



**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. 2013, Université Pierre et Marie Curie - UPMC. hceres-02031617

**HAL Id: hceres-02031617**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02031617v1>**

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

Evaluation de l'AERES sur l'unité :

Laboratoire de Chimie Théorique

LCT

sous tutelle des

établissements et organismes :

Université Paris 6 - Pierre et Marie Curie

Centre National de la Recherche Scientifique





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**



# Notation

À l'issue des visites de la campagne d'évaluation 2012-2013, 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 six critères définis par l'AERES.

NN (non noté) associé à un critère indique que celui-ci est sans objet pour le cas particulier de cette unité ou de cette équipe.

**Critère 1 - C1** : Production et qualité scientifiques ;

**Critère 2 - C2** : Rayonnement et attractivité académique ;

**Critère 3 - C3** : Interaction avec l'environnement social, économique et culturel ;

**Critère 4 - C4** : Organisation et vie de l'unité (ou de l'équipe) ;

**Critère 5 - C5** : Implication dans la formation par la recherche ;

**Critère 6 - C6** : Stratégie et projet à cinq ans.

Dans le cadre de cette notation, l'unité de recherche concernée par ce rapport a obtenu les notes suivantes :

- Notation de l'unité : **Laboratoire de Chimie Théorique**

| C1 | C2 | C3 | C4 | C5 | C6 |
|----|----|----|----|----|----|
| A  | A+ | A+ | A  | A+ | B  |



# Rapport d'évaluation

|   |                                 |
|---|---------------------------------|
| Nom de l'unité :                          | Laboratoire de Chimie Théorique |
| Acronyme de l'unité :                     | LCT                             |
| Label demandé :                           | Unité Mixte de Recherche        |
| N° actuel :                               | UMR 7616                        |
| Nom du directeur<br>(2012-2013) :         | M. Olivier PARISEL              |
| Nom du porteur de projet<br>(2014-2018) : | M. Olivier PARISEL              |

## Membres du comité d'experts

|             |  |
|-------------|--|
| Président : | M. Philippe SAUTET, CNRS et ENS de Lyon          |
| Experts :   | M. Xavier ASSFELD, Nancy (représentant du CoNRS) |
|             | M. Mark CASIDA, Grenoble                         |
|             | M. Laurent MARON, Toulouse (représentant du CNU) |
|             | M. Christian NAULIN, Bordeaux                    |
|             | M. Paul POPELIER, Manchester, Angleterre         |

### Délégué scientifique représentant de l'AERES :

M<sup>me</sup> Gilberte CHAMBAUD

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

M<sup>me</sup> Marie JARDAT (Université Pierre et Marie Curie)

M. Claude POUCHAN (CNRS)



## 1 • Introduction

### Historique et localisation géographique de l'unité

Le Laboratoire de Chimie Théorique a été formellement constitué au 01 janvier 1996 avec un statut d'UPR, puis contractualisé comme UMR au 01/01/1997. Il a été reconduit en tant qu'UMR d'abord le 01/01/2001, puis les 01/01/2005 et 01/01/2009, M. Olivier PARISEL en prenant alors la direction suite à M. Bernard SILVI, lui-même successeur en 2003 de M. Alain SEVIN, premier directeur en 1996.

Il est localisé sur le campus de l'UPMC à Jussieu où il s'est installé en 2011 dans des locaux rénovés après un séjour de plusieurs années dans les locaux du bâtiment Saint Raphaël à Ivry, durant la période de désamiantage.

