

1 Curriculum Vitæ

Chargé de Recherche au CNRS, section 9

(Mécanique des solides. Matériaux et structures. Biomécanique. Acoustique)

CR1, au CIRIMAT équipe MEMO (2006-)

Ancien élève de l'École Normale Supérieure de Lyon

Agrégé en sciences physiques, option physique

Né le 19 décembre 1975 à Châtenay-Malabry (92)

Qualifié MCF (2004) : #05228151397

Qualifié PR (2017) : #17133151397

CIRIMAT-ENSIACET, 4 Allée Émile Monso, BP 44362

31030 TOULOUSE Cedex 4

UMR 5085 (CNRS, UPS, INPT-ENSIACET), directeur : PR Christophe Laurent

courriel : damien.connetable@ensiacet.fr

1.1 Diplômes

2016 : *Habilitation à diriger des recherches*, INP Toulouse : “Simulations à l'échelle atomique : de la physique du solide à la métallurgie”, soutenue en novembre 2016.

2000-2003 : *Doctorat de Sciences Physiques*, discipline : physique, spécialité : simulation en physique atomique. École doctorale : physique et astrophysique de Lyon ; directeur de thèse : Xavier Blase (DR, Grenoble). Thèse soutenue en novembre 2003, mention très honorable, avec félicitations du jury.

2000 : Magistère de Physique de l'École Normale Supérieure (ENS) de Lyon.

1999-2000 : *Diplôme d'études appliquées (DEA) en Physique Théorique, option physique statistique* à l'ENS de Lyon.

1999 : *Admission à l'agrégation de sciences physiques, option physique*.

1996-1998 : Licence et Maîtrise de sciences physiques, Magistère de l'ENS Lyon.

1996 : *Admission à l'ENS de Lyon*.

1.2 Expériences de recherche

2005-2006 : Post-doctorant (CDD Arcelor) : “*Étude du diagramme de phase Fe-Al-C*”, sous la direction du Pr. P. Maugis, au CIRIMAT (Toulouse) ;

2004-2005 : Post-doctorant (CNRS), “*Implantation ionique dans silicium*” sous la direction de F. Christiano, au LAAS (Toulouse) ;

2003-2004 : ATER à l'Université Claude Bernard Lyon I (UCBL) ;

2000-2003 : Doctorat au ILM (ex LPMCN) : “*Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques et supraconductrices des clathrates de silicium et de carbone dopés*”, sous la direction du Pr. X. Blase ;

2000 : Stage de DEA au LPMCN : “*Étude ab initio des propriétés de surface des Clathrates*”, sous la direction du Pr. X. Blase.

1998 : Stage de Maîtrise au DAPNIA (CEA Saclay) sous la direction de G. Chardin : "*Peut-on définir l'antimatière en Relativité Générale ?*".

1997 : Stage de Licence au LPCML (UCBL) sous la direction de F. Joubert : "*Conversion de fréquence orange-violet par l'ion Néodyme trivalent dans les matériaux massifs ou guides d'ondes*".

1.3 Enseignements

2014- : Vacataire en L1, L2 et L3 à l'Institut Universitaire Champollion à Albi (INUC) en mathématiques (environ 100 hTD/an) ;

2010-2014 : Vacataire en L1 et L2 à l'Institut Universitaire Champollion à Albi (INUC) dans le département ST (50 à 88 hTD/an) ;

2009-2010 : Vacataire à l'ENSIACET (Toulouse) : travaux dirigés de mécanique quantique (20 hTD) ;

2007-2008 : Vacataire à l'INUC en L1 ;

2003-2004 : ATER à l'Université Claude Bernard Lyon I (UCBL) : interventions au CAPES de physique-chimie et au DEUG "sciences de la matière" ;

2000-2003 : Monitorat à l'UCBL, interventions au sein de la préparation à l'Agrégation de sciences physiques de l'ENS de Lyon, de la préparation au CAPES de physique-chimie de l'UCBL et en première année à l'IUT-A de Biologie de la Doua (Villeurbanne) ;

1999-2000 : "Colles" de sciences physiques en classes préparatoires de Mathématiques Supérieures au Lycée Lalande (Bourg en Bresse, Ain).

