



**HAL**  
open science

## CRM2 - Cristallographie, résonance magnétique et modélisations

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. CRM2 - Cristallographie, résonance magnétique et modélisations. 2012, Université de Lorraine, Centre national de la recherche scientifique - CNRS. hceres-02030115

**HAL Id: hceres-02030115**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02030115>**

Submitted on 20 Feb 2019

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



agence d'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Section des Unités de recherche

Rapport de l'AERES sur  
l'unité :

Cristallographie, Résonance Magnétique et  
Modélisations

CRM2

sous tutelle des  
établissements et organismes :

Université de Lorraine

CNRS



Janvier 2012



agence d'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Section des Unités de recherche

Le Président de l'AERES

**Didier Houssin**

---

Section des Unités  
de recherche

*Le Directeur*

**Pierre Glaudes**

---



## Unité

Nom de l'unité :	Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations
Acronyme de l'unité :	CRM2
Label demandé :	UMR
N° actuel :	7036
Nom du directeur (2009-2012) :	M. Claude LECOMTE
Nom du porteur de projet (2013-2017) :	M. Dominik SCHANIEL

## Membres du comité d'experts

Président :	M. Bernard CAPELLE, Paris
Experts :	M. Christian BONHOMME, Paris
	M. Serge BOUFFARD, Caen (représentant du CoNRS)
	M. Denis GRATIAS, Chatillon
	M. Jean-Louis HODEAU, Grenoble
	M. Dominique HOUSSET, Grenoble
	M. Francesco MAURI, Paris
	M. Wolfgang SCHERER, Allemagne
	M <sup>me</sup> Virginie SERIN, Toulouse (représentant du CNU)



# | Représentants présents lors de la visite

Déléguée scientifique représentant de l'AERES :

M<sup>me</sup> Anne-Marie CAZABAT

Représentant(s) des établissements et organismes tutelles de l'unité :

M. Giancarlo FAINI, INP CNRS

M. Pierre MUTZENHARDT, UL



# Rapport

## 1• Introduction

Date et déroulement de la visite : 19-20 janvier 2012

Le comité d'experts qui a rendu visite au laboratoire CRM2 a siégé pendant deux jours sur le campus de la Faculté des Sciences et Technologies, à Vandoeuvre-lès-Nancy.

L'organisation de ces deux journées, très appréciée par le comité, a permis de nombreux échanges avec les personnels (qui ont été très disponibles et sont apparus très enthousiastes), à l'occasion de présentations formelles et de discussions avec les différentes équipes autour d'affiches.

L'ensemble a été complété par une présentation du laboratoire par le directeur en exercice au début de la matinée du premier jour et par la présentation du projet par le futur directeur en dernier exposé du deuxième jour.

Le déroulement exact en est précisé avec l'ordre du jour ci-après.

### ORDRE DU JOUR DU COMITE D'EVALUATION DU CRM2

**Jeudi 19 janvier 2012**

**08h15-08h30** Accueil

**08h30-09h00** Réunion à huis clos du CE avec tutelles (+ directeur labo et porteur projet si besoin)

**09h00-10h00** Présentation du laboratoire (C. Lecomte)

**10h00-10h30** Café

**10h30-12h30** Exposés (15' présentation + 5' discussion)

RMN (1 exposé)

BIO (1 exposé)

MOD (2 exposés)

MAT (2 exposés)

**12h30-14h00** Repas (CE, directeurs, chefs de groupes, P. Allé)

**14h00-15h00** Groupe MQ

**15h00-17h00** Groupe BIOMOD

**17h00-17h30** Café

**17h30-18h00** Rencontre du CE avec les ITA et ACMOS

**18h00-18h30** Rencontre du CE avec les doctorants et post-doctorants



**18h30-19h00** Rencontre du CE avec les membres du conseil de laboratoire

## Vendredi 20 janvier 2012

**08h30-10h30** Groupe CRISP

**10h30-11h00** Visites du service commun DRX et de l'atelier

**11h00-12h00** Groupe RMN

**12h00-12h30** Visite du service commun RMN

**12h30-14h00** Repas (membres du CE)

**14h00-15h00** Présentation projet (D. Schaniel)

**15h00-16h00** Discussion du Comité d'Evaluation

Historique et localisation géographique de l'unité et description synthétique de son domaine et de ses activités :

Le CRM2 est localisé au sein de la Faculté des Sciences et Technologies, à Vandœuvre-lès-Nancy, sur deux sites différents (Tour A (RMN) et bâtiment B (LCM3B)) situés à 10 minutes l'un de l'autre, ce qui ne favorise pas les rencontres quotidiennes des membres du laboratoire.

Le laboratoire CRM2 (Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations) est issu de la fusion du LCM3B (UMR 7036, InP) avec l'équipe de Méthodologie RMN, appartenant auparavant à SRSMC (InC, UMR 7565).

Le LCM3B (Laboratoire de Cristallographie et Modélisation des Matériaux Minéraux et Biologiques) a été créé en janvier 1995 suite à une évaluation à mi-parcours du laboratoire de Minéralogie, Cristallographie et Physique Infrarouge (URA 809). C. Lecomte a été chargé de mettre en œuvre la nouvelle politique du LCM3B, fondée essentiellement sur le développement de méthodes expérimentales de modélisation des densités électroniques et ses applications aux matériaux, à la liaison chimique et aux macromolécules. Il est resté directeur du LCM3B jusqu'en décembre 2008 pour prendre la direction de la nouvelle UMR CRM2 en janvier 2009.

Le regroupement de l'équipe méthodologie RMN avec le LCM3B a été proposé au précédent comité d'experts pour optimiser les compétences en méthodologie de la diffraction X et de la RMN sur un seul laboratoire. Un tel laboratoire permet des études structurales fines à l'état solide et liquide et peut répondre à des demandes non conventionnelles d'équipes extérieures puisqu'il est maître des méthodes qu'il développe et utilise.

Les thématiques de recherche du CRM2 sont les suivantes :

- Méthodologie de la diffraction X :
  - o Modélisation de la densité électronique et de spin, développement de logiciels cristallographiques et applications aux matériaux moléculaires et protéines (interactions intermoléculaires, liaison chimique) ;
- Méthodologie RMN :
  - o Relaxation de spin, utilisation du parahydrogène, RQN



- Cristallographie sous contraintes :
  - o Température, champ électrique (piézoélectricité) et photocristallographie (matériaux magnétiques moléculaires) avec les deux volets : instrumentation et méthodes
- Cristallographie des protéines impliquées dans le stress oxydant de plantes
- Développements méthodologiques en calcul DFT :
  - o Nouvelles approches pour simuler les interactions faibles de type Van der Waals
- Nanocristallographie des matériaux moléculaires :
  - o Thématique nouvelle développée depuis 2010 grâce à l'arrivée au CRM2 de M. D. SCHANIEL

Ces différentes thématiques sont développées soit par l'une des quatre équipes du laboratoire, soit dans des projets transversaux.

#### Equipe de Direction :

Il n'y a pas vraiment d'équipe de direction. Le laboratoire fonctionne avec un directeur et un conseil de laboratoire constitué suivant les statuts d'une UMR.

#### Effectifs de l'unité :

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de producteurs du projet **
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs	25	26	25
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC	4	4	4
<b>N3</b> : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	1	1	
<b>N4</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	13	13,5	
<b>N5</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	2		
<b>N6</b> : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	12		
<b>N7</b> : Doctorants	14		
<b>N8</b> : Thèses soutenues	12		
<b>N9</b> : Nombre d'HDR soutenues	1		
<b>N10</b> : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	14	18	
<b>TOTAL N1 à N7</b>	71	44,5	29

\* Si différent, indiquer entre parenthèses les ETP correspondants.

\*\* Nombre de producteurs de la période 2008-2011 qui seront présents en 2013-2017.

Définition et téléchargement des critères :

<http://www.aeres-evaluation.fr/Evaluation/Evaluation-des-unites-de-recherche/Principes-d-evaluation>.





## 2 • Appréciation sur l'unité

### Avis global sur l'unité :

Le CRM2 est dans son ensemble un excellent laboratoire avec une très bonne production scientifique comme l'attestent le nombre de publications et le nombre de conférences invités. Il présente des thématiques variées avec un ensemble d'activités diversifiées et complémentaires comme le développement de méthodes, de logiciels et d'instrumentation dans les domaines de la cristallographie, de la RMN et de la DFT qui lui donne une position remarquable au niveau international. Il faut noter un investissement particulièrement important au niveau international en cristallographie.

L'ambiance générale du laboratoire semble bonne avec des personnels qui sont apparus très enthousiastes et motivés par leur projet.

Le départ de deux leaders lors du prochain contrat pourrait déstabiliser une partie des activités du laboratoire qui cependant semble disposer d'un réservoir de jeunes enseignants-chercheurs et chercheurs capables de prendre la suite. En revanche, le départ prochain d'un ingénieur de recherche aux savoir-faire remarquables peut être plus délicat à gérer.

Le projet porté par un nouveau directeur est séduisant avec une redistribution des forces dont devrait particulièrement profiter la nouvelle équipe BIOMOD. Attention cependant à ne pas isoler l'équipe MQ qui doit développer davantage d'activités transversales sur l'ensemble du laboratoire, les compétences sont là mais les activités sont un peu trop individualistes à l'échelle du laboratoire.

### Points forts et opportunités :

L'expertise en cristallographie est remarquable sur presque tous les plans (développement de méthodes, de logiciels et d'instrumentation) avec en particulier un savoir-faire en modélisation de la densité électronique et de spin mondialement reconnu.

La photocrystallographie avec le support de sa plateforme et la nanocrystallographie, plus récemment implantée au laboratoire, se développent avec succès et deviennent des points forts des activités.

Un autre point fort du laboratoire est l'association entre développements méthodologiques et instrumentation au sein de l'équipe RMN. Le projet para-hydrogène qui est soutenu financièrement par l'ANR devrait être un liant important pour l'équipe.

L'ambiance générale du laboratoire et la forte motivation des personnels sont des points positifs sur lesquels il faut s'appuyer pour développer davantage de projets transversaux entre les équipes et en particulier avec l'équipe MQ, qui compte tenu de ses savoir-faire, peut apporter beaucoup aux expérimentateurs.

Les relations internationales sont bien présentes dans la vie du laboratoire comme l'atteste le grand nombre de séminaires qui font intervenir des collègues des quatre coins du monde. Les séminaires sont nombreux chaque année et participent certainement de façon importante à l'animation scientifique du CRM2.

Les services communs que pilote le CRM2 avec compétence et sur lesquels il peut s'appuyer sont également très importants pour les activités du laboratoire en particulier au niveau des développements instrumentaux.

