

Curriculum Vitae

(Mis à jour : octobre 2020)

Loïc Joubert-Doriol

Maître de Conférences à l'Université Gustave Eiffel (UGE) Section CNU 31

Contact : Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Échelle, équipe Chimie Théorique
5, Boulevard Descartes
77454, Marne-la-Vallée Cedex 2

Cité Descartes, bâtiment Lavoisier, bureau K32
+33 (0) 1 60 95 73 02
loic.joubert-doriol@univ-eiffel.fr

Intérêts scientifiques :

Chimie Théorique, simulation, **Photochimie**, **dynamique quantique**, **systèmes ouverts**, phase géométrique, coordonnées curvilignes, **dynamique quantique « au vol »** en fonctions de base gaussiennes.

Expériences professionnelles : (ayant donné lieu à publications)

Depuis 2018 : **Maître de Conférences à l'Université Gustave Eiffel**, rattaché à l'institut Francilien des Sciences Appliqués (IFSA), et intégré à l'équipe Chimie Théorique (CT) au sein du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Échelle (MSME)

2016-2018 : **Boursier de l'Université de Toronto (postdoctorat) sous la supervision d'Artur Izmaylov pour le développement de nouvelles approches de dynamique quantique « au vol »**

2013-2016 : **Boursier de l'union Européenne (postdoctorat), Projet FP7-MC-IOF-332233 PinadBIO, effectué entre Toronto, Canada, et Sienne, Italie.**

Titre : « First Principles Study of Photoinduced Non-Adiabatic Dynamics in DNA Repair Photolyases » ;

Superviseurs : **Artur Izmaylov**, université de Toronto, Canada, de jan. 2013 à mars 2015 ;
Massimo Olivucci, université de Sienne, Italie, d'avril 2015 à mars 2016.

2009-2012 : **Thèse de doctorat, contrat doctoral avec mission complémentaire d'enseignement ;**

Titre : Contrôle de la photochimie du benzopyrane. Élaboration d'une stratégie couplant chimie quantique et dynamique quantique ;

Superviseurs : **Fabien Gatti** et **Benjamin Lasorne**, université Montpellier 2, Montpellier, France.

Jan.-juin 2009 : **Projet de master deuxième année ;**

Titre : Théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps pour les molécules à couches ouvertes ;

Superviseur : **Mark Casida**, université Joseph Fourier, Grenoble, France.

Avr.-juin 2008 : **Projet de master première année ;**

Titre : Calcul du spectre de vibration du fluoroforme par la méthode MCTDH ;

Superviseur : **Fabien Gatti**, université Montpellier 2, Montpellier, France.

Jan.-fév. 2006 : **Projet de licence chimie et biologie ;**

Titre : Étude théorique de l'ouverture C-C du cycle de l'oxirane ;

Superviseur : **Mark Casida**, université Joseph Fourier, Grenoble, France.

Cursus universitaire :

2009-2012 **Doctorat de chimie théorique**, université Montpellier 2, France ; directeur de thèse : **Fabien Gatti** ; date de soutenance : **7 novembre 2012 à l'université Montpellier 2.**

2007-2009 Master de chimie et physique avec **label de chimie théorique**, université Joseph Fourier de Grenoble, France.

2006-2007 Licence de chimie et physique (**réorientation** après cursus en biologie), université Joseph Fourier de Grenoble, France.

2003–2006 Licence de chimie et **biologie**, université Joseph Fourier de Grenoble, France.

Enseignements :

Depuis 2018 **Maître de Conférences**, université Paris-Est Marne-la-Vallée, France.

Mécanique classique	Cours / TD / TP	L1	34 h / 34 h / 8 h
Méthodes numériques	TD / TP	L3	30 h
Optique ondulatoire	Cours / TD / TP	L2	6 h / 8 h / 12 h

2009-2012 **Mission complémentaire d'enseignement** (Monitorat), université de Nîmes, France.

Thermochimie	TD	L1 / L2	44 h / 10 h
Conductimétrie	Cours / TD	L1	10 h
Chimie inorganique	TP	L1 / L2	24 h / 40 h
Chimie analytique	TP	L2	48 h
Thermochimie	TP	L3	20 h

2008 **Tutorat**, université Joseph Fourier, Grenoble, France.

