

## Curriculum Vitae

(Mis à jour : octobre 2025)

### **Loïc Joubert-Doriol**

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

**Contact :** Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, 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](mailto: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 Appliquées (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	22 h / 22 h / 8 h	(1 ou 2 groupes)
Option physique	Cours / TD	L1	12 h / 12h	
Méthodes numériques	TD / TP	L3	30 h	
Optique ondulatoire	Cours / TD / TP	L1	6 h / 8 h / 12 h	(1 ou 2 groupes)
Mécanique quantique	Cours / TD	L3	30 h	(en 2021)
Mécanique quantique	TD	L2	10 h	(en 2025)

Décompte des heures par année :

2018/19	144,5 hetd	Décharge stagiaire MCF : 48 hetd
2019/20	162,5 hetd	Décharge nouveau MCF : 30 hetd
2020/21	157,5 hetd	Décharge collaboration internationale : 44 hetd
2021/22	203 hetd	
2022/23	205 hetd	Dont 1,33 hetd de Khôlle
2023/24	203,5 hetd	Dont 8 hetd de projet

2024/25	63 h	Délégation CNRS 50 % ; au premier semestre ... en cours
2009-2012 <b>Mission complémentaire d'enseignement</b> (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	<b>Tutorat</b> , université Joseph Fourier, Grenoble, France.	

### Encadrement d'étudiants :

Dates	Nom	Sujet	Lieux	Co-encadrant	Niveau
<b>Avril – juin 2009</b>	Sébastien Bruneau	Stage : « Potential energy curves of the fundamental and excited states of the hexaaquofer II complex »	Université Joseph Fourier, Grenoble	Mark Casida	Master 2
<b>Sept. 2011 – sept. 2012</b>	Mohamad Saab	Formation début de projet de thèse : « Photo-organic chemistry guided by laser pulses. Applications: benzopyran and pyrazine » (A8)	Université Montpellier 2	Fabien Gatti	Doctorant
<b>Mai 2013 – fev. 2014</b>	Syed Ather Hasnain Rizvi	Stage : « Extended Erhenfest dynamics »	University of Toronto, Canada	Artur Izmaylov	« Bachelor »
<b>Nov. 2016 – mai 2017</b>	Jiaru Li	Co-encadrement : « Effects of geometric phase in non-adiabatic dynamics » (A14,A15)			« Bachelor »
<b>Août 2017 – juil. 2018</b>	Mina Asaad	Formation début de projet de thèse : « Implementation of the moving crude adiabatic representation in the variational multi-configuration Gaussian method »			Master
<b>Mars – juin 2019</b>	Rémi Vançon	Stage : « Test et développement de méthodes de localisations d'Intersections Coniques »	Université Paris-Est Marne-la-Vallée, Champs-sur-Marne		Master 2
<b>Mai – juin 2019</b>	Rosa Maskri	Stage : « Étude de la structure électronique lors du transfert ultrarapide de proton au sein			Master 1

		de la glycine »			
<b>Fév. – août 2020</b>	Rosa Maskri	Stage : « Etude des propriétés d'adsorption d'un filtre solaire encapsulé »	Université Gustave Eiffel, Champs-sur-Marne	Jérôme Gomar 50 % Isabelle Navizet 20 %	Master 2
<b>Jan. 2021 – Avril 2024</b>	Rosa Maskri	Thèse : « Étude de processus couplés électrons/noyaux ultra-rapides par dynamique quantique en base de fonctions gaussiennes dépendantes du temps » (A24,A28) Soutenue le 12/04/2024		Alexander Mitrushch enkov 20 %	Doctorante
<b>Mars - juin 2021</b>	David Nishimwe	« Mise en évidence de l'effet tunnel par une approche numérique »		Étienne Mangaud 25 %	Licence 1
<b>Depuis Jan. 2022</b>	Kossi Kety	« Étude théorique du transfert couplé électron-proton ultra-rapide dans les petits systèmes biologiques. Vers une description quantique complète de l'attochimie »		Alexander Mitrushch enkov 20 %	Doctorant
<b>Mar – Jul 2022</b>	Mina Asaad	Encadrement durant une visite au laboratoire MSME (A25)		Artur Izamylov	PhD
<b>Fév. - juin 2023</b>	Émmanuela Agbogba	Stage libre filé : « Étude du problème à trois corps : application à la découverte de Neptune »		Étienne Mangaud 50 %	Licence 1
<b>Mai – juin 2024</b>	Christophe Soule	Stage : « Étude du piégeage diabatique par la méthode de saut de surface : effet de la température »			Master 1

### Activités Administratives et organisation d'évènement scientifiques :

#### Actuelles :

Depuis sept. 2024 **Responsable de formation, deuxième année de licence Physique-Chimie.**

Responsabilités : élaboration des emplois du temps, sélection des enseignants non PC (mathématiques, anglais, informatique), gestion courante, réunions de rentrée, président du jury L2 (membre des jurys L1 et L3), responsable des

modalités de contrôle continu, admissions, contrats pédagogique, entretiens avec les étudiants, avis de poursuite d'étude, journées portes ouvertes (accueil et présentations).

