

**Marie-Liesse Doublet**

38 Ans (22-04-67)

Nationalité Française

**Laboratoire de Rattachement :**

**LSDSMS – UMR 5636**

Université Montpellier II - Bât. 15 - CC14

Place Eugène Bataillon

34 095 Montpellier Cédex 5

tél : 04 67 14 36 81

fax : 04 67 14 48 39

[Marie-Liesse.Doublet@univ-montp2.fr](mailto:Marie-Liesse.Doublet@univ-montp2.fr)

**Situation Actuelle :**

Chargée de Recherches 1<sup>ère</sup> Classe

Année de Stage au Laboratoire de Chimie des Solides de l'IMJR – Nantes (2001-2002)

## Production Scientifique

### • Publications dans des Revues Internationales

[1] J.-S. Filhol, F. Lemoigno, R. Yazami and M.-L. Doublet\*

"Hidden Phase Transformations in Lithium Intercalated Graphite Phase Diagram between StageII and StageI "

*Phys. Rev. B* (2005) Soumis

[2] V. Mauchamp, P. Moreau, L. Monconduit, M.-L. Doublet, F. Boucher and G. Ouvrard

"Electron energy-loss near-edge structures at lithium K-edge : determination of lithium insertion sites in  $\text{Li}_x\text{TiP}_4$  phases"

*Chem. Mater.* (2005) Soumis

[3] F. Gillot, S. Boyanov, L. Dupont, M.-L. Doublet, M. Morcrette, L. Monconduit, J.-M. Tarascon

"On the electrochemical reactivity and design of  $\text{NiP}_2$  negative electrodes for secondary Li-ion batteries"

*Chem. Mater.* 17 (2005) 6327.

[4] F. Gillot, M.-L. Doublet\*, L. Monconduit\*

"Electrochemical Behaviors of Binary and Ternary Manganese Phosphides"

*Chem. Mater.* 17 (2005) 5817.

[5] B. Mauvernay, M.-L. Doublet, L. Monconduit\*

"Redox Mechanism in the Binary Transition Metal Phosphide  $\text{Cu}_3\text{P}$ "

*J. Phys. Chem. Sol.* (2005) Sous Presse

[6] F. Gillot, L. Monconduit, M. Morcrette, M.-L. Doublet J.-M. Tarascon

"On the reactivity of  $\text{Li}_{(8-\gamma)}\text{Mn}_\gamma\text{P}_4$  towards lithium"

*Chem. Mater.* 17 (2005) 3627.

