



**HAL**  
open science

## LPCT - Laboratoire de physique et chimie théoriques

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. LPCT - Laboratoire de physique et chimie théoriques. 2017, Université de Lorraine, Centre national de la recherche scientifique - CNRS. hceres-02030124

**HAL Id: hceres-02030124**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02030124v1>**

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.

# HCERES

Haut conseil de l'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Département d'Évaluation de la Recherche

Évaluation de l'unité :

Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques

LPCT

sous tutelle des  
établissements et organismes:

Université de Lorraine

Centre National de Recherche Scientifique - CNRS

Campagne d'évaluation 2016-2017 (Vague C)

# HCERES

Haut conseil de l'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur

Département d'Évaluation de la Recherche

*Pour le HCERES,<sup>1</sup>*

Michel Cosnard, président

*Au nom du comité d'experts,<sup>2</sup>*

Odile Eisenstein, présidente du comité

---

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

<sup>1</sup> Le président du HCERES "contresigne les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts et signés par leur président." (Article 8, alinéa 5)

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

## Rapport d'évaluation

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.

Nom de l'unité : Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques

Acronyme de l'unité : LPCT

Label demandé : UMR

N° actuel :

Nom du directeur  
(2013-2017) :

Nom du porteur de projet  
(2018-2022) : M. Xavier ASSFELD

## Membres du comité d'experts

Présidente : M<sup>me</sup> Odile EISENSTEIN, Université de Montpellier

Experts :

- M. Marc BAADEN, Institut de Biologie Physico Chimique, Paris
- M. Jean-Louis BARRAT, Université de Grenoble
- M<sup>me</sup> Marie-Laure BOCQUET, École Normale Supérieure, Paris
- M. Jean-Marc LUCK, CEA Saclay
- M. François MAUREL, Université Paris-Diderot (représentant du CoNRS)
- M. Laurent MARON, Université de Toulouse (représentant du CNU)
- M. Fabrice BOYRIE, Université de Montpellier (représentant des personnels d'appui à la recherche)

Déléguée scientifique représentante du HCERES :

M<sup>me</sup> Nelly LACOME

Représentants des établissements et organismes tutelles de l'unité :

M<sup>me</sup> Claire-Marie PRADIER, CNRS

M. Frédéric VILLIERAS, Université de Lorraine

Directeurs ou représentants de l'École Doctorale :

M. Denis MAILLET, ED 409, « Énergie, Mécanique, Matériaux », EMMA

M. Dominik SCHANIEL, ED 412, « Synthèses, Expériences, Simulations, Applications de la Molécule aux Édifices Supramoléculaires », SESAMES

## 1 • Introduction

### Historique et localisation géographique de l'unité

Le projet de création du Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques (LPCT) repose sur la fusion de 4 équipes issues de quatre laboratoires distincts (3 UMR et 1 EA) :

- Le Groupe de Physique Statistique (GPS) de l'équipe P2M de l'Institut Jean Lamour (UMR 7198) ;
- L'Équipe de Théorie-Modélisation-Simulation (TMS) du Laboratoire Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes SRSMC (UMR 7565) ;
- L'Équipe de Modélisation Quantique (EMQ) du Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisation CRM2 (UMR 7036) ;
- L'Équipe de Biophysique et Physique Statistique (BPS) et deux autres membres du Laboratoire de Chimie et Physique - Approche Multi-échelle des Milieux Complexes LCP-A2MC (EA 4632).

Les chercheurs et enseignants-chercheurs (24 EC, 10 C et 6 ITA/BIATSS) de cette unité relèvent des sections 28, 29, 30, 31 et 85 du CNU et des sections 02 et 13 du CoNRS. Cette proposition de rassemblement de physiciens et de chimistes théoriciens est l'aboutissement de synergies remontant à de nombreuses années et de discussions initiées en 2014. Le laboratoire ainsi proposé identifiera clairement une grande partie de la recherche théorique, chimique et physique, sur le site lorrain, ce qui justifie sa demande de rattachement à l'INC, section principale 13 avec un rattachement secondaire à l'INP.

