



Évaluation de la recherche

ÉVALUATION DE L'UNITÉ :

Laboratoire de Chimie Moléculaire (LCM)

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES :

École Polytechnique - X

Centre National de la Recherche
Scientifique - CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2018-2019
VAGUE E



Pour le Hcéres¹ :

, Président

Au nom du comité d'experts² :

, Président du comité

En vertu du décret n°2014-1365 du 14 novembre 2014 :

¹ Le président du Hcéres "contresigne les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts et signés par leur président." (Article 8, alinéa 5) ;

² Les rapports d'évaluation "sont signés par le président du comité". (Article 11, alinéa 2).

Ce rapport est le résultat de l'évaluation du comité d'experts dont la composition est précisée ci-dessous. Les appréciations qu'il contient sont l'expression de la délibération indépendante et collégiale de ce comité. Les données chiffrées des tableaux de ce rapport sont extraites des fichiers déposés par les tutelles (dossier d'autoévaluation et données du contrat en cours / données du prochain contrat).

PRÉSENTATION DE L'UNITÉ

Nom de l'unité :	Laboratoire de Chimie Moléculaire
Acronyme de l'unité :	LCM
Label demandé :	UMR
Type de demande :	Renouvellement à l'identique
N° actuel :	9168
Nom de la directrice (2018-2019) :	M ^{me} Corinne GOSMINI
Nom de la porteuse de projet (2020-2024) :	M ^{me} Corinne GOSMINI
Nombre d'équipes et /ou de thèmes du projet :	3 (bilan)

MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

Président :	M. Michel ÉTIENNE, UPS Toulouse
Experts :	M. Éric CLOT, CNRS Montpellier
	M. Samuel DAGORNE, CNRS Strasbourg (représentant du CoNRS)
	M. Abdelaziz JOUAITI, CNRS Strasbourg (personnel d'appui à la recherche)
	M ^{me} Valérie PICHON, ESPCI Paris

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. Daniel GUILLON

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ

M^{me} Francine ABGOSSOU, CNRS
M. Benoît DEVEAUD, École Polytechnique
M^{me} Claire-Marie PRADIER, CNRS

INTRODUCTION

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

L'unité Laboratoire de Chimie Moléculaire (LCM), École Polytechnique, CNRS, UMR 9168 est issue de la fusion au 1^{er} janvier 2014 de deux unités elles-mêmes localisées à l'École Polytechnique : le laboratoire des Mécanismes Réactionnels (DCMR) et le laboratoire Hétéroéléments et Coordination (DCPH).

DIRECTION DE L'UNITÉ

L'unité est dirigée par M^{me} Corinne GOSMINI (directrice) et M. Gilles FRISON (directeur adjoint). Celui-ci sera remplacé par M. Grégory NOCTON pour la prochaine mandature.

NOMENCLATURE HCÉRES

ST4 : chimie.

DOMAINE D'ACTIVITÉ

Le domaine d'activité de l'unité est tourné vers les aspects fondamentaux et appliqués de la chimie moléculaire (chimie de coordination et chimie organométallique des éléments d et f, chimie de composés phosphorés, chimie organique et catalyse, principalement homogène) et de la chimie analytique en passant par la chimie théorique et la modélisation. Le développement de méthodologies pour la détection et l'analyse structurale de différents types de molécules biologiques, organiques et inorganiques est également une activité importante du LCM. Une synergie entre ces différentes thématiques est réalisée pour certains projets de recherche, par exemple à l'interface expérience / théorie. Une orientation vers les problématiques environnementales et de développement durable est bien marquée et devrait continuer de prendre de l'ampleur.

EFFECTIFS DE L'UNITÉ

	Composition de l'unité	
	Laboratoire de Chimie Moléculaire	
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2018	Nombre au 01/01/2020
Professeurs et assimilés	1	1
Maîtres de conférences et assimilés	0	
Directeurs de recherche et assimilés	2	2
Chargés de recherche et assimilés	6	6
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...	0	
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur	0	
ITA-BIATSS autres personnels cadre et non cadre EPIC...	10	8

Sous-total personnels permanents en activité	19	17
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres		
Chercheurs non titulaires, émérites et autres	14	
<i>dont doctorants</i>	11	
Autres personnels non titulaires	4	
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	18	
Total personnels	37	17

AVIS GLOBAL SUR L'UNITÉ

Le Laboratoire de Chimie Moléculaire présente une activité scientifique très bonne voire excellente comme en témoignent les publications dans les meilleurs des journaux de la discipline, les invitations et organisations de congrès, la capacité à répondre à de nombreux appels d'offre régionaux, nationaux et internationaux sélectifs et prestigieux, ainsi que l'obtention de prix. L'interface recherche fondamentale / recherche appliquée est très bonne et structure en partie les relations avec le milieu socio-économique ; celles-ci sont encore améliorables pour toute l'unité. En plus de la formation des docteurs, les personnels sont tous investis dans diverses actions de formation de haut niveau (master, etc.) ainsi qu'en formation permanente. L'unité est donc très attractive. La structuration de l'unité en trois équipes va être modifiée par suite de départs fragilisant l'une d'elles. Le modèle proposé est celui d'une équipe unique avec une structuration en deux axes thématiques (structure moléculaire et réactivité moléculaire) reposant sur le savoir-faire et les domaines d'excellence de l'unité, et un axe transverse chimie durable et environnementale. Les projets sont nombreux, tout à la fois réalistes et ambitieux et il faudra veiller à éviter une dispersion des forces et des moyens de recherche. La promotion des collaborations internes au service de ces projets ne devra pas occulter la nécessité de garder des défis et objectifs scientifiques clairs dans les domaines d'excellence qui caractérisent l'unité. La modification de l'écosystème de recherche et de formation local par la création de l'entité NewUni et le rattachement de l'École Polytechnique à celle-ci, même si elle génère une inquiétude légitime, devra être prise comme une nouvelle opportunité pour faire rayonner les travaux et les personnels de l'unité.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'unité est structurée en trois équipes. Comme recommandé dans le précédent rapport, l'un des objectifs de la fusion des précédentes unités était de réussir cette transition en promouvant des projets scientifiques transverses tout en maintenant l'expertise de chacune des équipes au plus haut niveau. Ceci a été partiellement réalisé, en particulier par des interactions spontanées entre chercheurs, non formellement soutenues par l'unité. Les techniques analytiques et de modélisation sont utilisées non seulement dans le cadre des activités de service mais aussi pour des thématiques propres de recherche ainsi que dans le cadre de collaborations internes. Même si une des équipes a été fragilisée par des départs de chercheurs, l'excellence de l'unité est réelle. Compte tenu de cette évolution, une structuration en thématiques est proposée pour la prochaine mandature.