### Équipe de Direction

Directeur: M. Olivier PARISEL

### Nomenclature AERES

ST4 Chimie

### Effectifs de l'unité

| Effectifs de l'unité   | Nombre au 30/06/2012 | Nombre au 01/01/2014 | 2014-2018<br>Nombre de<br>produisants<br>du projet |
|--|----------------------|----------------------|--|
| <b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés                             | 13                   | 14                   | 14   |
| <b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés                        | 7                    | 7                    | 7  |
| <b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)       | 3                    | 2                    | 0  |
| <b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)                            | 3                    | 3                    | 3  |
| <b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.) | 6                    | 3                    | 3  |
| <b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)     |                      |                      |  |
| <b>TOTAL N1 à N6</b>   | <b>32</b>            | <b>29</b>            | <b>27</b>  |
| <b>Taux de producteurs</b>   | <b>100 %</b>         |                      |  |



| <b>Effectifs de l'unité</b>                                 | Nombre au<br>30/06/2012 | Nombre au<br>01/01/2014 |
|---|-------------------------|-------------------------|
| Doctorants  | 10                      |                         |
| Thèses soutenues  | 11                      |                         |
| Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité * | 9                       |                         |
| Nombre d'HDR soutenues                                      | 6                       |                         |
| Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées | 18                      | 19                      |



## 2 • Appréciation sur l'unité

### Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité présente un large spectre en chimie théorique, combinant le développement de méthodes originales et des applications en chimie. Elle a développé un grand nombre de collaborations effectives avec des groupes d'expérimentateurs. Les points forts sont :

- Un très bon nombre global de publications : 2,7 par an et par ETPC, un nombre significatif d'articles dans des journaux de premier plan international à haut facteur d'impact (taux moyen 3,7): *Angewandte Chemie*, *JACS*, *PNAS* ... En outre, il faut relever une très bonne participation aux congrès (150 communications orales) et d'excellents développements méthodologiques conduisant à l'écriture de programmes et logiciels originaux,
- certains projets individuels sont excellents. Le recentrage en 3 thématiques est positif et devrait permettre un effet d'entraînement,
- l'opportunité d'une action marquante en Monte-Carlo quantique qui associe davantage encore les expertises remarquables de l'unité,
- l'impact en termes de citations, très bien situé pour la discipline (environ 2000 citations, soit 6 citations par article sur la période 2007-Juin 2012, 4 articles cités plus de 50 fois, 29 plus de 20 fois),
- une excellente attractivité auprès des étudiants, qui se traduit par une très bonne mobilité entrante,
- une très bonne participation à des projets et structures (2 Labex, 7 ANR),
- un nombre important de conférences invitées dans des congrès : 75 (soit 0,7/an/ETPC),
- de nombreuses collaborations suivies nationales et internationales,
- une distribution harmonieuse de l'encadrement,
- des actions remarquables de diffusion et de vulgarisation des connaissances (Année de la Chimie, livres),
- un laboratoire de grande visibilité et fortement présent sur l'UMPC et sur la communauté nationale des chimistes théoriciens (participation au bureau du Réseau de Chimie Théorique Français - RCTF).

Au niveau de la vie de l'unité on peut souligner :

- une très bonne ambiance générale,
- la forte implication du directeur qui assume ses responsabilités et les décisions,
- la très bonne organisation et vie collective des doctorants du laboratoire,
- la mise en place remarquable de séminaires externes.

Pour la participation à l'enseignement :

- un niveau d'implication élevé en enseignement et dans la gestion des structures (direction de l'école doctorale par exemple),
- un accueil important de stages de master et une bonne insertion des doctorants dans la vie active.





## Points à améliorer et risques liés au contexte

Pour le bilan :

- production scientifique fortement hétérogène, en quantité et en qualité, sur l'unité ainsi qu'une production en dessous du niveau souhaitable pour quelques chercheurs ou enseignants-chercheurs,
- un nombre de portage de projets limité. L'unité est souvent sollicitée pour participer à des projets, ce qui est une marque de reconnaissance mais ne facilite pas la mise en place d'une stratégie scientifique,
- l'intégration des codes est une activité importante qui pourrait être renforcée,
- l'interaction de la partie applicative avec l'industrie à renforcer,
- une communication informelle et imparfaite,
- l'absence de conseil de laboratoire,
- une telle structure informelle peut montrer des limites en cas de problème ou de désaccord majeur. Elle peut compromettre la prise de certaines décisions politiques ou stratégiques, par exemple sur l'évolution du projet scientifique.

