

Table des matières

1	Production scientifique	1
1.1	Articles dans des revues à comité de lecture	1
1.2	Proceedings	4
1.3	Manuscrit d'habilitation à diriger des recherches	4
1.4	Manuscrit de thèse	5
1.5	Articles de vulgarisation	5
1.6	Présentations Orales personnellement réalisées	6
1.7	Conférences : congrès divers	6
1.8	Liste des posters	8

1 Production scientifique

1.1 Articles dans des revues à comité de lecture

Les 57 articles cités ci-dessous sont presque tous accessibles depuis ma page [HAL](#) ou sur ma page web [OATAO](#), qui est hébergée par l'archive ouverte de l'Université de Toulouse. Mes publications sont triées ici par ordre chronologique.

- ACL-1) "Tailoring band gap and hardness by intercalation : An ab initio study of $\text{I}_8\text{@Si-46}$ and related doped clathrates.", **D. Connétable**, V. Timoshevskii, E. Artacho and X. Blase, [Phys. Rev. Lett.](#) **87** (2001) 206405. [IF: 8.385]
- 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: 1.925]
- ACL-3) "Carbon cage-like materials as potential low work function metallic compounds : Case of clathrates.", V. Timoshevskii, **D. Connétable** and X. Blase, [Appl. Phys. Lett.](#) **80** (2002) 1385. [IF: 3.495]
- 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: 3.575]
- 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: 8.385]
- 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: 3.575]
- ACL-7) "Electronic and superconducting properties of silicon and carbon clathrates.", **D. Connétable** and X. Blase, [Applied Surface Science](#) **226** (2004) 289. [IF: 4.439]
- 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: 8.385]
- ACL-9) "Room temperature Peierls distortion in small diameter nanotubes.", **D. Connétable**, G.M. Rignanes, J.C. Charlier and X. Blase, [Phys. Rev. Lett.](#) **94** (2005) 015503. [IF: 8.385]
- 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: 3.414]
- ACL-11) "Structural and electronic properties of p-doped silicon clathrates.", **D. Connétable**, [Phys. Rev. B](#) **75** (2007) 125202. [IF: 3.575]
- ACL-12) "First-principles calculations of the $\kappa\text{-Fe}_3\text{AlC}$ perovskite, and iron-aluminium intermetallics.", **D. Connétable** and P. Maugis, [Intermetallics](#) **16** (2008) 345-352. [IF: 3.353]
- 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: 1.433]
- 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: 3.575]

- 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: 3.575]
- 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: 1.433]
- ACL-17) “Lattice instabilities in hexagonal NiSi, NiAs prototype structure.”, **D. Connétable** and O. Thomas, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 075213. [IF: 3.575]
- ACL-18) “First-principles calculations of carbon clathrates : a comparison with silicon and germanium clathrates.”, **D. Connétable**, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 075209. [IF: 3.575]
- ACL-19) “First-principle study of nickel-siliciures ordered phases.”, **D. Connétable** and O. Thomas, *Journal of Alloys and Compounds* **509** (2011) 2639. [IF: 4.650]
- ACL-20) “Effect of pentagons in sp^3 systems : the case of chiral structures.”, **D. Connétable**, *Phys. Rev. B* **83** (2011) 035206. [IF: 3.575]
- 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: 2.711]
- 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: 1.433]
- ACL-23) “Diffusion and segregation of Niobium in fcc-nickel.”, **D. Connétable**, B. Ter-Ovanessian and E. Andrieu, *J. Phys.: Condens. Matter* **24** (2012) 095010. [IF: 2.711]
- ACL-24) “Study of multivacancies in alpha Fe.”, D. Kandaskalov, C. Mijoule and **D. Connétable**, *Journal of Nuclear Materials* **441** (2013) 168–177. [IF: 2.547]
- ACL-25) “Comparative study of metallic silicide-germanium orthorhombic MnP systems.”, **D. Connétable** and O. Thomas, *J. Phys.: Condens. Matter* **25** (2013) 355403. [IF: 2.711]
- 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: 1.870]
- 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: 1.855]
- ACL-28) “DFT study of the solubility of hydrogen and carbon in $\text{Ni}_3\text{Nb-D0}_a$ and $\text{Ni}_3\text{Nb-D0}_{22}$ systems.”, **D. Connétable**, F. Galliano, G. Odemer, C. Blanc and E. Andrieu, *Journal of Alloys and Compounds*, **610** (2014) 347-351. [IF: 4.650]
- 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: 4.650]
- 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: 3.414]
- 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: 7.656]