CRITÈRE 1 : QUALITÉ DES PRODUITS ET ACTIVITÉS DE LA RECHERCHE

A - Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité scientifique

Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité de l'unité Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Journaux / Revues	
Articles scientifiques	149
Articles de synthèse / revues bibliographiques	6
Autres articles (articles publiés dans des revues professionnelles ou techniques, etc.)	
Ouvrages	
Direction et coordination d'ouvrages scientifiques / édition scientifique	
Chapitres d'ouvrage	4
Colloques / congrès, séminaires de recherche	
Éditions d'actes de colloques / congrès	
Articles publiés dans des actes de colloques / congrès	
Autres produits présentés dans des colloques / congrès et des séminaires de recherche	
Organisation de colloques / congrès	6
Produits et outils informatiques	
Logiciels	1
Bases de données	
Outils d'aide à la décision	
Outils présentés dans le cadre de compétitions de solveurs	
Développements instrumentaux et méthodologiques	
Prototypes et démonstrateurs	

Plateformes et observatoires	
Autres produits propres à une discipline	
Créations artistiques théorisées	
Mises en scènes	
Films	
Activités éditoriales	
Participation à des comités éditoriaux (journaux scientifiques, revues, collections, etc.)	1
Direction de collections et de séries	
Activités d'évaluation	
Évaluation d'articles et d'ouvrages scientifiques (relecture d'articles / reviewing)	Oui
Évaluation de projets de recherche	Oui
Évaluation de laboratoires (type Hcéres)	Oui
Responsabilités au sein d'instances d'évaluation	Oui
Contrats de recherche financés par des institutions publiques ou caritatives	
Contrats européens (ERC, H2020, etc.) et internationaux (NSF, JSPS, NIH, banque mondiale, FAO, etc.)	3
Contrats nationaux (ANR, PHRC, FUI, INCA, etc.)	7
Contrats avec les collectivités territoriales	
Contrats financés dans le cadre du PIA	
Contrats financés par des associations caritatives et des fondations (ARC, FMR, FRM, etc.)	
Post-doctorants et chercheurs séniors accueillis	
Post-doctorants	10
Chercheurs séniors accueillis	3
Indices de reconnaissance	
Prix	2
Distinctions	1
Appartenance à l'IUF	
Responsabilités dans des sociétés savantes	Oui
Invitations à des colloques / congrès à l'étranger	11
Séjours dans des laboratoires étrangers	8

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité montre une forte production scientifique [plus de 155 publications pour 18 permanents (11 C, EC, IR, IE)] souvent dans les meilleurs journaux de la discipline (IF >5, dont généralistes comme 3 *J. Am. Chem. Soc.*, 5 *Angew. Chem. Int. Ed.*, 1 *Chem. Sci.*, 11 *Chem. Eur. J.*, 7 *Chem. Commun.*, etc.). On note des indices de reconnaissance de tout premier plan au niveau européen comme un projet ERC *Starting Grant* (2017) et la participation à 2 ITN. L'obtention de prix et invitations dans des congrès internationaux reconnus, la participation aux comités éditoriaux et à l'évaluation de la recherche au sens large sont des témoins de la visibilité du LCM.

L'attractivité de l'unité se traduit également par la réussite aux appels à projets nationaux type ANR, régionaux et locaux, par le nombre et la diversité des recrutements des non-permanents accueillis, par son implication dans différents réseaux à tous niveaux (IRs, labex, DIMs, FR, etc.) ainsi que dans l'organisation de colloques. L'unité est également investie dans la gestion de plateformes scientifiques et techniques.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Dans la nouvelle structuration thématique, il faudra rester attentif à la modification de l'écosystème de recherche due à la création de « NewUni » et aux conséquences en termes d'accès à certains financements ou formations (Comue UPSay, ED 2MIB).

Appréciation sur la production, le rayonnement et l'attractivité

L'unité montre un rayonnement au meilleur niveau scientifique international comme en témoignent la très bonne voire excellente qualité de sa production, les succès aux appels d'offres sélectifs et les distinctions obtenues. Une attention particulière devra être portée aux évolutions de l'écosystème local pour maintenir et améliorer encore cette position. Il faudra aussi veiller à l'implication de l'ensemble des personnels en synergie, à éviter l'éparpillement des projets et thèmes de recherche pour maintenir l'excellence de la production de l'unité et l'efficacité de la recherche.

B - Interactions avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Interactions de l'unité avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Brevets, licences, déclarations d'invention	
Déclarations d'invention	
Brevets déposés	
Brevets acceptés	4
Brevets licenciés	
Interactions avec les acteurs socio-économiques	
Contrats de R&D avec des industriels	5
Bourses Cifre	4
Créations de laboratoires communs avec une / des entreprise(s)	
Création de réseaux ou d'unités mixtes technologiques	
Création d'entreprise, de start-up	
Activités d'expertise scientifique	
Activités de consultant	
Participation à des instances d'expertises (type Anses) ou de normalisation	
Expertise juridique	
Rapports d'expertises techniques, produits des instances de normalisation	
Produits destinés au grand public	

Émissions radio, TV, presse écrite	4
Produits de vulgarisation : articles, interviews, éditions, vidéos, etc.	3
Produits de médiation scientifique	Oui
Débats science et société	1

Points forts et possibilités liées au contexte

Une interaction très forte avec le milieu socio-économique est révélée par le nombre conséquent de dispositifs Cifre et de contrats R&D. Les prises de brevet indiquent également le souci de protection des réalisations de l'unité. Ces succès sont directement issus de la qualité et de la créativité scientifiques dans tous les domaines d'activité de l'unité. La forte prise en compte des préoccupations sociétales actuelles telles que traduites par les nombreuses interactions avec le grand public est également à souligner.

Points à améliorer et risques liés au contexte

On ne peut qu'encourager l'unité à poursuivre son effort dans ces domaines même si les interactions avec le milieu socio-économique sont par essence fluctuantes et fragiles dans le temps.

Appréciation sur les interactions avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Les prises de brevets, le nombre de contrats de R&D et de dispositifs Cifre obtenus sur la période indiquent clairement que les interactions de l'unité avec le milieu socio-économique sont très bonnes. On encouragera la prise de brevets et assimilés dans le domaine de l'analytique et de l'environnement. La qualité scientifique et technique dont fait preuve ici l'unité est le gage d'un dynamisme pérenne.

C – Implication dans la formation par la recherche

Implication dans la formation par la recherche de l'unité Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Produits des activités pédagogiques et didactiques	
Ouvrages	
E-learning, moocs, cours multimédia, etc.	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	73
Nombre moyen d'article par étudiant	3
Formation	
Nombre de personnes Habilitées à Diriger des Recherche (HDR)	11
Nombre d'HDR soutenues pendant la période	3
Nombre de doctorants	27
dont doctorants bénéficiant d'un contrat spécifique au doctorat	
Nombre de thèses soutenues	16
Durée moyenne des thèses	3 ans

Stagiaires (BTS, M1, M2)	10
Labellisation nationale ou internationale des formations (Erasmus Mundus p ex.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

Malgré un nombre de permanents HDR relativement modéré (11), on constate un encadrement de doctorants (27 doctorants, 16 thèses soutenues) de haut niveau. Trois HDR ont été soutenues. La durée moyenne des thèses de trois ans montre une excellente implication des personnels dans un encadrement de qualité confirmé par un nombre moyen de trois articles par doctorant, sans abandon de thèse. Le taux d'employabilité des doctorants est remarquable (94 % à 6 mois, 72 % CDI, 69 % privé). L'accueil d'étudiants stagiaires à différents niveaux est également satisfaisant. Tous les chercheurs participent très activement à l'enseignement au niveau master à l'École Polytechnique principalement, ainsi que dans son montage et son organisation (M2P, Graduate degree, co-direction). Un investissement très important des personnels dans la formation permanente est à souligner, en particulier dans le domaine de la chimie analytique et plus récemment de l'électrochimie.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Il faudra veiller au passage à la nouvelle structuration NewUni et à l'implication de l'unité dans cette nouvelle organisation ; des financements locaux ou l'accès à des formations pourraient alors se retrouver impossibles ou problématiques. L'augmentation du nombre d'HDR ou encadrants de thèse ne pourrait être que bénéfique. La vigilance de l'ensemble des acteurs de l'unité dans ce contexte de restructuration sera nécessaire.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication des personnels dans la formation à et par la recherche est excellente aussi bien en terme d'encadrement de doctorants ou stagiaires que pour la promotion d'enseignements et de formations de haut niveau.