- Depuis jan. 2024 **Membre de la section CNU 31** au niveau national.
- Depuis Oct. 2021 Membre élu de la **commission permanente** locale pour la **section CNU 31** à l'Université Gustave Eiffel. **Vice-président** depuis mai 2024.
- Depuis sept. 2021 **Correspondant international** du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle.
- Depuis fév. 2020 Membre élu au **Conseil du laboratoire** Modélisation et Simulation Multi Echelle.

#### Passées :

- Mars-juin 2025 **Comité d'organisation** de la journée du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (**Journée MSME 2025**), juin 2025, Champs-sur-Marne, France.
- Mars-juin 2022 **Comité d'organisation** de la journée du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (**Journée MSME 2022**), juin 2022, Champs-sur-Marne, France.
- Avr-mai 2020 **Comité de sélection** pour un poste de Maître de conférences section CNU 31 à Université Gustave Eiffel.
- Sept. 2020 Organisation de l'**école thématique** « Variational Gaussian Wavepacket Methods for Quantum Propagation ». Enseignante : Prof. Irene Burghardt. Durée : 18 heures, en ligne.
- Mars 2020 Organisation de l'**école thématique** « Numerical analysis of high-dimensional quantum dynamics ». Enseignante : Prof. Caroline Lasser. Durée : 18 heures, Université Gustave Eiffel, France.

#### Financements et récompenses :

- 2021-2025 **Responsable scientifique** pour le partenaire MSME dans le cadre du projet « AttoChemistry » de l'**Agence Nationale pour la Recherche (ANR)** “*Chemistry with attosecond pulses: inducing charge migration and charge transfer in small biomolecules*”, coordonné par Fabien Gatti.  
**Financement de thèse pour Kossi Kety.**
- 2021 Projet mobilité « Mobility and International Cooperation Incentive Call » :  
Financé par l'« I-FUTURE SITE RESEARCH & EDUCATION »  
Incluant la visite d'un étudiant doctorant.  
Annulé pour raisons sanitaires (COVID).
- 2013-2016 **Boursier de l'union européenne** pour un projet postdoctoral de recherche :  
Financé par le **septième programme-cadre : Marie-Curie IOF**  
“*First Principles Study of Photo-induced Non-Adiabatic Dynamics in DNA Repair Photolyases*”
- Aug 2014 **Prix du meilleur poster** : “*Geometric phase effects in multidimensional quantum dynamics near conical intersections*”  
L. Joubert-Doriol, I. G. Ryabinkin, and A. F. Izmaylov  
XXII<sup>nd</sup> International Symposium on the Jahn-Teller Effet, Graz, Autriche.
- Jul 2011 **Prix du meilleur poster** : “*An investigation of the photochemical ring-opening of benzopyran*”

L. Joubert-Doriol, B. Lasorne, and F. Gatti

Ninth triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, Santiago de Compostela, Espagne.

2009-2012

**Bourse du ministère** pour contrat de thèse :

Doctorant Contractuel avec Mission Complémentaire d'Enseignement,

*“Control of organic photochemistry. Theoretical strategy coupling quantum chemistry and quantum dynamics”*

### Articles dans des revues internationales à comité de lecture :

**29 articles, 1207 citations, indice h de 17** (source : Google Scholar). Sélection de 5 articles :

- 1) C. Soize, L. Joubert-Doriol, et A. F. Izmaylov, « Quantum computer formulation of the FKP-operator eigenvalue problem for probabilistic learning on manifolds », *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **443**, 118080 (2025).
- 2) J Sanz García, R Maskri, A Mitrushchenkov et L. Joubert-Doriol, « Optimizing conical intersections without explicit use of non-adiabatic couplings », *J. Chem. Theory Comput.* **20**, 5643 (2024).
- 3) L. Joubert-Doriol, K. Jung, A. F. Izmaylov et P. Brumer, « Quantum Kinetic Rates within the Nonequilibrium Steady State », *J. Chem. Theory Comput.* **19**, 1130 (2023).
- 4) L. Joubert-Doriol, « Variational Approach for Linearly Dependent Moving Bases in Quantum Dynamics: Application to Gaussian Functions », *J. Chem. Theory Comput.* **18**, 5799 (2022).
- 5) R. Maskri et L. Joubert-Doriol, « The moving crude adiabatic alternative to the adiabatic representation in excited state dynamics », *Phil. Trans. R. Soc. A* **380**, 20200379 (2022).