Pour le projet :

- la description du projet apparaît trop succincte dans les documents,
- le projet se situe pour une trop large part dans la continuité des travaux en cours,
- le projet est parfois morcelé et manquant de cohérence, de ligne directrice, de stratégie, avec des priorités non explicitées,
- une analyse superficielle apparaît pour certains sujets,
- une adéquation imparfaite avec les moyens humains dans certaines thématiques de l'axe 3. Celui-ci apparaît comme une simple juxtaposition des anciens axes, ce qui limite la portée de l'évolution proposée,
- les animateurs des axes futurs ne sont pas clairement mentionnés dans le rapport, mais ils ont été indiqués à l'oral, après question,
- pyramide des âges problématique dans certains axes.

## Recommandations

- poursuivre la discussion et l'affinement du projet avec tous les membres de l'unité. Préciser la ligne directrice. Associer clairement chaque partie du projet à des moyens humains,
- accentuer le développement de l'animation scientifique interne au niveau de l'unité et dans les axes, source de synergies. La généraliser à tous les axes,
- favoriser la prise de responsabilités de la nouvelle génération des leaders scientifiques de l'unité,
- initier une discussion sur la propriété intellectuelle pour les codes développés dans l'unité. Encourager les chercheurs à coordonner les activités d'écriture de code, comme cela est proposé dans le projet,
- renforcer la diffusion des méthodes de l'unité dans les grands codes de Chimie quantique,
- inciter à utiliser encore plus l'outil du CECAM (nœud CFCAM en île de France),
- mettre en place une structure de conseil pour la direction de l'unité (conseil de laboratoire ou comité de direction élargi) ; la réunir de façon périodique et l'utiliser pour diffuser l'information en interne ; communiquer largement sur les nouvelles structures (Fédération) en particulier vers les ITA.



### 3 • Appréciations détaillées

#### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

L'unité est structurée en 5 grandes thématiques ou axes auxquels participe la grande majorité des membres avec des priorités plus ou moins bien définies. Deux de ces axes sont à caractère méthodologique et les trois autres sont davantage caractérisés par leurs domaines d'application. La présentation ci-dessous s'attache à différencier la production de l'unité selon ces axes en complément du point 2 qui en donne une vision globale. L'analyse ainsi faite permet de faire ressortir les points les plus forts de l'unité.

##### **Axe 1 : Méthodes pour la structure électronique.**

Actuellement l'axe porte ses efforts méthodologiques dans 4 domaines fortement imbriqués.

Les méthodes mélangeant l'approche DFT avec les approches « fonction d'onde » (ou encore plus correctement les approches MBT (pour l'anglais many-body theory), parce que certaines des approches sont basées non pas sur les fonctions d'ondes mais sur les fonctions de Green),

Les méthodes de QMC (pour l'anglais quantum Monte Carlo),

La méthode valence-bond (VB),

Les méthodes prenant avantage de la localisation préalable des orbitales.

Un point marquant dans l'approche mélangeant DFT et des approches MBT plus standard repose sur les idées de fonctionnelle à séparation de portée et de connexion adiabatique. L'importance de ces travaux est montrée par exemple dans le nombre de citations des articles phares (pour la période du bilan), notamment J. Chem. Phys. 127, 221103 (2007) qui a déjà obtenu 60 citations à cette date, et Phys. Rev. Lett. 102, 096404 (2009) qui a obtenu 64 citations. Ces approches ont été introduites dans les logiciels MOLPRO et DALTON et son auteur apparaîtra dans un avenir plus ou moins proche sur la liste d'auteurs de ces deux logiciels de chimie quantique mondialement connus, ce qui représente un point très positif.

