





Curiculum Vitae

Germain SALVATO VALLVERDU IPREM - UMR 5254 28 mai 2019

Germain Salvato Vallverdu

Associate Professor - Chemical physics and numerical simulations



10 août 1983, France Maried, 2 children

Contact

germain.vallverdu@univ-pau.fr (33) 5 59 40 78 51 (33) 6 88 59 08 87

> Technopôle Hélioparc 2 ave du Président P. Angot FR-64053 Pau cedex 9 http://iprem.univ-pau.fr

Theoretical Chemistry

Computational strategy
Development
Complex matrices
Surfaces, interfaces
VASP, CRYSTAL (solid)
Gaussian, Orca (molecule)
Gromacs, Lammps (MD)

Programming

Python Fortran, C ATEX, HTML/CSS

Languages

French English

Bibliometry

18 articles 13 conferences h-index: 8 12.5 citations per item 199 citations (181 w/o self-citations)

On the web

☐ publons 2764008
☐ GitHub ❤ GitLab: gvallverdu
☐ gsalvatovallverdu.gitlab.io

Abstract

Associate professor at the University of Pau & Pays Adour, I am a specialist in theoretical chemistry, molecular modeling and numerical simulations at IPREM institute. My research activities, in physical-chemistry, concern the understanding of macroscopic phenomena such as reactivity, thermochemistry or spectroscopy from a microscopic description of matter. The implementation and combination of relevant computational strategies allows for the investigation of complex systems in various field among petroleum-chemistry, biological systems or energy storage materials.

Professional Experiences

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

Pau, France

Associate professor

Theoretical chemistry and computational approaches. Surfaces, interfaces, reactivity and molecular interactions.

2009-2010 **CEA - DAM**

Bruyères le châtel, France

Postdoctoral position

Development and implementation of a mesoscopic model for reactive shock waves propagation in heterogeneous systems.

2006-2009 Université Paris-Sud 11

Orsay, France

PhD Student

Theoretical study of photophysical processes in fluorescent proteins.

Education

2006-2009	PhD in chemistry speciality theoretical chem Mention très honorable	istry Université Paris-Sud 11
2004-2006	Master degree of physical-chemistry speciality Physico-Chimie Moléculaire Mention TB	Université Paris-Sud 11
2003-2004	Bachelor Degree of physical-chemistry Mention TB	Université Paris-Sud 11
2003-2006	Magistère de Physico-Chimie Moléculaire	Université Paris-Sud 11 – ENS Cachan
2001-2003	Undergraduate physics and chemistry	Lycée François Arago, Perpignan

Main publications

Munoz, G. et al. Redox activity of nickel and vanadium porphyrins: a possible mechanism behind petroleum genesis and maturation? RSC Advances **2019**, 9, 9509–9516.

Santos Silva, H. et al. Impact of H-Bonds and Porphyrins on Asphaltene Aggregation As Revealed by Molecular Dynamics Simulations. Energy & Fuels **2018**, 32, 11153–11164.

Quesne-Turin, A. et al. Morphology and Surface Reactivity Relationship in the Li1+xMn2-xO4 Spinel with x = 0.05 and 0.10: A Combined First-Principle and Experimental Study. ACS Applied Materials & Interfaces **2017**,

Santos Silva, H. et al. The role of metalloporphyrins on the physical-chemical properties of petroleum fluids. Fuel **2017**, 188, 374–381.

Vallverdu, G. et al. First principle study of the surface reactivity of layered lithium oxides LiMO2 (M = Ni, Mn, Co). Surf. Sci. **2016**,

Maillet, J. B. et al. Mesoscopic simulations of shock-to-detonation transition in reactive liquid high explosive. EPL **2011**, 96, 68007.

Vallverdu, G. et al. 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.