Le CRM2 dispose de deux ateliers de mécanique particulièrement bien équipés et servis par du personnel compétent. Ces ateliers permettent les développements expérimentaux des groupes de recherche et des services communs.

Les problèmes d'hygiène et de sécurité sont bien identifiés et traités. Le laboratoire à cet égard fait preuve d'un grand sérieux avec des règles mises en place pour de nombreux points importants comme l'accueil des nouveaux entrants. De plus, les ACO sont vigilants et semblent mener en permanence une réflexion sur les améliorations possibles de la sécurité.

Le plan de formation semble très bien fonctionner comme l'atteste le grand nombre de formations suivies par de nombreux personnels.



### Points à améliorer et risques :

La localisation du laboratoire à deux endroits du campus assez distants l'un de l'autre est sans conteste un frein à une bonne synergie entre l'équipe méthodologie RMN et l'ancien LCM3B, cela devrait s'améliorer avec le futur déménagement, mais en attendant il est nécessaire que la direction soit attentive à développer des actions communes.

Même si des actions bien visibles existent (deux dépôts de brevet en 2009) la valorisation reste un point à améliorer. Des interactions plus importantes pourraient se développer avec des PME/PMI du tissu industriel local (ou national) en particulier en ce qui concerne l'équipe RMN qui semble la mieux armée pour obtenir des résultats rapidement.

Attention à l'équipe MQ qui se trouve réduite après le départ d'une partie de l'ancienne équipe MOD vers la nouvelle équipe BIOMOD. Elle devrait rapidement se renforcer mais il est nécessaire qu'elle se recentre sur les activités des autres équipes du laboratoire.

Dans les ateliers, compte tenu du manque de personnel, les mécaniciens sont amenés à travailler de manière isolée avec tous les risques que cela comporte, un regroupement des deux ateliers permettrait d'éviter ce risque.

### Recommandations :

Compte tenu du départ de deux leaders lors du prochain contrat, il est nécessaire que les jeunes enseignants-chercheurs et chercheurs prennent rapidement leurs responsabilités dans le fonctionnement du laboratoire et dans le développement des thématiques fortes et bien identifiées du CRM2. A priori le comité d'experts n'a pas de crainte car le laboratoire dispose de jeunes tout à fait capables d'assurer ces différentes tâches.

La période actuelle est délicate pour tous les laboratoires, le fonctionnement change avec une part de plus en plus importante donnée aux financements sur projets. Dans ces conditions, attention à la solidarité que chacun doit prendre à son compte pour que le laboratoire garde le bon état d'esprit qu'il présente, même si certains aspects peuvent être encore améliorés.



### 3 • Appréciations détaillées

#### Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Vu dans son ensemble le laboratoire présente des thématiques originales et pour certaines d'entre elles il se situe au meilleur niveau mondial : la détermination expérimentale des densités de charge électronique, spin et moment basée sur des affinements combinés qui prennent en compte des données de diffraction des RX, des neutrons non polarisés et polarisés et de diffusion Compton, les formidables développements autour de MoPro et de ELMAM et en particulier les applications à la biocristallographie, les travaux méthodologiques sur la DFT pour les calculs de structure électronique, l'association entre développements méthodologiques et instrumentation en RMN.

La quantité et la qualité des productions scientifiques sont tout à fait excellentes (251 publications durant les quatre années 2007-2010 la plupart dans de très bonnes revues). Le nombre de communications comprenant une forte proportion de conférences invitées est également très bon mais n'est pas homogène sur l'ensemble du laboratoire. L'ancienne équipe Bio doit davantage communiquer dans les conférences nationales et internationales, mais, compte tenu d'un projet bien défini et de la géométrie de la nouvelle équipe BIOMOD, ce point devrait s'améliorer.

Un effort doit être fait au niveau du nombre des thèses soutenues qui est un peu faible sans être alarmant pour les équipes MQ et BIO. Ce point pourrait peut-être être amélioré si les maîtres de conférences soutenaient leur HDR.

Un point fort est l'absence de non-produisant au sein du laboratoire.

#### Appréciation sur l'intégration de l'unité dans son environnement :

Selon les critères les appréciations sont assez différentes. La valorisation par des publications, des communications est excellente, en revanche les relations socio-économiques sont un peu faibles, mais il y a un effort important dans l'enseignement de la cristallographie au niveau international.

Le laboratoire a obtenu de nombreux succès au niveau des appels d'offres en particulier de l'ANR et présente une bonne capacité à obtenir des financements externes y compris au niveau européen (Pierre et Marie Curie grant, contrat avec le laboratoire de recherche cardiovasculaire du centre de recherche public de la santé du Luxembourg).

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'unité de recherche :

Sur ces différents points le laboratoire a une excellente position en particulier au niveau des invitations à des manifestations internationales (69 en 4 ans de 2007 à 2010) et des collaborations suivies avec des laboratoires étrangers. Attention à conserver ces points forts après les départs de deux leaders à forte visibilité internationale. La capacité à recruter des chercheurs, des post-doctorants et des doctorants de haut niveau en particulier étrangers est bonne même si en nombre le recrutement de doctorants est un peu faible dans certaines équipes.

#### Appréciation sur la gouvernance et la vie de l'unité :

L'organisation de l'unité est simple mais paraît efficace. Elle repose sur le directeur et son conseil de laboratoire ce qui vu la taille du laboratoire paraît raisonnable. Cependant pour le prochain contrat il est important que le nouveau directeur puisse s'appuyer sur un directeur-adjoint, compte tenu d'une part de son jeune âge (il doit avoir la possibilité de garder une activité de recherche importante) et d'autre part de son arrivée récente en France (il doit être entouré d'un directeur-adjoint qui connaît bien les structures et le fonctionnement de la recherche en France).

L'animation scientifique est très présente dans la vie du laboratoire comme l'attestent les très nombreux séminaires présentés aussi bien par des conférenciers du laboratoire et de la région, que par des conférenciers venant de partout en France ou de l'étranger. Un point fort du laboratoire est l'émergence régulière de nouveaux projets aussi bien au niveau des thématiques scientifiques qu'au niveau des développements de logiciels et d'instrumentations originaux.

L'unité est très impliquée dans l'enseignement et dans la structuration de la recherche :

- Responsabilité de deux plateformes de l'Institut Jean Barriol ;
- Vice Présidence du Conseil Scientifique de l'Université Henri Poincaré ;
- Vice Présidence pour les relations avec l'industrie de l'Université Henri Poincaré ;
- Candidature à la présidence de l'Université de Lorraine ;



- Membre de la commission régionale de la formation permanente du CNRS ;
- Direction de l'UFR STMP jusqu'en 2010 ;
- Direction de l'ENSIC ;
- Direction de l'Institut Jean Barriol ;
- Direction de l'école doctorale SESAMES jusqu'en 2008 ;
- Responsabilité des études à la Faculté de Pharmacie depuis 2009.

#### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Le projet de l'équipe CRISP est fondé sur une réorganisation et un recentrage sur trois thèmes principaux (la nano et la photo-cristallographie, la modélisation de la densité électronique et ses applications et la cristallographie fondamentale) ce qui répond aux points faibles que présentaient l'équipe MAT (la diversité des sujets et l'absence de stratégie commune claire). L'équipe a tout à fait les capacités pour mener à bien son projet, cependant le thème sur la cristallographie mathématique aurait intérêt à entrer progressivement dans des problèmes plus fondamentaux de la cristallographie moderne.

Le prochain projet de cinq ans de l'équipe MQ comprend trois sujets. Le premier, l'application des méthodes "range-separated" aux états excités, est un problème ambitieux et important pour la communauté des théoriciens et pourrait être potentiellement bien couplé avec l'activité expérimentale de l'équipe CRISP. Le deuxième, prédictions de structures cristallines ex-nihilo, devrait créer une synergie entre le groupe de théorie et les équipes expérimentales du laboratoire en particulier sur les cristaux moléculaires et sur la caractérisation des interactions intermoléculaires. Synergie qui malheureusement n'apparaît pas dans le projet. Quant au troisième thème, l'étude du graphène / surface du graphène / interaction moléculaire, les objectifs ne sont pas très clairs.

L'équipe BIOMOD présente la plus importante modification de la structure interne du laboratoire puisqu'elle se fonde sur la fusion de deux équipes, l'équipe du précédent Bio group et celle de modélisation cristallographique du groupe modélisation quantique et cristallographique. Ce regroupement paraît extrêmement positif au comité et devrait permettre une vraie synergie entre une activité de cristallographie et RMN structurale classique et le développement de nouveaux modèles de densité électronique appliqués aux protéines et aux ligands. Le développement de logiciels avec l'ensemble des compétences qui se retrouve dans l'équipe devrait avoir un fort impact sur la communauté.

Au niveau de l'équipe RMN, le projet para-hydrogène est ambitieux et original et il semble avoir déjà acquis son financement via l'ANR pH2-MR qui a démarré en 2011. Ce projet mêle instrumentation (avec une prise de risque au niveau de la production de para-hydrogène, sachant que le taux recherché est de l'ordre de 100%) et développements en RMN. Des défis théoriques et expérimentaux sont également proposés dans ce projet : ils apparaissent novateurs et tout à fait réalisables durant la période à venir.

Le projet RQN devrait, consécutivement à la réalisation complète de l'appareillage durant la période écoulée, pouvoir prendre un essor certain avec une ouverture intéressante vers des applications en relation avec le tissu industriel : le labelling des matériaux (et en particulier du bois). Une étudiante commence son doctorat sur ce thème : ceci assure la pérennité de ce projet pour la période à venir.

Le projet du laboratoire semble tout à fait cohérent, ambitieux par certains aspects mais reste dans le domaine du faisable, compte tenu de l'ensemble des savoir-faire présents au CRM2. Il faut noter un réel effort pour la mise en place d'opérations transversales qui devraient apporter des résultats intéressants et être un véritable moteur pour aider à atteindre les objectifs. Cela est très visible entre les équipes CRISP, BIOMOD et RMN mais attention à ne pas laisser de côté l'équipe MQ qui a pourtant des savoir-faire remarquables.

La politique des ressources humaines semble parfaitement définie pour les prochaines années avec des priorités bien identifiées et annoncées. Le renforcement de l'équipe MQ dès 2012 est vraiment une opération importante.

#### Appréciation sur l'implication de l'unité dans la formation :

Le rapport ne mentionne pas l'implication des personnels du laboratoire en licence et master, en revanche il fait mention de la direction de l'école doctorale SESAMES jusqu'en 2008.