CRITÈRE 2 : ORGANISATION ET VIE DE L'UNITÉ

Organisation et vie de l'unité Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Ratio femmes/hommes dans l'unité	30/40
Ratio femmes/hommes parmi les enseignants-chercheurs et chercheurs de l'unité	"4/10"
Ratio femmes/hommes parmi les docteurs et doctorants de l'unité	19/31
Ratio femmes/hommes aux postes de responsabilité de l'unité (direction, sous-direction de l'unité, direction d'équipe, etc.)	"2/2"

Points forts et possibilités liées au contexte

Une assemblée générale se réunissant deux fois par an tient lieu de conseil de laboratoire ce qui est raisonnable compte tenu de la taille de l'unité. Une réflexion collégiale a conduit à proposer une organisation de l'unité en axes thématiques pour la prochaine mandature. Des réunions mensuelles préparées par un bureau exécutif comprenant l'équipe de direction et quatre élus pour un an permettront une concertation sur l'organisation opérationnelle et budgétaire de l'unité. Des demi-journées thématiques annuelles seront organisées afin de promouvoir les convergences thématiques transverses. L'unité a accueilli de nouveaux personnels C, EC et ITA ; durant la même période des collègues ont quitté l'unité. Cela a permis une meilleure structuration de certains services et plateformes mais a fragilisé une équipe de recherche. L'unité répond de façon satisfaisante aux défis concernant la parité, l'intégrité scientifique, la sécurité et la protection des données. L'unité finance largement son activité à l'aide de ressources propres variées, signe de la qualité de son activité scientifique et du dynamisme de ses personnels. Les personnels ITA, tout comme les personnels non-permanents, sont satisfaits du travail et des relations au sein de l'unité.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Les différents départs de l'unité ont conduit à une restructuration scientifique en axes thématiques pour la prochaine mandature. Il faudra veiller à valoriser au mieux les compétences et constituer une masse critique suffisante sur des projets phares pour éviter les dispersions. L'unité devra également faire face à deux départs à la retraite de collègues ITA essentiels à son fonctionnement. Les personnels d'appui à la recherche seraient sensibles à plus de transparence lors des classements en vue des promotions et de la définition des fiches de postes. Les possibilités de promotions sont en nombre notablement dérisoire et les perspectives de carrière peu motivantes. Il y a un risque à voir partir les collègues avec perte de compétences pouvant remettre en cause l'un ou l'autre des services. L'unité pourrait s'engager dans la mise en place d'une démarche qualité. Le mode de gestion du budget en interne n'est pas précisé.

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'unité

Une nouvelle organisation thématique est proposée pour promouvoir une activité scientifique de qualité tout en faisant face à des fragilisations d'équipes de recherche. L'unité est financée largement par des ressources propres variées, gage de l'excellence de son activité scientifique. Les perspectives de carrière des personnels ITA sont beaucoup trop limitées.

CRITÈRE 3 : PERSPECTIVES SCIENTIFIQUES À CINQ ANS ET FAISABILITÉ DU PROJET

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité souhaite évoluer d'une organisation par équipes (3) en deux axes thématiques qui sont « Structure Moléculaire » et « Réactivité Moléculaire » et un axe transversal autour de la « Chimie Environnementale et Durable ». Cette organisation découle de choix internes et d'adéquation au nouvel écosystème de recherche local et à la création de NewUni. Cette organisation préserve et amplifie les domaines d'excellence de l'unité. Les principaux projets combineront pour certains des expertises croisées. On peut citer la détection et la caractérisation de produits de dégradations et métabolites de polluants émergents incluant les aspects prédictifs et mécanistiques. Ceci est en lien avec les techniques de diagnostic de pollution et de dépollution, et de valorisation des ressources naturelles. L'activation de petites molécules est connectée à ce thème par les choix des cibles comme l'activation de liaisons fortes et inertes C-H du méthane, C-O pour des synthèses sélectives et dépolymérisation de la lignine, et l'oxydation de l'eau. L'utilisation de métaux 3d plus abondants est un défi de cette chimie qui inclue également le calcium. La chimie des ligands non-innocents couplée au savoir-faire traditionnel de l'unité en chimie du phosphore qui va continuer de se développer permettra un contrôle du transfert d'électron en particulier en chimie des lanthanides avec des applications potentielles issues de leurs propriétés électroniques originales. La modélisation trouvera ici un champ d'application avec un défi particulier sur l'évaluation de la fiabilité des méthodes.

Points à améliorer et risques liés au contexte

La direction de l'unité et le bureau exécutif devront veiller à l'implication de toute l'unité dans la définition, la mise en œuvre et l'évolution des thématiques, en particulier l'intégration de l'ensemble des personnels et des compétences pour éviter l'isolement et l'éparpillement. Il faudra peut-être envisager de restreindre le nombre de projets très ambitieux afin de conserver une masse critique suffisante affectée à chacun d'eux. Il faudra également s'assurer que des défis scientifiques et techniques à relever seront la priorité de ces choix.

Appréciation sur les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

La structuration de la recherche en deux axes thématiques et un axe transverse autorisera des projets collaboratifs pour certains grands défis. Les domaines d'excellence traditionnels de l'unité (chimie du phosphore et des lanthanides, analyse de produits en matrice complexes, modélisation), qu'il faudra préserver et soutenir, garantissent la faisabilité des projets à différents niveaux. Certaines orientations nouvelles émergent tant en chimie analytique qu'en chimie moléculaire.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

A – Recommandations concernant les produits et activités de la recherche

La production de l'unité est très bonne voire excellente en termes de qualité et de quantité tant pour la production scientifique, la participation aux formations avancées (excellent) que pour les relations avec le milieu socio-économique qu'il conviendra de maintenir et de conforter. Ceci restera un défi dans la nouvelle organisation par axes où, tout en maintenant la créativité et l'originalité dans chacune des thématiques phares de l'unité, une synergie entre les différents acteurs sera nécessaire pour le succès de certains projets collaboratifs.

B – Recommandations concernant l'organisation et la vie de l'unité

Hormis la collégialité proposée pour le fonctionnement par axes thématiques, l'unité devra rester attentive à la modification de l'écosystème de recherche amené par la création NewUni. Elle devra mettre en œuvre une politique efficace de réponse aux appels d'offres et opportunités qui se présenteront dans ce nouveau contexte..

C – Recommandations concernant les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Les perspectives scientifiques dégagées par la nouvelle organisation par axes thématiques sont riches et l'unité a tous les moyens de réaliser ces objectifs ambitieux. Il faudra rester vigilant à maintenir des moyens humains suffisants sur des projets risqués et éviter la dispersion. Par contre, la richesse des projets proposés et l'excellence de l'unité ne doivent pas masquer les problèmes potentiels dus à un manque de masse critique pour mener à bien certains projets très ambitieux.