Ce regroupement associe des équipes travaillant dans les domaines théoriques en physique, biophysique et chimie sur les sites de Nancy et de Metz. A Nancy sont actuellement localisés sur le site de la Faculté des Sciences et Technologies (FST) de Vandoeuvre le groupe GPS et la plus grande partie de l'équipe TMS bientôt rejointe par l'équipe EMQ, une localisation commune de tous les Nancéens dans le même bâtiment. En parallèle, les Messins (9 enseignants-chercheurs, 4 de l'équipe BPS du LCP-A2MC et 5 de l'équipe TMS du SRSMC) resteront à Metz où ils occupent des locaux dans l'Institut de Chimie, Physique et des Matériaux. Ces équipes, provenant de deux pôles scientifiques (Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique - M4 et Chimie et Physique Moléculaire - CPM) rejoindront le pôle CPM de l'Université de Lorraine. Actuellement rattachées aux deux Écoles Doctorales EMMA et SESAMES qui vont fusionner, les équipes du laboratoire seront affiliées à l'ED « Chimie, Mécanique, Matériaux, Physique - C2MP ». L'ensemble de ces mouvements localise de façon claire les personnels permanents ainsi que les non-permanents sur Nancy et sur Metz et identifie un laboratoire exclusivement consacré à la théorie sur l'Université de Lorraine.

### Équipe de direction

L'équipe de direction sera constituée d'un directeur et d'un directeur-adjoint. Ce binôme sera épaulé par deux collègues élus, l'un sur Nancy et l'autre sur Metz. Cet ensemble formera le CoDir. Un conseil scientifique, le CoSci, sera constitué par le CoDir et les représentants des cinq axes du projet (3 élus et 2 nommés).

La constitution proposée du Conseil de Laboratoire (CoLab) répond aux recommandations du CNRS. Il sera composé de 15 membres (dont 6 nommés) : le CoSci plus un représentant élu du personnel BIATSS/ITA, un représentant élu du personnel contractuel (étudiants et post-docs) et 4 membres nommés. Il restera à préciser la répartition par collèges et sous-collèges des élus et nommés dans le conseil de laboratoire, comme recommandé dans les textes du CNRS.

### Nomenclature HCERES

ST4 (chimie) principal et ST2 (physique) secondaire.

### Domaine d'activité

Les domaines d'activité développés par les équipes évaluées sont riches et vastes, allant de la physique à la chimie. Les thématiques abordées incluent des études de la matière molle relevant en particulier de la biophysique, l'étude des matériaux, des études de la matière condensée par des approches statistiques et des études de systèmes réactifs allant de la physique à la biologie en passant par la chimie (systèmes relevant de l'énergie et systèmes en

solution notamment). Les avancées conceptuelles développées dans le cadre de ces activités sont soutenues par l'utilisation de l'outil informatique ainsi que le développement de codes originaux et/ou des modifications de codes commerciaux. A cet égard, le développement d'un mésocentre de calcul (centre EXPLOR) est un point fort de l'activité de cet ensemble de chercheurs et enseignants-chercheurs. L'ensemble des acteurs se retrouve donc dans une ambition de développer une approche fondamentale pour la description de la matière en interaction reposant sur le langage de la mécanique quantique, de la physique statistique et des approches complémentaires. Par ailleurs, un nombre important de permanents est impliqué dans des activités de communication de la science vers des publics variés (grand public ou spécialisé). En raison des points de convergence et de la compatibilité des compétences scientifiques, les équipes de provenances diverses ont déposé un projet d'association au sein de la même structure. Cette nouvelle structure devrait favoriser des collaborations transversales et interdisciplinaires (déjà soutenues par un projet financé par la mission pour l'interdisciplinarité du CNRS) et contribuer ainsi à la visibilité de la thématique théorique, que ce soit au niveau local, national, ou international.