Les stagiaires et les doctorants sont pris en charge dès leur arrivée en particulier au niveau de la sécurité. Ils semblent bien impliqués dans la vie du laboratoire, ils pourraient cependant davantage intervenir dans des séminaires internes. Leur financement ne semble pas poser de problèmes particuliers et ils ne se plaignent pas de leurs conditions de travail. L'unité a une bonne connaissance de leur devenir puisqu'un seul d'entre eux semble avoir échappé au suivi.



## 4 • Analyse équipe par équipe

**Équipe 1 :** MAT → CRISP  
**Nom du responsable :** M. Massimo NESPOLO  
**Effectifs** 11 EC/1C//3 (IR, T)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs	11	10,5	10,5
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC	1	1	1
<b>N3</b> : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs			
<b>N4</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1,5	2	
<b>N5</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*			
<b>N6</b> : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	6		
<b>N7</b> : Doctorants	6		
<b>N8</b> : Thèses soutenues	5		
<b>N9</b> : Nombre d'HDR soutenues			
<b>N10</b> : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	5	8	
<b>TOTAL N1 à N7</b>	25,5	13,5	11,5

\* Si différent, indiquer entre parenthèses les ETP correspondants.

\*\* Nombre de producteurs de la période 2008-2011 qui seront présents en 2013-2017.

Définition et téléchargement des critères :

<http://www.aeres-evaluation.fr/Evaluation/Evaluation-des-unites-de-recherche/Principes-d-evaluation>.

### • Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Les recherches de l'équipe MAT sont centrées sur l'étude des relations entre densité électronique et propriétés physiques des MATériaux. L'expertise en cristallographie de cette équipe est mondialement reconnue.



L'équipe CRISP qui a émergé de l'ancienne équipe MAT se concentre sur trois grands thèmes de recherche: (i) la nano et la photo-cristallographie, (ii) la modélisation de la densité électronique et ses applications et (iii) la cristallographie fondamentale.

Dans ses domaines, cette équipe est clairement l'une des meilleures au niveau mondial, et repousse les limites de la détermination expérimentale des densités de charge électronique, spin et moment basée sur des affinements combinés qui prennent en compte des données de diffraction des RX, des neutrons non polarisés et polarisés et de diffusion Compton.

Cette équipe a notamment, pour la première fois, pu déterminer/séparer expérimentalement à la fois la densité des électrons de valence ayant un spin up  $\rho^{\uparrow}$  et la densité des électrons de valence ayant un spin down  $\rho^{\downarrow}$  (cette thématique a été soutenue par l'ANR CEDA 2007). C'est l'un des groupes pionniers au niveau mondial dans ce domaine de recherche très compétitif.

Il faut également noter des études de matériaux accordables en utilisant la photocristallographie qui nécessite des développements instrumentaux de laboratoire et aussi sur grands instruments. Ces études ont pour objectifs de faciliter la création de matériaux fonctionnels accordables qui présentent, sous l'action de la lumière, des variations de leurs propriétés structurales/ magnétiques / optiques ; ceci permet un contrôle optique de leurs propriétés à l'état solide. Ces études sont soutenues par l'European Network of Excellence MAGMANet, le GDR "Magnétisme et Commutation Moléculaire" et le GDRI Franco-Japonais "Functional Molecular Materials and Devices. Ces recherches en photocristallographie ont pour but une meilleure compréhension des relations structures-propriétés de photo-accordabilité et permettent de faciliter la conception de nouveaux matériaux ayant ces propriétés. Cela concerne soit des solides cristallins moléculaires, soit des nano-cristaux ou nanostructures, soit des matériaux hybrides. Cette recherche nécessite le développement d'une plateforme instrumentale optique et d'outils méthodologiques d'analyse structurale qui sont réalisés avec le soutien du PPF et de l'ANR Auto-Org. Le développement ultime de ces études est de réaliser des expériences de photocristallographie en temps résolu, ce qui nécessite la synchronisation d'un laser pulsé et du détecteur XPAD sur une expérience de laboratoire. Cela se réalise avec le soutien des ANRs Cross Nano-Mat et Auto-Org.

Ces succès ne sont pas seulement fondés sur la capacité intellectuelle de l'équipe, mais aussi sur une stratégie appropriée pour développer les équipements instrumentaux - déjà impressionnants. À cet égard, les activités à SOLEIL (maintien et développement d'une ligne de lumière dédiée aux études de diffraction des rayons X à haute résolution et de photo-cristallographie) et le projet d'instrumentation du laboratoire (intégration et forte contribution au développement d'un détecteur XPAD à la pointe de l'état de l'art) permettront à l'équipe de rester un acteur majeur dans ce domaine de recherche au cours des prochaines années.

L'équipe de cristallographie fondamentale a une activité très engagée en lien avec la commission "Cristallographie Mathématique" de l'IUCr présidée par le responsable d'équipe. Le travail récent sur les polytypes dans le mica est à la fois une belle démonstration d'une détermination de structure cristallographique et un travail interdisciplinaire qui combine avec succès cristallographie et géologie. Ce travail s'inscrit dans la continuité d'un effort de longue date de l'équipe pour rationaliser le polytypisme et en comprendre la formation.

Il faut souligner que les recherches structurales de l'équipe sont à la limite de ce qui se fait actuellement. Pour de telles études de pointe, elle a développé des outils méthodologiques qui sont et seront importants pour l'ensemble de la communauté de cristallographie.

Les échanges/interactions entre les différents enseignants-chercheurs / chercheurs / doctorants sont fructueux, le nombre de doctorants est important. Toutefois il est à noter un déséquilibre dans le ratio enseignant-chercheur/chercheur-CNRS (11/1); la très bonne activité scientifique de cette équipe justifie le recrutement de chercheurs CNRS.

La quantité de la production scientifique (plus de 130 publications dans des revues internationales à comités de lectures) est remarquable, eu égard à la taille de l'équipe CRISP. Il s'y ajoute une centaine de conférences orales dont 41 conférences invitées plus un certain nombre de séminaires invités. Les articles sont principalement répartis dans des journaux reconnus internationalement dans le domaine de la cristallographie (Acta Cryst, plus de 20 %), de la chimie organique et inorganique (Eur J Inorg Chem, Inorg Chem, J. of Organic Chemistry) et des journaux de physico-chimie (Phys Chem Chem Phys, J. Phys chem, Chem Phys). La qualité des publications est en général élevée, comme en témoigne un taux de citations important dans la plupart des journaux. Tous les membres de l'équipe sont "produisants".

L'équipe pourrait clairement accueillir un plus grand nombre de post-doctorants (CNRS).



### Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

Si les relations socio-économiques ou culturelles de l'équipe ne peuvent être évaluées de façon extrêmement claire, il faut mentionner les importantes activités de formation dans le domaine de la cristallographie au niveau international (implication forte dans l'ECA et l'IUCr en particulier). Comme mentionné ci-dessus, au niveau national, les recherches sont systématiquement portées par des ANR blanches, ce qui démontre une capacité certaine à obtenir des financements externes.

Le très bon lien entre développement méthodologique et instrumentation de l'équipe fait que ses travaux sont valorisables (même si cela ne se traduit pas obligatoirement par des brevets). Les méthodes développées sont très utiles à la communauté scientifique et il y a, de la part des chercheurs, un réel souci à rendre les nouveaux outils/programmes développés utilisables par une large communauté. Les thèmes de recherche de l'équipe sont clairement dirigés vers des questions fondamentales en physique des solides et en sciences des matériaux. Cependant, ces questions constituent la base d'une conception rationnelle de matériaux fonctionnels (dispositifs piezo-électriques, matériaux photo-actifs, dispositifs magnéto-optiques, etc.). Par conséquent, l'impact de l'équipe sur les relations socio-économiques est important, car le développement systématique des matériaux fonctionnels avancés dépend de façon critique de nouvelles idées et concepts émergents de la recherche fondamentale.

L'équipe a une bonne capacité à obtenir des financements externes comme le montre l'obtention de 5 ANR (montant total d'environ 800 K€), de 3 projets financés par l'IJB, d'un contrat européen (Réseau d'excellence Magmanet), et d'une subvention PPF.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

La reconnaissance/lisibilité et l'activité de l'équipe sont très importantes tant au niveau national, européen qu'international :

- **National**

Un membre de l'équipe est secrétaire de l'Association Française de Cristallographie ;

Responsabilité du PPF « Cristallographie hors équilibre à haute résolution » qui implique Montpellier, Bordeaux, Brest, Reims, Orsay, Paris 6, Toulouse, Lyon, Dijon, Strasbourg, Angers ;

Diverses Expertises ANR et AERES ;

Organisation d'Ecoles de Cristallographie ;

Implication de deux chercheurs sur les Très Grands Instruments à SOLEIL : Ligne Cristal et au LLB.

- **Europe**

Le responsable d'équipe est membre du comité exécutif de l'European Crystallography Association ;

Deux membres de l'équipe sont sollicités pour diverses expertises européennes.

- **International**

Des membres de l'équipe sont respectivement ;

Vice Président de l'International Union of Crystallography ;

Chair du comité IUCr: « Mathematical Crystallography » ;

Co-Editeurs: Concept in Magnetic Resonance, Acta Cryst., Eur. J. Mineralogy, TheoChem, CrystResTechn... ;

Membre du comité IUPAC-C10 « Commission on Structure and Dynamics of Condensed Matter » ;

Membre du comité IUCr «Charge, Spin and Momentum Densities ».

À tout cela, il faut ajouter l'attribution du prix 2010 "Max Perutz" de l'European Crystallography Association et du prix 2007 "Max von Laue" de l'Association de Cristallographie Allemande à deux chercheurs de l'équipe.

Il n'est donc pas surprenant que cette grande renommée internationale de l'équipe se retrouve dans le nombre important de ses conférences invités (10 par an en moyenne) et dans la capacité à attirer les post-doctorants, doctorants et chercheurs invités du monde entier. Et ceci se retrouve également dans le nombre annuel de





collaborateurs invités, d'enseignements de cristallographie (France, Afrique, Inde, Japon, Pologne) et des nombreuses collaborations dans des laboratoires du monde entier avec des publications communes (Hauptman-Woodward Institut Buffalo USA, Rabdoud University Nijmegen Pays Bas, USTHB Alger Algérie). Une activité de séminaires scientifiques montre les échanges bien présents avec des scientifiques étrangers.