### Communications :

**20 communications et séminaires invitées** ; 18 contributions ; 23 affiches dont 3 présentées par des étudiants encadrés. Sélection de 5 communications :

- 1) **27<sup>th</sup> international workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and biology (QSCP-XXVII)**, Paris, France, juillet 2025. Estimating Reaction Timescales in Non-Equilibrium Steady States of Light-Harvesting Systems under Natural Light, L. Joubert-Doriol, K. A. Jung, A. F. Izmaylov et P. Brumer
- 2) **Discussion meeting on molecular benchmarks in nonadiabatic dynamics**, Paris, France, mai 2025. « The Crude Adiabatic Representation in Non-adiabatic Quantum Dynamics. », Loïc Joubert-Doriol
- 3) **CHAMPS workshop**, Bristol, Royaume-Uni, janvier 2024. « Full Quantum Dynamics Simulations of Non-adiabatic Photochemistry using Gaussian Wavepackets », L. Joubert-Doriol
- 4) **Cours invité** : Université Technique de Munich, Munich, Allemagne, juillet 2024. « Light-Matter Interaction in Molecular Physics: Modeling Absorption Spectra », Loïc Joubert-Doriol
- 5) **Workshop on electron-nuclei coupling dynamics in Interparticle Coulombic Electron Capture**, Paris, France, février 2023. « Electron-nuclear quantum dynamics using Gaussian functions », L. Joubert-Doriol

## Codes utilisés et programmation :

Chimie / dynamique quantique :

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

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

Autre : systèmes d'exploitations Linux et Windows, LaTeX

## Diffusion du savoir :

07 nov. 2023 Animateur « Forum de Provins », pour l'association TerreAvenir, Provins.

Depuis 2018 Animateur fête de la science, IFSA, bât. Lavoisier, Champs-sur-Marne.

Stand « L'effet de serre causé par le CO<sub>2</sub> » de 2018 à 2023.

Stand « La photographie », 2024.

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 (29) :

- A30 K. Kety, J. González-Vázquez, P. Decleva, A. Palacios, F. Martín, D. Pelàez, F. Gatti, R. Cireasa and L. Joubert-Doriol et A. O. Mitrushchenkov, « Ultrafast Proton Transfer in a Photoionized Glycine by a Mixed Quantum-Classical and Quantum Dynamics », Accepté pour publication dans *J. Chem. Phys.* (2025).
- A29 C. Soize, L. Joubert-Doriol, et A. F. Izmaylov, « Quantum computer formulation of the FKP-operator eigenvalue problem for probabilistic learning on manifolds », *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **443**, 118080 (2025).
- A28 J Sanz García, **R Maskri**, A Mitrushchenkov et L Joubert-Doriol, « Optimizing conical intersections without explicit use of non-adiabatic couplings », *J. Chem. Theory Comput.* **20**, 5643 (2024).
- A27 L. Joubert-Doriol, K. Jung, A. F. Izmaylov et P. Brumer, « Quantum Kinetic Rates within the Nonequilibrium Steady State », *J. Chem. Theory Comput.* **19**, 1130 (2023).
- A26 L. Joubert-Doriol, « Variational Approach for Linearly Dependent Moving Bases in Quantum Dynamics: Application to Gaussian Functions », *J. Chem. Theory Comput.* **18**, 5799 (2022).
- A25 **M. Asaad**, L. Joubert-Doriol et A. F. Izmaylov, « Controlling energy conservation in quantum dynamics with independently moving basis functions: Application to Multi-Configuration Ehrenfest », *J. Chem. Phys.* **156**, 204121 (2022).
- A24 **R. Maskri** et L. Joubert-Doriol, « The moving crude adiabatic alternative to the adiabatic representation in excited state dynamics », *Phil. Trans. R. Soc. A* **380**, 20200379 (2022).
- 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 \[physics.chem-ph\]](https://arxiv.org/abs/1602.05044).