ANALYSE ÉQUIPE PAR ÉQUIPE

Équipe 1 : HC Hétérochimie et Coordination

Nom de la responsable : M^{me} Audrey AUFRANT

DOMAINE D'ACTIVITÉ DE L'ÉQUIPE

L'activité de l'équipe HC est concentrée sur l'étude de l'interaction métal/ligand, métal/substrats et des transferts électroniques mis en jeu. Elle a trait aussi au développement de réactivités originales et au développement de méthodes catalytiques, de procédés efficaces et d'objets moléculaires performants en lien avec des préoccupations sociétales actuelles.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

	E1	
	HC Hétérochimie et Coordination	
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2018	Nombre au 01/01/2020
Professeurs et assimilés	0,5	
Maîtres de conférences et assimilés		
Directeurs de recherche et assimilés	1	
Chargés de recherche et assimilés	5	
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...		
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur		
ITA-BIATSS autres personnels cadre et non cadre EPIC...	3	
Sous-total personnels permanents en activité	10	0
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres		
Chercheurs non titulaires, émérites et autres	9	
<i>dont doctorants</i>	6	
Autres personnels non titulaires	3	
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	12	
Total personnels	22	0

CRITÈRE 1 : QUALITÉ DES PRODUITS ET ACTIVITÉS DE LA RECHERCHE

A - Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité scientifique

Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Journaux / Revues	
Articles scientifiques	87
Articles de synthèse / revues bibliographiques	1
Autres articles (articles publiés dans des revues professionnelles ou techniques, etc.)	
Ouvrages	
Direction et coordination d'ouvrages scientifiques / édition scientifique	
Chapitres d'ouvrage	1
Colloques / congrès, séminaires de recherche	
Éditions d'actes de colloques / congrès	
Articles publiés dans des actes de colloques / congrès	
Autres produits présentés dans des colloques / congrès et des séminaires de recherche	
Organisation de colloques / congrès	2
Produits et outils informatiques	
Logiciels	
Bases de données	
Outils d'aide à la décision	
Outils présentés dans le cadre de compétitions de solveurs	
Développements instrumentaux et méthodologiques	
Prototypes et démonstrateurs	
Plateformes et observatoires	
Autres produits propres à une discipline	
Créations artistiques théorisées	
Mises en scènes	
Films	
Activités éditoriales	
Participation à des comités éditoriaux (journaux scientifiques, revues, collections, etc.)	
Direction de collections et de séries	
Activités d'évaluation	

Évaluation d'articles et d'ouvrages scientifiques (relecture d'articles / reviewing)	Oui
Évaluation de projets de recherche	Oui
Évaluation de laboratoires (type Hcéres)	Oui
Responsabilités au sein d'instances d'évaluation	Oui
Contrats de recherche financés par des institutions publiques ou caritatives	
Contrats européens (ERC, H2020, etc.) et internationaux (NSF, JSPS, NIH, banque mondiale, FAO, etc.)	2
Contrats nationaux (ANR, PHRC, FUI, INCA, etc.)	3
Contrats avec les collectivités territoriales	
Contrats financés dans le cadre du PIA	
Contrats financés par des associations caritatives et des fondations (ARC, FMR, FRM, etc.)	
Post-doctorants et chercheurs séniors accueillis	
Post-doctorants	7
Chercheurs séniors accueillis	2
Indices de reconnaissance	
Prix	1
Distinctions	1
Appartenance à l'IUF	
Responsabilités dans des sociétés savantes	Oui
Invitations à des colloques / congrès à l'étranger	8
Séjours dans des laboratoires étrangers	8

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe HC développe des activités de recherche fondamentales originales en chimie de coordination et méthodologie organométallique. La synthèse de ligands élaborés à base de phosphore notamment, un savoir-faire historique de l'équipe, et l'étude (expérimentale et théorique) des relations structure/réactivité/spectroscopies de complexes organométalliques sont des thématiques sur lesquelles l'équipe est internationalement reconnue. Plusieurs articles à haut facteur d'impact (4 *Angew. Chem.* et 3 *JACS*) ont été publiés sur la période incluant notamment des travaux récents très novateurs sur l'utilisation de ligands redox non-innocents pour différencier la structure électronique (et ainsi la réactivité) de complexes organométalliques via la synthèse de composés hétérométalliques lanthanides/métaux de transition. Le niveau de financement de la recherche par les partenaires académiques est excellent (avec notamment 3 post-docs labex Charm3at, 3 ANR, 1 ERC starting), en accord avec l'originalité des travaux de recherche développés. L'arrivée de deux CR CNRS sur la période (1 recrutement et 1 mutation), les invitations à des colloques (8) et les séminaires invités (30) témoignent également des fortes visibilité et attractivité de l'équipe HC.

Points à améliorer et risques liés au contexte

La séparation récente de l'École Polytechnique et de l'Université Paris-Saclay est source d'incertitudes quant à l'environnement académique local futur, en particulier concernant la nature des appels d'offre associés.

Appréciation sur la production, le rayonnement et l'attractivité

La production et la visibilité scientifiques de l'équipe HC sont excellentes autant d'un point de vue qualitatif (30 % d'articles dans des journaux généralistes à IF > 5, 8 conférences invitées en colloques internationaux) que quantitatif (87 articles). Le niveau de financement de la recherche par des partenaires académiques est excellent.

B - Interactions avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Interactions de l'équipe avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Brevets, licences, déclarations d'invention	
Déclarations d'invention	
Brevets déposés	
Brevets acceptés	4
Brevets licenciés	
Interactions avec les acteurs socio-économiques	
Contrats de R&D avec des industriels	
Bourses Cifre	
Créations de laboratoires communs avec une / des entreprise(s)	
Création de réseaux ou d'unités mixtes technologiques	
Création d'entreprise, de start-up	
Activités d'expertise scientifique	
Activités de consultant	
Participation à des instances d'expertises (type Anses) ou de normalisation	
Expertise juridique	
Rapports d'expertises techniques, produits des instances de normalisation	
Produits destinés au grand public	
Émissions radio, TV, presse écrite	
Produits de vulgarisation : articles, interviews, éditions, vidéos, etc.	
Produits de médiation scientifique	
Débats science et société	

Points forts et possibilités liées au contexte

La diversité et la complémentarité des compétences au sein de l'équipe HC ont permis le dépôt de quatre brevets (acceptés) sur la période de référence dans des domaines différents, allant de l'utilisation de matériaux poreux à base d'Iridium pour la catalyse d'oxydation de l'eau (1 brevet), de complexes organométalliques (1 brevet) au développement de méthodologies de synthèses simples et peu coûteuses

d'OLEDs (2 brevets étendus à l'international en 2017). À cet égard, l'équipe a obtenu deux projets de prématuration financés par l'index et le labex permettant la réalisation des travaux sur les OLEDs, témoignant de sa capacité à obtenir des financements pour une recherche plus appliquée. L'implication de l'équipe HC dans des activités de vulgarisation scientifique (1 conférence et 2 articles sur la période) est également à souligner.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Les différentes expertises de l'équipe, notamment en méthodologie de synthèse pour une chimie durable, amènent le comité à encourager des interactions plus fortes avec l'industrie (pas de contrats R&D avec les industriels sur la période évaluée).

Appréciation sur les interactions avec l'environnement, les impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

L'équipe est en mesure d'interagir avec les acteurs socio-économiques, en témoigne l'obtention de deux projets de pré-maturation. Au vu des compétences de l'équipe et de la stratégie à cinq ans de l'unité (orientation forte vers une chimie durable), le comité encourage des interactions plus fortes avec l'industrie.