- [7] M.-L. Doublet, M.-B. Lepetit  
 "Leading interactions in  $\beta$ - $\text{AV}_6\text{O}_{15}$  compounds."  
*Phys. Rev. B* **71** (2005) 075119.
- [8] B. Mauvernay, M.-P. Bichat, F. Favier, L. Monconduit, M. Morcrette, and M.-L. Doublet  
 "Progress in the Lithium Insertion Mechanism in  $\text{Cu}_3\text{P}$ "  
*Ionics* **11** (2005) 39
- [9] M.-P. Bichat, F. Gillot, L. Monconduit, F. Favier, M. Morcrette, F. Lemoigno, M.-L. Doublet\*  
 "Redox Induced Structural Change in Anode Materials Based on  $(\text{MPn}_4)^{x-}$  Transition Metal Pnictides."  
*Chem. Mater.* **16** (2004) 1002
- [10] F. Gillot, M.-P. Bichat, F. Favier, M. Morcrette, M.-L. Doublet, L. Monconduit\*  
 "The  $\text{Li}_x\text{MPn}_4$  Phases ( $\text{M}=\text{Ti}, \text{V}, \text{Mn}$ ,  $\text{Pn}=\text{P}, \text{As}$ ) : New Negative Electrode Materials for Lithium-Ion Rechargeable Batteries"  
*Electrochimica Acta* **49** (2004) 2325
- [11] I. Malfant, C. Faulmann, L. Kushch, M.-E. Sanchez, L. Pilia, B. Garreau de Bonneval, P. Cassoux, M.-L. Doublet  
 "New salts derived from organic donor molecules with long-living excited states counter-ions"  
*Synth. Metal* **133-134** (2003) 377
- [12] L. Monconduit, F. Gillot, M.-L. Doublet\*, F. Lemoigno  
 "Lithium Insertion/Deinsertion Mechanisms in the Transition Metal Pnictides  $\text{Li}_x\text{MPn}_4$ "  
*Ionics* **9** (2003) 56
- [13] M.-L. Doublet\*, F. Lemoigno, F. Gillot and L. Monconduit  
 "The  $\text{Li}_x\text{VPn}_4$  Ternary Phases ( $\text{Pn} = \text{P}, \text{As}$ ) : Rigid Networks for Lithium Intercalation/Deintercalation"  
*Chem. Mater.* **14** (2002) 412
- [14] M.-B. Lepetit, M.-L. Doublet, P. Maurel  
 "Similarities between the t-J and Hubbard models in weakly filled systems"  
*Eur. Phys. J. B* **28** (2002) 49
- [15] I. Malfant, T. Courcet, C. Faulmann, P. Cassoux, H. Gornitzka, F. Granier, M.-L. Doublet, P. Guionneau, J.A.K. Howard, N. Kushch, A. Kobayashi  
 "Structure and Properties of BETS Salts : k-(BETS) $_8$  ( $\text{Cu}_2\text{Cl}_6$ )( $\text{CuCl}_4$ ), o-(BETS) $_2$  ( $\text{CuCl}_2$ ) and (BETS) $_2$  ( $\text{CuCl}_4$ )"  
*C. R. Acad. Sci.* **4** (2001) 149
- [16] M.-E. Sanchez, M.-L. Doublet, C. Faulmann, I. Malfant, P. Cassoux, L.A. Kushch, E.B. Yagubskii  
 "Anion Conformation and Physical Properties in BETS Salts with the Nitroprussiate Anion and its Related Ruthenium Halide ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ ) Mononitrosyl Complexes o-(BETS) $_4$  [ $\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}$ ], (BETS) $_2$  [ $\text{RuBr}_5\text{NO}$ ] and (BETS) $_2$  [ $\text{RuCl}_5\text{NO}$ ]"  
*Eur. J. Inorg. Chem.* (2001) 2797
- [17] C. Faulmann, M.-L. Doublet, F. Granier, B. Garreau de Bonneval, I. Malfant, J.-P. Legros, T. Togonidze, P. Cassoux  
 "Synthesis, Electrical Behaviour, and Crystal and Electronic Band Structures of Two Different Phases of the  $(\text{SmeEt}_2)$  [ $\text{Pd}(\text{dmit})_2$ ] $_2$  Salt. Consequences of Cationic Disorder on the Electrical Properties"  
*J. Mat. Chem.* **11** (2001) 2205