L. Joubert-Doriol, « Quantum dynamics beyond the Born-Oppenheimer approximation in molecular systems ». Disponible sur [waves2022.apps.math.cnrs.fr/scientific-program](https://waves2022.apps.math.cnrs.fr/scientific-program).

### Communications orales et séminaires invités (20) :

- I20 **Discussion meeting on molecular benchmarks in nonadiabatic dynamics**, Paris, France, mai 2025. « The Crude Adiabatic Representation in Non-adiabatic Quantum Dynamics. », Loïc Joubert-Doriol
- I19 Séminaire : EMC2, Sorbonne Université, Paris, France, octobre 2024. « Simulating Non-adiabatic Photochemistry using Gaussian Wavepackets for On-The-Fly Full Quantum Dynamics. », Loïc Joubert-Doriol
- I18 **Cours invité** : Université Technique de Munich, Munich, Allemagne, juillet 2024. « Light-Matter Interaction in Molecular Physics: Modeling Absorption Spectra », Loïc Joubert-Doriol
- I17 Séminaire : Université Aix Marseille, Marseille, France, avril 2024. « Non-adiabatic Quantum Dynamics Simulations Using Gaussian Wavepackets and Crude Adiabatic States », Loïc Joubert-Doriol
- I16 **Molecular dynamics workshop**, Angers, France, février 2024. « Treatment of linear dependence in the time-dependent variational principle: How to account for the varying dimensionality of the tangent space? », Loïc Joubert-Doriol
- I15 **CHAMPS workshop**, Bristol, Royaume-Uni, janvier 2024. « Full Quantum Dynamics Simulations of Non-adiabatic Photochemistry using Gaussian Wavepackets », L. Joubert-Doriol

- I14 **Workshop QD4ICEC : electron-nuclei coupling dynamics in Interparticle Coulombic Electron Capture**, Paris, France, février 2023. « Electron-nuclear quantum dynamics using Gaussian functions », [L. Joubert-Doriol](#)
- I13 **Waves 2022**, Palaiseau, France, juillet 2022. « Quantum dynamics beyond the Born-Oppenheimer approximation in molecular systems », [L. Joubert-Doriol](#)
- I12 **5<sup>th</sup> meeting GDR Ultrafast Phenomena**, Paris, France, novembre 2021. « Should we abandon adiabatic states to describe ultrafast molecular dynamics? », [L. Joubert-Doriol](#)
- I11 **Quantum Dynamics Network meeting**, Orsay, France, septembre 2021. « Chemistry with attosecond pulses: inducing charge migration and charge transfer in small biomolecules », [L. Joubert-Doriol](#)
- I10 **Watching Chemistry Happen**, en ligne, avril 2021. « Is the time-dependent variational principle really adapted for independent moving Gaussians? », [L. Joubert-Doriol](#)
- I9 **Working Group 2 Workshop of the COST Action CA18222**, en ligne, février 2021. « From low-energy nonadiabatic dynamics to attochemistry », [L. Joubert-Doriol](#)
- I8 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 (18) :

- O18 27<sup>th</sup> international workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics, and biology (QSCP-XXVII)**, Paris, France, juillet 2025. Estimating Reaction Timescales in Non-Equilibrium Steady States of Light-Harvesting Systems under Natural Light, L. Joubert-Doriol, K. A. Jung, A. F. Izmaylov et P. Brumer
- O17 Journées de Chimie Théorique du pôle Nord/Île de France**, ThéMoSia, Paris, France, juin 2025. « Estimating Timescales in the Nonequilibrium Steady State: Application to Molecular Isomerization in Nature », L. Joubert-Doriol, K. A. Jung, A. F. Izmaylov, et P. Brumer
- O16 Journée scientifique MSME**, Université de Créteil, France, juin 2024. « QUASICS project: Exploring quantum algorithms for classical simulations », L. Joubert-Doriol
- O15 Workshop : Quantum Dynamics and Spectroscopy of Functional Molecular Materials and Biological Photosystems**, Les Houches, France, septembre 2023. « Light-matter interaction in natural conditions: Estimating timescales in the nonequilibrium steady state », L. Joubert-Doriol
- O14 Journée scientifique MSME**, Champs-sur-Marne, France, juin 2023. « Projection technique to partition large dimensional systems beyond the molecular scale », L. Joubert-Doriol
- 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 249<sup>th</sup> 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 d'étudiant·e·s encadré·e·s (3) :