C – Implication dans la formation par la recherche

Implication dans la formation par la recherche de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Produits des activités pédagogiques et didactiques	
Ouvrages	
E-learning, moocs, cours multimédia, etc.	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	30
Nombre moyen d'article par étudiant	
Formation	
Nombre de personnes Habilitées à Diriger des Recherche (HDR)	
Nombre d'HDR soutenues pendant la période	1
Nombre de doctorants	14,5
dont doctorants bénéficiant d'un contrat spécifique au doctorat	
Nombre de thèses soutenues	7,5
Durée moyenne des thèses	
Stagiaires (BTS, M1, M2)	
Labellisation nationale ou internationale des formations (Erasmus Mundus p ex.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe HC participe de manière très significative à la formation par la recherche, tant au niveau master (montage de formation, encadrements et soutenances de stages, de travaux dirigés/pratiques) que doctoral (avec 7,5 thèses soutenues et la formation en cours ou effectuée de 14,5 doctorants sur la période). Tous les chercheurs effectuent de l'enseignement, particulièrement en M2 (Master chimie EP, graduate degree EP, Master pro IMAM) et sont également impliqués dans les formations doctorales pour l'insertion professionnelle (2 formations) organisées par l'unité. Le niveau de publication des doctorants est très bon (4 publications/thèse

soutenue) ainsi que leur taux d'employabilité six mois après la thèse (94 % dont 72 % en CDI). Aucun abandon de thèse n'est à déplorer sur la période.

Points à améliorer et risques liés au contexte

La séparation récente de l'École Polytechnique et de l'Université Paris-Saclay impose le rattachement de l'unité à une nouvelle ED, dont les contours et la politique scientifique restent à définir.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication de tous les membres de l'équipe HC dans la formation à et par la recherche est excellente et l'insertion professionnelle des doctorants formés est remarquable.

CRITÈRE 2 : ORGANISATION ET VIE DE L'ÉQUIPE

Organisation et vie de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Ratio femmes/hommes dans l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les enseignants-chercheurs et chercheurs de l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les docteurs et doctorants de l'équipe	
Ratio femmes/hommes aux postes de responsabilité de l'équipe (direction, sous-direction de l'équipe, etc.)	

Aucun élément n'est renseigné dans le rapport d'activité (et les documents) permettant de renseigner sur l'organisation et la vie de l'équipe HC.

Points forts et possibilités liées au contexte

N/A.

Points à améliorer et risques liés au contexte

N/A.

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Aucun élément n'est renseigné dans le rapport d'activité (et les documents) permettant de renseigner sur l'organisation et la vie de l'équipe HC.

CRITÈRE 3 : PERSPECTIVES SCIENTIFIQUES À CINQ ANS ET FAISABILITÉ DU PROJET

Points forts et possibilités liées au contexte

Plusieurs aspects importants du projet scientifique à cinq ans de l'unité incorporent de manière transverse les thématiques phares de l'équipe HC. À cet égard, la caractérisation expérimentale/théorique de complexes moléculaires originaux, le développement de méthodes de modélisation pour la prédiction de structures électroniques, l'activation de liaisons peu réactives (liaisons C-H par exemple) et la chimie de coordination des oxydes de phosphines pourraient mener à des applications intéressantes en chimie durable tout en permettant des avancées fondamentales en chimie moléculaire. La faisabilité de ces projets s'appuie sur le savoir-faire établi et les résultats prometteurs publiés ces dernières années par l'équipe HC. La stratégie à cinq ans de l'unité, qui vise notamment au développement d'outils moléculaires et de méthodologies de synthèse pour une chimie durable répondant aux enjeux sociétaux (activation/valorisation du CO et CH₄, oxydation de l'eau, valorisation

de la biomasse, détection et destruction d'organophosphorés), est ambitieuse et parfaitement en adéquation avec l'expertise et les travaux de recherche de pointe de l'équipe HC.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Une stratégie (à 5 ans) de valorisation de la biomasse est également envisagée et brièvement mentionnée dans le rapport d'activité. Le développement d'une thématique récente à très forte compétition sur l'oxydation de l'eau fait aussi partie des axes de recherche qui sont proposés.

Appréciation sur les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Le projet du Laboratoire (2 axes thématiques et un axe transverse, une seule équipe) incorpore les thématiques phares de l'équipe HC. Les projets liés à ces thématiques visant une chimie durable sont ambitieux et réalisables au vu des expertises et des synergies possibles au sein du laboratoire. D'un point de vue général, au vu du nombre et de la diversité des projets/thématiques déjà proposés par ailleurs, une concentration sur un nombre d'objectifs restreints mais atteignables avec des masses critiques suffisantes est recommandée.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

A – Recommandations concernant les produits et activités de la recherche

Tout en maintenant une production et une visibilité scientifiques excellentes, les interactions avec les acteurs socio-économiques (industrie) seraient à améliorer.

B – Recommandations concernant l'organisation et la vie de l'équipe

N/A.

C – Recommandations concernant les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Les projets de l'unité liés aux thématiques de l'équipe HC visant une chimie durable sont ambitieux et réalisables, mais au vu de la diversité et du nombre de projets envisagés à cinq ans, il est souhaitable de cibler quelques projets prioritaires (pour le contrat 2020-24) afin d'éviter toute dispersion.

Équipe 2 : SIM

Nom du responsable : M. Gilles FRISON

DOMAINE D'ACTIVITÉ DE L'ÉQUIPE

L'équipe SIMM étudie des espèces moléculaires (ions inorganiques, bioorganiques et bioinorganiques, complexes de métaux de transition et des éléments f) par modélisation classique et/ou quantique. Elle développe également des outils de modélisation pour la structure et la spectroscopie de systèmes flexibles en phase gazeuse.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

	E2	
	SIM	
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2018	Nombre au 01/01/2020
Professeurs et assimilés		
Maîtres de conférences et assimilés		
Directeurs de recherche et assimilés	1	
Chargés de recherche et assimilés	1	
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...		
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur		
ITA-BIATSS autres personnels cadre et non cadre EPIC...	1	
Sous-total personnels permanents en activité	3	0
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres		
Chercheurs non titulaires, émérites et autres	1	
<i>dont doctorants</i>	1	
Autres personnels non titulaires	1	
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	2	
Total personnels	5	0

CRITÈRE 1 : QUALITÉ DES PRODUITS ET ACTIVITÉS DE LA RECHERCHE

A - Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité scientifique

Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Journaux / Revues	
Articles scientifiques	45
Articles de synthèse / revues bibliographiques	2
Autres articles (articles publiés dans des revues professionnelles ou techniques, etc.)	
Ouvrages	
Direction et coordination d'ouvrages scientifiques / édition scientifique	
Chapitres d'ouvrage	2
Colloques / congrès, séminaires de recherche	
Éditions d'actes de colloques / congrès	
Articles publiés dans des actes de colloques / congrès	
Autres produits présentés dans des colloques / congrès et des séminaires de recherche	
Organisation de colloques / congrès	2
Produits et outils informatiques	
Logiciels	
Bases de données	
Outils d'aide à la décision	
Outils présentés dans le cadre de compétitions de solveurs	
Développements instrumentaux et méthodologiques	
Prototypes et démonstrateurs	
Plateformes et observatoires	
Autres produits propres à une discipline	
Créations artistiques théorisées	
Mises en scènes	
Films	
Activités éditoriales	
Participation à des comités éditoriaux (journaux scientifiques, revues, collections, etc.)	
Direction de collections et de séries	
Activités d'évaluation	

Évaluation d'articles et d'ouvrages scientifiques (relecture d'articles / reviewing)	Oui
Évaluation de projets de recherche	Oui
Évaluation de laboratoires (type Hcéres)	Non
Responsabilités au sein d'instances d'évaluation	Non
Contrats de recherche financés par des institutions publiques ou caritatives	
Contrats européens (ERC, H2020, etc.) et internationaux (NSF, JSPS, NIH, banque mondiale, FAO, etc.)	
Contrats nationaux (ANR, PHRC, FUI, INCA, etc.)	1
Contrats avec les collectivités territoriales	
Contrats financés dans le cadre du PIA	
Contrats financés par des associations caritatives et des fondations (ARC, FMR, FRM, etc.)	
Post-doctorants et chercheurs séniors accueillis	
Post-doctorants	2
Chercheurs séniors accueillis	1
Indices de reconnaissance	
Prix	1
Distinctions	
Appartenance à l'IUF	
Responsabilités dans des sociétés savantes	
Invitations à des colloques / congrès à l'étranger	3
Séjours dans des laboratoires étrangers	