Teaching

- Lectures in chemical-physics, theoretical chemistry and programming languages.
- Strong involvement in new information and communication technologies for education
- Science popularization: Quantum mechanics and workshops for school students



Curiculum Vitae

Germain Salvato Vallverdu

Nationalité française Né le 10 Août 1983 à Perpignan (Pyrénées orientales) Marié, 2 enfants

▲ IPREM

Technopôle Hélioparc 2 avenue du Président Pierre Angot 64053 Pau Cedex 9

J 05 59 40 78 51

@ germain.vallverdu@univ-pau.fr

https://publons.com/researcher/2764008/

• @gvallverdu - https://github.com/gVallverdu/

http://gvallver.perso.univ-pau.fr



Fonctions:

I

Octobre 2010 Aujourd'hui

Maître de conférences

- Chimie théorique, modélisation moléculaire, simulation numérique.
- Université de Pau et des Pays de l'Adour
 - o Matrices complexes, pétrochimie, thermochimie
 - o Bio-dégradation de composés organiques
 - Processus électroniques dans les matériaux pour le stockage électrochimique de l'énergie

2009 **♦** 2010 Chercheur-Ingénieur

- Développement et implémentation d'un modèle mésoscopique pour l'étude de la propagation d'ondes de chock réactives.
- CEA DAM Île de France.

2006 🔁 2009 Allocataire Moniteur

- Étude théorique de processus photophysiques dans des protéines fluorescentes.
- Université Paris Sud 11, Laboratoire de Chimie Physique, Orsay



Formation:



16 Juillet 2009 • Soutenance de thèse

Titre: Étude théorique de processus photophysiques dans des protéines fluorescentes. financement MNRT, mention très honorable.

Composition du jury:

- M. David Perahia (Directeur de recherche, IBBMC, Université Paris-Sud 11), président
- M. Xavier Assfeld (Professeur, Université Henry Poincaré, Nancy), rapporteur
- M. Daniel Borgis (Directeur de recherche, ENS Paris), rapporteur
- M. Olivier Parisel (Directeur de recherche, lCT, Université Paris 6)
- Mme Fabienne Mérola (Directeur de recherche, LCP, Université Paris-Sud 11)
- Mme Isabelle Demachy (Professeur, LCP, Université Paris-Sud 11), directrice de thèse

Disponible sur Thèse en ligne

• http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00431879/fr/

2006 - 2009 • Doctorat : Allocataire Moniteur à l'université Paris-Sud 11

Travaux de recherche effectués dans le Laboratoire de Chimie Physique, UMR 8000, financement MNRT, mention très honorable.

Enseignements effectués à l'IUT de mesures physiques d'orsay.

2003 - 2006 • Magistère de Physico-Chimie Moléculaire

Université Paris-Sud 11 et Ecole Normale Supérieure de Cachan.

2004 - 2006 • Master de Physico-Chimie Molécualire

Université Paris-Sud 11, mention Très Bien.

2003 - 2004 • Licence de Chimie Physique

Université Paris-Sud 11, mention Très Bien.

2001 - 2003 • Classes préparatoires aux grandes écoles

Lycée François Arago (Perpignan), classes PCSI - PC.



Activités de recherche:



1) Production scientifique

Bibliométrie^a

- 18 articles
- h-index = 8
- 12.5 citations par articles en moyenne
- 199 citations (181 or auto-citations)
- 13 conférences (1 conférence invitée, 7 dans des congrès nationaux)

a. Sources: ISI Web Of Knowledge

Articles in international and peer reviewed journals:

- [1] Munoz, G.; K. Gunessee, B.; Bégué, D.; Bouyssiere, B.; Baraille, I.; Vallverdu, G.; Silva, H. S. Redox activity of nickel and vanadium porphyrins: a possible mechanism behind petroleum genesis and maturation? *RSC Advances* **2019**, *9*, 9509–9516.
- [2] Santos Silva, H.; Alfarra, A.; Vallverdu, G.; Bégué, D.; Bouyssiere, B.; Baraille, I. Asphaltene aggregation studied by molecular dynamics simulations: role of the molecular architecture and solvents on the supramolecular or colloidal behavior. *Petroleum Science* 2019,
- [3] Santos Silva, H.; Alfarra, A.; Vallverdu, G.; Bégué, D.; Bouyssiere, B.; Baraille, I. Impact of H-Bonds and Porphyrins on Asphaltene Aggregation As Revealed by Molecular Dynamics Simulations. *Energy & Fuels* **2018**, *32*, 11153–11164.
- [4] Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Croguennec, L.; Vallverdu, G.; Allouche, J.; Charles-Blin, Y.; Chotard, J.-N.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Surface Reactivity of Li2MnO3: First-Principles and Experimental Study. ACS Applied Materials & Interfaces 2017,
- [5] Quesne-Turin, A.; Vallverdu, G.; Flahaut, D.; Allouche, J.; Croguennec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Morphology and Surface Reactivity Relationship in the Li1+xMn2-xO4 Spinel with x = 0.05 and 0.10: A Combined First-Principle and Experimental Study. ACS Applied Materials & Interfaces 2017,
- [6] Santos Silva, H.; Alfarra, A.; Vallverdu, G.; Bégué, D.; Bouyssiere, B.; Baraille, I. Sensitivity of Asphaltene Aggregation toward the Molecular Architecture under Desalting Thermodynamic Conditions. Energy & Fuels 2017,
- [7] Santos Silva, H.; Sodero, A. C. R.; Korb, J.-P.; Alfarra, A.; Giusti, P.; Vallverdu, G.; Bégué, D.; Baraille, I.; Bouyssiere, B. The role of metalloporphyrins on the physical-chemical properties of petroleum fluids. *Fuel* **2017**, *188*, 374–381.
- [8] 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**,