Il y a eu peu de contrats Européens ou programmes internationaux dans la période (Magmanet mais fin en 2008), mais le nombre important d'ANR blanches (2 coordinations dans l'équipe), en collaboration en particulier avec le laboratoire Léon Brillouin, Synchrotron Soleil, le LCC et CEMES Toulouse, l'Institut Néel à Grenoble et l'institut Charles Gerhard à Montpellier, reflète le rayonnement de l'équipe et les recherches de qualité.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Pour le prochain contrat quinquennal, l'équipe change de nom et devient "Cristallographie et relation Structure-Propriétés" : CRISP.

Outre la poursuite des efforts du laboratoire pour contribuer à la cristallographie mathématique et fondamentale discutée ci-dessous, les futures activités du laboratoire sont centrées autour des deux thèmes majeurs de l'équipe (i) études, analyses et modélisations des densités électroniques et applications et (ii) la photo- et nanocristallographie. Cette réorganisation et ce recentrage répondent aux points faibles, la diversité des sujets et l'absence de stratégie commune claire, que présentait l'équipe.

Le premier sujet (études des densité électroniques) vise une meilleure compréhension de la liaison chimique / propriétés physiques dans les matériaux corrélés, mais aborde également les études de base en sciences appliquées, telle que l'ingénierie du cristal avec en particulier le contrôle des interactions intermoléculaires. Ces sujets originaux constituent une excellente base pour des projets scientifiques à long terme, puisque les questions fondamentales dans la conception de matériaux modernes sont abordées. Ces sujets sont complétés par un projet plutôt ambitieux et risqué : le développement d'un logiciel d'affinement qui combine toutes les données de RX, neutrons, neutrons polarisés, diffusion Compton et donne accès aux densités électroniques et de spin. La première étape (co-affinement des données RX, neutrons non-polarisés et neutrons polarisés) est déjà réalisée avec le programme Molly-nx, la deuxième étape (affinement avec les données de diffusion Compton) est en cours.

Au stade actuel, la première étape de ce projet pourrait déjà fournir des résultats d'affinement donnant les distributions distinctes des densités de spin  $\alpha$  et  $\beta$ . C'est déjà très impressionnant. Il serait aussi souhaitable de fusionner le programme Molly de l'équipe CRISP avec le programme MoPro développé par la partie de l'équipe QCM qui participera à l'équipe BIOMOD, ce qui étendrait considérablement le champ d'application du logiciel MoPro. L'interface conviviale et les outils d'analyse élaborés du programme MoPro pourraient alors être combinés avec les techniques d'affinement développées conjointement pour les données de diffraction des rayons X et des neutrons et de diffusion Compton dans le programme Molly. Cette activité comporte également un volet inter-équipe (MQ, BIOMOD) sur la prédiction de structures. Le comité d'experts souligne que les multiples compétences de l'équipe (et leur excellence) rend réalisable leur objectif très ambitieux : la détermination expérimentale de la matrice de vrais matériaux.

Par ailleurs, dans le cas des projets en photo- et nanocristallographie (par exemple la relation structure-propriété des (nano-)matériaux moléculaires photo-accordables et des potentielles applications optiques), le groupe a fait de grands progrès, comme le prouvent d'excellentes publications. La grande compétence de D. Schaniel dans ce domaine permettra à l'équipe de poursuivre le développement de ces projets. Cette activité comporte aussi un volet inter-équipe avec l'équipe RMN qui est très prometteur sur les études NMR de l'état solide, les structures locales et leur dynamique.

Le projet sur la cristallographie mathématique et fondamentale est centré sur un réexamen des lois de macle de Friedel, avec pour objectif d'en tirer des lois plus générales. La macle est définie comme une interface spéciale qui présente une forte continuité structurale entre les deux cristaux adjacents. En résumé, l'idée clé ici est de considérer séparément chaque position de Wyckoff de la structure et d'en construire le groupe normalisateur dans  $SO_3$ . Une décomposition groupe/sous-groupe de ce normalisateur sur le groupe intersection avec le groupe d'espace de la structure, donne toutes les opérations d'interface possibles qui maintiennent cette position de Wyckoff invariante tout en changeant l'orientation cristalline. Ce projet est sans aucun doute séduisant par rapport à la cristallographie académique. Toutefois, il serait certainement plus pertinent encore de l'appréhender en y ajoutant des considérations plus physiques. Les macles pourraient ainsi être définies comme des interfaces spécifiques qui ont un degré suffisamment élevé de cohérence structurale locale entre les deux cristaux adjacents pour avoir une faible énergie interfaciale. Cela peut être un critère très différent du degré de continuité au niveau de l'interface puisqu'il existe des interfaces avec une grande cohérence structurale mais qui ne présentent aucun réseau de coïncidence. Le comité



d'experts recommande de considérer ces deux aspects ensemble, la coïncidence globale entre les cristaux et la cohérence structurale locale à l'interface, car ils peuvent très certainement se compléter.

D'un point de vue plus général, le projet sur la cristallographie mathématique aurait intérêt à entrer dans des problèmes plus fondamentaux de la cristallographie moderne, de la définition même de la cristallographie (science de l'ordre géométrique dans les solides ?) jusqu'à la compréhension profonde de la diffraction (quel type de distribution de diffuseurs dans l'espace diffracte?) et les représentations dans un espace à N dimensions (quasi cristal et phases incommensurables, au-delà des ensembles de Meyer ?). Dans l'équipe CRISP, les talents sont là qui peuvent certainement apporter leur contribution au niveau international (Commission Math IUCr et les activités de formation) d'une manière très positive et fructueuse.

Le projet scientifique de l'équipe est élaboré avec une réflexion sur les possibilités d'affectation des moyens humains. Dans le prochain quinquennat, le recrutement de 3 nouveaux membres est nécessaire pour compenser le départ de compétences établies (PREX) et compléter les compétences existantes pour apporter pérennité et souffle aux thématiques.

Le succès du développement du détecteur pixel XPAD mené en commun avec l'équipe BIOMOD (en collaboration avec la société imXPAD, SOLEIL et d'autres laboratoires) et l'implication à long terme sur la ligne CRISTAL à SOLEIL permettront à l'équipe d'étudier des matériaux de plus en plus complexes. Malheureusement, l'équipe n'a pas encore réussi à obtenir les ressources financières nécessaires pour continuer à développer un diffractomètre de poudre dédié aux nano-matériaux cristallins, le projet EQUIPEX (NANODIFFRAX) n'ayant pas été retenu. Ce projet d'instrumentation est cependant fortement soutenu par le comité d'experts.

#### Conclusion :

L'équipe CRISP est clairement un des leaders mondiaux tant sur les études de densité électronique et de spin que sur les études de photo-cristallographie. Cette reconnaissance se voit par le nombre d'invitations, de prix et sa forte attractivité. Sa force est liée d'abord à la grande qualité de ses chercheurs, à son implication dans les formations et la valorisation/diffusion de la science, son implication dans les organismes internationaux, aux liens efficaces entre les développements d'analyses (software) et instrumentaux qui sont, in fine, appliqués à des problématiques difficiles. Elle est liée ensuite à sa grande renommée internationale et sa visibilité, ce qui permet au groupe non seulement d'attirer des chercheurs d'excellence de presque tous les coins du monde, mais aussi d'initier et d'être pionnier dans la recherche de nouvelles orientations. Cette équipe a deux gros atouts, une compétence exceptionnelle dans les études avancées de diffraction des rayons X, des neutrons et de la diffusion Compton, et les savoir-faire pour développer en permanence de nouveaux outils et de nouvelles méthodologies.

Le danger dans cette équipe est lié au prochain départ d'un de ses leaders, il faudra qu'elle gère parfaitement cette situation afin de conserver son excellente visibilité internationale. Le comité d'experts encourage les jeunes collègues du groupe à soutenir rapidement leur HDR de manière à élargir les possibilités d'encadrement des thèses.

Le succès et l'énorme activité de cette équipe prouvent que la cristallographie moderne offre toujours des sujets de recherche très intéressants, qui sont à la base du développement et de la conception de matériaux fonctionnels. Le comité soutient fermement sans aucune hésitation les efforts de recherche ambitieux et souvent couronnés de succès de cette excellente équipe et l'encourage à diffuser ses compétences et développements expérimentaux et méthodologiques en dehors des communautés de cristallographie afin d'élargir le domaine d'applications de ce remarquable savoir-faire.



**Équipe 2 :** MOD → MQ

**Nom du responsable :** M. Janos Angyan

**Effectifs**

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs	2	1	0
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC	3	2	2
<b>N3</b> : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs			
<b>N4</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*			
<b>N5</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*			
<b>N6</b> : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	5		
<b>N7</b> : Doctorants	3		
<b>N8</b> : Thèses soutenues	2		
<b>N9</b> : Nombre d'HDR soutenues			
<b>N10</b> : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	3	
<b>TOTAL N1 à N7</b>	13	3	2

\* Si différent, indiquer entre parenthèses les ETP correspondants.

\*\* Nombre de producteurs de la période 2008-2011 qui seront présents en 2013-2017.

Définition et téléchargement des critères :

<http://www.aeres-evaluation.fr/Evaluation/Evaluation-des-unites-de-recherche/Principes-d-evaluation>.

## • Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe de modélisation quantique (partie de l'équipe EMQC dans le contrat 2009-2012) est formée par des chercheurs du CNRS (2 DR2, CR1). L'équipe a une excellente production de 64 publications dans la période 2007-2011, publiées dans des revues de grande qualité et à fort impact à la fois en chimie et en physique (dont 16 PRB, 7 J. Chem. Phys, 4 PRL, 2 PNAS, ...).

L'équipe est bien reconnue à la fois au niveau national et international, et en particulier dans la communauté chimie-quantique, par ses travaux méthodologiques sur "Density Functional Theory" pour les calculs de structure électronique. Les travaux dans le domaine des fonctionnelles hybrides "range separated", les extensions de ces



approches aux méthodes MP2 et RPA et sur les interactions de van der Waals sont particulièrement visibles. De telles approches ont été utilisées pour décrire les forces intermoléculaire / interfragmentaire et des complexes à transfert de charge. Ces deux sujets (en plus du calcul de la densité de charge électronique) ont une interface naturelle avec les activités expérimentales et d'autres modélisations du CMR2, en particulier dans la caractérisation des interactions intermoléculaires et la détermination et l'analyse de la densité de charge électronique. Malheureusement seulement 2 articles (sur 64) de l'équipe QM ont été publiés conjointement avec les autres équipes du laboratoire. En plus des travaux sur le développement méthodologique, l'équipe a également appliqué des approches DFT pour résoudre des problèmes pertinents, d'une manière très opportune, sur la physique du graphène (en particulier sur les forces entre les couches et la fonctionnalisation covalente), sur les supraconducteurs à base de fer (structure électronique et magnétique) et sur les hydrates métalliques sous pression.