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe SIM développe des activités de recherche en étroite collaboration avec différents groupes expérimentaux dans lesquels des approches théoriques sont utilisées afin de parvenir à une meilleure compréhension des systèmes étudiés. Un axe fort des travaux de l'équipe concerne la modélisation des données obtenues lors d'expériences de spectroscopie d'action infrarouge IRMPD (IR multiphoton dissociation). Ces travaux consistent notamment au développement d'un champ de force polarisable afin de pouvoir effectuer des simulations de dynamique moléculaire classique plus précises. Cette méthodologie a été utilisée pour étudier des agrégats de molécules d'eau de taille croissante contenant un ion de charge allant de -2 à +3. Dans un autre registre, différents outils de la chimie théorique ont été utilisés pour analyser la structure électronique de différents édifices moléculaires (peptides réduits par un électron en phase gazeuse, complexes de ligands NHC) afin de mieux comprendre les transferts électroniques dans ces systèmes. Les résultats de ces études sont généralement publiés dans de très bons journaux du domaine de la chimie physique (5 *PCCP*, 5 *JCP A* ou *B*).

Points à améliorer et risques liés au contexte

Le rapport ne précise pas comment l'arrivée récente d'un professeur dont les recherches portent en partie sur la modélisation de mécanismes de réactions en catalyse homogène pourrait permettre de compenser les pertes en forces vives de l'équipe (un DR à 40 %, départ d'un CRCN et fin de l'éméritat d'un professeur). La taille sous-critique des personnels impliqués dans les thématiques portées par l'équipe SIM fait craindre une perte de visibilité de cette compétence historique du laboratoire dans le futur.

Appréciation sur la production, le rayonnement et l'attractivité

Compte tenu de la taille de l'équipe, la production scientifique est quantitativement et qualitativement de très bonne qualité (45 articles dont 25 % environ d'IF supérieur à 5). Elle concerne essentiellement des journaux spécialisés en chimie physique. Le rayonnement et l'attractivité de l'équipe sont très bons avec, notamment, une très forte participation des étudiants et post-doctorants.

B - Interactions avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Interactions de l'équipe avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Brevets, licences, déclarations d'invention	
Déclarations d'invention	
Brevets déposés	
Brevets acceptés	
Brevets licenciés	
Interactions avec les acteurs socio-économiques	
Contrats de R&D avec des industriels	
Bourses Cifre	
Créations de laboratoires communs avec une / des entreprise(s)	
Création de réseaux ou d'unités mixtes technologiques	
Création d'entreprise, de start-up	
Activités d'expertise scientifique	
Activités de consultant	
Participation à des instances d'expertises (type Anses) ou de normalisation	
Expertise juridique	
Rapports d'expertises techniques, produits des instances de normalisation	
Produits destinés au grand public	
Émissions radio, TV, presse écrite	
Produits de vulgarisation : articles, interviews, éditions, vidéos, etc.	
Produits de médiation scientifique	
Débats science et société	

Points forts et possibilités liées au contexte

N/A.

Points à améliorer et risques liés au contexte

N/A.

Appréciation sur les interactions avec l'environnement, les impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Il n'existe pas de relations claires avec le monde socio-économique mais il est souvent difficile pour une équipe de chimie théorique, a fortiori petite, de parvenir à bien se positionner dans ce contexte.

C – Implication dans la formation par la recherche

Implication dans la formation par la recherche de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Produits des activités pédagogiques et didactiques	
Ouvrages	
E-learning, moocs, cours multimédia, etc.	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	11
Nombre moyen d'article par étudiant	
Formation	
Nombre de personnes Habilitées à Diriger des Recherche (HDR)	
Nombre d'HDR soutenues pendant la période	2
Nombre de doctorants	6,5
dont doctorants bénéficiant d'un contrat spécifique au doctorat	
Nombre de thèses soutenues	5,5
Durée moyenne des thèses	
Stagiaires (BTS, M1, M2)	
Labellisation nationale ou internationale des formations (Erasmus Mundus p ex.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe SIM est très impliquée dans la formation par la recherche avec notamment un nombre important de thèses (5,5) et deux HDR soutenues sur la période. Le nombre de publications issues des thèses (11) est tout à fait satisfaisant. De plus, les membres de l'équipe SIM sont fortement impliqués dans des tâches d'enseignement au niveau master (professeur chargé de cours à l'École Polytechnique) et dans les tâches de management de l'enseignement (membre du conseil de perfectionnement du master chimie de l'Université de Paris-Saclay). Le domaine de la chimie physique est bien positionné par rapport aux centres d'intérêts des élèves polytechniciens pour espérer en attirer vers la filière chimie.

Points à améliorer et risques liés au contexte

La nouvelle géométrie du paysage universitaire avec la création de NewUni laisse planer des incertitudes sur les futurs flux de doctorants avec notamment le manque de visibilité sur la future école doctorale de NewUni.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication de l'équipe SIM dans la formation par la recherche est excellente avec un très bon dynamisme au niveau de l'encadrement doctoral. Le positionnement fort de la chimie théorique dans le cycle d'enseignement des élèves polytechniciens est un atout majeur pour l'équipe.

CRITÈRE 2 : ORGANISATION ET VIE DE L'ÉQUIPE

Organisation et vie de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Ratio femmes/hommes dans l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les enseignants-chercheurs et chercheurs de l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les docteurs et doctorants de l'équipe	
Ratio femmes/hommes aux postes de responsabilité de l'équipe (direction, sous-direction de l'équipe, etc.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

N/A.

Points à améliorer et risques liés au contexte

N/A.

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Compte tenu de la faible taille de l'équipe, il n'y a pas de données claires pour évaluer ce critère.

CRITÈRE 3 : PERSPECTIVES SCIENTIFIQUES À CINQ ANS ET FAISABILITÉ DU PROJET

Points forts et possibilités liées au contexte

La restructuration de l'unité en axes thématiques prend en partie son origine dans l'analyse de la taille sous-critique de l'équipe SIM pour le prochain plan. La volonté de développer de manière plus synergétique les recherches expérimentales et théoriques dans l'unité est un point tout à fait positif porteur d'avancées potentielles. La définition des axes « Structure Moléculaire » et « Réactivité Moléculaire » en particulier est tout à fait pertinente vis-à-vis des compétences en chimie théorique présentes dans l'unité. Chacun des thèmes pourra bénéficier de personnes ressources en modélisation. Dans ce contexte, des recherches collaboratives fructueuses pourront être menées. Le projet met clairement l'accent sur la complémentarité des approches et ne restreint pas les apports en modélisation à une prestation de service. À ce titre, la volonté de renforcer et développer la compétence sur l'évaluation de la fiabilité des méthodes de modélisation, voire de proposer des développements de méthodes de modélisation est un objectif ambitieux mais essentiel.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Le point de fragilité évident dans la restructuration proposée concerne le nombre de personnes effectivement impliquées dans des activités de modélisation. On peut l'estimer à un maximum de deux ETP pour toute l'unité. À ce titre, l'axe de recherche consistant à développer des méthodes de modélisation semble difficile à mener à bien sans renfort en termes de moyens humains. Toutefois, il est légitime de se poser la question de la pertinence d'un tel renfort dans un milieu ne disposant pas de la masse critique pour mener des discussions « théoriques » nécessaires aux développements méthodologiques.