Encadrement d'étudiants :

Dates	Nom étudiant	Lieux	Co-encadrant	Niveau
Avril – juin 2009	Sébastien Bruneau	Université Joseph Fourier, Grenoble	Mark Casida	Master 2
Sept. 2011 – sept. 2012	Mohamad Saab	Université Montpellier 2	Fabien Gatti	Doctorant
Mai 2013 – fev. 2014	Syed Ather Hasnain Rizvi	University of Toronto, Canada	Artur Izmaylov	« Bachelor »
Nov. 2016 – mai 2017	Jiaru Li			« Bachelor »
Août 2017 – juil. 2018	Mina Asaad			Master
Avril – juin 2019	Rémi Vançon	Université Paris-Est Marne-la-Vallée, Champs-sur-Marne		Master 2
Mai – juin 2019				Master 1
Fév. – août 2020	Rosa Maskri	L'Oréal, Aulnay-sous-Bois	Jérôme Gomar	Master 2
			Isabelle Navizet	
Depuis Oct. 2020		Université Gustave Eiffel, Champs-sur-Marne	Céline Léonard, Alexander Mitrushchenkov	Doctorante

Articles dans des revues internationales à comité de lecture :

23 articles, 680 citations, indice h de 13 (source : Google Scholar). Sélection de 5 articles :

- 1) L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Nonadiabatic Quantum Dynamics with Frozen-Width Gaussians », *J. Phys. Chem. A* **122**, 6031 (2018). « **feature article** » et **couverture**.
- 2) L. Joubert-Doriol, J. Sivasubramaniam, I. G. Ryabinkin et A. F. Izmaylov, « Topologically correct quantum nonadiabatic formalism for on-the-fly dynamics », *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 452 (2017).
- 3) L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Molecular "Topological Insulators": A Case Study of Electron Transfer in Bis (methylene) Adamantyl Carbocation », *Chem. Commun.* **53**, 7365 (2017).
- 4) I. G. Ryabinkin, L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Geometric Phase Effects in Nonadiabatic Dynamics near Conical Intersections », *Acc. Chem. Res.* **50**, 1785 (2017).
- 5) L. Joubert-Doriol, B. Lasorne, D. Lauvergnat, H.-D. Meyer, et F. Gatti, « A generalised vibronic-coupling Hamiltonian model for benzopyran », *J. Chem. Phys.* **140**, 044301 (2014).

Communications :

8 communications et séminaires invitées ; 13 contributions ; 18 affiches. Sélection de 5 communications :

- 1) **Conference on Light and Molecules**, Marseille, France, octobre 2019. **Communication invitée** : « The moving crude adiabatic representation: how to use adiabatic states for non-adiabatic dynamics? », L. Joubert-Doriol.

- 2) **Mathematical Questions of Molecular Quantum Dynamics**, Paris, France, septembre 2019. **Communication invitée** : « Understanding and accounting for geometric phase effects in direct dynamics near conical intersections », L. Joubert-Doriol.
- 3) **Journées GDR ThÉMS**, Orsay, France, novembre 2019. « Utilizing adiabatic states in Non-adiabatic direct quantum dynamics », L. Joubert-Doriol.
- 4) **High Dimensional Quantum Dynamics**, Lille, France, août 2018. **Contribution orale** : « Direct quantum nonadiabatic dynamics in the moving crude adiabatic representation », L. Joubert-Doriol, I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov.
- 5) **Université McGill**, département de chimie, Montréal, Canada, mars 2018. **Séminaire invité** : « Geometric phase effects in molecular dynamics beyond the Born-Oppenheimer approximation », L. Joubert-Doriol.

Codes utilisés et programmation :

Chimie / dynamique quantique :

Gaussian	Utilisateur avec une très bonne connaissance de la méthode champ d'espace actif complet auto-cohérent (CASSCF)
MCTDH	Utilisateur des méthodes de propagation et relaxation améliorée
Molcas, Molpro, Firefly	Utilisateur des méthodes CASSCF et perturbation de l'espace actif complet (CASPT2, XMCQDPT2)
DeMon2k	Développement de la partie fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFT) : diagonalisation « Davidson » et contamination de spin des états excités (https://sites.google.com/site/markcasida/demon2kgteam).

Programmation : script Shell, Matlab / **Octave, Fortran, MPI**

Autre : systèmes d'exploitations Linux et Windows, LaTeX

Diffusion du savoir :

- 07 oct. 2020 Animateur fête de la science 2020, bât. Lavoisier, Champs-sur-Marne.
- 17 jan. 2015 Bénévole au **festival** « Brain Fest », Ontario Sciences Center, Toronto, Canada.
- 10 mai 2014 Bénévole au **festival** annuel « Science Rendezvous », université de Toronto, Canada.
- 2014-2015 Membre de l'organisation de **diffusion des sciences** « Let's Talk Science ».
- 2006-2007 **Animateur** employé au centre culturel, scientifique et industriel (CCSTI) de Grenoble, France. Participation à la **fête de la science 2007** à Grenoble.