Aucune thèse dirigée par les membres de l'équipe MQ n'a été soutenue au cours du contrat 2007-2011, mais un étudiant a commencé sa thèse en 2010 sous la supervision de l'équipe.

#### Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'activité de recherche de l'équipe a été soutenue par 3 projets ANR (l'un d'entre eux animé par l'équipe). Les projets ANR ont soutenu deux chercheurs postdoctoraux pour une durée totale de 3 ans

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

L'équipe a participé à l'organisation d'un workshop international et a été invitée à de nombreuses conférences pour présenter ses travaux. L'excellente insertion de l'équipe dans sa communauté scientifique est en outre confirmée par le fait que la plupart des publications sont le résultat de collaborations nationales et internationales avec d'autres groupes théoriques / expérimentaux.

#### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Le prochain projet de cinq ans de l'équipe comprend trois sujets.

- 1) L'application des méthodes "range-separated" aux états excités. C'est une extension naturelle de l'importante activité théorique / méthodologique de l'équipe dans le contrat précédent. Le problème est ambitieux et important pour la communauté des théoriciens. L'activité est également potentiellement bien couplé avec l'activité expérimentale de l'équipe CRISP.
- 2) Prédiction de structures cristallines. Ici l'équipe envisage d'utiliser les méthodes (et les codes) déjà disponibles dans la littérature pour prédire la structure cristalline ex-nihilo. Elle projette d'utiliser son expertise en interaction intermoléculaire (van der Waals) pour traiter le cas de cristaux moléculaires. Toutefois, dans le projet de recherche il n'est pas spécifié quel type de cristaux ils ont envisagé de traiter et quelles seraient les motivations scientifiques conduisant à un choix particulier de cristaux. Dans la présentation orale une application possible aux matériaux pour batterie a été mentionné, mais avec une explication pas très claire sur les objectifs et les intérêts scientifiques. Potentiellement une synergie entre le groupe de théorie et les équipes expérimentales du laboratoire pourrait être créée sur la prédiction de la structure de cristaux moléculaires et sur la caractérisation des interactions intermoléculaires. Toutefois, le projet de recherche ne montre pas de coordination sur ce sujet entre l'équipe QM et les autres équipes du laboratoire.
- 3) L'étude du graphène / surface du graphène / interaction moléculaire. L'équipe se propose d'étudier comment la structure de bande du graphène est modifiée par une fonctionnalisation latérale par des groupes moléculaires. Cependant, aucune information sur le type de fonctionnalisation n'est donnée dans le projet de recherche. L'équipe se propose d'étudier l'effet de l'interaction substrat-graphène pour trouver le substrat le plus approprié. Dans ce second cas, l'équipe a pu profiter de son expertise sur les interactions de van der Waals. Cependant, il n'est pas décrit dans le projet de façon claire et explicite quels sont les buts et objectifs de l'étude proposée.

#### Conclusion :

Pour conclure, l'équipe QM a mis au point une ligne de recherche originale, bien identifiée et à long terme sur les fonctionnelles "range-separated", sur les interactions faibles intermoléculaire/interfragmentaire et sur les complexes à transfert de charge. En plus de cela, et grâce à des collaborations avec des groupes externes, l'équipe a également appliqué les méthodes ab-initio pour des projets à court terme sur des sujets chauds. Ce deuxième type d'activité est très efficace en termes de publications, mais (étant donné la petite taille de l'équipe) pourrait aussi



diluer les efforts sur trop de sujets qui, à terme, pourraient être perçus davantage comme les recherches des groupes externes que de l'équipe QM. Pour éviter cela, l'équipe doit mettre en avant ses forces et l'expertise par exemple, sur les interactions faibles intermoléculaires, et se concentrer sur quelques sujets bien identifiés, avec des stratégies et des objectifs bien définis. À cet égard, l'équipe est bien placée pour étudier les interactions graphène-substrat et des cristaux moléculaires, mais pour les deux sujets, les objectifs et les stratégies à long terme n'ont pas été décrits dans le rapport. Enfin, dans le choix des applications et des systèmes, l'équipe devrait profiter davantage de la présence des autres équipes du CRM2 pour élaborer des projets communs à long terme. Les points faibles de cette équipe sont sa très petite taille et sa faible collaboration avec les autres équipes du CRM2, Le comité d'experts suggère de profiter du prochain recrutement d'un maître de conférences pour lui associer des axes de recherche communs entre cette équipe QM et les autres équipes expérimentales du laboratoire.



### Équipe 3 :

BIO → BIOMOD

Nom du responsable : M. Claude DIDIERJEAN, M. Christian JELSCH

### Effectifs

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs	5	7,5	7,5
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC	0	1	1
<b>N3</b> : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs			
<b>N4</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1	1,5	
<b>N5</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*			
<b>N6</b> : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité			
<b>N7</b> : Doctorants	1		
<b>N8</b> : Thèses soutenues	2		
<b>N9</b> : Nombre d'HDR soutenues	1		
<b>N10</b> : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	5	
<b>TOTAL N1 à N7</b>	7	10	8,5

\* Si différent, indiquer entre parenthèses les ETP correspondants.

\*\* Nombre de producteurs de la période 2008-2011 qui seront présents en 2013-2017.

Définition et téléchargement des critères :

<http://www.aeres-evaluation.fr/Evaluation/Evaluation-des-unites-de-recherche/Principes-d-evaluation>.

### • Appréciations détaillées

#### Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Le « Bio group » a pour objet de recherche principal l'étude structurale de différentes enzymes dans le but de mieux comprendre leur mécanisme catalytique et leur spécificité pour différents substrats. Il comporte actuellement 4 maîtres de conférences, un technicien à 50% et deux doctorants. Il rassemble des compétences en cristallographie des macromolécules et en RMN structurale depuis fin 2009. Les protéines étudiées pendant la période 2008-2011 incluent notamment les oxydoréductases de plantes, les méthionine sulfoxyde réductases et la Glutathione S-Transférase. Les travaux sur la thiorédoxine, la glutarédoxine et la méthionine sulfoxyde réductase, des enzymes impliqués dans la régulation redox de la cellule et la réponse au stress oxydatif (génération de dérivés réactifs de l'oxygène, sulfoxydation de méthionines, ...), et notamment la détermination de plusieurs structures par



cristallographie aux rayons X, ont permis de mieux comprendre les mécanismes catalytiques mis en jeu et les bases de l'intégration de cofacteurs tels les clusters Fe-S. Un projet sur les glutathione S-transferase cytosoliques d'un champignon dégradant le bois (*P. chrysosporium*) a débuté en 2007 et a été soutenu par le programme Blanc de l'ANR en 2009. La détermination d'une première structure a permis à l'équipe d'identifier une nouvelle famille de GST. Le but du projet est de caractériser et de déterminer le rôle biologique (notamment le substrat, une implication dans les voies de détoxification ou de dégradation de matières organiques résistantes, ...) de ces différentes GST cytosoliques. La RMN structurale est un nouvel outil de l'équipe et il est actuellement utilisé pour l'étude des interactions entre une glutarédoxine et BoLA. D'autres projets ont également été menés durant cette période et concernent la modélisation moléculaire de protéines (metalloprotéinase-9, galactosyl-transferase) associées à des problématiques de santé humaine, et l'analyse structurale de peptidomimétiques. L'équipe est bien impliquée dans la formation des jeunes chercheurs, avec trois thèses encadrées et soutenues durant la période 2008-2011 et deux thèses actuellement en cours. Malgré leur dispersion thématique, les projets portés par cette équipe sont pertinents et se basent sur une expertise en enzymologie structurale de longue date. La majorité de ces projets repose sur une collaboration locale avec notamment l'UMR 1136 INRA-UHP et l'UMR 7214 CNRS-UHP. La production scientifique est très honnête et régulière avec une trentaine de publications sur la période 2008-2011, dont 5 *J. Biol. Chem.*, 2 *J. Mol. Biol.* La communication des travaux de l'équipe dans les congrès et autres manifestations scientifiques est cependant très faible (une seule communication orale et aucune affiche sur la période 2008-2011), ce qui nuit à la reconnaissance du travail de l'équipe dans la communauté scientifique nationale et internationale. Tout en conservant les bonnes collaborations établies avec les biologistes locaux, l'équipe doit mieux définir une thématique et une problématique biologique propres qui pourront guider ses développements futurs et faciliter sa reconnaissance dans la communauté scientifique.

L'application d'un modèle de densité électronique multipolaire à l'affinement des macromolécules à résolution subatomique, et la constitution de bibliothèque de paramètres multipolaires transférables, constituent un apport majeur du CRM2 à la bio-cristallographie. Il permet notamment le calcul des propriétés électrostatiques, sur des petites molécules (ligands) comme sur des protéines (éléments de structure secondaire, voisinage d'un site actif, par exemple). Ces informations peuvent être d'un grand intérêt pour la modélisation moléculaire et l'analyse des interactions protéines-ligands, comme le montrent 4 articles concernant l'aldose réductase, la protéine DING ou les hélices des protéines, publiés par cette équipe entre 2008 et 2011.

L'effort de développement de logiciels conviviaux (MoPro, MoPro viewer) pour l'affinement multipolaire et la visualisation de la densité électronique et des propriétés électrostatiques est aussi un point important et assez impressionnant du travail de cette équipe. Ces logiciels sont très complets et faciles d'utilisation ; ils jouent un rôle essentiel dans la diffusion et l'utilisation de ces nouveaux outils dans la communauté scientifique.

Le projet de recherche "Densité électronique Modélisation et Reconnaissance Moléculaire" est fortement lié au développement plutôt réussi du logiciel MoProSuite par l'équipe BIOMOD. Ce logiciel moderne et hautement flexible constitue la base fondamentale de la réussite des affinements multipolaires d'une grande variété de composés et de matériaux, allant des petites molécules aux grosses biomolécules comme les protéines. Le logiciel MoPro est réellement en concurrence avec les deux logiciels connexes (XD2006 et JANA). Cependant, il représente le code le plus récent qui surpasse nettement ses concurrents grâce à son interface très conviviale, la présence d'outils d'analyse sophistiqués et l'intégration d'un transfert aux bases de données automatique pour de meilleurs affinements cristallographiques de structures de protéines. En conséquence, le logiciel de Nancy est à l'heure actuelle clairement le meilleur outil scientifique pour les études de densité de charges de macromolécules.

#### Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

Les travaux de recherche de l'équipe sont essentiellement valorisés par la publication d'articles dans des revues internationales à comité de lecture. L'équipe a clairement su établir des collaborations stables avec des biologistes Nancéens. Des collaborations plus ponctuelles ont permis de mettre les compétences de modélisation de l'équipe au service d'un projet concernant la santé humaine ou de former un doctorant malaisien et aider à l'installation d'une équipe de bio cristallographie en Malaisie. L'équipe a été partenaire dans 3 projets ANR programme Blanc depuis 2005 et une demande sur le projet GST fongiques a été déposée en 2011 et 2012. 1 BQR a également été attribué à l'équipe en 2011. L'équipe a su trouver les financements nécessaires à son fonctionnement.

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

L'un des membres de l'équipe a assuré la direction de l'UFR STMP jusqu'en 2010 et assure maintenant la direction de l'ENSIC.



L'équipe accueille des étudiants en thèse de façon régulière. Un effort de participation à des congrès nationaux et internationaux contribuera significativement à un meilleur rayonnement de l'équipe à l'extérieur.

#### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Le projet se fonde sur la fusion de deux équipes, l'équipe du précédent Bio group et celle de modélisation cristallographique du groupe modélisation quantique et cristallographique. Ce regroupement devrait permettre une vraie synergie entre une activité de cristallographie et RMN structurale classique et le développement de nouveaux modèles de densité électronique appliqués aux protéines et aux ligands, permettant d'accéder à la densité de charge et au potentiel électrostatique pour l'analyse structurale et la modélisation. En effet, les études des mécanismes réactionnels et de la spécificité des différentes GST fongiques pourront vraiment bénéficier de l'application des modèles de densité électronique multipolaires et de l'étude du potentiel électrostatique développée ces dernières années dans l'équipe de modélisation. D'autre part, les compétences en cristallographie des protéines devraient permettre à cette nouvelle équipe d'identifier et de produire des protéines cristallisables, pour lesquelles la très haute résolution permettra de mieux comprendre leur fonctionnement. Cette nouvelle équipe aura la taille suffisante pour à la fois développer une thématique biologique spécifique, développer de nouveaux outils de modélisation, et en montrer l'application sur quelques exemples pertinents. Cependant, 3 projets biologiques distincts sont envisagés (GST, Glutaredoxine, Protéine antigél) et le groupe doit veiller à ne pas trop se disperser, mais tenter de se focaliser sur une thématique fédératrice, pour une meilleure visibilité scientifique. D'autre part, la recherche de protéines pour lesquelles l'utilisation du modèle multipolaire et de MoPro apporterait une information biologiquement pertinente devrait être renforcée, grâce aux compétences de ce nouveau groupe et avec l'aide de la communauté des bio cristallographes, en France et à l'étranger. Le groupe aura bientôt l'équipement nécessaire pour purifier les protéines à cristalliser (FPLC) : il aura ainsi une plus grande maîtrise de la production et de la qualité des échantillons nécessaires à ses projets. Le savoir-faire de cette équipe dans le domaine de la modélisation multipolaire de la densité électronique des protéines, unique en Europe, pourra être ainsi mieux développé, appliqué et partagé avec la communauté des biologistes structuralistes.

#### Conclusion :

Le Bio Group a eu une production scientifique très correcte et a su établir de bonnes collaborations locales, porteuses de projets à long terme. Bien que la dispersion thématique soit trop grande pour la taille du groupe, des projets communs à tous les enseignants-chercheurs de l'équipe ont émergé au fil des quatre années passées. Cependant, la visibilité et la définition d'une identité scientifique propre restent des points à améliorer. L'absence de collaboration forte avec les autres groupes du CRM2, notamment avec le groupe EMQC, est surprenante, mais la nouvelle organisation l'a prise en compte.

Le nouveau groupe BIOMOD constitue une association très judicieuse de compétences en biologie structurale (Cristallographie, RMN, ...) et en développement méthodologique pour l'affinement et l'analyse de structure cristallographique de protéines. Il permettra de mettre à profit toutes les connaissances développées pour la modélisation multipolaire de la densité électronique depuis plus de 15 ans dans le laboratoire, pour développer de nouveaux outils d'analyse (potentiel électrostatique) et de modélisation, qui pourront être appliqués aux projets biologiques de ce même groupe. Il s'agit d'une démarche originale, qui devrait permettre de mieux comprendre le rôle des forces électrostatiques dans les interactions protéine-ligand et la nature du potentiel électrostatique des sites actifs en fonction des mécanismes réactionnels mis en jeu. De plus, les outils logiciels développés au CRM2, tels MoPro et MoPro viewer seront des atouts pour la visualisation des différentes propriétés, et pour la diffusion de ces nouvelles approches dans la communauté des biologistes structuralistes. Ce groupe réunira des chercheurs dont les compétences aux frontières de la physique et de la biologie forment un ensemble unique, qui peut être extrêmement fructueux.

Il serait également très souhaitable de fusionner le Logiciel MoPro développé par l'équipe BIOMOD avec le programme Molly de l'équipe CRISP, ce qui étendrait considérablement le champ d'application du logiciel MoPro. L'interface conviviale et les outils d'analyse élaborés du programme MoPro pourraient alors être combinés avec les techniques d'affinement développées conjointement pour les données de diffractions des rayons X et des neutrons et de diffusion Compton dans le programme Molly.

Le point à améliorer pour les personnes issues du Bio Group est la communication externe, ainsi que la définition d'un thème biologique fédérateur. Il faudra aussi être attentif à ce que l'interaction entre l'équipe Bio et l'équipe Modélisation soit forte pour que la synergie soit effective.

On ne peut que recommander de tout faire pour mettre à profit cet ensemble unique de compétences et cette extraordinaire interdisciplinarité pour montrer l'intérêt de cette description détaillée de la densité électronique pour l'analyse structurale des protéines et les interactions protéines-ligands, sur les projets biologiques du groupe, comme sur d'autres projets pertinents identifiés dans la communauté scientifique.





**Équipe 4 :** RMN

**Nom du responsable :** M. Daniel CANET, M. Pierre MUTZENHARDT

**Effectifs**

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs	7	7	7
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC		0	
<b>N3</b> : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	1	1	
<b>N4</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1	0	
<b>N5</b> : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	1		
<b>N6</b> : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	1		
<b>N7</b> : Doctorants	4		
<b>N8</b> : Thèses soutenues	3		
<b>N9</b> : Nombre d'HDR soutenues			
<b>N10</b> : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	5	2	
<b>TOTAL N1 à N7</b>	15	8	7

\* Si différent, indiquer entre parenthèses les ETP correspondants.

\*\* Nombre de producteurs de la période 2008-2011 qui seront présents en 2013-2017.

Définition et téléchargement des critères :

<http://www.aeres-evaluation.fr/Evaluation/Evaluation-des-unites-de-recherche/Principes-d-evaluation>.

## • Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe de Méthodologie RMN (notée E4 dans le rapport d'activités) s'appuie sur 8 EC (3 PR et 5 MdC, aucun personnel CNRS dans l'équipe) et 4 personnels IR, IE et T. Il est tout d'abord important de noter que parmi les EC, certains d'entre eux occupent des fonctions à responsabilités lourdes au sein de l'Université (1 VP Recherche et 1 VP Relations Industrielles et Valorisation). De plus, un MCPUH effectue son activité de recherche à mi-temps au sein du groupe. Malgré ces points restrictifs, le nombre des publications sur la période est fort puisqu'il s'établit à 44 (dans des journaux internationaux avec comité de relecture). A cela s'ajoute un certain nombre de chapitres de livres ainsi que des ouvrages de vulgarisation scientifique pour le milieu étudiant (voir par ex. RMN-express). Les publications sont harmonieusement ventilées entre journaux généralistes (JACS, JCP, JPC, CPL...) et journaux beaucoup plus



orientés vers la RMN (Concepts in NMR, JMR, MRC...). Le standard global de ces journaux est très bon. On notera plus particulièrement deux articles invités dans des revues importantes du domaine (Annual Rep. on NMR Spect. et Encyclopedia of Magnetic Resonance). Durant la période, 5 thèses ont été soutenues (faisant intervenir uniquement 2 membres du groupe comme Directeurs de thèse - voir recommandations ci-dessous). Ce nombre de thèses est conséquent (total de 7, 3 en cours).

- La production scientifique de l'équipe peut être considérée comme originale dans le sens où elle combine systématiquement des préoccupations liées à la résonance magnétique et aux développements instrumentaux (et ce, en imagerie, gradients, sondes et antennes). Il s'agit là véritablement d'une spécificité de l'équipe Méthodologie RMN du laboratoire. On retiendra en particulier la réalisation complète d'un spectromètre RQN en collaboration avec la DGA pour la détection de composés azotés (il n'y a actuellement pas d'équivalent commercial d'un tel équipement). Cette réalisation a été accompagnée d'études théoriques qui ont très bien complété l'approche expérimentale et instrumentale.
- L'obtention de nouvelles géométries de bobines pour la réalisation de gradients de champ B1 est également un point important (Rev. Sci. Instr.). Un point fort (qui sera repris par la suite) est la mise au point de nouvelles séquences permettant l'obtention d'une hyperpolarisation pure dans le cas du para-hydrogène. Ces points attestent clairement de la qualité des travaux de l'équipe Méthodologie RMN. Ils attestent également de la visibilité de l'équipe tant au niveau national qu'international.

#### Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'un des membres de l'équipe a assuré la Vice-Présidence du Conseil Scientifique de l'Université de Nancy et est candidat à la présidence de l'Université de Lorraine.

L'équipe Méthodologie RMN est bien représentée dans son environnement local. En particulier, certains membres de l'équipe participent très activement aux instances universitaires (au plus haut niveau), mais également à des instances régionales et nationales. Ces activités contribuent très certainement à la reconnaissance de l'équipe.

La valorisation et la dissémination de la recherche en dehors du laboratoire sont une caractéristique bien présente. On notera en particulier la publication d'ouvrages généraux destinés aux étudiants par plusieurs membres du laboratoire ou collaborateurs nancéens proches. Sur la période, le laboratoire a été très impliqué dans l'organisation de conférences annuelles dites du GERM. Ces congrès, nationaux, binationaux, ou écoles d'été, rassemblent toute la communauté française en RMN/RPE. Les aspects éducatifs, pédagogiques et de recherche sont liés. La participation de l'équipe dans les instances du GERM est d'ores et déjà assurée pour la prochaine période.

Durant la période passée, l'équipe a été très directement impliquée dans le projet RQN initié par l'Institut franco-allemand de Saint-Louis (ISL) et la DGA. Il en a découlé la construction de prototypes et d'un spectromètre complet (durant la période).

Des financements ont été obtenus dans le cadre des Pépinières à projets (IJB & Prime projects).

Des demandes dans le cadre de l'ANR ont été couronnées de succès (voir ci-dessous).