- [18] M.L. Doublet, S. Remy, F. Lemoigno  
 "Density Functional Theory Analysis of the Local Chemical Bonds in the Periodic Tantalum Dichalcogenides  $TaX_2$  ( $X=S, Se, Te$ )."  
*J. Chem. Phys.* **113** (2000) 13
- [19] M.-L. Doublet and M.-B. Lepetit  
 "Correlation and Dimerization Effects on the Physical Behavior of the  $NR_4 [Ni(dmit)_2]_2$  Charge Transfer Salts : A DMRG Study of the Quarter-Filling t-J Model"  
*J. Chem. Phys.* **110** (1999) 1767
- [20] M.-L. Doublet, N. Gallego-Planas, P.H.T. Philipsen, R. Brec and S. Jobic  
 "A New Theoretical Approach for Electrical Properties of  $TiX_2$  ( $X = S, Se, Te$ ) Phases with Density Functional Calculations."  
*J. Chem. Phys.* **108** (1998) 649
- [21] C. Rovira, J. Tarrès, E. Ribera, J. Veciana, E. Canadell, E. Molins, M. Mas, V. Laukhin, M.-L. Doublet, D.O. Cowan, S. Yang  
 "Metallic Conductivity in a Disordered Charge-transfer Salt derived from *cis*-BET-TTF"  
*Synt. Met.* **86** (1997) 2145
- [22] R. Rousseau, R.P. Shibaeva, S.S. Khasanov, L.P. Rozonberg, N.D. Kushch, E.B. Yagubskii, K.V. Van, M.-L. Doublet, E. Canadell  
 "Electronic Structures of the  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$  [MHg(XCN) $_4$ ] ( $M=Ti, K, NH_4, X=S, Se$ ) and related phases. Synthesis and crystal structure of the new stable organic metal  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$  TIHg(Se $_{(1-x)}$ S $_x$ CN) $_4$ ( $x=0.125$ )."  
*J. Phys. France I* **6** (1996) 1527
- [23] M.-L. Doublet, G.-J. Kroes, E. J. Baerends, A. Rosa  
 "H $_2$ O Photodissociation Dynamics based on Potential Energy Surfaces from Density Functional Calculations."  
*J. Chem. Phys.* **103** (1995) 2538
- [24] V.A. Merzhanov, D.A. Hits, E.B. Yagubskii, M.-L. Doublet, E. Canadell  
 "Electronic Properties of Isostructural Organic Conductors ET $_3$  (HSO $_4$ ) $_2$  and [Ni(ddd) $_2$ ] $_3$  (HSO $_4$ ) $_2$  , Thermopower and Tight-Binding Calculations".  
*Synth. Met.* **71** (1995) 1867
- [25] M.-L. Doublet, I. Malfant, S. Hebrard, E. Canadell, D. Chasseau, J.-P. Legros, L. Brossard  
 "Stabilized 1D Metal in TTF [Ni(dmit) $_2$ ] $_2$  through Very Weak Coupling between Phonons and Weakly Correlated Fermions."  
*Acta Phys. Pol. A* **87** (1995) 781
- [26] F. Goze, A. Audouard, L. Brossard, V.N. Laukhin, J.-P. Ulmet, S. Askenazy, M.-L. Doublet, E. Canadell, J.-P. Pouget, V.E. Zavodnik, R.P. Shibaeva, B. Hilti, C.W. Mayer  
 "Effect of the Cooling Rate on the Transverse Magnetoresistance of (TSeT) $_2$  Cl in its Charge Density Wave Ground State."  
*Physica B* **211** (1995) 286
- [27] M.-L. Doublet, E. Canadell, L. Brossard, B. Garreau, J.-P. Legros, P. Cassoux, J.-P. Pouget  
 "Structural and Electronic Properties of the Molecular Conductors (EDT-TTF) $_x$  [Pd(dmit) $_2$ ] $_y$  ( $x:y = 2,3$  and  $2,2$ )."  
*J. Phys. Condens. Matter* **7** (1995) 4673

- [28] J. Tarrès, N. Santalo, M. Mas, E. Molins, J. Veciana, C. Rovira, S. Yang, H. Lee, D.O. Cowan, M.-L. Doublet, E. Canadell  
 "A new family of molecular Metals Based on bis (ethylenethio) tetrathiafulvalene (BET-TTF) and octahedral counterions."  
*Chem. Mat.* **7** (1995) 1558
- [29] M.-L. Doublet, E. Canadell, M.-H. Whangbo  
 "Structure-Property Correlations in the Platinum Oxide and Palladium Sulfide Bronzes with Columnar Chains of Square Planar TX<sub>4</sub> Units."  
*J. Am. Chem. Soc.* **116** (1994) 2115
- [30] M.-L. Doublet, E. Canadell, J.-P. Pouget, R.P. Shibaeva  
 "Comparison of the Electronic Structures of Isostructural (BEDT-TTF)<sub>3</sub> (HSO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and [Ni(dddt)]<sub>3</sub> (HSO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> Molecular Metals."  
*J. Phys. I France* **4** (1994) 1439
- [31] M.-L. Doublet, E. Canadell, R.P. Shibaeva  
 "Concerning the First-Order Transition in the κ-phase (BEDT-TTF)<sub>4</sub> PtCl<sub>6</sub> C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CN."  
*J. Phys. I France* **4** (1994) 1479
- [32] C. Bianchini, K.G. Caulton, C. Chardon, M.-L. Doublet, O. Eisenstein, S.A. Jackson, T.J. Johnson, A. Meli, M. Peruzzini, W.E. Streib, F. Vizza  
 "The Mechanism of Acetylene Cyclotrimerization Catalyzed by the fac-IrP<sub>3</sub><sup>+</sup> Fragment : The Relationship between Fluxionality and Catalysis."  
*Organometallics* **13** (1994) 201
- [33] B. Pomarède, B. Garreau, I. Malfant, L. Valade, P. Cassoux, J.-P. Legros, A. Audouard, J.-P. Ulmet, M.-L. Doublet, E. Canadell  
 "Synthesis, Crystal Structure, Electrical Properties, and Electronic Band Structures of (NH<sub>4</sub>Me<sub>(4-y)</sub>)<sub>x</sub> [M(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> Complexes (M = Ni, Pd, Pt, dmit<sup>2-</sup> = 2-Thioxo-1,3-dithiole-4,5-dithiolato)."  
*Inorg. Chem.* **33** (1994) 3401
- [34] L. Brossard, M. Ribault, M.-L. Doublet, E. Canadell, B. Garreau, J.-P. Legros  
 "Inhibited Superconductivity Induced by Localization Effects in (EDT-TTF)<sub>2</sub> [Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>"  
*Synth. Met.* **55**, (1993) 2855
- [35] J.D. Martin, M.-L. Doublet, E. Canadell  
 "Comparison of the Electronic Structures of the (BEDT-TTF)<sub>4</sub> [M(CN)<sub>4</sub>] (M=Ni,Pt) and (BEDT-TTF)<sub>4</sub> [M(C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)<sub>2</sub>] (M=Cu,Pt). Structural Requirements for Hidden Fermi Surface Nesting."  
*J. Phys. I France* **3** (1993) 2451
- [36] M.-L. Doublet, E. Canadell, J.-P. Pouget, E.B. Yagubskii, J. Ren, M.-H. Whangbo  
 "Factors affecting the Metallic versus Semiconducting Properties of Charge Transfer Salts containing [M(dddt)]<sub>2</sub> (M=Pd, Pt) Dimers."  
*Solid State Commun.* **88** (1993) 699