1.4 Activité éditoriale

Je suis *peer reviewer* dans un très grand nombre de revues scientifiques : chez *Physical Review B*, *Physical Review Letters*, *Carbon*, *Journal Physics Condensed Matter*, *Intermetallics*, *Journal of Solid State Chemistry*, *Journal of Applied Crystallography*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Acta Materialia* ou encore pour *Computational Materials Science*.

Je suis aussi évaluateur de projets pour l'ANR, pour des appels à projet du CNRS, et pour l'"Office of Basic Energy Sciences" des États-Unis, et également évaluateur de projets au méso-centre de calcul CALMIP (Toulouse).

1.5 Publications

41 articles dans des revues internationales avec comité de lecture et **2 proceedings** (voir annexe 2.1).

1.6 Encadrements et activité scientifique

3 doctorants co-encadrés (dont 1 en cours), 4 post-doctorants co-encadrés, 8 étudiants (M1) encadrés et participation à 5 jurys de thèse.

Pilote d'une ANR Blanche "**EcHyDNA**" (2010-2014, "Étude à l'échelle atomique de l'interaction de l'hydrogène avec des défauts dans le nickel et interprétation classique de la dynamique associée"), collaboration avec D. Tanguy (CR, ILM).

1.7 Management

Élu CHSCT à l'Université Paul Sabatier (2010-2014), au CT de l'INP Toulouse (2008-2009) et élu à l'UMR 5085 (2008-2016).

2 Production scientifique

2.1 Articles dans des revues à comité de lecture

Les articles cités ci-dessous sont quasiment tous accessibles depuis ma page web OATAO (jusqu'en 2017). Les liens ci-dessous sont actifs.

- ACL-1) "Tailoring band gap and hardness by intercalation : An ab initio study of $I_8@Si-46$ and related doped clathrates.", *D. Connétable*, V. Timoshevskii, E. Artacho and X. Blase, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 206405. [IF: 8.46]
- ACL-2) "A new class of low compressibility materials : Clathrates of silicon and related materials.", A. San Miguel, P. Mélinon, X. Blase, F. Tournus, *D. Connétable*, E. Reny, S. Yamanaka, J.P. Itié, C. Cros and M. Pouchard, *High Pressure Research* **22** (2002) 539. [IF: 1.10]
- ACL-3) "Carbon cage-like materials as potential low work function metallic compounds : Case of clathrates.", V. Timoshevskii, *D. Connétable* and X. Blase, *Applied Phys. Lett.* **80** (2002) 1385. [IF: 3.14]
- ACL-4) "Pressure stability and low compressibility of intercalated cage like materials : The case of silicon clathrates.", P. San Miguel, P. Mélinon, *D. Connétable*, X. Blase, F. Tournus, E. Reny, S. Yamanaka and J.P. Itié, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 054109. [IF: 3.83]
- ACL-5) "Superconductivity in doped sp^3 semiconductors : The case of the clathrate.", *D. Connétable*, V. Timoshevskii, B. Masenelli, J. Beille, J. Marcus, B. Barbara, A.M. Saitta, G.M. Rignanes, P. Mélinon, S. Yamanaka and X. Blase, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 247001. [IF: 8.46]
- ACL-6) "Guest displacement in silicon clathrates.", F. Tournus, B. Masenelli, P. Mélinon, *D. Connétable*, X. Blase, A.M. Flank, P. Lagarde, C. Cros and M. Pouchard, *Phys. Rev. B* **69** (2004) 035208. [IF: 3.83]
- ACL-7) "Electronic and super conducting properties of silicon and carbon clathrates.", *D. Connétable* and X. Blase, *Applied Surface Science* **226** (2004) 289. [IF: 3.38]
- ACL-8) "The role of the dopant in the superconductivity of diamond.", X. Blase, C. Adessi and *D. Connétable*, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 237004. [IF: 8.46]
- ACL-9) "Room temperature Peierls distortion in small diameter nanotubes.", *D. Connétable*, G.M. Rignagnese, J.C. Charlier and X. Blase, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 015503. [IF: 8.46]
- ACL-10) "Optimisation of the parameters of an extended defect model applied to non-amorphizing implants.", E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani and *D. Connétable*, *Materials Science and Engineering B* **124-125** (2005) 397-400. [IF: 2.33]
- ACL-11) "Structural and electronic properties of p-doped silicon clathrates.", *D. Connétable*, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 125202. [IF: 3.83]
- ACL-12) "First-principles calculations of the κ - Fe_3AlC perovskite, and iron-aluminium intermetallics.", *D. Connétable* and P. Maugis, *Intermetallics* **16** (2008) 345-352. [IF: 2.54]