Liste détaillée des productions scientifiques

Publications dans des revues internationales à comité de lecture :

- A23 B. Gonon, B. Lasorne, G. Karras, L. Joubert-Doriol, D. Lauvergnat, F. Billard, B. Lavorel, O. Faucher, S. Guérin, E. Hertz et F. Gatti, « A generalized vibronic-coupling Hamiltonian for molecules without symmetry: Application to the photoisomerization of benzopyran », *J. Chem. Phys.* **150**, 124109 (2019).
- A22 L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Nonadiabatic Quantum Dynamics with Frozen-Width Gaussians », *J. Phys. Chem. A* **122**, 6031 (2018). « **Feature article** » et **couverture**.
- A21 L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Variational nonadiabatic dynamics in the moving crude adiabatic representation: Further merging of nuclear dynamics and electronic structure », *J. Chem. Phys.* **148**, 114102 (2018).
- A20 H. Daoud, L. Joubert-Doriol, A. F. Izmaylov et R. J. D. Miller, « Exploring vibrational ladder climbing in vibronic coupling models: Toward experimental observation of a geometric phase signature of a conical intersection », *Chem. Phys.* **515**, 28 (2018).
- A19 L. Joubert-Doriol, J. Sivasubramaniam, I. G. Ryabinkin et A. F. Izmaylov, « Topologically correct quantum nonadiabatic formalism for on-the-fly dynamics », *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 452 (2017).
- A18 L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Molecular "Topological Insulator": A Case Study of Electron Transfer in Bis (Methylene) Adamantyl Carbocation », *Chem. Commun.* **53**, 7365 (2017).
- A17 I. G. Ryabinkin, L. Joubert-Doriol, et A. F. Izmaylov, « Geometric Phase Effects in Nonadiabatic Dynamics near Conical Intersections », *Acc. Chem. Res.* **50**, 1785 (2017).
- A16 A. F. Izmaylov et L. Joubert-Doriol, « Quantum Nonadiabatic Cloning of Entangled Coherent States », *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 1793 (2017).
- A15 J. Li, L. Joubert-Doriol, et A. F. Izmaylov, « Geometric phase effects in excited state dynamics through a conical intersection in large molecules: N-dimensional linear vibronic coupling model study », *J. Chem. Phys.* **147**, 064106 (2017).
- A14 A. F. Izmaylov, J. Li, et L. Joubert-Doriol, « Diabatic Definition of Geometric Phase Effects », *J. Chem. Theory Comput.* **12**, 5278 (2016).
- A13 L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Problem-free time-dependent variational principle for open quantum systems », *J. Chem. Phys.* **142**, 134107 (2015).
- A12 L. Joubert-Doriol, I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov, « Non-stochastic matrix Schrödinger equation for open systems », *J. Chem. Phys.* **141**, 234112 (2014).
- A11 L. Joubert-Doriol, B. Lasorne, D. Lauvergnat, H.-D. Meyer, et F. Gatti, « A generalised vibronic-coupling Hamiltonian model for benzopyran », *J. Chem. Phys.* **140**, 044301 (2014).