- 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: 2.644]
- 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: 3.575]
- 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: 7.656]
- 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. Pardoen, J. Proost, D. Schryvers and H. Idrissi, *Acta Materialia* **111** (2016) 253-261. [IF: 7.656]
- ACL-36) "First-principles study of transition metal carbides", **D. Connétable**, *Materials Research Express* **3** (2016) 126502. [IF: 1.151]
- 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, *Journal of Alloys and Compounds* **708** (2017) 1063-1072. [IF: 4.650]
- 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: 2.711]
- 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, *Journal of Alloys and Compounds* **748** (2018) 12-25. [IF: 4.650]
- ACL-40) "Stress-controlled carbon diffusion channeling in bcc-iron : a mean-field theory.", P. Maugis, S. Chentouf and **D. Connétable**, *Journal of Alloys and Compounds* **769** (2018) 1121-1131. [IF: 4.650]
- 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, *Journal of Alloys and Compounds* **772** (2019) 280-287. [IF: 4.650]
- ACL-42) "Site stability and diffusion of hydrogen under localized shear in aluminum.", Y. Wang, **D. Connétable** and D. Tanguy, *Philosophical Magazine* **99** (2019) 1184-1205. [IF: 1.855]
- ACL-43) "Theoretical study on hydrogen solubility and diffusivity in the γ -TiAl $L1_0$ structure.", **D. Connétable**, *International Journal of Hydrogen Energy* **44** (2019) 12215-12227. [IF: 4.082]
- ACL-44) "Elastic properties of the α' martensitic phase of the Ti-6Al-4V alloys obtained by additive manufacturing.", N. Dumonet, **D. Connétable**, B. Viguier and B. Malard, *Scripta Materialia* **167** (2019) 115-119. [IF: 5.079]
- ACL-45) "Effect of sub-surface hydrogen on crack tip plasticity in aluminium", Y. Wang, **D. Connétable** and D. Tanguy, *Philosophical Magazine* **99** (2019) 2355-2375. [IF: 1.855]
- ACL-46) "Impurity effects and morphological instabilities during growth of spheroidal graphite in cast irons.", J. Lacaze, **D. Connétable** and M.J. Castro de Roman, *Materialia* **8** (2019) 100471. [IF: 2.76]
- ACL-47) "Theoretical study of the insertion and diffusivity of hydrogen in the $\text{Ti}_3\text{Al}-D0_{19}$ system : comparison with the Ti-hcp and TiAl- $L1_0$ systems." **D. Connétable**, *International Journal of Hydrogen Energy* **44** (2019) 32307-32322. [IF: 4.082]

- ACL-48) "Nickel isotope fractionation during metal-silicate differentiation of planetesimals : experimental petrology and ab initio calculations.", J. Guignard, G. Quitté, M. Méheut, M.J. Toplis, F. Poitrasson, **D. Connétable** and M. Roskosz, *Geochimica et Cosmochimica Acta* **269** (2020) 238-256. [IF: 4.690]
- ACL-49) "Theoretical study of the oxygen insertion and diffusivity in the γ -TiAl $L1_0$ system." **D. Connétable**, A. Prillieux, C. Thenot and J.P. Monchoux, *Journal Physics: Condensed matter* **32** (2020) 175702. [IF: 2.711]
- ACL-50) "Insertion and diffusion of interstitial atoms (H, C, N and O) in nickel.", M. David, A. Prillieux, D. Monceau and **D. Connétable**, *Journal of Alloys and Compounds* **822** (2020) 153555. [IF: 4.650]
- ACL-51) "Effect of stress on vacancy formation and diffusion in fcc systems : comparison between DFT calculations and elasticity theory.", **D. Connétable** and P. Maugis, *Acta Materialia* **200** (2020) 869-882. [IF: 7.656]
- ACL-52) "Stability of Zener order in martensite : an atomistic evidence", P. Maugis, **D. Connétable** and P. Eyméoud, *Scripta Materialia* **194** (2021) 113632. [IF: 5.079]
- ACL-53) "Hydrogen enhanced vacancy concentration at the Σ_5 -{210}[001] symmetric tilt grain boundary in Ni.", X.J. Shen, **D. Connétable**, E. Andrieu and D. Tanguy, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **29** (2021) 055004. [IF: 1.874]
- ACL-54) "Diffusion anisotropy of interstitials in stressed fcc alloys : the case of hydrogen.", **D. Connétable** and P. Maugis, *J. Alloys and Compounds* **879** (2021) 160425. [IF: 4.650]
- ACL-55) "Insertion and diffusion of N and C in γ -TiAl : theoretical study and comparison with O.", E. Epifano, G. Hug and **D. Connétable**, *Physica B: Physics of Condensed Matter* **624** (2022) 413370. [IF: 1.901]
- ACL-56) "Interactions of oxygen with intrinsic defects in $L1_0$ γ -TiAl in presence of substitutional solutes : influence on diffusion kinetics.", C. Thenot, R. Besson, P. Sallot, J.P. Monchoux and **D. Connétable**, *Computational Materials Science* **201** (2022) 110933. [IF: 2.644]
- ACL-57) "Investigation of mechanical properties of $Mn_{15}Si_{26}$ via EBSD-nanoindentation coupling and *ab-initio* calculation.", M. Mejri, B. Malard Y. Thimont, **D. Connétable**, P. Floquet, R. Laloo, A. Proietti, and C. Estournès, *J. Alloys and Compounds* **900** (2022) 163458. [IF: 4.650]