- ACL-13) "A Calphad assessment of Al-C-Fe system with the kappa carbide modelled as an ordered form of the fcc phase.", *D. Connétable*, P. Maugis, J. Lacaze and B. Sundman, *Calphad Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **32** (2008) 361-370. [IF: 2.13]
- ACL-14) "Atomic-scale study of low-temperature equilibria in iron-rich Al-C-Fe.", R. Besson, A. Legris, *D. Connétable* and P. Maugis, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 014204. [IF: 3.83]
- ACL-15) "First-principles study of the structural, electronic, vibrational, and elastic properties of orthorhombic NiSi.", *D. Connétable* and O. Thomas, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 094101. [IF: 3.83]
- ACL-16) "Calphad-type assessment of the Fe-Nb-Ni ternary system.", M. Mathon, *D. Connétable*, B. Sundman and J. Lacaze, *Calphad Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **33** (2009) 136-161. [IF: 2.13]
- ACL-17) "Lattice instabilities in hexagonal NiSi, NiAs prototype structure.", *D. Connétable* and O. Thomas, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 075213. [IF: 3.83]
- ACL-18) "First-principles calculations of carbon clathrates : a comparison with silicon and germanium clathrates.", *D. Connétable*, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 075209. [IF: 3.83]
- ACL-19) "First-principle study of nickel-silicides ordered phases.", *D. Connétable* and O. Thomas, *Journal of Alloys and Compounds* **509** (2011) 2639. [IF: 3.13]
- ACL-20) "Effect of pentagons in sp^3 systems : the case of chiral structures.", *D. Connétable*, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 035206. [IF: 3.83]
- ACL-21) "First-principles study of the migration process of hydrogen and vacancy in titanium.", *D. Connétable*, J. Huez, E. Andrieu and C. Mijoule, *J. Phys.: Condens. Matter* **23** (2011) 405401. [IF: 2.21]
- ACL-22) "First-principle calculations of Fe-Nb-Ni-Cr systems.", *D. Connétable*, M. Mathon and J. Lacaze, *Calphad Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry* **35** (2011) 588-593. [IF: 2.13]
- ACL-23) "Diffusion and segregation of Niobium in fcc-nickel.", *D. Connétable*, B. Ter-Ovanesian and E. Andrieu, *J. Phys.: Condens. Matter* **24** (2012) 095010. [IF: 2.21]
- ACL-24) "Study of multivacancies in alpha Fe.", D. Kandaskalov, C. Mijoule and *D. Connétable*, *Journal of Nuclear Materials* **441** (2013) 168–177. [IF: 2.20]
- ACL-25) "Comparative study of metallic silicide-germanium orthorhombic MnP systems.", *D. Connétable* and O. Thomas, *J. Phys.: Condens. Matter* **25** (2013) 355403. [IF: 2.21]
- ACL-26) "First-principles study of sulfur multi-absorption in nickel and its segregation to the Ni(100) and Ni(111) surfaces.", D. Kandaskalov, D. Monceau, C. Mijoule and *D. Connétable*, *Surface Science* **617** (2013) 15–21. [IF: 1.93]
- ACL-27) "Atomistic modelling segregation of hydrogen to the $\Sigma 9\{221\}[110]$ symmetric tilt grain boundary in Al.", X. Shen, *D. Connétable* and D. Tanguy, *Philosophical Magazine* **94** (2014) 2247-2261. [IF: 1.63]
- ACL-28) "DFT study of the solubility of hydrogen and carbon in Ni_3Nb-D0_a and Ni_3Nb-D0_{22} systems.", *D. Connétable*, F. Galliano, G. Odemer, C. Blanc and E. Andrieu, *Journal of Alloys and Compounds*, **610** (2014) 347-351. [IF: 3.13]

