

**Jean-Sébastien Filhol**

Adresse : laboratoire : School of physics  
University of Exeter  
Exeter, EX4 4QL, UK.  
Tel: 44-(0)139-226-4198  
Fax: 44-(0)139-226-4111  
Mél: [filhol@excc.ex.ac.uk](mailto:filhol@excc.ex.ac.uk)

personnelle: 27 Rollestone Crescent, Exeter EX4 5EB, UK  
Tel: 44-(0)139-210-018

Date et lieu de naissance : 9 avril 1973 (29 ans.), Chatenay Malabry(France), Nationalité :Française.

**Parcours universitaire**

- 2002-2003 : **Stage Post Doctoral** à la School of Physics de l'université d'Exeter (UK) (financement européen)
- 2001-2002 : **Stage Post Doctoral** au Chemical Engineering Department of the university of Virginia (USA), laboratoire de M. Neurock. *Prix du département pour excellent travail.*
- 1998-2001 : **Thèse de Doctorat (discipline : chimie-physique théorique)** à l'Ecole Normale Supérieure de Lyon sous la direction de Philippe Sautet, Mention Très Honorable (N.B. pas de félicitations du jury à l'ENS Lyon).
- 1997-1998 : **Diplôme d'Etudes Approfondies en Sciences de la matière condensée, surfaces et interfaces mention Très Bien** à l'université Claude Bernard (Lyon I).  
- 3<sup>ème</sup> année du Magistère des Sciences de la Matière,  
**Magistère des Sciences de la Matière**, Ecole Normale Supérieure de Lyon, **Mention Bien.**
- Juillet 1997 : **Agrégation de Sciences Physiques Option Chimie**, classement : 35<sup>ème</sup>.
- 1996-1997 : Préparation au concours de l'Agrégation de Sciences Physiques Option Chimie à l'ENS Lyon.
- 1995-1996 : Maîtrise de Chimie Physique de l'Ecole Normale Supérieure de Lyon, Mention Assez Bien – 2<sup>ème</sup> année de Magistère des Sciences de la Matière (Université Claude Bernard Lyon-I).
- 1994-1995 : Licence de Chimie Physique de l'Ecole Normale Supérieure de Lyon, Mention Assez Bien – 1<sup>ère</sup> année de Magistère des Sciences de la Matière (Université Claude Bernard Lyon-I).
- Sept. 1994 : Intégration à l'Ecole Normale Supérieure de Lyon comme élève **normalien**.
- 1991-1994 : Classes Préparatoires au Lycée Charlemagne, Paris.

**Publications**

- Ethylene adsorption and coadsorption with H on a Pd(110) surface: a first principles theoretical study.**  
*J.-S. Filhol, D. Simon, P. Sautet. J. Phys. Chem. B, 2003, 107, 1604*
- Highly strained structure of a four layer deposit of Pd on Ni(110) : a coupled theoretical and experimental study**  
*J.-S. Filhol, M.-C. Saint Lager, D. Simon, P. Sautet, P. Dolle, J.C. Bertolini, Phys. Rev. Lett 2002, 89, 146106-1*
- First Principles analysis of CO oxidation over PtRu surfaces,**  
*M. Neurock, S. Desai, J.-S. Filhol, Abstracts of papers of the ACS. 223: 100-Coll part1 Apr 7 2002*
- Reconstructions et réactivité catalytique induites par contrainte:étude quantique des dépôts Pd sur Ni,**  
*J.-S. Filhol (Thèse)*
- A surface phase stability diagram for Pd deposits on Ni(110): a first principles theoretical study.**  
*J.-S. Filhol, D. Simon, P. Sautet. Phys. Rev. B., 2001, 64, 085412*
- Stress induced nanostructure in a Pd monolayer on Ni(110): a first principles theoretical study.**  
*J.-S. Filhol, D. Simon, P. Sautet. Surface Science, 2001, 472, L139.*
- Multichromophoric cyclodextrins. Antenna induced unimolecular photoreaction. Photo-isomerization of a nitron.** PF Wang, L Jullien, B Valeur, *JS Filhol, J Canceill, JM Lehn. New Journal of Chemistry, 1996, 20, 895*
- Charge transfer-embedded atom method potentials for O-Al-Zr system.**  
*X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, J.-S. Filhol, M.N. Neurock (2003, soumis à Phys. Rev. B)*
- Understanding the high activity of Pd/Ni(110) deposits.**  
*J.-S. Filhol, D. Simon, P. Sautet (soumis à Nature)*
- Ab initio electrochemistry in water**  
*J.-S. Filhol, M. Neurock. (écrit, bientôt soumis)*

---



---

## Programmation

---

-**Code Vib** : programme de calcul de vibrations moléculaires à partir de (n'importe quel) programme de calcul quantique.