L'approche à séparation de portée est également au cœur des problématiques associant les méthodes de type interaction de configuration ou les méthodes VB. Grâce à un recrutement récent, l'équipe est bien positionnée pour explorer la combinaison de l'approche à séparation de portée et des fonctions de Green pour les propriétés optiques non linéaires et les états excités.

Une autre partie des travaux vise à améliorer la méthode QMC, soit par l'amélioration des méthodes d'échantillonnage et d'optimisation, soit en utilisant de meilleures fonctions d'importances avec une contribution venant de la théorie VB. Le code maison développé est très commode pour tester des idées, dont certaines ont été ensuite implémentés dans d'autres codes, notamment le code QMC-CHAMP mondialement connu et dont l'équipe compte un co-auteur. Le niveau de reconnaissance de cette contribution peut être illustré par la publication, J. Chem. Phys. 128, 174101 (2008) qui a déjà obtenu 43 citations.

Il est à noter que le nombre de personnes travaillant sur la méthode QMC est tel que l'unité pourrait ambitionner un rayonnement encore plus grand. Il est tout à fait possible que ce rayonnement augmente dans les années à venir si les efforts sur le développement de la méthode QMC sont poursuivis, mais seulement à condition de vouloir se rendre plus visible en organisant par exemple des ateliers sur le sujet ou en se proposant comme éditeurs d'une édition spéciale d'un volume de journal dévoué à ce sujet.

##### **Axe 2 : Concepts et Méthodes Interprétatives.**

L'unité développe des méthodes et des outils pour l'interprétation des calculs de chimie quantique. Ces nouveaux descripteurs permettent de réexaminer des concepts classiques en chimie avec le langage moderne des fonctions d'onde. L'axe a développé des logiciels dédiés. La compréhension chimique issue de ces interprétations sert de base au développement de champs de forces originaux qui ouvrent plusieurs domaines d'applications. La variété et le caractère large des recherches menées par l'axe dans le domaine sont remarquables et assez uniques au monde.

Les nouvelles approches (NCI, EPLF, MPD) apportent des renseignements et des concepts nouveaux (subvalence des cations métalliques par exemple). Leur extension aux fonctions d'onde corrélées est un atout majeur. Les approches Valence-Bond sont développées et appliquées à des systèmes jusqu'alors inaccessibles. Les concepts qui en découlent apportent un degré avancé de compréhension de la liaison chimique.



A la lecture du bilan, il est cependant difficile d'évaluer l'impact de ces recherches. On note cependant une production élevée avec un total de 59 ACL sur la période de référence, ce qui correspond à une moyenne de plus de 3 publications par an par ETPC. La production est par contre très variable d'un membre à l'autre de cet axe. Les journaux choisis pour publier ces résultats possèdent des facteurs d'impact élevés, que se soit pour des journaux spécialisés (JCTC par exemple) ou plus généralistes.

Le développement de cet axe bénéficie d'une masse critique importante de chercheurs qui développent des interactions et des fertilisations croisées.

### **Axe 3 : Chimie et Univers.**

Les travaux réalisés dans cet axe s'appuient sur des développements méthodologiques visant à l'interprétation des résultats de calculs en termes de « liaisons chimiques ». Ils bénéficient aussi du support de chercheurs impliqués dans d'autres « Axes », concernant notamment les processus hétérogènes (interactions atomes ou molécules - surfaces, adsorption), ou les calculs de surfaces de potentiel (PES) par des méthodes DFT (avec traitement de la longue portée, qui est prédominante dans les processus à basse énergie) et QMC.

Cependant la multiplicité des « possibles » engendrée par la variété des méthodes théoriques applicables conduit à une certaine dispersion pour les applications dans le domaine de l'astrochimie. Cette dispersion pourrait être un atout, mais pose problème en raison notamment de la pyramide des âges du personnel impliqué majoritairement dans cet axe (2 retraités émérites ou bénévoles, 1 MCF). Il est vrai, comme il est rappelé ci-dessus, que certains sujets bénéficient de l'appui d'autres chercheurs du LCT. Cependant, une trop grande dispersion risque de résulter dans une analyse superficielle des sujets traités, simplement par manque de temps ou de moyens humains.