- ACL-29) “Segregation of hydrogen on defects in fcc nickel : the case of self-interstitials and cavities.”, *D. Connétable*, Y. Wang and D. Tanguy, *Journal of Alloys and Compounds* **614** (2014) 211-220. [IF: 3.13]
- ACL-30) “Effect of trapping and temperature on the hydrogen embrittlement susceptibility of alloy 718.”, F. Galliano, E. Andrieu, C. Blanc, J.-M. Cloué, *D. Connétable* and G. Odemer, *Materials Science and Engineering A* **611** (2014) 370–382. [IF: 2.65]
- ACL-31) “Stability of vacancy-hydrogen clusters in nickel from first principles calculations.”, D. Tanguy, Y. Wang and *D. Connétable*, *Acta Materialia* **78** (2014) 135-143. [IF: 5.30]
- ACL-32) “First-principles nickel database : energetics of impurities and defects.”, *D. Connétable*, E. Andrieu and D. Monceau, *Computational Materials Science* **101** (2015) 77-87. [IF: 2.29]
- ACL-33) “Hydrogen influence on diffusion in nickel from first-principles calculations.”, Y. Wang, *D. Connétable* and D. Tanguy, *Phys. Rev. B* **91** (2015) 094106. [IF: 3.83]
- ACL-34) “Influence of trap connectivity on H diffusion : Vacancy trapping.”, Y. Wang, *D. Connétable* and D. Tanguy, *Acta Materialia* **103** (2016) 334-340. [IF: 5.30]
- ACL-35) “Dislocation/hydrogen interaction mechanisms in hydrided nanocrystalline palladium films.”, B. Amin-Ahmadi, *D. Connétable*, M. Fivel, D. Tanguy, R. Delmelle, S. Turner, T. Pardoën, J. Proost, D. Schryvers and H. Idrissi, *Acta Materialia* **111** (2016) 253-261. [IF: 5.30]
- ACL-36) “First-principles study of transition metal carbides”, *D. Connétable*, *Materials Research Express* **3** (2016) 126502. [IF: 1.07]
- ACL-37) “Impact of the clusterization on the solubility of oxygen and vacancy concentration in nickel : A multi-scale approach.”, *D. Connétable*, M. David, A. Prillieux, D. Young and D. Monceau, *J. Alloys and Compounds* **708** (2017) 1063-1072. [IF: 3.13]
- ACL-38) “Diffusion of interstitials in metallic systems, illustration of a complex study case : aluminum.”, M. David and *D. Connétable*, *J. Phys.: Condensed Matter* **29** (2017) 455703. [IF: 2.21]
- ACL-39) “Study of vacancy-(H,B,C,N,O) clusters in Al using DFT and statistical approaches : consequences on solubility of solute.”, *D. Connétable* and M. David, *J. Alloys and Compounds* **748** (2018) 12-25. [IF: 3.13]
- ACL-40) “Stress-controlled carbon diffusion channeling in bcc- iron : a mean-field theory.”, P. Maugis, S. Chentouf and *D. Connétable*, *J. Alloys and Compounds* **769** (2018) 1121-1131. [IF: 3.13]
- ACL-41) “Diffusion of interstitial species (H and O atoms) in fcc systems (Al, Cu, Co, Ni and Pd) : contribution of first and second order transition states.”, *D. Connétable* and M. David, *J. Alloys and Compounds* **772** (2018) 280-287. [IF: 3.13]

2.2 Proceedings

- Proc-1) “Hydrogen enhanced dislocation emission at a crack tip.”, Y. Wang, D. Tanguy and *D. Connétable*, *International Hydrogen Conference (IHC 2012)*.

