

Céline BARRETEAU

37 ans

Chargée de Recherche au CNRS - HDR,

Section CoNRS 17 – Chimie des matériaux, nanomatériaux et procédés

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE)

UMR 7182 Université Paris Est Créteil / CNRS

celine.barreteau@cnrs.fr

ORCID ID: 0000-0002-3123-0859



MOTS CLES : DFT, machine learning, thermoelectricity, semiconductors, solid-state synthesis, electric band structure, material prediction.

PARCOURS PROFESSIONNEL

- Avril 2025 : Habilitation à Diriger des Recherches
- Depuis octobre 2016 : Chargée de Recherche au CNRS, section 17, rattachée à l'Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE-UMR 7182), département M2I.
- Février 2014 – Septembre 2016 : Post-Doctorat, Université de Genève, Département de Physique de la Matière Quantique (DQMP), (Genève, Suisse). Groupe du Pr. D. Van der Marel. *Synthèse, croissance et caractérisation de monocristaux de semi-conducteurs 2D.*
- Octobre 2010 – Septembre 2013 : Thèse de doctorat, Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay (ICMMO), Université Paris Sud (Orsay, France). *Matériaux céramiques thermoélectriques pour la production d'électricité propre.*

FORMATION PAR LA RECHERCHE ET ENSEIGNEMENT

- Co-encadrante d'1 thèse soutenue en 2024, co-directrice de 2 thèses en cours.
- Enseignements à l'UPEC et l'Université Paris Saclay (CM et TP autour de l'initiation aux calculs DFT et aux techniques d'apprentissage automatique) (environ 25h/an).

RESPONSABILITES COLLECTIVES

- Membre élue au conseil de laboratoire de l'ICMPE, représentante des personnels rang B CNRS (depuis 2020).
- Responsable scientifique de groupe Modélisation et Calcul au sein du département M2I, ICMPE (depuis 2023).

RAYONNEMENT NATIONAL ET INTERNATIONAL

- Membre de 3 jurys de thèse.
- Co-directrice adjointe du GIS de Thermoélectricité (2022).

PRODUCTION SCIENTIFIQUE

50 publications

- 2 conférences invitées dans des congrès internationaux & 3 dans des congrès nationaux.

DISTINCTIONS

- Prix de thèse B. Coqblin en 2014 décerné par le GdR de Thermoélectricité.
- Médaille de Bronze du CNRS 2024.

VULGARISATION SCIENTIFIQUE

- Correspondante pour l'association Femmes et Sciences auprès de la DR01 et DR02 pour l'exposition XX-Elles (2025).
- Membre du projet « 94, un Val de Sciences », création d'une exposition itinérante *ScienceOmatic* (UPEC, Exploradome, ANR, Val de Marne).

ARTICLES REPRESENTATIFS

- Structural and Electronic transport properties in Sr doped BiCuSeO. Barreteau, C.; Bérardan, D.; Amzallag, E.; Zhao, L-D.; Dragoe, N., *Chemistry of Materials* **2012**, 24, 3168-3178 (hal-02143251).
- High Pressure melt growth of SiP, SiAs, GeP and GeAs, 2D layered semiconductors. Barreteau, C.; Michon, B.; Bernard, C.; Giannini, E., *Journal of Crystal Growth*. **2016**, 443, 75-80 (hal-02104553).
- Looking for new thermoelectric materials among the TMX intermetallics using high-throughput calculations. Barreteau, C.; Crivello, J.-C.; Joubert, J.-M.; Alleno, E., *Comput. Mater. Chem.* **2019**, 156, 96-103 (hal-03007686).
- Coexisting structural disorder and robust spin-polarization in half-metallic FeMnVAL. Gupta, S.; Chakraborty, S.; Pakhira, S.; Barreteau, C.; Crivello, J.-C.; Bandyopadhyay, B.; Greneche, J.-M.; Alleno, E.; Mazumbar, C., *Phys. Rev. B* **2022**, 106, 115148 (hal-06812754).
- SrCuP and SrCuSb Zintl phases as potential thermoelectric materials. Moll, A.; Hamidou, A.; Crivello, J.-C.; Joubert, J.-M.; Alleno, E.; Barreteau, C., *J. All. Comp.* **2023**, 942, 169123 (hal-03974626).
- Chemical composition of lithiated nitrodonickelates $\text{Li}_{3-x}\text{Ni}_x\text{N}$: evidence of the intermediate valence of nickel ions from ion beam analysis and *ab initio* calculations. Fernandes, T.; Cavoué, T.; Berger, P.; Barreteau, C.; Crivello, J.-C.; Emery, N., *Inorg. Chem.* **2023**, 62, 16013-16020 (hal-04228615).
- Promising Multicomponent cubic alloys for hydrogen storage: insights from first-principles calculations and machine learning. Nefzi, Z.; Barreteau, C.; Levrel, L.; Crivello, J.-C., *ACS Appl. Ener. Mater.* **2025**, 8, 3327-3337 (hal-05008497).

ACTIVITES SCIENTIFIQUES

Ma formation scientifique ainsi que mes premières expériences en recherche concernaient principalement la synthèse et la caractérisation (structurale et des propriétés électriques ou thermiques) de composés chalcogènes. Après avoir soutenu une thèse sur l'optimisation d'un composé d'oxychalcogénure de bismuth pour des applications en thermoélectricité à l'Université Paris Sud en 2013, j'ai effectué un post-doctorat à l'Université de Genève sur la croissance et la caractérisation de monocristaux de dichalcogénures 2D.

En 2016, j'ai réussi le concours de chargé de recherche au CNRS afin de poursuivre mes travaux de recherche au sein de l'Institut de Chimie et des Matériaux de Paris-Est (ICMPE). Mes activités de recherche portent principalement sur la découverte de nouveaux matériaux pour l'énergie en particulier dans le domaine de la thermoélectricité. L'originalité de mon approche consiste à combiner un volet expérimental (synthèse, caractérisation, optimisation) à un volet théorique, basé sur des calculs premiers principes. Ce volet théorique permet d'effectuer un criblage massif au sein d'un grand nombre de candidats potentiels et ainsi d'accélérer fortement la découverte de nouveaux composés prometteurs. Depuis, j'ai développé des compétences théoriques avec notamment l'utilisation des méthodes DFT pour étudier la stabilité et la structure électronique des matériaux, en plus de mes compétences expérimentales autour de la synthèse par voie solide, la caractérisation structurale et l'étude des propriétés de composés thermoélectriques notamment.

Par ailleurs, ces dernières années, j'ai également enrichi mon approche théorique du criblage en couplant des calculs DFT à des techniques d'apprentissage automatique afin d'accélérer et de complexifier notre méthodologie. J'applique cette méthodologie à plusieurs projets de recherche en collaboration étroite avec des expérimentateurs pour découvrir de nouveaux composés d'intérêts dans différents domaines, tels que la thermoélectricité ou le stockage de l'hydrogène.