

Germain Salvato Vallverdu

Maître de conférences -- Docteur en Chimie-Physique



10 août 1983, France
Marié, 2 enfants

Contact

germain.vallverdu@univ-pau.fr
05 59 40 78 51
06 88 59 08 87

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
L^AT_EX, HTML/CSS

Langues

Français
Anglais (Professional)

Sur internet

 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.

Expérience 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 choc 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

- 2006-2009 **Doctorat de chimie** spécialité chimie-théorique Université Paris-Sud 11
Mention très honorable
- 2004-2006 **Master de chimie** spécialité physico-chimie moléculaire Université Paris-Sud 11
Mention TB
- 2003-2004 **Licence de chimie-physique** Université Paris-Sud 11
Mention TB
- 2003-2006 **Magistère de Physico-Chimie Moléculaire** Université Paris-Sud 11 – ENS Cachan
- 2001-2003 **CPGE PCSI-PC** Lycée François 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 Li_xPO_yN_z 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 Li_xPO_yN_z 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.