Proc-2) "Effect of Antimony on primary graphite growth in cast iron– from ab initio calculations to experimental observations.", I. Bleskov, K. Theuwissen, *D. Connétable* and J. Lacaze, The Minerals, Metals and Materials Society, TMS (2013).

2.3 Manuscrit d'habilitation à dirigé des recherches :

"Simulations à l'échelle atomique de la physique du solide à la métallurgie", soutenue le 17 novembre 2016.

Membres du jury : Pr. E. Andrieu (CIRIMAT, Toulouse), Pr. L. Calmels (CEMES, Toulouse, rapporteur), Pr. J.-M. Joubert (ICMPE, Paris-Est), Pr. A. Legris (UMET, Lille, rapporteur), Pr. A. Maignan (CRISMAT, Caen) et Pr. D. Monceau (CIRIMAT, Toulouse)

2.4 Articles de vulgarisation

Vulg-1) "Simulations à l'échelle atomique en métallurgie", *D. Connétable* (2012), Magazine scientifique n°12 de l'Université Paul Sabatier (Toulouse, France).

2.5 Présentations Orales

- Or-1) *D. Connétable*, X. Blase, "Propriétés structurales, électroniques et supraconductrices des clathrates", GDR-DFT (CNRS) Toulon Février 2004.
- Or-2) *D. Connétable*, X. Blase, "Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes", Laboratoire de Physique du Solide, Toulouse (22 Mars 2005).
- Or-3) *D. Connétable*, "Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes", Laboratoire des Colloïdes, Verres et Nanomatériaux, Montpellier (18 Avril 2005).
- Or-4) *D. Connétable*, "Des clathrates aux nanotubes de carbone", CIRIMAT-ensiacet, Toulouse (Janvier 2006).
- Or-5) *D. Connétable*, "Ground state properties and supraconductivity of carbon and silicon clathrates", EPFL, (2013, Novembre, Suisse).
- Or-6) *D. Connétable*, "Fragilisation par l'hydrogène des alliages métalliques", HCERES, CIRIMAT (20 novembre 2014).
- Or-7) *D. Connétable*, Y. Wang, D. Tanguy, "First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel", GDR ModMat, Lyon (8 janvier 2015).
- Or-8) *D. Connétable*, Y. Wang, D. Tanguy, "First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel", TouCam, Toulouse (5 novembre 2015).
- Or-9) *D. Connétable*, "First-principles calculations for metallurgy", SAFRAN, Saclay (6 septembre 2016).
- Or-10) *D. Connétable*, M. David, "Effect of stress on interstitial diffusivity and solubility" TouCam, Toulouse (9 novembre 2017).
- Or-11) *D. Connétable*, M. David, "Diffusion des interstitiels dans les métaux", ICMPE, (5 février 2018).

- Or-12) *D. Connétable*, M. David, "Diffusion des interstitiels dans les métaux", Atelier "Exploration du Paysage Énergétique : Méthodes & Applications" (Mai 2018).
- Or-13) *D. Connétable*, P. Maugis, "Effets des contraintes sur la solubilité et la diffusion des interstitiels et des lacunes dans les métaux", Matériaux 2018 (Strasbourg).