1.2 Proceedings

- Proc-1) "Hydrogen enhanced dislocation emission at a crack tip.", Y. Wang, D. Tanguy and **D. Connétable**, *International Hydrogen Conference (IHC 2012): Hydrogen-Materials Interactions*. Ed. B. P. Somerday, and P. Sofronis. ASME Press, 2014.
- 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).
- Proc-3) "Cinétique d'évolutions microstructurales dans l'alliage de titane Ti6Al4V élaboré par fabrication additive", Y. Lakroune, **D. Connétable**, J. Hugues, P. Hermantier, F. Prima and M. Dehmas, *Conférence Manufacturing 21 (Angers 2021)*

1.3 Manuscrit d'habilitation à diriger 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)

1.4 Manuscrit de thèse

“Étude *ab initio* des propriétés structurales, électroniques et supraconductrices des clathrates de silicium et de carbone dopés”, soutenue en novembre 2003.

Membres du jury : Pr. M. Broyer (Université Claude Bernard Lyon I), DR. C. Delerue (IEMN, Lille, rapporteur), Pr. J.-P. Gaspard (ULG, Université de Liège, rapporteur), Pr. F. Mauri (Université Pierre et Marie Curie, Paris), DR. P. Mélinon (Université Claude Bernard Lyon I) et DR. X. Blase (Université Claude Bernard Lyon I, directeur de thèse).

1.5 Articles de vulgarisation

Vulg-1) “Simulations à l’échelle atomique en métallurgie”, ***D. Connétable*** (2011), [Magasine scientifique](#) n°23 de l’Université Paul Sabatier (Toulouse, France).

