

ISABELLE BARAILLE

Professeure des universités (CNU 31)
Université de Pau et des Pays de l'Adour

Enseignant-chercheur à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA), tout d'abord maître de conférences (1996-2005), puis professeure depuis 2005, je réalise mes travaux de recherche et d'enseignement respectivement, au sein de l'IPREM (Institut des sciences analytiques et de physico-chimie pour l'environnement et les matériaux) (UMR CNRS 5254) et du collège STEE (Sciences et Technologie pour l'Energie et l'Environnement).

Mes travaux de recherche concernent essentiellement des développements méthodologiques et algorithmes originaux pour la spectroscopie vibrationnelle, la modélisation et simulation de systèmes complexes à l'échelle moléculaire et des études couplées expérience/théorie sur les surfaces- interfaces dans les matériaux. L'ensemble de ces compétences m'a permis de (i) coordonner plusieurs projets adossés à des financements variés (ii) participer aux réflexions du groupe théorie du Réseau pour le Stockage de l'Énergie Électrochimique (RS2E) (iii) d'être membre, depuis 2015, du laboratoire commun « Cartographie Moléculaire des Matrices Complexes » (CNRS/Université et INSA de Rouen/UPPA/Total RC, étendu à Florida State University en 2018). Ces activités de recherche ont donné lieu à 74 publications dans des revues internationales à comité de lecture. J'ai dirigé ou co-dirigé 13 thèses (dont 2 en cours) et 12 stages post-doctoraux de durées allant de 12 à 24 mois. De 2016 à 2019, j'ai assuré l'animation du pôle « Chimie Analytique, Physique et Théorique » (31 permanents) qui est l'un des 3 pôles scientifiques de l'IPREM, après avoir de 2011 à 2015 assuré la direction de l'équipe de Chimie- Physique qui était l'une des 4 équipes de l'Institut (35 permanents, 25 non permanents).

Dans le domaine de la formation, j'ai, depuis mon entrée en fonction, pris part à des activités pédagogiques très variées. Outre les tâches traditionnelles attachées à la fonction d'enseignant chercheur, j'ai participé à la mise en œuvre d'actions innovantes visant à améliorer l'insertion et le taux de réussite des étudiants de licence. En tant que responsable de la 1^{ère} année de la licence Physique-Chimie (PC) de 2002 à 2008, j'ai participé à la mise en place des classes au cours du 1^{er} semestre, au tutorat d'accompagnement et à la mise en place, du plan « Réussite en Licence ». Éluë en 2009, co-directrice des études de cette licence (7 parcours et 13 années répartis sur deux sites), j'ai supervisé la rédaction du dossier d'auto évaluation de la formation (noté A par l'AERES) et animé les réflexions concernant l'élaboration de la maquette 2011-14. En 2014, j'ai coordonné la demande d'accréditation du 1^{er} Coursus Master en Ingénierie de l'UPPA, mention « Science des matériaux » auprès du réseau FIGURE qui a ouvert en septembre 2014. De 2014 à 2016, j'ai été référente de l'UPPA au niveau du comité de pilotage du réseau.

Mon implication au niveau des instances universitaires s'est concrétisée, tout au long de ma carrière, par une participation à plusieurs niveaux : département de Chimie (membre du bureau), laboratoire (membre du conseil de laboratoire ou du conseil scientifique 2002-18), UFR Sciences et Techniques de Pau (membre élu du conseil 2008-16), École doctorale des Sciences Exactes et de leurs Applications (membre du conseil). Depuis avril 2016, je suis élue à la vice-présidence de la commission de la recherche (réélue pour un deuxième mandat le 07 janvier 2021). Je siège en tant que membre élu au Conseil National des Universités section 31, depuis janvier 2017.

Autres responsabilités exercées

- Portage du dossier « Research for UNITA » (Re-UNITA) déposé le 10/11/20, en réponse de l'appel à projet dans le cadre d'Horizon Europe « Support for research and innovation dimension of European University ». Re-UNITA qui a été sélectionné par la communauté européenne pour un financement de 2 M€ a pour ambition de créer un environnement propice à l'émergence d'un agenda de recherche et d'innovation partagé au sein de l'alliance européenne UNITA.

Principales publications

- Sensitivity of Asphaltene Aggregation toward the Molecular Architecture under Desalting Thermodynamic Conditions, H. Santos Silva, A. Alfarrá, G. Vallverdu, D. Begue, B. Bouyssiere, **I. Baraille**, Energy & Fuels, **32**, 2681 (2018)
- Impact of H-Bonds and Porphyrins on Asphaltene Aggregation As Revealed by Molecular Dynamics Simulations, H. Santos Silva, A. Alfarrá, G. Vallverdu, D. Bégué, B. Bouyssiere, **I. Baraille**, Energy & Fuels, **32**, 11153 (2018)
- Asphaltene aggregation studied by molecular dynamics simulations: role of the molecular architecture and solvents on the supramolecular or colloidal behavior, H. Santos Silva, A. Alfarrá, G. Vallverdu, D. Bégué, B. Bouyssiere, **I. Baraille**, Petroleum Science, **16**, 669 (2019)
- Redox activity of nickel and vanadium porphyrins: a possible mechanism behind petroleum genesis and maturation ?, G. Munoz, B. Gunessee, D. Bégué, B. Bouyssiere, **I. Baraille**, G. Valverdu, H. Santos Silva, RSC Advances, **9**, 9509, (2019)
- Role of the porphyrins and demulsifiers in the aggregation process of asphaltenes at water/oil interfaces under desalting conditions: a molecular dynamics study, H. Santos Silva, A. Alfarrá, G. Vallverdu, D. Bégué, B. Bouyssiere, **I. Baraille**, Petroleum Science, **17**, 797 (2020)
- Using computed infrared intensities for the reduction of vibrational configuration interaction bases, V. Le Bris, M. Odunlami, D. Bégué, **I. Baraille**, O. Coulaud. Physical Chemistry Chemical Physics, **22**, 7021, (2020)
- Stabilization and improvement of energy storage performance of high mass loading cobalt hydroxide electrode by surface functionalization, J. Olchowka, R. Invernizzi, A. Lemoine, J. Allouche, **I. Baraille**, D. Flahaut et L. Guerlou-Demourgues, Journal of The Electrochemical Society, **167**, 100527 (2020)
- Surface reactivity of Li₂MnO₃: structural and morphological impact, A. Quesne-Turin, D. Flahaut, L. Croguennec, G. Vallverdu, J. Allouche, Y. Charles-Blin, J.-N. Chotard, M. Ménétrier, **I. Baraille**, Applied Surface Science, (2020)

- Molecular cartography of A1 and A2 asphaltenes sub-fractions from classical molecular dynamic simulations, O. Villegas, G. Vallverdu, B. Bouyssiére, S. Acevedo, J. Castillo, **I. Baraille**, Energy & Fuels (2020)
- Controlled Nanostructuration of Cobalt Oxyhydroxide Electrode Material for Hybrid Supercapacitors, R. Invernizzi, L. Guerlou-Demourgues, F. Well, A. Lemoine, M.A. Dourges, **I. Baraille**, D. Flahaut, J. Olchowka, Materials, 14, 2325 (2021)