Les travaux sont menés en collaboration à la fois avec des observateurs (OSU de Grenoble et Besançon) et des expérimentateurs, notamment au sein de l'UPMC (plateforme ASTROLAB), mais aussi à l'extérieur (Rennes).

On note une vingtaine de publications dans des revues avec comité de lecture de bon niveau (IF moyen de l'ordre de 4), dont la moitié dans des revues d'Astrophysique (ApJ, A&A, Mon. Not. Roy. Astro. Soc.). Les supports éditoriaux choisis sont tous d'excellente notoriété. L'équilibre entre revues d'astrophysique et de chimie-physique montre bien l'adéquation entre développements méthodologiques et applications qui caractérise la façon dont cette thématique est abordée.

Les recherches menées dans cet axe s'appuient sur un savoir-faire de l'unité dans le domaine des calculs ab initio (de type Multi-Reference-Configuration-Interaction -MRCI) mais aussi de type Monte Carlo Quantique, et ce qui est sans doute plus spécifique au LCT, les méthodes topologiques (description en termes de liaisons de valence). Ce savoir-faire est utilisé pour modéliser des systèmes complexes intéressant l'astrophysique, en relation avec les observations récentes (au sol, ou missions spatiales) : nuages moléculaires interstellaires, atmosphère de Titan, exobiologie...

Ces travaux sont soutenus par des Programmes Nationaux du CNRS (PCMI, PNP, EPOV, ARCHES), et réalisés avec des collaborations principalement locales (ASTROLAB) ou nationales. Les relations internationales ne sont pas mentionnées dans le rapport, mais seulement dans les fiches individuelles (notamment participation à l'action COST « The Chemical Cosmos... »).

### **Axe 4 : Chimie et surface.**

On peut noter dans cet axe, deux approches distinctes :

L'approche par décompte électronique qui est une activité « historique » de l'unité. Ces travaux traitent essentiellement des oxydes et ont donné lieu à une thèse, quelques collaborations internationales, 8 publications et une ANR en cours.

L'approche DFT sur des systèmes d'assemblage ou de surfaces métalliques mais aussi sur des réactions de catalyse sur surface. Le premier cadre d'étude traite essentiellement de l'adsorption de molécules sur des surfaces métalliques qui sont les prérequis nécessaires à une étude mécanistique. Le second cadre d'étude s'intéresse à des réactions de catalyse sur des surfaces d'oxydes, de nanoparticules ou de zéolithes. On peut noter le projet de travailler sur des réactions de type Fischer-Tropsch ou des transferts de proton dans les zéolithes.



Cette activité scientifique est de qualité et elle bénéficie d'une bonne reconnaissance internationale. Sur la période de 6 ans (2007-2012), l'équipe a publié 100 articles (soit environ 3 articles/ETPC/an) dans de très bons journaux de chimie-physique. On note cependant une assez forte disparité dans la production selon les acteurs impliqués. 5 articles sur cette période sont cités plus de 20 fois, dont 2 plus de 35 fois, ce qui représente un très bon impact.

#### **Axe 5 : Sélectivités et Environnements.**

Cet axe constitue un autre champ d'applications des diverses méthodes développées dans l'unité. Il s'étend de la réactivité organométallique aux composés à activité biologique en passant par un niveau intermédiaire dédié aux métaux en biologie (toxicité). Les recherches entreprises possèdent un très fort impact sociétal, comme par exemple les travaux menés sur le saturnisme. Deux domaines d'application peuvent être identifiés :

D'une part, l'étude de la réactivité organométallique qui est réalisée en très grande synergie avec des groupes expérimentaux. Cette étude est essentiellement liée à des réactions faisant intervenir des organolithiens et/ou des organocuprates/zincates. Dans de tels composés, la nature de la sphère de solvatation est un problème important pour la description de la réactivité et des travaux intéressants sur la microsolvatation ont été menés dans l'équipe. La collaboration avec l'IRCOF de Rouen sur les composés lithiés est un élément moteur de cet axe. La réactivité hétérobimétallique a également été étudiée ainsi que la catalyse au cuivre, très utilisée en chimie organique de synthèse. Ces études sont réalisées en utilisant des techniques classiques de la DFT mais aussi des approches de dynamique moléculaire. Ces travaux sont de bonne qualité.

