

AURELIE PERRIER-PINEAU

Maître de Conférences

Université de Paris, Laboratoire i-CLeHS

Diplômée de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris, j'ai obtenu mon doctorat en Chimie-Physique de l'Université Bordeaux 1 en 2005. Après un post-doctorat à l'Université de Sienne (Italie), j'ai été nommée maître de conférences à l'Université Paris Diderot en 2007, devenue aujourd'hui Université de Paris. Depuis mon stage-postdoctoral et mon intégration dans le groupe « Modélisation Moléculaire » du laboratoire ITODYS, je m'intéresse à l'étude théorique des propriétés optiques de molécules conjuguées photoactives et plus particulièrement photochromes. Dans ce cadre, grâce aux outils basés sur la chimie quantique et la dynamique moléculaire classique, je m'intéresse à la modélisation de l'effet que peut avoir l'environnement (solvant, incorporation dans une matrice peptidique, greffage sur une surface, couplage avec une autre molécule photoactive...) sur la photoréactivité de ces molécules. Mes travaux s'inscrivent dans un réseau de collaborations à la fois théoriques (France, Belgique, Italie, Allemagne) et expérimentales avec des chimistes de synthèse (Japon, ENS de Cachan) et des spécialistes en spectroscopie ultra-rapide (CEA, Université de Lille 1). J'ai soutenu mon « Habilitation à Diriger des Recherches » portant sur la « Contribution à l'étude théorique de systèmes photoactifs : propriétés optiques, réactivité et effets d'environnement » en 2014. J'ai ensuite rejoint le groupe « Chimie Théorique et Modélisation » de l'Institut de Recherche de Chimie de Paris (IRCP) en 2014 qui a été rattaché au laboratoire i-CLeHS, « Institute of Chemistry for Life and Health Sciences » en 2019. En sus de mes activités de recherche dédiées à l'étude théorique de molécules photoactives isolées et insérées dans des environnements complexes, je m'intéresse désormais également à la modélisation des interactions entre ligands et molécules biologiques (ADN, protéines).

Autres responsabilités exercées

- 2^{ème} Vice-présidente, section 31, Conseil National des Universités (depuis 2019)
- Membre nommée, section 31, Conseil National des Universités (2014-2019)
- Membre élue du bureau de Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT) (2018-)
- Membre élue de la Commission Recherche de la Faculté des Sciences, Université de Paris (2019-)
- Membre nommée de la Commission des Finances et des Moyens, Faculté des Sciences, Université de Paris (2019-)
- Co-responsable du Master 1 « Chimie » (2014-2019) puis « Frontiers in Chemistry » (2019-), Université de Paris
- Membre nommée du conseil de perfectionnement du Master de Chimie (2014-)
- Membre nommée de la cellule pédagogique de l'UFR de Chimie de l'Université Paris Diderot (2009-2016)
- Membre élue du Conseil Scientifique de l'UFR de Chimie, Université Paris Diderot Paris 7 (2009-2014)

Principales publications

- **L. Le Bras, C. Lemarchand, S. Aloïse, C. Adamo, N. Pineau*, A. Perrier***, *Modeling Photonastic Materials: A First Computational Study*, Journal of Chemical Theory and Computation 2020 16 (11), 7017-7032. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00762>

- **L. Le Bras, R. Berthin, I. Hamdi, M. Louati, S. Aloïse, M. Takeshita, C. Adamo, A. Perrier***, *Understanding the properties of dithienylethenes functionalized for supramolecular self-assembly: a molecular modeling study*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2020), 22, 6942-6952. <https://doi.org/10.1039/C9CP06590C>
- **A. Perrier*, M. Eluard, M. Petitjean, A. Vanet***, *In Silico Design of New Inhibitors Against Hemagglutinin of Influenza*, *J. Phys. Chem. B* (2019), 123 (3), 582–592, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b10767>
- **L. Le Bras, C. Adamo, A. Perrier***, *Modeling the Modulation of Emission Behavior in E/Z Isomers of Dipyrrrolyldiphenylethene: From Molecules to Nanoaggregates*, *J. Phys. Chem. C* (2017) 121, 25603–25616. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b09310>
- **A Sharma, S Delile, M Jabri, C Adamo, C Fave, D Marchal, A Perrier***, *Interaction of osmium (III) redox probes with DNA: insights from theory*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18 (2016), 30029– 30039. <https://doi.org/10.1039/C6CP05105G>
- **A. Fihey, A. Perrier, W. Browne, D. Jacquemin**, *Multiphotochromic molecular systems*, *Chem. Soc. Rev.* 44 (2015) 3719-3759. <https://doi.org/10.1039/C5CS00137D>
- **A. Fihey*, F. Maurel, A. Perrier***, *Plasmon–Excitation Coupling for Dithienylethene/Gold Nanoparticle Hybrid Systems: A Theoretical Study*, *J. Phys. Chem. C* 119 (2015) 9995-10006, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b01118>
- **A. Perrier*, S. Aloïse, M. Olivucci, D. Jacquemin**, *Inverse versus Normal Dithienylethenes : Computational Investigation of the Photocyclization Reaction*, *J. Phys. Chem. Lett.*, 4 (2013) 2190-2196. <https://doi.org/10.1021/jz401009b>
- **A. Perrier, F. Maurel, D. Jacquemin***, *Single Molecule Multiphotochromism with Diarylethenes*, *Acc. Chem. Res.* 2012, 45, 8, 1173–1182, <https://doi.org/10.1021/ar200214k>
- **S. Aloïse*, M. Sliwa, Z. Pawlowska, J. Réhault, J. Dubois, O. Poizat, G. Buntinx, A. Perrier*, F. Maurel, S. Yamaguchi, M. Takeshita**, *Bridged Photochromic Diarylethenes Investigated by Ultrafast Absorption Spectroscopy: Evidence for Two Distinct Photocyclization Pathway*, *J. Am. Chem. Soc.*, (2010), 132, 7379 – 7390. <https://doi.org/10.1021/ja910813x>