



**HAL**  
open science

## LCT - Laboratoire de chimie théorique

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. LCT - Laboratoire de chimie théorique. 2018, Université Pierre et Marie Curie - UPMC, Centre national de la recherche scientifique - CNRS. hceres-02031616

**HAL Id: hceres-02031616**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02031616>**

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.

ÉVALUATION DE L'UNITÉ :  
Laboratoire de Chimie Théorique (LCT)

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET  
ORGANISMES :

Sorbonne université

Centre national de la recherche scientifique -  
CNRS

**CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2017-2018**  
VAGUE D



Pour le Hcéres<sup>1</sup> :

Michel Cosnard, Président

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

Chantal Daniel, Présidente du  
comité

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

<sup>1</sup> Le président du Hcéres "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).

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.

## PRÉSENTATION DE L'UNITÉ

<b>Nom de l'unité :</b>	Laboratoire de Chimie Théorique
<b>Acronyme de l'unité :</b>	LCT
<b>Label demandé :</b>	UMR
<b>Type de demande :</b>	Renouvellement à l'identique
<b>N° actuel :</b>	7616
<b>Nom du directeur (2017-2018) :</b>	M. Olivier PARISEL
<b>Nom du porteur de projet (2019-2023) :</b>	M. Jean-Philip PIQUEMAL
<b>Nombre d'équipes et /ou de thèmes du projet :</b>	4

## MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

<b>Président :</b>	M <sup>me</sup> Chantal DANIEL, université de Strasbourg
<b>Experts :</b>	M. Bernard AMADON, CEA M <sup>me</sup> Clémence CORMINBOEUF, EPFL Lausanne M. Laurent GALMICHE, ENS Cachan (personnels d'appui à la recherche) M. Laurent MARON, université de Toulouse (représentant du CNU) M. Antonio MONARI, université de Lorraine (représentant du CoNRS)
<b>Conseiller scientifique représentant du Hcéres :</b>	M. François GUILLAUME
<b>Représentants des établissements et organismes tutelles de l'unité :</b>	M. Daniel BORGIS, CNRS M. Bertrand MEYER, Sorbonne université M <sup>me</sup> Frédérique PERRONET, Sorbonne université M <sup>me</sup> Claire-Marie PRADIER, CNRS

## INTRODUCTION

Le Laboratoire de Chimie Théorique (LCT) UMR-7616 est composé de 15,5 enseignants-chercheurs, 7 chercheurs et 3 personnels d'appui à la recherche. Il relève de deux tutelles, le CNRS et Sorbonne Université (SU). Le LCT est membre de la fédération de recherche Institut Parisien de Chimie Physique et Théorique (IP2CT FR-2622) et est rattaché dans son intégralité à l'École Doctorale Chimie-Physique et Chimie Analytique Paris-Centre (ED 388). Le LCT est partenaire de deux laboratoires d'excellence (labex), l'un dédié à la chimie fondamentale et ses applications (Michem), l'autre à la modélisation et à la simulation numérique (CALSIMLAB). Les activités scientifiques de l'unité recouvrent l'ensemble des domaines de recherche de la chimie théorique, du développement méthodologique formel à la modélisation multi-échelle des systèmes complexes

## HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

Le LCT, constitué au 1<sup>er</sup> janvier en 1996 sur la base de la fusion de deux laboratoires, a été contractualisé en UMR au 1<sup>er</sup> janvier 1997 et reconduit dans cette structure jusqu'au dernier contrat qui a pris effet au 1<sup>er</sup> janvier 2014.

## DIRECTION DE L'UNITÉ

L'équipe de direction est constituée du directeur de l'unité.

## NOMENCLATURE HCÉRES

ST4 : chimie.

## DOMAINE D'ACTIVITÉ

Les activités scientifiques du LCT se déclinent autour de deux pôles, à savoir les « Méthodes et Outils pour la Chimie Quantique » et la « Modélisation des Systèmes Complexes », incluant trois thématiques historiques qui sont le développement de méthodes pour le calcul électronique de molécules et systèmes étendus, l'analyse de la liaison chimique au moyen d'approches topologiques et l'application des méthodes de chimie théorique à l'étude des propriétés physico-chimiques et de la réactivité chimique. Plus récemment, des approches mixtes quantique/classique et de dynamique moléculaire ont été développées afin de réaliser des études multi-échelles qui sont capables de prendre en compte les effets d'environnement au sens large. Le projet du LCT est basé sur ces deux pôles animés par six équipes dont les activités vont de la théorie de la structure électronique et l'interprétation chimique à la chimie de l'espace ou aux matériaux pour l'environnement et l'énergie en passant par la méthodologie pour les simulations multi-échelle ou la chimie inorganique et organométallique. Un axe transverse « Métachimie » est consacré à une réflexion approfondie et originale sur la diffusion des connaissances en chimie.

## EFFECTIFS DE L'UNITÉ

Composition de l'unité	Nombre au 30/06/2017	Nombre au 01/01/2019
<b>Personnels permanents en activité</b>		
Professeurs et assimilés	3	3
Maitres de conférences et assimilés	11	12,5
Directeurs de recherche et assimilés	2	2
Chargés de recherche et assimilés	3	5

Conservateurs, cadres scientifiques (EPIC, fondations, industries, etc.)	0	0
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur	0	0
ITA, BIATSS autres personnels cadres et non-cadres des EPIC	3	3
<b>TOTAL personnels permanents en activité</b>	<b>22</b>	<b>25,5</b>
<b>Personnels non-titulaires, émérites et autres</b>		
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres	3	
Chercheurs non titulaires (dont post-doctorants), émérites et autres	2	
Autres personnels non titulaires (appui à la recherche)	1	
Doctorants	7	
<b>TOTAL personnels non titulaires, émérites et autres</b>	<b>14</b>	
<b>TOTAL unité</b>		
	<b>36</b>	

## AVIS GLOBAL SUR L'UNITÉ

Le LCT est une unité de recherche très active atteignant l'excellence scientifique dans de nombreux domaines de la chimie théorique. La restructuration proposée en six équipes améliore l'adéquation compétences/projets et ajoute à la cohérence scientifique en faisant évoluer sa politique qui se décline en trois à quatre thèmes au sein de chacune des équipes. Les interactions de l'unité avec son environnement sont de grande qualité avec des partenariats tant académiques qu'industriels et une implication dans des actions à destination du grand public et de la jeunesse. La vie de l'unité est qualitativement bonne et les perspectives à cinq ans sont satisfaisantes, non seulement en recherche fondamentale autour des méthodes et outils pour la structure électronique, l'interprétation chimique, le développement de méthodes multi-échelle, la chimie inorganique/organométallique, interstellaire ou des matériaux pour l'environnement et l'énergie, mais également autour du développement et de l'exploitation de nouvelles méthodes et logiciels rassemblés dans une seule boîte à outils à l'usage du théoricien.

Les compétences de ses personnels, son histoire, sa production et son environnement font de ce laboratoire l'un des plus renommés en France, en Europe et au-delà, en chimie théorique attirant doctorants, post-doctorants, chercheurs et professeurs invités de toutes nationalités.

Les rapports d'évaluation du Hcéres  
sont consultables en ligne : [www.hceres.fr](http://www.hceres.fr)

Évaluation des coordinations territoriales  
Évaluation des établissements  
Évaluation de la recherche  
Évaluation des écoles doctorales  
Évaluation des formations  
Évaluation et accréditation internationales



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

[hceres.fr](http://hceres.fr)

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

[Hcéres](https://www.youtube.com/Hceres)