2.6 Liste des posters

- Poster-1) "Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates", Workshop, Berlin (Juillet 2001).
- Poster-2) 'Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates' GDR-DFT : Dinard (Mars 2002).
- Poster-3) "Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates GDR-DFT : Cap d'Agde (Mai 2005).
- Poster-4) "Étude ab initio des propriétés de composés de Fe-Al-C", D. Connétable, P. Maugis, Journées de la Matière Condensée 2006.
- Poster-5) "Étude des défauts ponctuels dans la pérovskite Fe_3AlC_x ", R. Besson, D. Connétable, A. Legris, P. Maugis, J. Morillo, Journées de la Matière Condensée 2006.
- Poster-6) "Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes", D. Connétable, X. Blase, GDR-DFT, 2007.
- Poster-7) "DFT calculations and Calphad assessment of the Fe-Al-C system", D. Connétable, B. Sundman, P. Maugis, Multiscale Approach to Alloys, Stockholm 2007.
- Poster-8) "Rôle des multilacunes dans les processus de diffusion : application au nickel", D. Connétable, C. Mijoule, et E.-H. Megchiche, GDR-DFT++ 2009.
- Poster-9) "Calphad-type assessment of the Cr-Fe-Nb-Ni quaternary system", D. Connétable, M. Mathon, J. Lacaze et B. Sundman, GDR-DFT++ 2009.
- Poster-10) "Theoretical DFT study of point defects of sulphur atoms in the γ -Nickel", D. Kandaskalov, D. Connétable, C. Mijoule, D. Monceau, GDR-Co-DFT 2011 (Strasbourg).
- Poster-11) "First-principles study of defects in hcp-titanium : the case of vacancies and hydrogen", D. Connétable, J. Huez, E. Andrieu, and C. Mijoule, Titanium 2011 (Juillet, Chine).
- Poster-12) "First-principles study of defects in hcp-titanium : the case of vacancies and hydrogen", D. Connétable, J. Huez, E. Andrieu, and C. Mijoule, DIMAT 2011 (Dijon).
- Poster-13) "First-principles study of defects in hcp-titanium : the case of vacancies and hydrogen", D. Connétable, J. Huez, E. Andrieu, and C. Mijoule, GDR-Co-DFT 2011 (Strasbourg).
- Poster-14) "Theoretical DFT study of point defects of sulphur atoms in the γ -Nickel", D. Kandaskalov, D. Connétable, C. Mijoule, D. Monceau, Congrès DFT 2011 (Grèce, Athènes).
- Poster-15) "Hydrogen Enhanced Dislocation Emission at a Crack Tip", Y. Wang, D. Connétable, D. Tanguy, ICAMM 2012 and VASP workshop, June 11-16, 2012, Institut des Matériaux Jean Rouxel (Nante, France).

- Poster-16) "Multi-scale study of the influence of impurities on the oxygen solubility in nickel", M. David, D. Connétable, D. Monceau, ICAMM International Conference on Advanced Materials Modelling (Septembre 2016, Rennes France).
- Poster-17) "Multi-scale study of the influence of impurities on the oxygen solubility in nickel", M. David, D. Connétable, D. Monceau, MMM2016 (Dijon, Octobre 2016).
- Poster-18) "Segregation anisotropy in Ni grain boundaries : consequences on embrittlement", I. Braems, A. Karpinska, D. Connétable and P. Ganster, Journées Surfaces et interfaces (Rennes, 2017).
- Poster-19) M. David, D. Monceau, D. Connétable, "Concentration des défauts ponctuels dans le nickel", Atelier "paysage énergétique" (LAAS, juin 2018).
- Poster-20) D. Connétable, M. David, "Diffusion of interstitial species contribution of first- and second-order transition states", Atelier "paysage énergétique" (LAAS, juin 2018).

2.7 Encadrements de stages, post doctorants

1. Thèses :

- These-1) D. Kandaskalov (2009-2012, soutenue en janvier 2013), co-direction Pr. C. Mijoule et D. Connétable : "Étude théorique de défauts ponctuels et complexes dans les métaux : application au fer-cc et nickel-cfc."
- These-2) Y. Wang (2011-2014, soutenue en décembre 2014), financement ANR blanche *EcHyDNA*, co-direction D. Tanguy, D. Connétable et E. Andrieu : "Étude ab initio des interactions hydrogènes-défauts dans les métaux cfc : cas des lacunes et des dislocations en pointe de fissure" ;
- These-3) M. David (2015-2018, financement ministériel), co-direction D. Connétable et D. Monceau : "Approche multi-échelles des effets des impuretés et des défauts sur la solubilité et la diffusion de l'oxygène dans le nickel et les alliages Ni-Cr" ;