D'autre part, l'étude de composés ayant une activité biologique, en particulier des réactions de type cycloaddition mais aussi des études plus complexes sur les radicaux soufrés. Dans le premier cas, il s'agit des travaux de DFT classique avec des analyses de topologie alors que dans le second cas des calculs plus poussés, incluant la corrélation électronique explicite sont réalisés. D'autres études de réactivité radicalaire ou de réaction de transfert monoélectronique sont aussi conduites. Ces études représentent un défi important pour la chimie théorique moléculaire actuelle. Enfin, une étude suivie sur l'activation du dioxygène moléculaire en collaboration avec un groupe d'expérimentateurs de l'Université Paris-Descartes se poursuit de même que des travaux sur le saturnisme et les complexes du plomb. Ces travaux sont aussi de bonne qualité et reconnus dans la communauté. Le calcul de grandeurs thermodynamiques, tel que le potentiel redox de thio-redoxines, est également un savoir-faire important de l'unité qu'il faut préserver et développer.

A cet axe sont associées 36 ACL, ce qui correspond à environ 3 publications/an/ETPC. Les thématiques des journaux vont de la biologie à la chimie-physique en passant par des supports à très fort facteur d'impact (Angewandte Chemie par exemple). On note cependant une assez forte disparité dans la production selon les acteurs impliqués.

#### **Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques**

Le rayonnement est également analysé selon les 5 axes structurant l'unité car on y décèle une inhomogénéité dont il est nécessaire de rendre compte.

#### **Axe 1 : Méthodes pour la structure électronique.**

Il est impossible de contourner le fait que cet axe est animé par un chercheur extrêmement connu dans le domaine de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT pour l'anglais density-functional theory) avec un haut niveau de créativité et un grand rayonnement international. L'organisation informelle d'un congrès international à Kathmandou en 2012 représente à elle seule une illustration parfaite de cette renommée. Un grand nombre de collègues, eux aussi de rayonnement mondial, ont répondu positivement et le congrès a été un grand succès ! Le groupe de méthodes attire régulièrement des conférenciers de haut niveau, aidant à donner une dimension encore plus large à la formation des étudiants en doctorat et en Masters déjà bien formés par des cours du Label de Chimie Théorique du Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT) et par une politique forte de participation des étudiants aux écoles d'été.



## Axe 2 : Concepts et Méthodes Interprétatives.

Le recrutement récent d'un chargé de recherche formé en dehors de nos frontières sur cet axe démontre son attractivité et sa notoriété au plan international. De nombreuses conférences invitées internationales (28 lui sont associées) dont 17 portent sur le développement et l'application des nouveaux champs de force. Seuls trois membres dispensent ces conférences invitées ce qui montre leur forte reconnaissance mais démontre aussi que les autres membres sont moins visibles.

## Axe 3 : Chimie et Univers.

Les travaux qui ont eu le plus d'impact en termes de citations à ce jour concernent la stabilité des molécules organiques complexes (application du principe d'énergie minimum), ainsi que le piégeage d'espèces volatiles, notamment des gaz rares, dans des clathrates et leur implication sur l'origine de l'atmosphère de Titan. Cependant, l'impact dans la communauté internationale, mesuré en termes d'invitations ou de communications orales dans des conférences internationales est moindre : on note peu d'invitations et pratiquement pas de communications orales.