-*utilisateurs*: ENS Lyon (voir J. Phys. Chem. B, 2003, **107**, 1604), Université de Lille (voir J.-F. Paul, Catalysis Today, 70 (1-3): 255-269 OCT 15 2001), Université de Virginie (groupe de M. Neurock), United Technologies Research Center (S. Opalka)

-**Code Hess**: Code de dynamique moléculaire développé pour valider un nouveau type de potentiels pour les métaux (code source inclus dans la thèse J.-S. Filhol, ENS Lyon).

-**Code Mpot** : Interface/code de calcul pour calculs électrochimiques en DFT périodique. (bientôt publié)

**Programmation en C et shell unix**

---

## Activités de Recherche

---

Sept. 2002–août 2003 : **Stage Post Doctoral** au laboratoire de modélisation de la school of physics (Pr. Jones).

Sujet : électroluminescence dans les semi-conducteurs GaN dopé par Er.

Sept. 2001–août 2002 : **Stage Post Doctoral** au laboratoire de computer and molecular simulation of the Chemical Engineering Department at the University of Virginia (USA) sous la direction de Matthew Neurock.

Sujets : Méthodes de calcul quantique en présence de champs électriques : développement et application aux réactions électrochimiques à l'interface eau-métal.

-Etude des POSS (polyhedral oligomeric silsesquioxanes) : structures électroniques, étude par dynamique moléculaire ab initio de leur oxydation radicalaire par l'oxygène atomique.

-Etude de l'interface oxyde-oxyde ZrO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> : étude quantique, développement de potentiels pour la mécanique moléculaire.

Sept. 1998–août 2001 : **Thèse de Doctorat** au Laboratoire de chimie théorique de l'Ecole Normale Supérieure sous la direction de Philippe Sautet.

Discipline : Physico-Chimie Théorique. Mention Très Honorable (pas de mention félicitation du jury à l'ENS Lyon).

Sujet : : *Reconstructions et réactivité catalytique induites par contrainte : une étude quantique des dépôts Pd/Ni(110).*

**Thèse de Doctorat** soutenue publiquement le 16 juillet 2001 à Lyon devant le jury ci-dessous :

*Président* : Alain Fuchs, Professeur, LCP, Université de Paris Sud, Orsay.

*Rapporteurs* : Alain Pastuel, Directeur de recherche CNRS, LPMMC, Grenoble.

Christian Minot, Professeur, LCT, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)

*Examineurs* : Bernard Bigot, Professeur, ENS Lyon, Lyon.

Claude Henry, Directeur de Recherche, CRMC2, Marseille.

Philippe Sautet, Directeur de Recherche CNRS, IRC, Lyon.

Février –sept. 1998 : Stage de **DEA de Sciences de la matière condensée, surfaces et interfaces**

Laboratoire d'émission électronique du département de physique des matériaux équipe sous la direction de Vu Thien Bihn.

Sujet : *Synthèse et stabilisation d'émetteurs électroniques nanoscopiques (nanopointes) en HfC pour l'émission électronique froide.*

Mai – août 1996 : Stage de **Maîtrise des Sciences de la Matière** :

Laboratoire de RMN, au chemistry department de l'Université de Californie **Berkeley (U.S.A.)** sous la direction de A. Pines.

Sujet : *développement de nouveaux moyens d'étude de surface par RMN par utilisation de xénon et d'hélium hyperpolarisés.*

Mai – juillet 1995 : Stage de **Licence des Sciences de la Matière** :

Laboratoire de Chimie de l'Ecole Normale Supérieure / Laboratoire de Chimie du conservatoire National des arts et métiers sous la direction de L. Jullien et B. Valeur.

Sujet : Etude cinétique du transfert d'énergie entre une  $\beta$ -cyclodextrine modifiée et une nitroène lors d'une irradiation lumineuse : exemple de photocatalyseur.