• Valorisation - Brevet

[37] M.-L. Doublet, L. Monconduit-Jégou, F. Gillot

"Lithium-material comprising an intermetallic lithium/transition metal pnictide phase for lithium batteries"

*U.S. Pat. Appl. Publ. (2003) CODEN: USXXCO-US-2003113631, A1-20030619, CAN-139:39167, AN-2003:473084, CAPLUS.*

• Proceedings dans des Congrès Internationaux

[38] M.-L. Doublet\*, J.-S. Filhol, C. Combelles, F. Lemoigno, R. Yazami

"A New Phase Diagram for Li-Graphite between StageII and StageI"

*J. power Source (2006) Soumis*

[39] L. Valade, I. Malfant, A. Glaria, J.-F. Lamère, B. Garreau de Bonneval, D. de Caro, S. Vincendeau, K. Jacob, M.-L. Doublet, and A. Zwick

"(BETS)<sub>2</sub>[RuX<sub>5</sub>NO] (X = Cl, Br): an explanation of different conductive properties through structural and spectroscopic studies"

*Proceedings of the Sixth International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors, and Ferromagnets - ISCOM 2005*

[40] M.-L. Doublet\*, F. Lemoigno, M.-P. Bichat, F. Favier\*, L. Monconduit

"Original Structural Behavior Induced by Electrochemical Redox Reactions in Li<sub>9</sub>TiP<sub>4</sub> Anode."

*J. Electrochem. Soc. PV-2003-19 (2004) ISBN 1-56677-402-0*

[39] M.-L. Doublet\*, F. Lemoigno

"Amorphization / Recrystallization Mechanism in the Ternary Li<sub>x</sub>MPn<sub>4</sub> Phases (M = Ti, V ; Pn = P, As) - A Theoretical DFT Study"

*J. Electrochem. Soc. PV2003-20(2003) ISBN 1-56677-402-0*

[40] N. Bourgeon, H. Kabbour, S. Jouanneau, A Verbaere, M.-L. Doublet, J. Gaubicher, F. Boucher, G. Ouvrard, D. Guyomard

"Structural, Local and Electrochemical Characterization of Li<sub>1+x</sub>V<sub>3</sub>O<sub>8</sub> Materials"

*J. Electrochem. Soc. PV2003-20(2003) ISBN 1-56677-402-0*

[41] F. Lemoigno, M.-L. Doublet, L. Chapon, D. Ravot, J.-C. Tedenac

"Comparison between experimental XANES Spectra and Electronic Structure Calculations in the filled skutterudites Ce<sub>y</sub>Fe<sub>(4-x)</sub>Ni<sub>x</sub>Sb<sub>12</sub>"

*Proceeding of the International Conference on Thermoelectrics (2003)*

[42] M.-L. Doublet, F. Granier and M.-B. Lepetit

"Quantitative On-Site Repulsion U for the Ni(dmit)<sub>2</sub> Molecule"

*Synth. Met. 103 (1999) 2062*

[43] F. Lemoigno, S. Remy and M.-L. Doublet

"Why has 1T-TaTe<sub>2</sub> not yet been synthesized : a DFT Contribution."

