

Élise DUBOUÉ-DIJON

Laboratoire de Biochimie Théorique
Institut de Biologie Physico-Chimique
13 rue Pierre et Marie Curie
75005 Paris



Activités de recherche

- Oct 2018 – **Chargée de recherche CNRS (CRCN)**, LBT, IBPC (Paris, France)
Modélisation moléculaire, ARN, ADN, enzymes, ions, réactivité, QM/MM, calculs d'énergie libre, échantillonnage avancé
- Janv. 2016–Sept 2018 **Post-doctorat**, IOCB, Prague (République Tchèque).
Équipe de Pavel Jungwirth
Champs de force avancés, électrolytes, protéines, dynamique moléculaire ab initio, diffraction de neutrons
- Sept. 2012–2015 **Doctorat**, École Normale Supérieure, Paris (France).
Directeur de thèse Damien Laage
Dynamique d'hydratation de biomolécules, catalyse enzymatique, dynamique moléculaire, modèles théoriques

Financements & Distinctions

- **ANR-JCJC “MUSIRICAT”** (2023-2027)
- Financement **“International Emerging Actions”** du CNRS pour une collaboration avec I. Tunon (U. Valencia, Spain) (2020-2021)
- Sélectionnée pour le **Lindau Nobel Laureate Meeting** (2018)
- **EMBO Long-Term post-doctoral Fellowship** (Jan 2016–2018)
- **Prix de Thèse** “Arconati-Visconti de la Chancellerie des Universités de Paris”
- **Prix de Thèse L’OREAL-UNESCO** For Women In Science

Éducation

- 2024 **Habilitation à Diriger des Recherches (HDR)** en chimie (délivrée par ENS-PSL)
Modeling the interplay between biomolecules and their environment: from ion binding to ribozyme catalysis
- 2012-2015 **Doctorat**, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris (UPMC) and Ecole Normale Supérieure (ENS).
- 2012 **Master de Chimie**, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris (UPMC), **spécialité chimie physique et théorique**, mention TB
- 2009–2012 **École Normale Supérieure (ENS)** (Paris), Majeure Chimie, mineure Physique

Interruptions de carrière

- 2020 : congé maternité (4 mois)
2022–2023 : congé maternité (4 mois)

Communication scientifique

- **23 publications (+ 1 preprint)** dans des revues internationales avec relecture par les pairs > 1200 citations (Google scholar, Avril 2025).
- **26** communications orales dans des conférences à portée nationale ou internationale, dont **8 invitations**.

Organisation de conférences:

- Workshop CECAM “Advanced force fields in multiscale approaches for computational spectroscopy”, **2025**, Paris (France)
- Workshop “LBT days: at the frontier of biomolecular simulation”, **2024**, Paris (France)
- Co-présidence du Gordon Research Seminar **2022** on Water and Aqueous Solutions in Holderness (USA).

Activités d’enseignement et d’encadrement

Encadrement

- 3 encadrements de thèses (1 co-supervision, 2 directions)
- Encadrement de 4 stagiaires de M2
- membre de 5 jurys de thèse

Enseignement

2020 – Enseignement dans diverses formations de PSL

- L1 “Sciences pour un Monde Durable », chimie générale, 20h/an
- L3 ENS « Cinétique et réactivité », tutorat des projets, 8h/an
- M2 ICI “Advanced Molecular Simulation and Enhanced Sampling”, 8h/an
- Examinatrice à l’oral de chimie de l’examen d’entrée à l’ENS (2022 et 2023)

2019 Membre du comité scientifique pour l’**organisation des Olympiades Internationales de Chimie 2019 à Paris. Co-responsable** de la conception et organisation des épreuves écrites.

2013 – 2015 **Monitorat**, Université Pierre et Marie Curie, chimie générale, niveaux L1 et L2. Cours de chimie théorique à la préparation à l’agrégation (ENS/Paris VI).

2010 – 2024 **Membre du comité scientifique** de la préparation française aux Olympiades internationales de chimie. **Responsable** des épreuves pratiques de sélection.

Autres responsabilités et activités

- 2024 – : **Présidente de la subdivision Modélisation & Simulation** de la division de Chimie Physique de la SCF (Société Chimique de France).
- 2024 – : **Assistante de Prévention** du LBT
- 2024 – : Membre du **conseil pédagogique du Master de Chimie** de PSL.
- 2023 – : co-organisation des **séminaires et groupes de discussion** au LBT
- 2022 – : **Correspondante Développement Durable** du LBT
- 2021 – : Membre du **comité DARI CT7** pour l’attribution des heures de calcul sur les calculateurs nationaux ; évaluation des projets.
- **Relecture d’articles** pour JACS, Angewandte, Nature communications, PNAS, J. Phys. Chem. B, J.Phys.Chem.Lett, J. Chem. Phys., Proteins, Biophysical J.
- **Évaluation de projets** pour des agences de financement : ANR, ERC