## Effectifs de l'unité

Composition de l'unité	Nombre au 30/06/2016	Nombre au 01/01/2018
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	24	24
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	10	10
N3 : Autres personnels titulaires (appui à la recherche et/ou n'ayant pas d'obligation de recherche)	6	6
N4 : Autres chercheurs et enseignants-chercheurs (ATER, post-doctorants, etc.)	4	
N5 : Chercheurs et enseignants-chercheurs émérites (DREM, PREM)	3	
N6 : Autres personnels contractuels (appui à la recherche et/ou n'ayant pas d'obligation de recherche)		
N7 : Doctorants	10	
TOTAL N1 à N7	57	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	23	

Bilan de l'unité	Période du 01/01/2011 au 30/06/2016
Thèses soutenues	32
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	9
Nombre d'HDR soutenues	4



## 2 • Appréciation sur l'unité

### Avis global sur l'unité

Les quatre équipes constituant ce projet sont toutes de grande qualité scientifique dans le domaine de la physique et de la chimie théorique. Les thématiques abordées sont très variées puisqu'elles incluent l'étude de la matière molle, notamment en biophysique, l'étude des matériaux, l'étude de la matière condensée et l'étude de systèmes réactifs allant de la physique à la biologie en passant par la chimie. Toutes les équipes ont une production ou une activité excellente, voire exceptionnelle. La publication dans les journaux à haut facteur d'impact de leur discipline est significative. Le nombre de non-productifs est négligeable sur l'ensemble des quatre équipes. Ces équipes ont également un rayonnement et une attractivité remarquables, qui se traduisent par de très bonnes performances sur les critères habituels (conférences invitées, organisations de congrès, visiteurs, échanges, doctorants d'origine étrangère, cotutelles, etc.), mais aussi par l'établissement de laboratoires internationaux (LEA et LIA). Le nombre de doctorants par rapport au nombre d'HDR est dans la norme habituelle pour la plupart des équipes, et même élevé dans certaines d'entre elles. Il est important de poursuivre une politique attractive pour les doctorants. La réunion des deux écoles doctorales (EMMA et SESAMES) en une seule (C2MP) est un facteur positif dans cette direction. C'est également le cas des cursus internationaux déjà existants (SaarLorLux) et du collège doctoral franco-allemand. Les succès aux appels d'offre sont inégaux, très bons pour certaines équipes et à améliorer pour d'autres. Même si les équipes les moins actives dans ce domaine ne semblent pas handicapées par leur faible taux de réussite aux appels d'offre, le comité leur recommande d'être plus proactives et agressives dans ce domaine.

Toutes les équipes relèvent de la théorie (de la physique à la chimie), et jusqu'à présent les applications développées sont très en amont et ne peuvent aisément se prêter à des partenariats avec le monde économique. Il est remarquable que l'une des équipes ait développé un programme original et très actif de communication et d'épistémologie qui atteint des publics très variés (du grand public au public spécialisé). Des efforts dans les mêmes directions sont effectués par des membres des autres équipes. Certaines de ces actions, très originales, sont destinées à des publics éloignés du domaine d'activité principal de ces équipes, comme le développement d'un jeu sérieux pour des pharmaciens en officine. Il résulte de ces diverses actions que, globalement, ces quatre équipes ont une interaction importante et de grande qualité avec leur environnement par l'intermédiaire d'actions culturelles qui ne sont pas nécessairement très proches de leur compétence scientifique. C'est une marque d'ouverture d'esprit et d'engagement que l'on ne peut que saluer.

S'agissant du cœur de métier de l'ensemble des membres du laboratoire, on peut cependant regretter que leur implication dans la production ou l'évolution de codes numériques ne leur apporte pas de bénéfices clairement identifiés (que ce soit sous forme de citations ou de revenus financiers). Localement, cependant, les équipes se sentent très concernées par le projet de mésocentre de calcul EXPLOR. L'un de leurs membres est responsable de cette opération, qui sera évidemment structurante. Ces équipes ont des tailles variables, et en conséquence ont adapté des modes d'organisation variés qui ont bien fonctionné dans la dernière période quinquennale. Le projet des quatre équipes résultant d'un changement profond de structure ne peut être analysé dans la continuation du bilan de chaque équipe. Il fait l'objet d'une section séparée présentée en fin de rapport.