- [9] Silva, H. S.; Sodero, A. C. R.; Bouyssiere, B.; Carrier, H.; Korb, J.-P.; Alfarra, A.; Vallverdu, G.; Bégué, D.; Baraille, I. Molecular Dynamics Study of Nanoaggregation in Asphaltene Mixtures: Effects of the N, O, and S Heteroatoms. *Energy & Fuels* **2016**,
- [10] 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.
- [11] Guille, E.; Vallverdu, G.; Baraille, I. First-principle calculation of core level binding energies of LixPOyNz solid electrolyte. *J. Chem. Phys.* **2014**, *141*, 244703.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] Jonasson, G.; Teuler, J.-M.; Vallverdu, G.; Mérola, F.; Ridard, J.; Lévy, B.; Demachy, I. Excited State Dynamics of the Green Fluorescent Protein on the Nanosecond Time Scale. J. Chem. Theory Comput. 2011, 7, 1990–1997.
- [15] 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.
- [16] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Using biased molecular dynamics and Brownian dynamics in the study of fluorescent proteins. *J. Mol. Struct. : THEOCHEM* **2009**, *898*, 73–81.
- [17] Villoing, A.; Ridhoir, M.; Cinquin, B.; Erard, M.; Alvarez, L.; Vallverdu, G.; Pernot, P.; Grailhe, R.; Mérola, F.; Pasquier, H. Complex Fluorescence of the Cyan Fluorescent Protein: Comparisons with the H148D Variant and Consequences for Quantitative Cell Imaging†. *Biochemistry* **2008**, *47*, 12483–12492.
- [18] Demachy, I.; Ridard, J.; Laguitton-Pasquier, H.; Durnerin, E.; Vallverdu, G.; Archirel, P.; Lévy, B. Cyan Fluorescent Protein: Molecular Dynamics, Simulations, and Electronic Absorption Spectrum. *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 24121–24133.

Personal conferences

- [1] Vallverdu, G. Approches couplées spectroscopie XPS-chimie quantique : applications à l'étude de la réactivité chimique aux interfaces. *Journées des Spectroscopies d'Électrons, Nancy*, **2019**.
- [2] Vallverdu, G.; Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Croguenec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Surface reactivity of layered manganese oxides: an experimental and theoretical approach. *Physical and Theoretical Chemistry, Edinburgh, Scotland*, **2018**.
- [3] Vallverdu, G.; Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Croguenec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Surface reactivity of layered lithium oxides used as cathode materials: a coupled experimental-theoretical study. Structure-Property Relationships in Solid Satete Materials, Nantes, France, 2016.