1.6 Présentations Orales personnellement réalisées

- Or-N-1) **D. Connétable**, X. Blase, “*Propriétés structurales, électroniques et supraconductrices des clathrates*”, GDR-DFT (février 2004, Toulon).
- Or-N-2) **D. Connétable**, Y. Wang, D. Tanguy, “*First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel*”, GDR ModMat (janvier 2015, Lyon).
- Or-N-3) **D. Connétable**, Y. Wang, D. Tanguy, “*First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel*”, TouCam (novembre 2015, Toulouse).
- Or-N-4) **D. Connétable**, M. David, “*Effect of stress on interstitial diffusivity and solubility*”, TouCam (novembre 2017, Toulouse).
- Or-N-5) **D. Connétable**, M. David, “*Diffusion des interstitiels dans les métaux*”, Atelier “Exploration du Paysage Énergétique : Méthodes & Applications” (mai 2018, Toulouse).
- Or-N-6) **D. Connétable**, P. Maugis, “*Effets des contraintes sur la solubilité et la diffusion des interstitiels et des lacunes dans les métaux*”, Matériaux (novembre 2018, Strasbourg).
- Or-N-7) **D. Connétable**, “*Diffusion dans les métaux*”, aux journées “La métallurgie, quel avenir !” (avril 2019, Nancy).
- Or-N-8) **D. Connétable**, “*Solubilité et diffusivité des interstitiels : apport des simulations ab initio*”, ThermaHT7 (janvier 2020, Toulouse).
- Or-N-9) **D. Connétable**, “*Effect of stress on the interstitial solubility and diffusivity*”, GDR ConCord (juillet 2021).
- Or-Int-1) **D. Connétable**, “*Ground state properties and superconductivity of carbon and silicon clathrates*”, EPFL, (novembre 2013, Suisse).
- Or-L-1) **D. Connétable**, X. Blase, “*Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes*”, Laboratoire de Physique du Solide (mars 2005, Toulouse).
- Or-L-2) **D. Connétable**, “*Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes*”, Laboratoire des Colloïdes, Verres et Nanomatériaux (avril 2005, Montpellier).
- Or-L-3) **D. Connétable**, “*Des clathrates aux nanotubes de carbone*”, CIRIMAT-ensiacet (janvier 2006, Toulouse).
- Or-L-4) **D. Connétable**, “*Fragilisation par l’hydrogène des alliages métalliques*”, HCERES, CIRIMAT (novembre 2014, Toulouse).
- Or-L-5) **D. Connétable**, “*First-principles calculations for metallurgy*”, SAFRAN (septembre 2016, Saclay).
- Or-L-6) **D. Connétable**, M. David, “*Diffusion des interstitiels dans les métaux*”, ICMPE, (février 2018, Paris).
- Or-L-7) **D. Connétable**, “*Solubilité et diffusivité des interstitiels : apport des simulation ab initio*”, ONERA (septembre 2019, Châtillon).
- Or-L-8) **D. Connétable**, “*Influence des contraintes sur la diffusion et la solubilité des interstitiels dans les cfc*”, GDR ConCord (juillet 2021, La Rochelle).

1.7 Conférences : congrès divers

Les personnes soulignées sont celles ayant présentées.

- Conf-1) X. Blase, **D. Connétable** : “Structural, electronic and superconducting properties of clathrates”, Nanotec’03 “Nanotechnology in carbon and related materials”, Brighton, UK (août 2003).

- Conf-2) X. Blase, **D. Connétable** : “From plastic to superconducting properties of cage-like clathrates”, TAMC4 "Theory of atomic and molecular clusters", Toulouse (avril 2004).
- Conf-3) X. Blase, **D. Connétable** : “Plastic to superconducting properties of cage-like materials”, Atelier "Progress in Ab Initio Computational Methods for Material Sciences", Château du CNRS, Gif-sur-Yvette, France (janvier 2004).
- Conf-4) X. Blase, **D. Connétable** : “Plastic to superconducting properties of silicon and carbon clathrates”, Material Research Society Fall meeting, Symposium GG, Boston, (novembre-décembre 2004).
- Conf-5) X. Blase, **D. Connétable** : “Plastic to superconducting properties of covalent clathrates”, 12th International Workshop on Computational Physics and Material Sciences, International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy (janvier 2005).
- Conf-6) X. Blase, **D. Connétable** : “Ab initio approach to conductivity and superconductivity in nanotubes”, ElecMol’05, Grenoble, 19-21 décembre 2005 (présentations de X. Blase, encadrant de thèse).
- Conf-7) D. Kandaskalov, C. Mijoule, **D. Connétable** : “Theoretical DFT study of mono-, di- and trivacancies formation in α -iron.”, 2011.
- Conf-8) I. Bleskov, **D. Connétable**, J. Lacaze, “Effect of dopant species on primary graphite growth – Characterization and simulation”, EUROMAT 2011, Sessions : Eutectic/Intermetallic structures.
- Conf-9) I. Bleskov, **D. Connétable**, J. Lacaze, “Effect of various elements on primary graphite growth in cast irons – Characterization and first-principles simulation”, MCWASP 2012.
- Conf-10) D. Kandaskalov, **D. Connétable**, C. Mijoule : “First-principles calculation V_n in α -iron” (mai 2011, Toulouse).
- Conf-11) Y. Wang, D. Tanguy, **D. Connétable**, “Hydrogen Enhanced Dislocation Emission at a Crack Tip”, DPG Spring Meeting 2013, 13–14 March 2013, University of Regensburg (Regensburg, Germany)
- Conf-12) Y. Wang, **D. Connétable**, D. Tanguy, “Hydrogen Enhanced Dislocation Emission at a Crack Tip”, Journées "Jeunes Chercheurs 2013", 26 et 27 juin 2013, Résidence-Club Lafayette - La Rochelle, France.
- Conf-13) Y. Wang, **D. Connétable**, D. Tanguy, “Hydrogen enhanced diffusion in nickel from first-principles calculations”, Journée de la Matière Condensée 15 (août 2014, Paris).
- Conf-14) M. David, D. Monceau, **D. Connétable**, “Approche multi-échelle de l’influence des impuretés sur la solubilité de l’oxygène dans le nickel”, GDR ModMAT (janvier 2017, Rouen).
- Conf-15) M. David, D. Monceau, **D. Connétable**, “Diffusion des atomes en insertion dans les systèmes cubiques à faces centrées : cas du nickel”, 7e journées de dynamique du sud-ouest (juin 2017, Montpellier).
- Conf-16) M. David, D. Monceau, **D. Connétable**, “Étude multi-échelle des défauts ponctuels dans le nickel (de l’étude DFT à la concentration)”, (journée thermo du CIRIMAT, juin 2018).
- Conf-17) M. David, D. Monceau, **D. Connétable**, “Approche multi-échelle des défauts ponctuels dans le nickel”, Matériaux (Novembre 2018).
- Conf-18) A. Riot, F. Virot, **D. Connétable**, “La rétention du tritium dans l’installation ITER : du suivi de l’inventaire à l’évaluation du terme source en situations accidentelles”, Journée des Doctorants CIRIMAT (octobre 2020).

