François-Xavier Coudert

Directeur de recherche au CNRS
Professeur attaché à l'ENS / PSL
42 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 Massachussetts (Amherst), dir. Scott Auerbach.
- 2001–2005: Élève de l'École normale supérieure (Paris), département de Chimie.

Production scientifique

- **170 publications** dans des revues internationales à comité de lecture (20 118 citations, h-index = 69)
- 9 chapitres d'ouvrages collectifs
- **37 conférences internationales sur invitation** des organisateurs
- 63 interventions orales en conférences internationales, 19 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, 7 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)
- 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

- "Machine learning interatomic potentials for amorphous zeolitic imidazolate frameworks", N. Castel, D. André, C. Edwards, J. D. Evans and F.-X. Coudert, ***Digital Discovery*, 2024**, 3 (2), 355–368.
- "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
- "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. Senkovska, U. Stoeck, D. Wallacher, D. M. Többens, S. Zander, R. S. Pillai, G. Maurin, F.-X. Coudert and S. Kaskel, ***Nature*, 2016**, 532, 348–352

Responsabilités administratives & scientifiques

- Depuis 2024 : Membre de la Commission Internationale des MOFs / IZA
- Depuis 2024 : Membre du bureau de la Division de Chimie Physique de la SCF et la SFP
- Depuis 2020 : Membre élu du Sénat Académique de l'Université PSL
- 2014–2024 : Membre du bureau et trésorier de la sous-division « Modélisation et Simulation » de la Division de Chimie Physique de la SCF et SFP
- 2015–2020 : Membre du bureau du GDR « Thermodynamique Moléculaire et des Procédés »
- 2014–2020 : Trésorier de l'Association Française pour l'Adsorption (AFA)
- 2014–2019 : Membre nommé du Conseil Scientifique de l'Institut de Chimie (INC) du CNRS
- Depuis 2014 : Responsable communication scientifique et membre du directoire de l'UMR 8247

Encadrement d'étudiants & enseignement

- 16 doctorants co-dirigés ou co-encadrés
- 16 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
Université PSL	Machine learning & databases (cours & TD)	M2	36 h	2021–…
École normale supérieure	Thermodynamique statistique (cours & TD)	L3	32 h	2015–…
Université PSL	Theoretical chemistry (cours & TD)	M1	24 h	2019–…

- 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

- Co-porteur du PRI "Small Molecule Laboratory" (Smolab) CNRS / Université de Kyoto
- Porteur d'un projet international CNRS / Imperial College London
- 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.