## Axe 4 : Chimie et Surfaces.

Cet axe est globalement bien reconnu pour ses travaux sur la modélisation en chimie des surfaces. Comme indiqué plus haut, les travaux sont bien cités. 7 conférences invitées dans des congrès ont été données sur la période 2007-2012. On peut regretter cependant que ces conférences aient été présentées pour l'essentiel par une seule personne. L'impact international est donc inégalement réparti. On peut relever aussi dans cet axe la présence d'un membre junior de l'IUF qui va pouvoir utiliser sa mise en délégation pour dynamiser encore plus son activité.

## Axe 5 : Sélectivités et Environnements.

On notera la promotion au grade de professeur de deux éléments moteurs de cet axe. On peut par contre déplorer que certains maîtres de conférences n'aient pas encore soutenu leur HDR. On peut dénombrer quelques (5) conférences invitées réparties selon les trois points forts énoncés plus haut.

## Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

L'interaction avec l'environnement social, économique et culturel est développée de multiple façon. L'une des actions intéressante et originale se manifeste dans le cadre de la "métachimie". Nous avons donc choisi de placer ici une analyse de cette activité.

Cette activité est un vecteur important pour faire reconnaître le travail de l'unité dans les domaines :

- de l'enseignement de la chimie,
- de l'histoire de la chimie,
- des concepts de la chimie.

Le regroupement sous le vocable de « métachimie » est apparu inapproprié au comité car il prête à confusion. Pourquoi pas simplement « histoire et pédagogie de la chimie » ?

Cela dit, l'activité est fort intéressante, même si son évaluation est difficile avec les critères usuels. L'âge moyen avancé (58 ans) des contributeurs à cette activité amène beaucoup de questions sur son évolution dans le prochain contrat. La contribution du LCT dans le domaine est très forte et très appréciée en France avec la parution depuis 2003 de 3 ouvrages traitant de la structure électronique des molécules et qui sont bien connus et fortement utilisés pour les enseignements. On peut en particulier noter le soin apporté à la préparation du troisième de ces ouvrages. A cela se rajoute aussi deux publications en 2011 dans l'Actualité Chimique.

Un effort particulièrement important du point de vue de la continuité de la "métachimie" est le logiciel OrbiMol permettant à n'importe quel enseignant ou chercheur d'accéder par internet aux informations sur les orbitales moléculaires pour une importante base de données de molécules. L'utilisation du logiciel en ligne OrbiMol est bien documentée avec plus de 2500 connexions. Ce n'est pas un effort entièrement unique en son genre, même en France. Cependant il y a peu de recouvrement et peu de redondance entre OrbiMol et un autre logiciel produit à l'université de Marseille. Jusqu'à présent, le rayonnement de l'effort pédagogique du LCT ne s'étend pas plus loin que la France, mais ceci peut changer grâce à ce logiciel qui est en train d'être doté d'une interface en anglais.



L'activité de l'unité dans ce domaine bénéficie à toute la communauté des chimistes chercheurs et enseignants en France et ces efforts doivent être encouragés. Il reste toutefois un point d'interrogation concernant les capacités de l'unité à maintenir une présence aussi forte en "métachimie" à l'avenir.

L'unité est également fortement impliquée dans la vie de l'établissement puisque le porteur de la nouvelle structure fédérative regroupant les laboratoires de chimie-physique de l'UPMV et succédant à la fédération SMART est l'un des jeunes professeurs de l'unité.

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

L'ambiance générale est très bonne au sein de l'unité. Elle est organisée de façon efficace et le directeur est très impliqué pour assumer ses responsabilités et prendre les décisions nécessaires. L'animation scientifique apparaît de qualité. L'activité d'organisation de séminaires externes est remarquable, avec une très bonne liste d'invités illustres.

L'organisation et la vie collective des doctorants au sein de l'unité est remarquable. Le "gouter des doctorants" est une excellente initiative.

