Laura Gomez

Chef de projet technique -- Ingénieure en mécatronique et biomécanique



13 janvier 1989, France En concubinage

Contact

laura-gomez@gmx.fr +33 7 70 49 23 44

IPREM Technopôle Hélioparc 2 ave du Président P. Angot 64053 Pau cedex 9

Chimie Théorique

Modélisation Développement Stratégies calculatoires VASP, CRYSTAL (solide) Gaussian (molécule) DL-POLY, AMBER (dynamique)

Programmation

Fortran, C Python LATEX, HTML/CSS

Langues

Français Anglais Espagnol

Sur internet

ip orcid.org/0000-0003-1116-8776 • gVallverdu • gvallver.perso.univ-pau.fr

Résumé

Physico-chimiste de formation, je suis Maître de conférences en chimie théorique à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour à l'IPREM (Institut des sciences analytiques et de Physico-chimie pour l'environnement et les matériaux). Mes activités de recherche concernent le développement et l'utilisation de méthodes de simulations numériques à différentes échelles de temps et ou d'espace, appliquées à l'étude de systèmes complexes. J'effectue mes enseignements à l'UFR sciences et techniques de Pau principalement en chimie-physique.

Experience Professionnelle

depuis 2010 Université de Pau et des Pays de l'Adour

Pau, France

Maître de conférences

Chimie théorique et simulation numérique. Surface, interface et réactivité.

2009-2010 **CEA - DAM**

Bruyères le châtel, France

Chercheur-ingénieur

Développement et implémentation d'un modèle mésoscopique pour l'étude de la propagation d'ondes de chock réactives dans un système hétérogène.

2006-2009 Université Paris-Sud 11

Orsay, France

Allocataire de recherche, moniteur

Étude théorique de processus photophysiques dans les protéines fluorescentes.

Formation

2013-2015	Master d'ingénierie biomédical spécialité bio	omécanique	BME et Arts et Métiers
2008-2013	Ecole d'ingénieur en mécatronique spécialité 6 mois en Corée à l	é robotique et si	imulation ISTY - UVSQ
2003-2004	Licence de chimie-physique Mention TB		Université Paris-Sud 11
2003-2006	Magistère de Physico-Chimie Moléculaire	Université Par	is-Sud 11 – ENS Cachan
2001-2003	CPGE PCSI-PC	Lycée Fr	ançois Arago, Perpignan

Publications significatives

Vallverdu, G.; Minvielle, M.; Andreu, N.; Gonbeau, D.; Baraille, I. First principle study of the surface reactivity of layered lithium oxides LiMO2 (M = Ni, Mn, Co). Surf. Sci. **2016**,

Guille, E.; Vallverdu, G.; Tison, Y.; Bégué, D.; Baraille, I. Possible Existence of a Monovalent Coordination for Nitrogen Atoms in LixPOyNz Solid Electrolyte: Modeling of X-ray Photoelectron Spectroscopy and Raman Spectra. J. Phys. Chem. C **2015**, 119, 23379–23387.

Guille, E.; Vallverdu, G.; Baraille, I. First-principle calculation of core level binding energies of LixPOyNz solid electrolyte. J. Chem. Phys. **2014**, 141, 244703.

Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Cras, F. L.; Baraille, I. First principles calculations of solid-solid interfaces: an application to conversion materials for lithium-ion batteries. J. Mater. Chem. **2012**, 22, 22063–22071.

- Maillet, J. B.; Bourasseau, E.; Desbiens, N.; Vallverdu, G.; Stoltz, G. Mesoscopic simulations of shock-to-detonation transition in reactive liquid high explosive. EPL **2011**, 96, 68007.
- Vallverdu, G.; Demachy, I.; Mérola, F.; Pasquier, H.; Ridard, J.; Lévy, B. Relation between pH, structure, and absorption spectrum of Cerulean: A study by molecular dynamics and TD DFT calculations. Proteins: Struct., Funct., Bioinf. **2010**, 78, 1040–1054.