*Synth. Met. 103 (1999) 2679*

[44] F. Goze, A. Audouard, L. Brossard, V.N. Laukhin, J.-P. Ulmet, M.-L. Doublet, E. Canadell, J.-P. Pouget, V.E. Zavodnik, R.P. Shibaeva, B. Hilti, C.W. Mayer  
"Magnetoresistance in Pulsed Fields, Band Structure Calculations and Charge-Density Wave Instability in (TSeT)<sub>2</sub> Cl."  
*Synth. Met.* **70** (1995) 1279

[45] M.-L. Doublet, E. Canadell, B. Garreau, J.-P. Legros, J.-P. Pouget, L. Brossard  
"Interplay between Structural, Magnetic Properties and Calculated Band Structure of (EDT-TTF)<sub>2</sub> [M(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub> where M = Ni, Pd."  
*Synth. Met.* **70** (1995) 1063

#### • Conférences invitées dans des Congrès Internationaux

[1] **IBA - HBC 2006** - International Battery Association (Kona - USA) 8-12 Janv. 2006  
"A New Phase Diagram for Li-Graphite between StageII and and StageI"

[2] **2005 MRS Fall Meeting** - Material Research Science (Boston) 28 Nov. - 2 Déc. 2005  
"Local Chemical Bond Analysis to Predict the Redox Properties of Electrode Materials for Li-Ion Batteries"

[3] **204<sup>th</sup> Meeting of the Electrochemical Society** (Orlando) 12-17 Oct. 2003  
"Original Structural Behaviour induced by Electrochemical Redox Reaction - A Theoretical Study of Li<sub>x</sub>MPn<sub>4</sub> Anode Materials"

#### • Conférences invitées dans des Laboratoires Internationaux

[4] **National Institute of Chemistry** (Ljubljana- Slovénie) Janv. 2006  
"Redox Mechanisms in Ternary and Binary Transition Metal Phosphides"

[5] **California Institute of Technology** (Caltech - Pasadena) Sept. 2004 - Material Research Lecture  
"Enlighthening Redox Chemistry through Electronic Structure Calculations and Chemical Bonding Analyses : Application to Transition Metal Pnictides, a new class of Anode Materials for Lithium-Ion Batteries"

[6] **Theoretische Chemie** (Amsterdam) Oct. 1994  
"Electronic Structures of Low-Dimensional Organic Conductors"

[7] **Max Planck Institut** (Stuttgart) Déc. 1993  
"Electronic Structures of Organic and Inorganic Low-Dimensional Systems"

#### • Communications Orales dans des Congrès Internationaux

[8] **Lithium Battery Discussion 2005** (Arcachon) 2-7 Mai 2005  
"Redox Mechanism in Manganese Phosphides"

[9] **Lithium Battery Discussion 2005** (Arcachon) 22-27 Mai 2005  
" Experimental / Theoretical Evidence for a new Phase Diagram of Lithium Intercalated Graphite Li-GIC between Stage II and Stage I"

[10] **206<sup>th</sup> Meeting of the Electrochemical Society** (Honolulu) *2-8 Octobre 2004*  
"Origins of Composition Delay in the StageII to StageI Phase Transformation in  $\text{LiC}_6$ "

[11] **203<sup>th</sup> Meeting of the Electrochemical Society** (Paris) *27 Avril - 2 Mai 2003*  
"Reversible Amorphization / Recrystallization Mechanism in the ternary  $\text{Li}_x\text{MPn}_4$  Phases "

[12] **Lithium Battery Discussion 2001** (Arcachon) *2-7 Mai 2001*  
"First Theoretical Investigations on the Insertion / Deinsertion Mechanisms in the Transition Metal Pnictogenides  $\text{Li}_x\text{MX}_4$  Phases : Application to Ion-Lithium Rechargeable Batteries ?"