Appréciation sur les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Le projet de l'unité, construit sur deux axes thématiques et un axe transverse, permet d'identifier clairement les domaines principaux (Structure et Réactivité Moléculaire) dans lesquels les compétences en chimie théorique des personnels pourraient abonder de manière pertinente aux projets proposés. Le comité suggère d'optimiser l'apport de la chimie théorique en proposant des formations doubles aux doctorants de l'équipe qui feraient à la fois les expériences et les calculs associés à leur projet.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

A – Recommandations concernant les produits et activités de la recherche

Si les publications sont très bien positionnées dans le domaine d'expertise de l'équipe, la chimie physique, l'implication, au travers de publications dans des journaux plus généralistes à plus fort impact, est à améliorer en vue d'augmenter la visibilité nationale et internationale des modélisateurs de l'unité.

B – Recommandations concernant l'organisation et la vie de l'équipe

N/A.

C – Recommandations concernant les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

La taille sous-critique atteinte par l'équipe SIM met clairement en danger cette compétence historique de l'unité dans le futur plan. La structuration proposée est un moyen de répondre à cette inquiétude. On pourra notamment profiter de l'arrivée récente d'un professeur compétent en modélisation de réactivité moléculaire pour consolider un axe modélisation qui intègre plus fortement les aspects Structure et Réactivité. Le faible nombre de permanents compétents dans le domaine de la modélisation va conduire à devoir faire des choix pour établir des axes de recherche prioritaires sur lesquels mettre les forces humaines. L'intégration systématique d'approches théoriques dans les futures thèses du laboratoire est sans doute une piste à suivre. Ceci devrait être d'autant plus facile que c'est une pratique déjà présente au laboratoire depuis de nombreuses années.

Équipe 3 : CHIMEN

Nom du responsable : M. Stéphane BOUCHONNET

DOMAINE D'ACTIVITÉ DE L'ÉQUIPE

L'activité de l'équipe CHIMEN s'articule autour de problématiques environnementales. L'activité essentielle porte sur la détection et la caractérisation de molécules inconnues à l'état de traces dans des matrices complexes, en particulier par spectrométrie de masse. La modélisation de mécanismes de dégradation en laboratoire et l'analyse de données par approche statistique (big data) sont des caractéristiques de l'activité de l'équipe.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

	E3	
	CHIMEN	
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2018	Nombre au 01/01/2020
Professeurs et assimilés		
Maîtres de conférences et assimilés		
Directeurs de recherche et assimilés		
Chargés de recherche et assimilés		
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...		
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur		
ITA-BIATSS autres personnels cadre et non cadre EPIC...	4	
Sous-total personnels permanents en activité	4	0
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres		
Chercheurs non titulaires, émérites et autres	4	
<i>dont doctorants</i>	4	
Autres personnels non titulaires	0	
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	4	
Total personnels	8	0

CRITÈRE 1 : QUALITÉ DES PRODUITS ET ACTIVITÉS DE LA RECHERCHE

A - Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité scientifique

Production de connaissances, activités et collaborations académiques concourant au rayonnement et à l'attractivité de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Journaux / Revues	
Articles scientifiques	27
Articles de synthèse / revues bibliographiques	3
Autres articles (articles publiés dans des revues professionnelles ou techniques, etc.)	
Ouvrages	
Direction et coordination d'ouvrages scientifiques / édition scientifique	
Chapitres d'ouvrage	1
Colloques / congrès, séminaires de recherche	
Éditions d'actes de colloques / congrès	
Articles publiés dans des actes de colloques / congrès	
Autres produits présentés dans des colloques / congrès et des séminaires de recherche	
Organisation de colloques / congrès	2
Produits et outils informatiques	
Logiciels	1
Bases de données	
Outils d'aide à la décision	
Outils présentés dans le cadre de compétitions de solveurs	
Développements instrumentaux et méthodologiques	
Prototypes et démonstrateurs	
Plateformes et observatoires	
Autres produits propres à une discipline	
Créations artistiques théorisées	
Mises en scènes	
Films	
Activités éditoriales	
Participation à des comités éditoriaux (journaux scientifiques, revues, collections, etc.)	1
Direction de collections et de séries	
Activités d'évaluation	

Évaluation d'articles et d'ouvrages scientifiques (relecture d'articles / reviewing)	Oui
Évaluation de projets de recherche	Oui
Évaluation de laboratoires (type Hcéres)	Non
Responsabilités au sein d'instances d'évaluation	Non
Contrats de recherche financés par des institutions publiques ou caritatives	
Contrats européens (ERC, H2020, etc.) et internationaux (NSF, JSPS, NIH, banque mondiale, FAO, etc.)	1
Contrats nationaux (ANR, PHRC, FUI, INCA, etc.)	1
Contrats avec les collectivités territoriales	
Contrats financés dans le cadre du PIA	
Contrats financés par des associations caritatives et des fondations (ARC, FMR, FRM, etc.)	
Post-doctorants et chercheurs séniors accueillis	
Post-doctorants	1
Chercheurs séniors accueillis	
Indices de reconnaissance	
Prix	
Distinctions	
Appartenance à l'IUF	
Responsabilités dans des sociétés savantes	
Invitations à des colloques / congrès à l'étranger	
Séjours dans des laboratoires étrangers	

Points forts et possibilités liées au contexte

L'activité de recherche de l'équipe s'articule autour des problématiques environnementales. Elle porte sur la détection et la caractérisation de molécules inconnues à l'état de traces dans des matrices complexes. Ces recherches s'accompagnent par la modélisation de mécanismes de dégradation en laboratoire. Cette activité se traduit par une bonne production scientifique (environ 1,6/an par ETP) d'un bon niveau au regard du facteur d'impact de certains journaux dans lesquels ces articles sont publiés comme *Trends in Analytical Chemistry*. On peut également souligner la participation à un programme de collaboration européen et à un programme national témoignant de l'ouverture de l'équipe à des collaborations extérieures.

Points à améliorer et risques liés au contexte

50 % des articles sont publiés dans des journaux avec un facteur d'impact inférieur ou égal à 3. Il serait pertinent de viser des journaux avec plus de visibilité. Par ailleurs, assez peu de publications sont co-signées avec d'autres équipes de l'unité. On ne note également aucune invitation à donner des conférences dans des congrès internationaux et également une très faible visibilité des permanents de l'équipe au niveau international (peu de communications orales et faible présence dans des congrès internationaux). L'implication au niveau des sociétés savantes ou dans différentes instances est également inexistante.

Appréciation sur la production, le rayonnement et l'attractivité

En accompagnement d'une production scientifique de bon niveau, une contribution plus active au sein de la communauté nationale et surtout internationale devrait amener à améliorer la visibilité de l'activité de l'équipe.