- A10 I. G. Ryabinkin, [L. Joubert-Doriol](#), et A. F. Izmaylov, « When do we need to account for the geometric phase in excited state dynamics? », *J. Chem. Phys.* **140**, 214116 (2014). **2014 Editor's choice.**
- A9 J. S. Endicott, [L. Joubert-Doriol](#), et A. F. Izmaylov, « A perturbative formalism for electronic transitions through conical intersections in a fully quadratic vibronic model », *J. Chem. Phys.* **141**, 034104 (2014).
- A8 M. Saab, [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, S. Guérin, et F. Gatti, « A quantum dynamics study of the benzopyran ring opening guided by laser pulses », *Chem. Phys.* **442**, 93 (2014).
- A7 [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov, « Geometric phase effects in low-energy dynamics near conical intersections: A study of the multidimensional linear vibronic coupling model », *J. Chem. Phys.* **139**, 234103 (2013).
- A6 M. Ndong, A. Nauts, [L. Joubert-Doriol](#), H.-D. Meyer, F. Gatti, et D. Lauvergnat, « Automatic computer procedure for generating exact and analytical kinetic energy operators based on the polyspherical approach: General formulation and removal of singularities », *J. Chem. Phys.* **139**, 204107 (2013).
- A5 [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, F. Gatti, M. Schröder, O. Vendrell, et H.-D. Meyer, « Suitable Coordinates for Quantum Dynamics: Applications », *Comp. Theo. Chem.* **990**, 75 (2012).
- A4 M. Ndong, [L. Joubert-Doriol](#), H.-D. Meyer, A. Nauts, F. Gatti, et D. Lauvergnat, « Automatic computer procedure for generating exact and analytical kinetic energy operators based on the polyspherical approach », *J. Chem. Phys.* **136**, 034107 (2012).
- A3 A. Ipatov, F. Cordova, [L. Joubert-Doriol](#), et M. E. Casida, « Excited-State Spin-Contamination in Time-Dependent Density-Functional Theory for Molecules with Open-Shell Ground States », *Theochem* **914**, 60 (2009).
- A2 [L. Joubert-Doriol](#), F. Gatti, C. Iung, et H.-D. Meyer, « Computation of vibrational energy levels and eigenstates of fluoroform using the multiconfiguration time-dependent Hartree method », *J. Chem. Phys.* **129**, 224109 (2008).
- A1 F. Cordova, [L. Joubert-Doriol](#), A. Ipatov, M. E. Casida, C. Fillipi, et A. Vela, « Troubleshooting Time-Dependent Density Functional Theory for Photochemical Applications: Oxirane » *J. Chem. Phys.* **127**, 164111 (2007).

Autres articles :

[L. Joubert-Doriol](#), T. Domratcheva, M. Olivucci, et A. F. Izmaylov, « Nuclear dynamics investigation of the initial electron transfer in the cyclobutane pyrimidine dimer lesion repair process by photolyases ». Disponible sur [arXiv : arXiv:1602.05044 \[physics.chem-ph\]](#).

Communications orales et séminaires invités :

- 18 Séminaire : CFL-DESY, Centre for Free electron Laser science, Hambourg, octobre 2020. « Nonadiabatic quantum dynamics with frozen-width Gaussians », [L. Joubert-Doriol](#)

- I7 Conference on Light and Molecules**, Marseille, France, octobre 2019. « The moving crude adiabatic representation: how to use adiabatic states for non-adiabatic dynamics? », [L. Joubert-Doriol](#)
- I6 Mathematical Questions of Molecular Quantum Dynamics**, Paris, France, septembre 2019. « Understanding and accounting for geometric phase effects in direct dynamics near conical intersections », [L. Joubert-Doriol](#)
- I5 Séminaire : LCT**, laboratoire Modélisation et Simulation Multi Échelle, Champs-sur-Marne, France, mai 2018. « Dynamique moléculaire au-delà de l'approximation de Born-Oppenheimer : la phase géométrique », [L. Joubert-Doriol](#).
- I4 Séminaire : Département de chimie**, Université McGill, Montréal, Canada, mars 2018. « Geometric phase effects in molecular dynamics beyond the Born-Oppenheimer approximation », [L. Joubert-Doriol](#).
- I3 Séminaire : THEO**, Institut des Sciences Moléculaires, Bordeaux, France, octobre 2016. « Describing non-adiabatic quantum effects in large systems », [L. Joubert-Doriol](#).
- I2 Séminaire : LCQ**, Institut de chimie, Strasbourg, France, octobre 2015. « Towards computational non-adiabatic biology: Methods et application to the DNA repair », [L. Joubert-Doriol](#).
- I1 Séminaire : CTMM, ICGM**, Montpellier, France, septembre 2014. « Geometric phase effects on the dynamics of molecular systems in the neighbourhood of a conical intersection », [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov.

Contributions orales et autres séminaires :

- O13 Journées GDR ThéMS**, Orsay, France, novembre 2019. « Utilizing adiabatic states in Non-adiabatic direct quantum dynamics », [L. Joubert-Doriol](#)
- O12 Journée scientifique MSME**, Champs-sur-Marne, France, juin 2019. « Dynamiques couplées des électrons et des noyaux pour la photochimie des systèmes moléculaires », [L. Joubert-Doriol](#)
- O11 Journées Théorie, Modélisation et Simulation**, Paris, France, juin 2019. « The moving crude adiabatic representation to avoid conical intersection-related problems in "on-the-fly" quantum dynamics », [L. Joubert-Doriol](#)
- O10 High Dimensional Quantum Dynamics**, Lille, France, août 2018. « Direct quantum nonadiabatic dynamics in the moving crude adiabatic representation », [L. Joubert-Doriol](#) et A. F. Izmaylov
- O9 Quantum Dynamics: from Algorithms to Applications**, Greifswald, Allemagne, septembre 2016. « Geometric phase in multidimensional quantum dynamics », [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov
- O8 High Dimensional Quantum Dynamics**, Rostock, Germany, septembre 2016. « Conical

intersection induced interference in multidimensional quantum dynamics », [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov

- O7 **249th ACS National Meeting**, Denver, USA, mars 2015. « Theoretical study of the electron transfer in DNA repair process of the cyclobutane pyrimidine dimer lesion », [L. Joubert-Doriol](#), T. Domratcheva, M. Olivucci, et A. F. Izmaylov.
- O6 **2014 Symposium on Chemical Physics**, Waterloo, Canada, octobre 2014. « Problem-free Time-Dependent Variational Principle for Open quantum Systems », [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov.
- O5 **High Dimensional Quantum Dynamics**, Mittelwihr, France, septembre 2014. « A Constrained Time-Dependent Variational Principle for Open Systems », [L. Joubert-Doriol](#), I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov.
- O4 **Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones**, Marseille, France, juillet. 2012. « Élaboration d'un modèle théorique pour décrire l'ouverture photochimique du benzopyrane », [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, H.-D. Meyer, et F. Gatti.
- O3 **Journée des Chimistes Théoriciens de l'ICG**, Grabels, France, juin 2012. « Élaboration d'une stratégie pour la construction de modèles de surfaces d'énergie potentielle : application à l'ouverture du benzopyrane », [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, et F. Gatti.
- O2 **Les journées de l'ICGM**, Teyran, France, mars 2011. « Contrôle de la photochimie organique. Élaboration d'une stratégie couplant chimie quantique et dynamique quantique », [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, et F. Gatti.
- O1 **Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones**, Namur, Belgique, juillet 2010. Présentation « Flash » : « Étude théorique de l'ouverture du benzopyrane application au contrôle photochimique », [L. Joubert-Doriol](#), B. Lasorne, et F. Gatti.

Communications par affiches :

- P18 Première réunion générale du GDR NBODY, Lille, France, janvier 2020.
- P17 2017 Symposium on Chemical Physics, Waterloo, Canada, novembre 2017.
- P16 100th Canadian Chemistry Conference and Exhibition, Toronto, Canada, mai 2017.
- P15 2016 Symposium on Chemical Physics, Waterloo, Canada, novembre 2016.
- P14 Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Lyon, France, juillet 2016.
- P13 DNA damages : modeling and rationalize structure and reactivity, Lyon, France, novembre 2015.
- P12 Modelling Photoactive Molecules Conference, Nantes, France, avril 2015.
- P11 XXIInd International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Graz, Autriche, août 2014. **Prix du poster** : « Geometric phase effects in multidimensional quantum dynamics near conical

intersections », L. Joubert-Doriol, I. G. Ryabinkin, et A. F. Izmaylov.

- P10 26th Canadian Symposium on Theoretical et Computational Chemistry, Montréal, Canada, juillet 2014.
- P9 M4 workshop, Hamilton, Canada, décembre 2013.
- P8 2013 Symposium on Chemical Physics, Waterloo, Canada, novembre 2013.
- P7 CECAM MCTDH Workshop : High Dimensional Quantum Dynamics: Challenges et opportunities, Birmingham, Royaume-Uni, avril 2012.
- P6 Workshop: 4th annual meeting of the COST Action CUSPFEL, Cluj, Roumanie, mars 2012.
- P5 CECAM Workshop: New QM/MM opportunities for in silico macromolecular photochemistry, Lyon, France, février 2012.
- P4 Satellite of the ninth triennial Congress of the World Association of Theoretical et Computational Chemists: Excited states et non-adiabatic processes in complex systems. Theoretical approaches, San Feliu de Guixols, Espagne, août 2011.
- P3 Ninth triennial Congress of the World Association of Theoretical et Computational Chemists, Santiago de Compostela, Espagne. **Prix du poster** : « An investigation of the photochemical ring-opening of benzopyran », L. Joubert-Doriol, B. Lasorne, et F. Gatti, juillet 2011.
- P2 Journées dynamiques du sud-ouest, Pau, France, mai 2011.
- P1 Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Namur, Belgique, juillet 2010.