- E3 **Workshop on High-Dimensional Quantum Dynamics, Hamburg**, Allemagne, juillet 2024. « Ultrafast Hydrogen Migration in a Photoionized Glycine by a Mixed Quantum-Classical Dynamics », **K. Kety**, A. Mitrushchenkov, A. Palacios, D. Peláez, F. Gatti, F. Martin, J. G. Vasquez, [L. Joubert-Doriol](#), P. Decleva, R. Cireasa.
- E2 **Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones**, Rouen, France, juin 2024. « Ultrafast Hydrogen Migration in a Photoionized Glycine by a Mixed Quantum-Classical Dynamics », **K. Kety**, J. Vasquez, A. Mitrushchenkov, P. Decleva, [L. Joubert-Doriol](#), R. Cireasa, P. Ruiz, F. Martin, F. Gatti.
- E1 **Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones**, Bordeaux, France, juillet 2022. Poster : « The moving crude adiabatic alternative to the adiabatic representation in excited state dynamics », **R. Maskri**, A. Mitrushchenkov et [L. Joubert-Doriol](#).

#### Communications par affiches (20) :

- P20 Canada-France Quantum Alliance (CAFQA), Grenoble, France, mai 2025.
- P19 High Dimensional Quantum Dynamics, Groningue, Pays-Bas, juillet 2022.
- 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 XXII<sup>nd</sup> 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 26<sup>th</sup> 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.

## Liste détaillée des enseignements

Année	niveau(1)	Diplôme (2)	Intitulé	nature (3)	effectifs	volume horaire annuel	
						(en h)	(en hETD)
2018/19	L1 S1	PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	39	23 / 23 / 8	65,5
2018/19	L1 S1	MI	Option physique	CM / TD	30	12 / 12	30
2018/19	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	16	30	30
2018/19	L1 S2	PC-SPI	Optique Ondulatoire	CM / TD / TP	42	6 / 8 / 2	19
2019/20	L1 S1	SPA / PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	41 / 40	31 / 31 / 8	85,5
2019/20	L1 S1	MI	Option physique	CM / TD	23	12 / 12	30
2019/20	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	17	30	30
2019/20	L1 S2	PC-SPI	Optique Ondulatoire	CM / TD	46	6 / 8	17
2020/21	L1 S1	SPA / PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	36 / 33	33 / 33 / 12	94,5
2020/21	L1 S1	MI	Option physique	CM / TD	22	12 / 12	30
2020/21	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	13	33	33
2021/22	L1 S1	MPC / PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	33 / 34	33 / 33 / 12	94,5
2021/22	L1 S1	MI	Option physique	CM / TD	35	6 / 6	15
2021/22	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	16	30	30
2021/22	L3 S5	PC	Mécanique quantique	CM / TD	41	12 / 12	30
2021/22	L1 S2	MPC / PC-SPI	Optique Ondulatoire	CM / TD	39 / 38	12 / 16	34
2022/23	L1 S1	MPC / PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	39 / 38	44 / 44 / 16	128
2022/23	L1 S1	MI	Option physique	CM / TD	36	6 / 6	15
2022/23	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	13	30	30
2022/23	L1 S2	MPC / PC-SPI	Optique Ondulatoire	CM / TD	40 / 42	12 / 16	34
2022/23	L1 S2	SPA	Khôlles	Khôlles	4	1,33	1,33
2023/24	L1 S1	PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	72	44 / 44 / 4	123
2023/24	L1 S1	MI	Option physique 1	CM / TP	29	4 / 9,5	15,5
2023/24	L3 S5	PC	Initiation aux méthodes numériques	TP	14	30	30
2023/24	L1 S2	SPA / PC-SPI	Optique Ondulatoire	CM / TD	39	6 / 8	17
2023/24	L1 S2	MI	Option physique 2	CM / TD	22	4 / 4	10
2023/24	L3 S2	MPC	Projet	Projet	2	8	8
2024/25	L1 S1	MPC / PC-SPI	Dynamique du point	CM / TD / TP	36	22 / 22 / 8	63
						Total	835,83

(1) Licence  $n^{\circ}$  année ( $L_n$ ),  $n^{\circ}$  Semestre ( $S_n$ )

(2) Sciences-Physiques de l'Ingénieur (SPI), Physique-Chimie (PC), Sciences-Physiques-Anglais (SPA), Mathématiques-Physiques-Chimie (MPC), Mathématiques-Informatique (MI)

(3) cours magistraux (CM), travaux pratiques (TP), travaux dirigés (TD), encadrement de travaux de fin d'étude et de stages