- Conf-19) Y. Lakroune, M. Dehmas, **D. Connétable**, “Apport de la résistivité électrique et la diffraction des rayons x à haute énergie sur l’étude des cinétiques d’évolutions microstructurales et chimiques dans des matériaux métalliques : Application au Titane pur (Ti) et à ces alliages (Ti-Al) et (Ti-6Al-4V”, Journée des Doctorants CIRIMAT (octobre 2020).
- Conf-20) C. Thenot, **D. Connétable**, P. Sallot, J.-P. Monchoux, “TiAl embrittlement at high temperatures”, Journée des Doctorants CIRIMAT (octobre 2020).
- Conf-21) C. Thenot, **D. Connétable**, P. Sallot, J.-P. Monchoux, “TiAl embrittlement at high temperatures”, MRS2020 (Boston, décembre 2020).
- Conf-22) A. Riot, F. Viot, **D. Connétable**, “La rétention du tritium dans l’installation ITER : du suivi de l’inventaire à l’évaluation du terme source en situations accidentelles”, Journées des Doctorants IRSN (avril 2021).
- Conf-23) C. Thenot, **D. Connétable**, P. Sallot, J.-P. Monchoux, “Fragilisation à hautes températures de l’alliage TiAl”, Plasticité 2020 (avril 2021).
- Conf-24) A. Riot, F. Viot, **D. Connétable**, “La rétention du tritium dans l’installation ITER : du suivi de l’inventaire à l’évaluation du terme source en situations accidentelles”, Journées du GDR ThematHT (août 2021).
- Conf-25) Y. Lakroune, **D. Connétable**, J. Hugues, P. Hermantier, F. Prima, M. Dehmas, “Microstructural evolution during post heat treatment of the Ti-6Al-4V titanium alloy elaborated by powder bed fusion” EUROMAT (septembre) 2021.
- Conf-26) C. Thenot, **D. Connétable**, P. Sallot, J.-P. Monchoux, “TiAl embrittlement at high temperatures”, Intermetallics (octobre 2021).

1.8 Liste des posters

La première personne est celle ayant présentée le poster.