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Les invitations à des congrès internationaux constituent un point important de l'équipe Méthodologie RMN. On notera tout particulièrement des invitations à des congrès de référence dans le domaine de la RMN/RQN et de la relaxométrie, à savoir "EUROMAR" et "Conference on Field Cycling NMR Relaxometry". Il s'agit là véritablement d'un élément important de visibilité de l'équipe car ces deux congrès font partie du "must". Le bilan de la période s'établit à 16 communications orales pour le groupe (8 conférences invitées, une majorité concernant des congrès internationaux).

L'attractivité du groupe se mesure aussi par le nombre important d'étudiants qui ont effectué une thèse dans le groupe sur la période (voir le tableau récapitulatif de l'équipe). Plusieurs thèses en méthodologie sont actuellement en cours. Ce vivier intéressant d'étudiants assure une activité soutenue au groupe, ce qui lui permet d'assurer une production scientifique conséquente.

Les résultats obtenus par l'équipe au niveau de l'ANR sont très intéressants puisque 4 projets ont été actés (et ce pour un total de 800 keuros, en comptant un projet se terminant en 2009). Deux de ces ANR commencent en 2011, ce qui assure en partie la pérennité de l'activité scientifique pour la période à venir. On note également un effort collaboratif important avec des collègues italiens sur la thématique du para-hydrogène.



### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Deux points importants ressortent de l'ensemble du projet de recherche pour la période 2013-2017. Tout d'abord, le projet para-hydrogène est ambitieux et original. Très peu d'applications relatives au para-H<sub>2</sub> ont été proposées à ce jour, tant au point de vue national qu'international. A priori, le financement du projet est acquis via l'ANR pH<sub>2</sub>-MR qui a démarré en 2011. Il s'agit d'un point très positif. Une fois encore, ce projet mêle instrumentation (avec de réels challenges concernant la production de para-hydrogène, sachant que le taux recherché est de l'ordre de 100%) et développements en RMN. La prise de risque maximale concerne très certainement la production en routine du para-H<sub>2</sub>. Les applications potentielles pourraient éventuellement s'étendre au domaine de l'imagerie, sachant que l'équipe possède un savoir-faire évident dans ce domaine (personnels du laboratoire ou collaborateurs très proches dans le périmètre nancéen). Des défis théoriques et expérimentaux sont également proposés dans ce projet : ils apparaissent novateurs et tout à fait réalisables durant la période à venir.

Le projet RQN devrait pouvoir prendre un essor certain et ce, consécutivement à la réalisation complète de l'appareillage durant la période écoulée. Il apparaît en effet important de promouvoir cette technique via des applications ciblées. Des pistes techniques comme la miniaturisation des amplificateurs ou l'augmentation du rapport signal/bruit par des techniques de denoising sont proposées. On notera également une ouverture intéressante vers des applications en relation avec le tissu industriel : le labelling des matériaux (et en particulier du bois). L'imagerie RQN, mettant en jeu des antennes spécifiques développées au laboratoire, est une ouverture possible tout à fait intéressante. Une étudiante commence son doctorat sur ce thème : cela devrait assurer la pérennité de ce projet pour la période à venir.

En conclusion, le projet de l'équipe Méthodologie RMN est cohérent et semble associé à des financements d'ores et déjà acquis.

### Conclusion :

L'équipe Méthodologie RMN est de très bon niveau. Elle présente une production scientifique de qualité, ainsi qu'une bonne visibilité nationale et internationale. Le point fort de l'équipe est clairement l'association entre développements méthodologiques et instrumentation. Il s'agit de faire perdurer cette spécificité dans les années à venir. Cette remarque pose inévitablement le problème du départ programmé du leader historique de l'équipe, ainsi que d'un ingénieur de recherche extrêmement qualifié en électronique/RF. Il est absolument nécessaire d'anticiper ces départs en demandant auprès des tutelles, et le plus rapidement possible, des remplacements effectifs. Ce point est extrêmement important et doit être considéré avec une attention toute particulière. Le comité d'experts tient à préciser qu'il a une confiance totale dans les personnels déjà présents ou nouvellement nommés. Ces personnels sont de très haut niveau et présentent tous des parcours académiques remarquables, que ce soit en France ou à l'étranger. Ce point permettra à l'équipe d'assurer une continuité dans la recherche de haut niveau. À ce sujet, le projet para-hydrogène (financé par l'ANR) apparaît comme une excellente opportunité à saisir, car il devrait cristalliser les compétences théoriques et méthodologiques du groupe.

Certains points plus faibles de l'équipe peuvent être précisés ici. Tout d'abord, et bien que de nature essentiellement méthodologique, les projets de la période 2013-2017 auraient pu comporter plus d'applications potentielles explicites. Cela passera sans doute par un effort de recherche collaborative encore plus marqué, que ce soit au niveau des chimistes, physiciens ou médecins. Différentes communautés devraient être potentiellement intéressées par la RQN portable et les potentialités du para-hydrogène.

Compte tenu des retombées potentielles des projets, des PME/PMI du tissu industriel local (ou national) devraient être contactées. Celles-ci n'ont été que peu mentionnées. Il faut noter également que certaines avancées en instrumentation (nouvelles sondes, bobines, antennes) devraient pouvoir faire l'objet de brevets.

La renommée internationale du groupe devrait permettre également d'assurer encore plus de collaborations, en particulier à l'étranger (via par exemple des étudiants doctorants ou post-doctorants en commun).

Enfin, l'équipement du spectromètre 600 MHz WB permet d'envisager des expériences élaborées en RMN du solide et en imagerie. Les compétences actuelles du groupe (qui sont très grandes, et ont été encore renforcées par l'arrivée de nouveaux membres dans l'équipe) devraient permettre d'utiliser encore plus ce potentiel. De nouvelles pistes de recherche devraient pouvoir émerger. Il faudra veiller également à ce que les jeunes collègues du groupe passent le plus rapidement possible leur HDR de manière à pouvoir encadrer officiellement les thèses du laboratoire.

De manière plus générale, le groupe Méthodologie RMN a une possibilité considérable de rapprochement thématique avec les autres entités du CRM2, autour des questions de structure, de spectroscopie, de modélisation et



de calculs DFT. La mise en commun des compétences devrait conduire à de très forts développements en cristallographie RMN.

À l'exception de ces quelques remarques/conseils, le comité d'experts a particulièrement apprécié son entrevue avec l'équipe Méthodologie RMN.



## Services Communs de RMN et de diffraction de rayons X

### • Appréciations détaillées

Le CRM2 gère au bénéfice d'une communauté plus large que les utilisateurs locaux, deux services communs, l'un de diffraction de rayons X et l'autre de RMN.

#### Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'évaluation de ces plateformes étant à la limite du cahier des charges du comité d'experts, les chiffres (nombre de publications hors CRM2, nombre d'expériences externes, bilan financier...) permettant d'évaluer de manière approfondie leurs productions et leur rayonnement n'ont pas tous été fournis. Cependant pour la plateforme RMN le nombre des publications s'élève à 80 ce qui est excellent.

Néanmoins, le comité d'experts estime que ces plateformes présentent un dynamisme certain et un atout pour l'Université de Lorraine. Il tient également à souligner que leur rattachement au CRM2 et leur proximité avec les équipes scientifiques de ce laboratoire sont des points forts qu'il faut absolument maintenir. Le travail des équipes de recherche et les développements méthodologiques permettent une évolution continue du parc instrumental et leur valorisation.

#### Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

La plateforme RMN est utilisée par environ 15 laboratoires de l'Université de Lorraine. Une dizaine d'entreprises sont également clientes de cette plateforme.

La plateforme de diffraction de rayons X est, quant à elle, utilisée par des laboratoires de l'Institut Jean Barriol et des Instituts proches, mais également par des laboratoires plus distants voire étrangers soit via des collaborations ou via le PPF photocristallography. Le taux d'utilisation interne est à peine supérieur à 50%. 10% du temps est consacré à des développements instrumentaux, fraction qu'il est nécessaire de maintenir, voire d'augmenter compte tenu des importants développements en cours ou prévus.

Le comité d'experts suggère que les plateformes mettent en place un compte d'exploitation par instrument afin de pouvoir valoriser au mieux leur utilisation notamment comme prestation interne dans les projets ANR.

L'implication du CRM2 sur les grands instruments est également un point fort de la plateforme diffraction des rayons X : elle lui permet de profiter des développements faits sur ceux-ci pour les prolonger par des développements dédiés à des instruments de laboratoire (cf. le développement du détecteur XPAD).

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Le service commun de RMN dispose d'un parc important d'instruments dont plusieurs spectromètres RMN haute résolution des liquides et des solides ainsi qu'un spectromètre permettant l'imagerie IRM. Quatre spectromètres en phase liquide (200, 300, 400 et 600 MHz) sont ouverts à l'accueil d'équipes extérieures soit en libre service, soit avec le soutien technique du personnel de ce service commun. En phase solide, un spectromètre 300 MHz et un 600 MHz permettent de faire des expériences à l'angle magique. La mise à disposition d'un mini-imageur IRM de bonne résolution permet de faire de l'imagerie de toutes sortes d'objets voire de petits animaux (attention à ce que ces expériences animales soient bien validées par un comité d'éthique). Des expériences plus spécifiques permettent d'étudier les phénomènes de relaxation.

La spectroscopie de l'azote 14 fait l'objet de développements instrumentaux intéressants.

Le service commun de diffraction de rayons X permet les études dans trois grands domaines : détermination de structure de cristaux, analyse des densités électroniques et photo-cristallographie. Pour cela, il dispose d'équipements performants (trois diffractomètres 4-cercles, un diffractomètre pour les poudres et un appareil pour la diffusion des rayons X aux petits angles). La plupart de ces expériences peuvent être réalisées à haute ou basse température. Vu l'implication de ses personnels sur les instruments de SOLEIL, l'accès à ce service donne aussi aux utilisateurs une possible ouverture sur l'utilisation du rayonnement synchrotron.

#### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

La stratégie des services communs dépend beaucoup des équipes utilisatrices et de leur capacité d'investissement. Il est évident que ces services communs ont bénéficié d'un support important et ont pu investir



dans de nouveaux équipements. Leur adossement au CRM2 a certainement contribué pour une grande part à ce dynamisme.