- [4] Vallverdu, G.; Guille, E.; Tison, Y.; Bégué, D.; Baraille, I. XPS Chemical shifts calculations: confrontation between experimental and theoretical investigations. *GDR REncontres de Spectroscopie Théorique, Roscoff, France*, **2016**.
- [5] Vallverdu, G. Au sujet de Python appliqué à la chimie théorique. PyCon-fr 2015, 2015.
- [6] Vallverdu, G.; Minvielle, M.; Andreu, N.;; Gonbeau, D.; Baraille, I. Réactivité de surface d'oxydes lamellaires LiNi_xMn_yCo_{1-x-y}O₂. 14^e Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Paris, France, 2014.
- [7] Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Baraille, I. Étude par une approche couplée expériencethéorie des interfaces solide/solide dans le matériau de conversion CuO: propriétés thermodynamiques et nanostructuration. *GDR-CoDFT*, *Lorient*, *France*, **2013**.
- [8] Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Baraille, I. Theoretical study of solid-solid interfaces in conversion materials: structure, electronic properties and thermodynamic stability. *International Conference on Advanced Materials Modelling (ICAMM), Nantes, France*, **2012**.
- [9] Vallverdu, G.; Maillet, J.-B.; Bourasseau, E.; Stoltz, G.; Soulard, L. A mesoscopic model for shock wave propagation in TATB. *Discrete Simulations of Fluid Dynamics, Rome, Italie*, **2010**.
- [10] Vallverdu, G.; Maillet, J.-B.; Bourasseau, E.; Stoltz, G.; Soulard, L. A mesoscopic model for shock wave propagation in TATB. *New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Paris, France*, **2010**.
- [11] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Calcul de spectre d'absorption par simulation moléculaire: incertitudes statistique et liées à la fonctionnelle de la densité. *Journées Modélisation de l'ENS ENSC Paris, Paris, France*, **2009**.
- [12] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Utilisation de dynamique moléculaire contrainte et dynamique Brownienne dans l'étude des protéines fluorescentes. *Journée de l'école doctorale de chimie de l'université Paris Sud 11*, **2008**.
- [13] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Le chromophore de la Green Fluorescent Protein: effets de la protéine sur le déclin de la fluorescence. *9^e Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes, Bordeaux, France*, **2007**.
- [14] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Le chromophore de la Green Fluorescent Protein : étude du déclin de la fluorescence. *Journées Modélisation de l'ENS ENSC Paris, Paris, France*, **2007**.

Conferences done by others

- [1] Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Vallverdu, G.; Croguennec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Investigation on the Surface Reactivity of layered manganese oxides: an experimental and theoretical combined approach. 17th European Conference On Applications Of Surface And Interface Analysis, Montpellier, France, 2016.
- [2] Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Vallverdu, G.; Croguennec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Investigation on the surface reactivity of layered lithium oxides: an experimental and theoretical combined approach. *European Conference on surface Science, Grenoble, France*, **2016**.

- [3] Quesne-Turin, A.; Vallverdu, G.; Flahaut, D.; Croguennec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Défauts structuraux et impact sur la réactivité de surface de Li2MnO3: Couplage expérience/théorie. 26ème Journée de Chimie du Grand Sud-Ouest, Bordeaux, France, 2016.
- [4] Guille, E.; Vallverdu, G.; Baraille, I. Modelling of the electronic properties of Li_xPO_yN_z: molecular dynamics and periodic DFT approaches. *International Conference on Advanced Materials Modelling (ICAMM), Nantes, France,* **2014**.
- [5] Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Pecquenard, B.; Le Cras, F.; Baraille, I. Etude des interfaces formées au sein du matériau de conversion CuO, électrode positive pour microbatterie au Li. 13^{eme} journée de la matière condensée, Montpellier, France, **2012**.
- [6] Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Pecquenard, B.; Le Cras, F.; Baraille, I. Theoretical interface investigations in conversion positive electrode for Li-ion batteries. *Materials Research Society (MRS)*, San-Fransisco, USA, 2012.
- [7] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Theoretical study of the radiationless decay of the Green Fluorescent Protein chromophore in water and in protein. *ISQBP President's Meeting "Pushing the Boundaries of Biomolecular Simulation"*, Ascona, Suisse, **2008**.

Posters

- [1] Vallverdu, G.; Minvielle, M.; Andreu, N.;; Gonbeau, D.; Baraille, I. Surface reactivity of layered lithium oxide LiNi_xMn_yCo_{1-x-y}O₂. *International Conference on Advanced Materials Modelling (ICAMM), Nantes, France*, **2014**.
- [2] Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Baraille, I. Approche théorique des interfaces solide/solide: application au calcul des propriétés structurales et thermodynamiques des matériaux de conversion. 13^e Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Marseille, France, 2012.
- [3] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Using biased molecular dynamics and Brownian dynamics in the study of fluorescent proteins. *CCP5 summer school, Sheffield, Angleterre*, **2008**.
- [4] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Using biased molecular dynamics and Brownian dynamics in the study of fluorescent proteins. XI^e Rencontres des Chimistes Théoriciens Franco-phones, Dinard, France, 2008.
- [5] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. The chromophore of Green fluorescent protein: dynamics of the fluorescent state inside the protein. 12th European Conference on the Spectrocopy of Biological Molecules, Bobigny, France, 2007.
- [6] Vallverdu, G.; Demachy, I.; Ridard, J.; Lévy, B. Fluorescence de la Cyan Fluorescent Protein: étude théorique de deux mécansimes de désactivatio. X^e Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Nancy, France, 2006.

