best practices in machine learning for chemistry", N. Artrith, K. T. Butler, F.-X. Coudert, S. Han, O. Isayev, A. Jain and A. Walsh, *Nature Chemistry*, **2021**, 13, 505–508.

- ▶ “The changing state of porous materials”, T. D. Bennett, [F.-X. Coudert](#), S. L. James and A. I. Cooper, *Nature Materials*, **2021**, 20, 1179–1187.
- ▶ “Structure and chemistry of graphene oxide in liquid water from first principles”, F. Mouhat, [F.-X. Coudert](#) and M.-L. Bocquet, *Nature Commun.*, **2020**, 11, 1566
- ▶ “Air separation with graphene mediated by nanowindow-rim concerted motion”, F. Vallejos-Burgos, [F.-X. Coudert](#) and K. Kaneko, *Nature Commun.*, **2018**, 9, 1812
- ▶ “Liquid metal-organic frameworks”, R. Gaillac, P. Pullumbi, K. A. Beyer, K. W. Chapman, D. A. Keen, T. D. Bennett and [F.-X. Coudert](#), *Nature Materials*, **2017**, 16, 1149–1154
- ▶ “Interplay between defects, disorder and flexibility in metal-organic frameworks”, T. D. Bennett, A. K. Cheetham, A. H. Fuchs and [F.-X. Coudert](#), *Nature Chemistry*, **2017**, 9, 11–16
- ▶ “A pressure amplifying framework material with negative gas adsorption transitions”, S. Krause, V. Bon, I. Senkowska, U. Stoeck, D. Wallacher, D. M. Töbrens, S. Zander, R. S. Pillai, G. Maurin, [F.-X. Coudert](#) and S. Kaskel, *Nature*, **2016**, 532, 348–352

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
- ▶ 2014–2019 : 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
- ▶ 2014–2020 : 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

- ▶ 14 doctorants co-dirigés ou co-encadrés
- ▶ 15 post-doctorants
- ▶ 10 étudiants de niveau M2, 19 stagiaires de niveau L3 et M1
- ▶ Enseignements principaux sur la période 2018–2023 :

Établissement	Intitulé	Niveau	Durée	Période
École normale supérieure	Thermodynamique statistique (cours & TD)	L3	32 h	2015–...
Université PSL	Physique statistique (cours)	L3	20 h	2015–2021
Université PSL	Theoretical chemistry (cours & TD)	M1	24 h	2019–...
Université PSL	Machine learning & databases (cours & TD)	M2	36 h	2021–...

- ▶ 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 4 contrats avec Air Liquide : 3 thèses CIFRE, 1 projet de recherche collaborative
- ▶ Porteur d’un contrat avec EDF R&D, Département Mécanique des Fluides, Énergies et Environnement
- ▶ Porteur d’un contrat avec Orano
- ▶ Porteur d’un projet ANR JCJC (2018–2022), partenaire de 4 autres ANR
- ▶ Porteur d’un projet ÉMERGENCE@INC 2018
- ▶ Porteur de 2 projets IDEX PSL “COOCAR”, partenaire d’un troisième

Divers

- ▶ 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 et du projet Homebrew.
- ▶ Principal développeur du projet **Domino**, une bibliothèque orientée objet pour prototyper de nouveaux algorithmes de simulation moléculaire.