• Communications Orales dans des Congrès et GDR Nationaux

[13] **GDR 522 - Matériaux Moléculaires** (Gif-sur-Yvette) *Déc. 1999*  
"Limite de l'Approche Mono-Electronique pour l'Etude des Transitions de Phases du Sel Fortement 1D  $(\text{TSeT})_2\text{Cl}$ "

[14] **Transferts Electroniques TRANSEL'99** (Montpellier) *Mars 1999*  
"Désordre et Non-Stoechiométrie dans les Phases Ternaires  $\text{Li}_x\text{MX}_4$  ( $M=\text{V},\text{Nb},\text{Ta}$  ;  $X=\text{N},\text{P},\text{As}$ )"

[15] **GDR 522 - Matériaux Moléculaires** (Nantes) *Janv. 1999*  
"Effet de la Corrélation et de la Dimérisation sur les Propriétés Physiques des Conducteurs Organiques : Comparaison des Modèles Hubbard et t-J"

[16] **6<sup>èmes</sup> Journées de la Société Française de Chimie** (Perpignan) *Janv. 1997*  
"Etude Théorique de la Structure Electronique des Phases  $1\text{T-MX}_2$  ( $X=\text{S},\text{Se},\text{Te}$ )"

[17] **5<sup>ème</sup> Réunion des Chimistes Théoriciens Francophones** (Arcachon) *Oct. 1996*  
"Structure Electronique des Phases  $\text{TiX}_2$  par la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité"

• Séminaires dans des Laboratoires Nationaux

[18] **Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée** (CNRS-UMR 7574) *Mai 2005*  
"Apport de la Chimie Théorique dans la Compréhension des Mécanismes Redox dans les Matériaux d'Electrodes pour Batteries Lithium-Ion"

[19] **Laboratoire de Réactivité et Crystallographie des Solides** (CNRS-UMR 6007) *Mars 2005*  
"Structure Electronique et Liaison Chimique : des Outils Théoriques Simples pour Comprendre les Propriétés Redox des Matériaux d'Electrode. Application aux Pnictogénures de Métaux de Transition"

[20] **Laboratoire de Physique Quantique** (CNRS-UMR 5626) *Déc. 2001*  
"Les Interactions Donneur-Accepteur dans les Conducteurs Organiques de Basse Dimensionnalité"

[21] **Institut des Matériaux Jean Rouxel** (CNRS-UMR 6502) *Janv. 2000*  
"La Corrélation Electronique dans les Systèmes Infinis Périodiques : Difficultés, Alternatives"

[22] **Laboratoire Chimie Moléculaire et Organisation des Solides** (CNRS-UMR 5637) *Mars 1999*  
"Propriétés des Conducteurs Organiques : Une Approche Orbitale"

[23] **Laboratoire des Agrégats Métalliques et Matériaux Inorganiques** (CNRS-UMR 5072) *Janv. 1998*

"Théorie de la Fonctionnelle de la Densité : Notions de Base"

[24] **Laboratoire de Physique Quantique** (CNRS-UMR 5626) *Mars 1998*

"La Corrélation Electronique dans les Conducteurs Organiques : Application de la DMRG pour Accéder aux Valeurs Quantitatives de la Répulsion Intra-Site U. Comparaison Méthodologique des Hamiltoniens Hubbard et t-J "

[25] **Laboratoire de Physique Quantique** (CNRS-UMR 5626) *Nov. 1996*

"Les Conducteurs Organiques : Succès et Limitations de la Méthode Hückel Etendue"

- Cours dans des Ecoles Thématiques

[26] **GALERNE** (Piriac) Septembre 1999

"Les Méthodes Corrélées de la Chimie Quantique" - 2 heures de Cours

[27] **Les Méthodes de la Chimie Quantique** (Bordeaux) Février 1998

"La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité" - 4 heures de Cours + 4 heures de TP

[28] **Mieux Connaître les Matériaux Complexes** (Saint-Mathieu de Trévières) Janvier 1998

"Approche Locale de la Fonctionnelle de la Densité" - 1 heure 30 de Cours + 2h de TP

## Encadrement

- Stages Divers

2005 : Magistère (5 mois) **Sandrine Leccina** (encadrement 100%)