2) Encadrement doctoral

Depuis mon recrutement j'ai participé à l'encadrement des thèses de Lucile Martin (2010-2013), Ambroise Quesne-Turin (2014-2017), Alexia Lemoine (2018 - 2021), Bhuvan Kumar Gunessee (2018 - 2021) et Orlando Villegas (2018 - 2021).



Émilie Guille (2011-2014): L'école doctorale ED211 et l'UPPA m'ont accordé une co-direction à hauteur de 40% avec le Pr Isabelle Baraille pour cette thèse.

Cette thèse a concerné l'étude de l'interface entre une électrode et un électrolyte solide. Ce type d'électrolyte est utilisé pour contourner les problèmes de sécurité inhérents aux électrolytes liquides dans des microbatteries au lithium. L'électrolyte étudié était le $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$ (LIPON) qui présente une structure amorphe. La plus longue partie de la thèse fut consacrée à l'identification de motifs représentatifs de la structure du LIPON par comparaison de résultats expérimentaux et théoriques : spectres IR, Raman, XPS. Le modèle a ensuite été utilisé pour étudier l'interface entre le LIPON et une électrode modèle de silicium.

3) Encadrement d'étudiants en M2 Recherche

Depuis 2013 j'ai encadré 6 étudiants en Master 2 chimie et physico-chimie des matériaux, spécialité recherche. 4 d'entre eux ont travaillé sur des sujets mixtes couplant expériences et théorie en collaboration avec un expérimentateur de l'IPREM spécialiste de la caractérisation de surface. Les noms, dates, taux d'encadrement et les titres des stages sont reportés dans le tableau ci-dessous.

Nom de l'étudiant	année	taux	sujet
Marie Minvielle	2013	50%	Étude de l'adsorption de sondes gazeuses à la surface de matériaux d'électrode positive : cou- plage expérience/théorie
Dimitri Del Pianta	2014	50%	Étude des processus d'insertion dans les matériaux d'électrode positive pour microbatteries au sodium
William Lafargue-Dit-Hauret	2015	100%	Étude théorique de la conductivité ionique à l'in- terface électrode/électrolyte solide : Application au système LiPON/Si
Youn Charles-Blin	2016	50%	Étude de la réactivité de surface de matériaux d'électrode modèles de la famille des oxydes de lithium lamellaire : approche couplée expé- rience/théorie
Amine Bekkali	2017	50%	Une étude via un couplage expérience-théorie des déplacements chimiques en spectroscopie photoélectronique à rayonnement X
Guillaume Fradet	2017	50%	Calculs de spectres Infra Rouge.
Gérald Munoz	2018	50%	La réactivité des porphyrines : applications aux fluides pétroliers
Quentin Labarde	2019	50%	Prévision de la viscosité d'un diesel paraffinique modèle par modélisation moléculaire



4) Participation à un comité de sélection

En 2013, j'ai participé au comité de sélection pour le recrutement d'un Maître de conférence en section CNU 33 et 31. Le profil du poste concernait la Physico-chimie des matériaux appliquée aux surfaces / interfaces.

5) Projets

- Demande d'Allocations de Ressources Informatiques (DARI)
 - o 2017 2 500 000 heures scalaires
 - o 2017 1 000 000 heures scalaires
 - o 2016 400 000 heures scalaires
 - o 2015 200 000 heures scalaires
 - o 2014 200 000 heures scalaires
 - o 2013 150 000 heures scalaires
- 2016 participation à la rédaction du Projet ANR INGROWTH (Rejeté à la deuxième étape).
- 2018/2019 soumission de l'ANR JCJC MALICE
- 2018 Projet région Nouvelle Aquitaine (IPREM ICMCB (Bordeaux) Saft (Partenaire industriel)), démarrage septembre 2018.