B - Interactions avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Interactions de l'équipe avec l'environnement non académique, impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Brevets, licences, déclarations d'invention	
Déclarations d'invention	
Brevets déposés	
Brevets acceptés	
Brevets licenciés	
Interactions avec les acteurs socio-économiques	
Contrats de R&D avec des industriels	5
Bourses Cifre	4
Créations de laboratoires communs avec une / des entreprise(s)	
Création de réseaux ou d'unités mixtes technologiques	
Création d'entreprise, de start-up	
Activités d'expertise scientifique	
Activités de consultant	
Participation à des instances d'expertises (type Anses) ou de normalisation	
Expertise juridique	
Rapports d'expertises techniques, produits des instances de normalisation	
Produits destinés au grand public	
Émissions radio, TV, presse écrite	4
Produits de vulgarisation : articles, interviews, éditions, vidéos, etc.	
Produits de médiation scientifique	
Débats science et société	

Points forts et possibilités liées au contexte

Il est important de souligner un nombre élevé de dispositifs Cifre traduisant une forte interaction de l'équipe avec le monde socio-économique.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Aucune valorisation des activités de recherche au travers du dépôt de brevets n'a été réalisée malgré l'existence de travaux de recherche directement adossés à des activités industrielles (EDF, Suez...). Aucune activité d'expertise n'est également mentionnée.

Appréciation sur les interactions avec l'environnement, les impacts sur l'économie, la société, la culture, la santé

Si les relations avec l'industrie existent, une plus forte implication de l'expertise pourrait ouvrir à de nouvelles collaborations industrielles mais surtout institutionnelles.

C – Implication dans la formation par la recherche

Implication dans la formation par la recherche de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Produits des activités pédagogiques et didactiques	
Ouvrages	
E-learning, moocs, cours multimédia, etc.	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	
Productions scientifiques (articles, ouvrages, etc.) issus des thèses	19
Nombre moyen d'article par étudiant	
Formation	
Nombre de personnes Habilitées à Diriger des Recherche (HDR)	
Nombre d'HDR soutenues pendant la période	
Nombre de doctorants	6
dont doctorants bénéficiant d'un contrat spécifique au doctorat	
Nombre de thèses soutenues	3
Durée moyenne des thèses	
Stagiaires (BTS, M1, M2)	3
Labellisation nationale ou internationale des formations (Erasmus Mundus p ex.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

Compte tenu de la taille de l'équipe et surtout du faible nombre d'HDR, le nombre de doctorants (6 sur la période dont 3 ayant soutenus) accueillis au sein de l'équipe est élevé et la production scientifique de ces étudiants est remarquable avec plus de trois articles par doctorant. Les fortes interactions entre volet académique et volet industriel des travaux de recherche de l'équipe menés principalement dans le cadre de dispositifs Cifre constituent certainement une spécificité et un atout pour les doctorants formés en son sein.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Seulement trois stagiaires M1 et M2 ont été accueillis au sein de l'équipe au cours de la période. Ceci est d'autant plus surprenant qu'un membre de l'équipe est impliqué dans l'élaboration de formations au niveau master. L'encadrement des doctorants est porté par une seule personne.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Au regard du nombre d'HDR, il est important de souligner le nombre important de doctorants formés au sein de cette équipe. La formation par la recherche des non-permanents doit également passer par une plus forte incitation à participer à des congrès à l'étranger.

CRITÈRE 2 : ORGANISATION ET VIE DE L'ÉQUIPE

Organisation et vie de l'équipe Période du 01/01/2013 au 30/06/2018	
Ratio femmes/hommes dans l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les enseignants-chercheurs et chercheurs de l'équipe	
Ratio femmes/hommes parmi les docteurs et doctorants de l'équipe	
Ratio femmes/hommes aux postes de responsabilité de l'équipe (direction, sous-direction de l'équipe, etc.)	

Points forts et possibilités liées au contexte

Aucune information permettant de répondre à ces points n'est explicitée dans les documents fournis. On peut néanmoins imaginer que la taille de l'équipe conduit certainement à une animation scientifique informelle au fil de l'eau.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Les interactions avec les autres équipes sont insuffisantes.

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Les interactions avec les autres équipes demeurent limitées.

CRITÈRE 3 : PERSPECTIVES SCIENTIFIQUES À CINQ ANS ET FAISABILITÉ DU PROJET

Points forts et possibilités liées au contexte

Les orientations vers les problématiques environnementales qui portent sur la détection et la caractérisation de molécules inconnues à l'état de traces dans des matrices complexes et l'accompagnement de celles-ci par la modélisation de mécanismes de dégradation en laboratoire est certainement une recherche de pointe et actuelle, et l'équipe possède un savoir-faire évident dans les projets qu'elle souhaite mener.

Points à améliorer et risques liés au contexte

Les différents projets sont dans la continuité des projets en cours. Une meilleure interaction avec les autres équipes est souhaitée.

Appréciation sur les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Le projet de recherche à cinq ans est en forte continuité avec ce qui est mené actuellement. De plus, si la recherche a fortement été soutenue lors du dernier contrat via des dispositifs Cifre, de nouvelles collaborations ou des poursuites de collaborations internes et externes à l'unité ne sont pas évoquées, ce qui fragilise le potentiel de l'équipe à mener ces travaux.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

A – Recommandations concernant les produits et activités de la recherche

Une participation plus forte de l'équipe à des manifestations ou à des échanges internationaux doit être envisagée afin d'améliorer la visibilité de celle-ci.

B – Recommandations concernant l'organisation et la vie de l'équipe

Tout en promouvant des collaborations internes à l'unité, il sera important de garder une recherche forte indépendante en renforçant les projets propres à l'équipe par des collaborations nationales et internationales comme c'est le cas dans le cadre de l'ANR.

C – Recommandations concernant les perspectives scientifiques à cinq ans et la faisabilité du projet

Il est important de bien identifier les points forts de l'équipe et faire ressortir les verrous des projets envisagés afin d'identifier les points sur lesquels les efforts devront être portés et d'établir d'éventuelles collaborations.

DÉROULEMENT DE LA VISITE

DATE DE LA VISITE

Début : 11 décembre 2018 à 8h45

Fin : 11 décembre 2018 à 17h00

LIEU DE LA VISITE

Institution : École Polytechnique

Adresse : Route de Saclay, 91128 Palaiseau Cedex

DÉROULEMENT OU PROGRAMME DE VISITE

- 08h45-09h15 : Réunion de démarrage du comité à huis clos en présence du conseiller scientifique du Hcéres (signature de la feuille d'émargement) exposé au comité des procédures Hcéres, etc.
- 09h15-10h15 : Exposé de la DU et des responsables d'équipe actuel(le)s ; échanges sur le bilan de l'unité et des équipes en présence de l'ensemble des personnels.
- 10h15-10h45 : Entretien à huis clos avec les doctorants seuls, hors la présence de la DU et des responsables d'équipes.
- 10h45-11h00 : Pause-café.
- 11h00-11h30 : Entretien à huis clos avec les représentants des tutelles (vice-président recherche, DAS).
- 11h30-12h45 : Exposé des objectifs scientifiques en rapport avec les 3 axes (1 porte-parole) et conclusion sur la future organisation de l'unité (DU).
- 12h45-14h00 : Buffet avec l'ensemble des membres de l'unité.
- 14h00-14h30 : Entretien avec les personnels ingénieurs, techniciens et administratifs seuls, hors la présence de la DU et des responsables d'équipes.
- 14h30-15h00 : Entretien avec les personnels chercheurs et enseignants-chercheurs statutaires, hors la présence de la DU.
- 15h00-15h15 : Entretien à huis clos du comité avec la DU.
- 15h15-17h00 : Entretien à huis clos du comité en présence du conseiller scientifique en fin de visite.

OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

On trouvera ci-dessous, soit les observations des tutelles, soit l'indication suivante :

« En dépit des sollicitations du Hcéres, aucune observation ne lui est parvenue dans les délais prescrits. ».



2 rue Albert Einstein
75013 Paris, France
T. 33 (0)1 55 55 60 10

hceres.fr

[@Hceres_](https://twitter.com/Hceres_)