---



---

## Participation à des Congrès et Communications Orales

---

- février 2003 : Conférence du réseau européen Renibel : Erbium in semiconductors (contribution orale)
- juin 2002 : NSF/DMR(Champaign, USA). Poster :Multiscale simulation of the synthesis, assembly and properties of nanostructured organic/inorganic hybrid materials
- Avril 2001 : Troisième réunion des physico-chimistes théoriciens Rhône-Alpes, Lyon  
Poster: Structures contraintes et réactivité dans les surfaces Pd/Ni(110).
- Janv. 2001 : Structure électronique et Matériaux 2001 (SEMAT 2001), à Aspet ( France)  
Contribution orale: *Pd/Ni(110) surfaces: from the structure to the reactivity*
- Nov. 2000 : Groupement de Recherche : ‘ Structure électronique des matériaux catalytiques’, à Lyon  
Contribution orale : *Ethylene hydrogenation on Pd/Ni(110) surfaces.*
- Juin 2000 : 8<sup>th</sup> International Conference on Theoretical aspects of Heterogeneous Catalysis (CAT2000)  
La Colle sur Loup (France)  
Poster: *A theoretical study of Pd/Ni(110) surfaces: influence of the stress on the structure and the phase diagram.*  
Douzième entretiens Jacques Cartier (SIMA2), Lyon  
Poster: *Theoretical study of a Pd deposit on a Ni(110) surface*
- Avril 2000 : Workshop on quantum systems in chemistry and physics , Uppsala (Suède).  
Poster : *A theoretical study of Pd/Ni(110) surfaces stress induced nanostructured deposits vs. Alloying*
- Oct. 1999 : Structure électronique et Matériaux 1999 (SEMAT 99), Strasbourg.  
Contribution orale : *Ab initio study of Pd deposits under epitaxial stress on Ni(110)*

---



---

## Activités d'Enseignement

---

- 2002-2003: Enseignement des TD de mathématiques 2<sup>ième</sup> année de sciences physiques à l'Université d'Exeter (24h)
- 2001-2002: Encadrement d'un étudiant de Master of science et d'un étudiant en Doctorat.
- 1998-2001: **Moniteur** de l'Université Claude Bernard (Lyon I) - (64 heures équivalent T.D. par an). Tuteur Pédagogique Henry Chermette (Professeur Université Lyon I).  
Enseignements assurés :  
DEUG Biologie 1<sup>ière</sup> année (55.5 h de T.D. d'électricité, 13.5 h de T.D. d'optique, 114 h de T.P. d'électricité )  
DEUG Biologie 2<sup>nde</sup> année : T.P. de chimie organique (36 h)  
DEUG Sciences 2<sup>nde</sup> année : T.P. de thermique (8 h)  
Licence de Chimie-physique : T.D. de Spectroscopie moléculaire (32 h)  
Maîtrise physique : T.P. d'énergétique (26 h)  
*Construction* de T.P. pour les licences-maîtrises de chimie :  
Electrolyse de NaCl par un électrolyseur a membrane de Naflon .  
Addition 1-2 vs Addition 1-4 sur une énone : l'effet de l'organométallique.
- 1997-1998 : Examineur oral en classes préparatoires au lycée du Parc:  
(120 h de Kholles dont 80h en PC et 40 en PCSI )
- 2000 et 2001 : Correcteur aux écrits du concours E3A (ENSAM etc...)

---



---

## Responsabilités administratives et collectives

---

- 2002-2003: Organisation des séminaires du groupe semi-conducteurs à l'Université d'Exeter
- 2001-2002: Mise en place d'un cluster de PC (64 processeurs), installation du parallélisme.
- 1998 - 2001: Représentant élu des moniteurs au CIES de Lyon pendant trois années consécutives:  
-membre du comite pédagogique du CIES (évaluation des contenus des formations CIES).  
-délégué du CIES Lyon au forum les TICE organisé en septembre 2000 a Grenoble
- 2000 –2001: Administration temporaire des services de calculs et des ordinateurs du groupe de chimie théorique de l'ENS Lyon (vacances)
- Juin 2000: Participation à l'organisation du congrès CAT2000 organisé en parti par le Laboratoire de Chimie théorique de l'ENS Lyon.