

**Federica AGOSTINI**  
**Section 15 : Chimie physique, théorique et analytique**  
**Collège B2**

## Curriculum Vitae

### État civil et situation professionnelle

Federica AGOSTINI (42 ans)

Maître de Conférences, Université Paris-Saclay

### Adresse professionnelle

Institut de Chimie Physique (ICP)

Université Paris-Saclay

15 av. Jean Perrin

91405 Orsay

Email : federica.agostini@universite-paris-saclay.fr

### Activité de recherche

Mon activité de recherche se concentre sur l'étude théorique des processus ultrarapides, sur des échelles de temps de la femtoseconde à la picoseconde, induits par l'interaction de système moléculaires isolés ou environnés avec la lumière. Mon expertise est notamment le développement de la théorie et des algorithmes applicables en dynamique moléculaire non-adiabatique afin de modéliser réactions photochimiques et photophysiques qui demandent de prendre en compte les effets couplés des états électroniques fondamentaux et excités.

### Expériences dans conseils et comités d'expertises

- ◆ Membre nommé de l'**editorial board** de Physical Review A : 2025 à présent.
- ◆ Membre élu du **Conseil d'unité** : 2019-2020 et 2025 à présent.
- ◆ Membre (suppléant) élu en binôme du **Conseil du Département** de Chimie de Paris-Saclay : 2021-2024
- ◆ Membre nommé du **comité scientifique** du LabEx PALM – Physique Atomes, Lumière, Matières de Paris-Saclay : 2019-2020
- ◆ Membre nommé du **comité scientifique** du Département PhOM – Physique Ondes et Matière de Paris-Saclay : 2023 à présent
- ◆ Membre nommé du **comité scientifique** du working group A4 de Psi-k – Non-equilibrium dynamics and open systems : 2024 à présent.
- ◆ **Expertise AAP** : ANR en France (1 ou 2 par an) ; DFG en Allemagne (4) ; FWF en Autriche (2) ; ERC Starting Grant (1) ; Chaire d'Alembert de l'Université2 P (1) ; Fondation Jean-Marie Lehn de l'Université de Strasbourg (1).
- ◆ Membre du bureau du **GDR ThéMS** : 2020-2022.
- ◆ Membre de **comités de sélection** MCF : (2) en 2020 et en 2022.
- ◆ Membre de **jury de thèse** : (3) en qualité de rapporteur et (3) en qualité d'examinatrice.

### Activités de diffusion scientifique

- ◆ Construction de la chaîne YouTube ViTAMécaQ « des étudiants et pour les étudiants » créée et entretenue par Y. Justum et M. Desouter-Lecomte pour aider à l'apprentissage de la mécanique quantique en licence.
- ◆ Participation à l'organisation d'ateliers et écoles thématiques (12 dont 7 en France).
- ◆ Participation à l'organisation d'une coopération internationale pour construire une base de données pour le développement et le benchmark de techniques de simulation de dynamique moléculaire non-adiabatique.

### Prix et distinctions

Prix Jeune Chercheuse de la Fédération de Chimie Physique de Paris-Saclay en 2019 et de la Division de Chimie Physique de la Société Chimique de France en 2022.

### Affectations successives dans la recherche

**2016 – présent** : Institut de Chimie Physique de l'Université Paris-Saclay

**2020-2021** : Délégation CNRS à l'Institut de Chimie Physique de l'Université Paris-Saclay

### Publications significatives depuis mon affectation à l'ICP

- ◆ L.-M. Ibele, E. Sangiogo Gil, E. Villaseco Arribas, F. Agostini.\* Simulations of photoinduced processes with the exact factorization: State of the art and perspectives, *PCCP Reviews, Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** (2024) 26693.
- ◆ E. Villaseco Arribas, N. T. Maitra, F. Agostini.\* Nonadiabatic dynamics with classical trajectories: The problem of an initial coherent superposition of electronic states, *J. Chem. Phys.* **160** (2024) 054102.
- ◆ C. Pieroni, E. Sangiogo Gil,\* L. M. Ibele, M. Persico, G. Granucci, F. Agostini.\* Investigating the photodynamics of trans-azobenzene with coupled trajectories, *J. Chem. Theory Comput.* **20** (2024) 580.
- ◆ L.-M. Ibele, E. Sangiogo Gil, B. F. E. Curchod, F. Agostini.\* On the nature of geometric and topological phases in the presence of conical intersections, *J. Phys. Chem. Lett.* **14** (2023) 11625.
- ◆ J. Bowles, S. Jähnigen, R. Vuilleumier, F. Calvo, C. Clavaguéra, F. Agostini.\* Influence of the environment on the infrared spectrum of alanine: an effective modes analysis, *J. Chem. Phys.* **158** (2023) 094305.
- ◆ C. Pieroni, E. Marsili, D. Lauvergnat, F. Agostini.\* Relaxation dynamics through a conical intersection: Quantum and quantum-classical studies, *J. Chem. Phys.* **154** (2021) 034104 – *Special Collection in Honor of Women in Chemical Physics and Physical Chemistry*.
- ◆ F. Talotta, S. Morisset, N. Rougeau, D. Lauvergnat, F. Agostini.\* Spin-orbit interactions in ultrafast molecular processes, *Phys. Rev. Lett.* **124** (2020) 033001.
- ◆ F. Agostini,\* B. F. E. Curchod. Overview: Different flavours of excited-state molecular dynamics, *WIREs Comput. Mol. Sci.* **9** (2019) e1417.