Par ailleurs, le comité d'experts a noté l'important effort de développement autour du détecteur XPAD qui permet une acquisition rapide et ainsi d'étudier des dynamiques de réorganisation structurale rapide comme celles induites par l'application d'un champ électrique ou d'un pulse laser. Au-delà de ces cas d'école, il faut espérer que le CRM2 fera connaître les potentialités de cette instrumentation et saura en récolter les fruits en termes de projets collaboratifs et de production scientifique. Il est, par ailleurs, regrettable que le projet EQUIPEX Nanodiffrax, qui comporte la conception et la réalisation d'un diffractomètre RX sur poudres avec multi-détecteur, important pour des études en temps résolu de nanomatériaux et la collecte de diagrammes PDF en laboratoire, n'ait pas été retenu. C'est un projet ambitieux que le comité encourage.

### Conclusion :

En conclusion, le comité d'experts tient à souligner la qualité des services communs de RMN et de diffraction de rayons X rattachés au CRM2. Ces services ont su garder une ouverture réelle vers les laboratoires extérieurs tout en bénéficiant d'une proximité positive des groupes de recherche du CRM2. Le point fort de ces deux services est indéniablement leurs développements instrumentaux et méthodologiques. Les travaux autour du détecteur XPAD et de la photo-cristallographie en sont de bons exemples.

Le rôle des services communs est bien sûr de développer et maintenir une instrumentation au service des utilisateurs. La caractéristique de ces services est d'aller au-delà de l'instrumentation standard. Mais compte tenu de la taille réduite de ces équipes, des choix stratégiques doivent être faits aussi bien en RMN qu'en diffraction des rayons X afin de maintenir en libre-service les instruments standard et développer les axes les plus compétitifs. La diffraction résolue en temps en fait partie.

Le comité d'experts recommande à la Direction du CRM2 de maintenir la dynamique de développement qu'elle a su créer autour de ses plateformes techniques et de préparer bien en amont les futurs investissements (prochain CPER par exemple).



## 5 • Notation

À l'issue des visites de la campagne d'évaluation 2011-2012, les présidents des comités d'experts, réunis par groupes disciplinaires, ont procédé à la notation des unités de recherche relevant de leur groupe (et, le cas échéant, des équipes internes de ces unités).

Cette notation (A+, A, B, C) a porté sur chacun des quatre critères définis par l'AERES. Elle a été accompagnée d'une appréciation d'ensemble.

Dans le cadre de cette notation, l'unité de recherche concernée par ce rapport (et, le cas échéant ses équipes internes) a (ont) obtenu l'appréciation d'ensemble et les notes suivantes :

### Appréciation d'ensemble de l'unité CRM<sup>2</sup> :

Unité dont la production, l'organisation, l'animation et le projet sont excellents, le rayonnement est très bon.

### Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A	A+	A+

### Appréciation d'ensemble de l'équipe MAT - CRISP :

Excellente équipe à tous points de vue.

### Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A+	-	A+

### Appréciation d'ensemble du département MOD - MQ :

Équipe dont la production est excellente, le rayonnement est très bon, le projet est bon mais doit être amélioré.

### Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A	-	B



Appréciation d'ensemble de l'équipe JELSH - BIOMOD :

Équipe dont la production et le rayonnement sont très bons. Le projet est excellent.

Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	-	A+

Appréciation d'ensemble de l'équipe JELSH :

Excellente équipe à tous points de vue.

Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A+	-	A+

Appréciation d'ensemble de l'équipe R M N :

Équipe dont la production, le rayonnement et le projet sont très bons.

Tableau de notation :

<b>C1</b>	<b>C2</b>	<b>C3</b>	<b>C4</b>
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	-	A





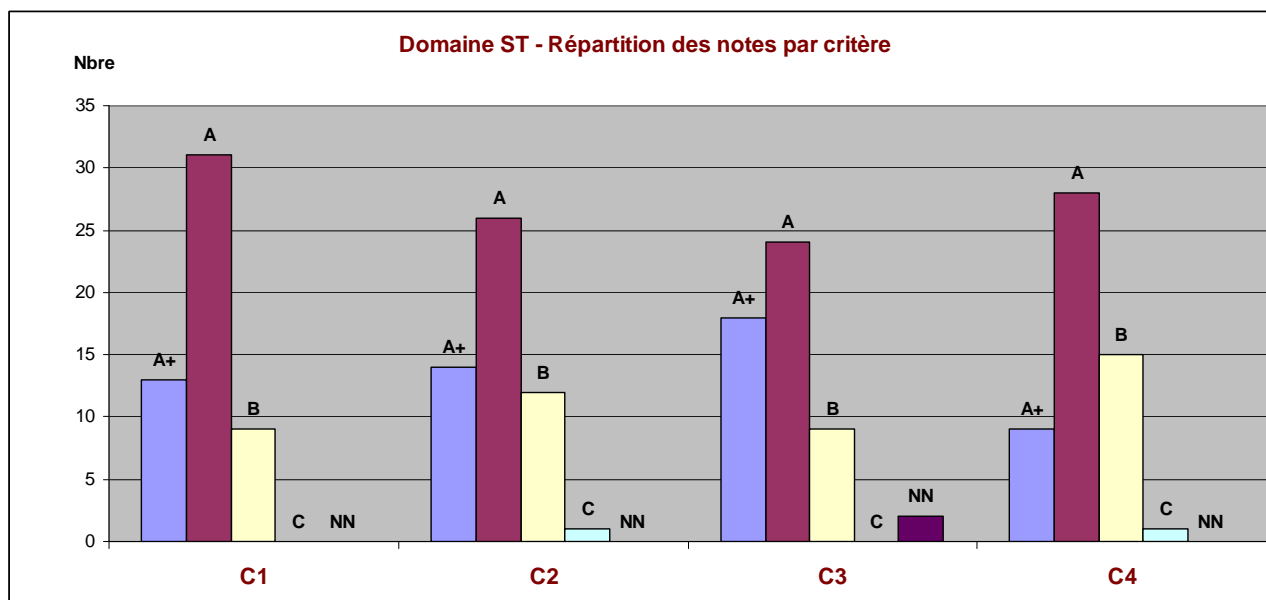
## 6 • Statistiques par domaine : ST au 10/05/2012

### Notes

Critères	C1	C2	C3	C4
	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Gouvernance et vie du laboratoire	Stratégie et projet scientifique
A+	13	14	18	9
A	31	26	24	28
B	9	12	9	15
C	-	1	-	1
Non noté	-	-	2	-

### Pourcentages

Critères	C1	C2	C3	C4
	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Gouvernance et vie du laboratoire	Stratégie et projet scientifique
A+	25%	26%	34%	17%
A	58%	49%	45%	53%
B	17%	23%	17%	28%
C	-	2%	-	2%
Non noté	-	-	4%	-





## 7 • Observations générales des tutelles

L'Administrateur Provisoire  
Jean-Pierre Finance

à

Monsieur Pierre GLAUDES  
Directeur de la section des unités de l'AERES  
20 rue Vivienne  
75002 PARIS

Objet : rapport d'évaluation de l'UMR CRM2  
Référence du document : C2013-EV-0542493S-S2PUR130004672-RT

Monsieur le Directeur,

Vous m'avez transmis le 14 mars dernier le rapport d'évaluation de l'UMR « Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisation (CRM2) » et je vous en remercie.

Je vous prie de trouver ci-dessous les éléments de réponse de Monsieur C. Lecomte, directeur de l'unité. L'Institut de Physique du CNRS et Philippe Piéri, Délégué Régional Centre-Est du CNRS, me font savoir qu'ils n'ont pas de remarque particulière à formuler sur le rapport AERES du CRM2 – UMR CNRS UL 7036.

En tant que tutelle du laboratoire nous n'avons pas de remarque particulière à émettre sur le rapport du Comité d'évaluation. Nous prenons bonne note de ses recommandations qui nous semblent tout à fait recevables à ce jour.

Je vous prie d'agréer, cher collègue, l'expression de mes sentiments distingués.

L'Administrateur Provisoire



Jean-Pierre Finance

Monsieur le Président,

Je vous prie de bien vouloir trouver ci-dessous la réponse du CRM2, UMR 7036, au rapport du Comité d'Evaluation de l'AERES. L'analyse du laboratoire nous est apparue très pertinente. Nous souhaitons cependant apporter les éclaircissements suivants :

**Equipe MAT → CRISP :**

Le Comité nous conseille d'élargir l'analyse des macles au cas d'association cristalline sans continuité réticulaire, dont l'existence est justifiée par une interface à faible énergie. Nous devons remarquer que *par définition* une macle possède une continuité réticulaire, plus ou moins importante : l'absence de cette continuité place l'association cristalline en dehors de la catégorie des macles. Ceci-dit, l'analyse de la symétrie propre de l'interface d'une macle en termes de groupe dipériodique obtenu comme intersection des groupes des individus augmenté par l'opération de macle va précisément dans la direction indiquée par le Comité.

L'extension suggérée est fort intéressante et peut être envisagée comme étape successive du projet proposé. En conséquence, pour renforcer cette thématique, il faut donner des moyens humains à cette équipe, actuellement portée par un enseignant-chercheur et un doctorant. Le recrutement d'un chercheur à forte connotation mathématique permettrait d'élargir et étendre une approche très prometteuse vers la compréhension des bases *structurales* de la formation des associations cristallines, qui est la *conditio sine qua non* pour développer des protocoles de synthèse cristalline capable d'augmenter le rendement en monocristaux, ce qui réduirait significativement les difficultés expérimentales dans la caractérisation de composés à forte tendance au maillage.

**ITA/IATOS :**

Lors de la rencontre des ITA/IATOS, les questions suivantes ont été discutées et non rapportées dans le rapport.

Formation : les stages proposés ne correspondent pas aux attentes des agents, ceci malgré les thèmes de formation demandés par les ITA. La majorité des formations reste orientée vers la bureautique au détriment des autres formations plus spécifiques.

Activités des ITA : les travaux du personnel technique portent sur des domaines et des niveaux souvent très diversifiés. Ils sont de plus en plus amenés à effectuer des travaux qui débordent de leur métier, notamment concernant les aménagements des

locaux (plomberie, électricité, menuiserie, etc...), le Service Général de l'Université assurant de moins en moins la prise en charge de ces tâches. Ceci pénalise notablement le potentiel technique de l'unité et de telles tâches sont difficilement valorisables pour les agents.

Je vous remercie par avance de bien vouloir prendre note de ces modifications et vous prie d'agréer, Monsieur le Président, l'expression de mes sentiments distingués.

Vandœuvre-lès-Nancy, le 23 avril 2012



Claude LECOMTE  
Directeur du CRM2



UNIVERSITÉ  
DE LORRAINE

*Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations*

**UMR CNRS n° 7036**

*Université de Lorraine - Faculté des Sciences et Technologies*

*BP 70239 - 54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex*

*Tél : (33) (0)3 83 68 48 63 - Fax : (33) (0)3 83 40 64 92*