« Détermination du Schéma des Interactions Magnétiques dans les Oxydes de Vanadium  $\square$ - $AV_6O_{15}$  (A=Li, Na, Cu, Pb) par la Méthode du Spin Dimer »

2004 : Magistère (2 mois) **Germain Vallverdu** (encadrement 100%)

« Etude Théorique des Mécanismes d'Insertion de  $Li^+$  dans les Matériaux d'Electrodes pour Batteries Li-Ion »

2002 : D.E.A. (5 mois) **Houria Kabbour** (encadrement 50%)

« Etude Théorique des mécanismes d'insertion d'ions  $Li^+$  dans l'oxyde  $Li_xV_3O_8$  »

1998 : Maîtrise (3 mois) **Bertrand Desrousseaux** (encadrement 100%)

« Etude Théorique de la Structure et des Propriétés du composé  $[AcrH][Ni(dmit)_2]_2$  »

1997 : D.E.A. (9 mois) **Fabien Granier** (encadrement 100%)

« Structure Electronique des Conducteurs Organiques. Application de la Méthode Hückel étendue pour le Calcul des Structures de Bandes et des Surfaces de Fermi »

1996 : Stage du CNAM (9 mois) **Baptiste Chapuisat** (encadrement 100%)

Installation d'un Serveur IBM Risc6000



- Thèses

- 2008-2005 : Thèse de l'Université de Montpellier II de **Cécil Combelles** (Encadrement 100%)  
«Modélisation *ab initio* appliquée à la Conception de Nouvelles Batteries »  
**Bourse MESR**
- 2008-2005 : Thèse de l'Université de Montpellier II de **Jérôme Bernardi** (Encadrement 100%)  
«Mécanismes Redox dans les Phosphures de Métaux de Transition »  
**Bourse ADEME non-cofinancée**
- 1997-2000 : Thèse de l'Université de Montpellier II de **Stanislas Remy** (Encadrement 100%)  
Démission du candidat à la fin de son contrat BDI pour réorientation professionnelle.  
« Application de la Fonctionnelle de la Densité à l'étude de Solides Covalents Inorganiques : Apport de la Vision Locale de la Liaison Chimique pour l'Etude des Propriétés Physiques des matériaux »  
**Bourse BDI - Région**
- 1997-2000 : Thèse de l'Université de Montpellier II de **Fabien Granier** (Encadrement 100%)  
soutenue le 22 Décembre 2000.  
« Etude Théorique du Rôle des Interactions Donneur-Accepteur sur la Structure Electronique et les Propriétés Physiques des Conducteurs Organiques de Basse Dimensionnalité. »  
**Bourse MESR + Monitorat**

- Stage Post-Doctoral

- 1996-97 : Stage Post-Doctoral(6 mois) **Nuria Gallego-Planas** (Encadrement 100%)  
« Les Dichalcogènes de Métaux de Transition - Application de la Méthode de la Fonctionnelle de la Densité »  
**Bourse Européenne** (Capital Human and Mobility. Program CHRX-CT94-0675)

- Invitations à des Jury de Thèse

- 25 Mai 2005 : Thèse de l'Université de Grenoble présentée par **Yvan Reynier**  
"Thermodynamique et Cinétique d'Electrodes pour Batteries Lithium-Ion"  
**Directeur : Rachid Yazami**
- 12 Juillet 2002 : Thèse de l'Université d'Orsay présentée par **Calin Wurm**  
" Propriétés électrochimiques de phosphates et arsénates d'éléments de transition (Fe, V) synthétisés à basse température "  
**Directeur : Christian Masquelier**

- 8 Octobre 1999 : Thèse de l'Université de Bordeaux présentée par **Delphine Le Pevelen**  
*"Analyse Structurale des Matériaux soumis simultanément à Haute Pression et Basse Température : Conception et Réalisation de l'Appareillage de Diffraction de Rayons X, Application au Diagramme de Phases de deux Conducteurs Organiques : (TMTSF)<sub>2</sub> ClO<sub>4</sub> et (TSeT)<sub>2</sub> Cl"*  
**Directeur : Daniel Chasseau**
- 27 Janvier 1999 : Thèse de l'Université Paul Sabatier de Toulouse présentée par **Thierry Courcet**  
*"Synthèse de Composés Moléculaires Organiques-Inorganiques à Propriétés Physiques Hybrides"*  
**Directeur : Patrick Cassoux**