- P-1) 2001 : “Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates”, **D. Connétable**, X. Blase, Workshop, Berlin (juillet).
- P-2) 2002 : “Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates”, **D. Connétable**, X. Blase GDR-DFT : Dinard (mars).
- P-3) 2005 : “Tailoring hardness and band gap by intercalation : an ab-initio study of $I_8@Si-46$ and related p-type doped clathrates”, **D. Connétable**, X. Blase GDR-DFT : Cap d’Agde (mai).
- P-4) 2006 : “Étude ab initio des propriétés de composés de Fe-Al-C”, **D. Connétable**, P. Maugis, Journées de la Matière Condensée.
- P-5) 2006 : “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.
- P-6) 2007 : “Supraconductivité dans les systèmes carbonés : diamant dopé et nanotubes”, **D. Connétable**, X. Blase, GDR-DFT.
- P-7) 2007 : “DFT calculations and Calphad assessment of the Fe-Al-C system”, **D. Connétable**, B. Sundman, P. Maugis, Multiscale Approach to Alloys, Stockholm.
- P-8) 2009 : “Rôle des multilacunes dans les processus de diffusion : application au nickel”, **D. Connétable**, C. Mijoule, et E.-H. Megchiche, GDR-DFT++.
- P-9) 2009 : “Calphad-type assessment of the Cr-Fe-Nb-Ni quaternary system”, **D. Connétable**, M. Mathon, J. Lacaze et B. Sundman, GDR-DFT++.
- P-10) 2011 : “Theoretical DFT study of point defects of sulphur atoms in the γ -Nickel”, D. Kandaskalov, **D. Connétable**, C. Mijoule, D. Monceau, GDR-Co-DFT (Strasbourg).

- P-11) 2011 : "First-principles study of defects in hcp-titanium : the case of vacancies and hydrogen", **D. Connétable**, J. Huez, E. Andrieu, and C. Mijoule, Titanium (Juillet, Chine).
- P-12) 2011 : "First-principles study of defects in hcp-titanium : the case of vacancies and hydrogen", **D. Connétable**, J. Huez, E. Andrieu, and C. Mijoule, DIMAT (Dijon).
- P-13) 2011 : "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 (Strasbourg).
- P-14) 2011 : "Theoretical DFT study of point defects of sulphur atoms in the γ -Nickel", D. Kandaskalov, **D. Connétable**, C. Mijoule, D. Monceau, Congrès DFT (Grèce, Athènes).
- P-15) 2012 : "Hydrogen Enhanced Dislocation Emission at a Crack Tip", Y. Wang, **D. Connétable**, D. Tanguy, ICAMM 2012 and VASP workshop, June, Institut des Matériaux Jean Rouxel (Nante, France).
- P-16) 2016 : "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, Rennes France).
- P-17) 2016 : "Multi-scale study of the influence of impurities on the oxygen solubility in nickel", M. David, **D. Connétable**, D. Monceau, MMM2016 (Dijon, Octobre).
- P-18) 2017 : "Segregation anisotropy in Ni grain boundaries : consequences on embrittlement", I. Braems, A. Karpinska, **D. Connétable** and P. Ganster, Journées Surfaces et interfaces (Rennes).
- P-19) 2018 : "Concentration des défauts ponctuels dans le nickel", Atelier "paysage énergétique", M. David, D. Monceau, **D. Connétable** (LAAS, juin).
- P-20) 2018 : "Diffusion of interstitial species contribution of first- and second-order transition states", **D. Connétable**, M. David, Atelier "paysage énergétique" (LAAS, juin).
- P-21) 2018 : "Nickel Isotopic Fractionation between Metal and Silicate : Insights from Theoretical Approaches", M. Méheut, **D. Connétable**, J. Guignard, G. Quitté, conférence Goldschmidt.
- P-22) 2019 : "Propriétés élastiques de la phase martensitique α' du Ti-6Al-4V", N. Dumontet, **D. Connétable**, B. Malard, B. Viguié, "La métallurgie, quel avenir !", Nancy (avril).
- P-23) 2019 : "Propriétés élastiques de la phase martensitique α' du Ti-6Al-4V", N. Dumontet, **D. Connétable**, B. Malard, B. Viguié, Plasticité, Lille (avril).
- P-24) 2019 : "Propriétés élastiques de la phase martensitique α' du Ti-6Al-4V", N. Dumontet, **D. Connétable**, B. Malard, B. Viguié, POUDRES, matériaux frittés et fabrication additive, Grenoble (mai).
- P-25) 2020 : "Défauts ponctuels dans le nickel", réunion GDR ThermaHT7, M. David, D. Monceau, **D. Connétable** (Toulouse, janvier).
- P-26) 2021 : "First-principle study of hydrogen isotopes solubility and diffusion in BeO", PFMC-18 A. Riot, F. Viot, **D. Connétable**, (juin).
- P-27) 2021 : "La rétention du tritium dans l'installation ITER : du suivi de l'inventaire à l'évaluation du terme source en situations accidentelles", A. Riot, F. Viot, **D. Connétable**, Journées du GDR ThermaHT (août 2021).