Les axes méthodologiques apparaissant dans la structuration scientifique du laboratoire correspondent à des équipes bien organisées autour d'un animateur avec des réunions régulières et bénéficiant d'une excellente coordination.

L'organisation est collégiale et informelle. Une difficulté provient peut être du caractère imparfait de la communication et de la diffusion d'informations entre les membres de l'unité. Même s'il n'y a pas de conflit aujourd'hui, cette structure informelle peut vite montrer ses limites. Cela s'est ressenti par exemple dans la mise en place de la politique scientifique. Il est souhaitable de mettre en place et de réunir un conseil de laboratoire, et d'opérer un affichage clair dans l'unité de la politique scientifique et des projets de recherche.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'attractivité de l'unité auprès des étudiants et la dynamique de la mobilité entrante sont remarquables. L'encadrement est par ailleurs très bien distribué entre les membres de l'unité. Au cours de la période, 11 thèses ont été soutenues et actuellement le laboratoire accueille 10 doctorants dont une partie en co-tutelle. Les doctorants sont tous rattachés à l'ED 388, « Chimie-Physique et chimie analytique de Paris Centre » dont le directeur est l'un des jeunes professeurs de l'unité.

L'unité est fortement impliquée dans l'enseignement à l'UMPC (UFR926) mais aussi dans les écoles ou au niveau européen avec le M2 de Chimie théorique. L'activité d'accueil de stagiaires est remarquable et l'insertion des étudiants est globalement bonne.

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

La présentation et la structuration du projet scientifique ne sont pas totalement convaincantes. Sa description est apparue trop succincte et les thématiques sont pour une trop large part dans la continuité directe des travaux en cours. Il est donc difficile de cerner les problématiques émergentes. Le projet est apparu large et parfois morcelé, ce qui nuit à la cohérence d'ensemble. La stratégie et la ligne directrice n'étaient pas suffisamment explicitées. Une difficulté réside parfois (comme dans l'axe III) dans l'adéquation entre le nombre de sujets et la limitation des moyens humains. La nouvelle structuration en trois axes présente l'avantage de donner une vision plus compacte de l'unité. Cependant l'axe 3 apparaît trop fortement comme la juxtaposition des anciens axes, limitant ainsi l'impact du changement opéré. L'analyse SWOT de ce projet a été peu visible dans les présentations.

Dans l'axe sur la théorie de la structure électronique, le projet pour les cinq prochaines années est raisonnable mais malheureusement trop concis. Il manque en particulier une analyse SWOT. On peut souligner le manque d'une explication à propos de l'importance des projets choisis et d'une analyse réaliste pour situer le projet vis-à-vis de la compétition avec d'autres équipes au niveau mondial et en France.

Finalement il est à noter qu'un des leaders aura 65 ans avant que la prochaine période de 5 années soit écoulée. Qui prendra sa relève en animant l'équipe de Méthodes ? C'est ici le principal enjeu que le LCT doit relever dans un avenir proche.



Concernant la thématique Astrochimie, intégrée dans le nouvel axe 3 « Modélisation des Systèmes complexes / c) Univers proche et lointain, le Comité relève que le projet, présenté succinctement dans le rapport, ne mentionne que l'extension des études entreprises en Exobiologie (réorientation vers les composants moléculaires des chondrites), les glaces moléculaires, les clathrates spatiaux. Le dernier item proposé ne concerne, outre la continuation des travaux concernant la réactivité des molécules primordiales, qu'une extension portant sur les conséquences « chimiques » de l'évolution des constantes physiques fondamentales aux temps astronomiques.

Ce projet est certes en cohérence avec les développements réalisés dans le précédent contrat, mais il ne présente pas de prise de risque particulière, hormis bien entendu celle inhérente à tout projet de recherche, dans la mesure où les moyens pour réussir sont présents dans le laboratoire. La seule inquiétude concerne les moyens en personnel affecté à cette thématique.



## 4 • Déroulement de la visite

### Dates de la visite :

Début : Mercredi 19 Décembre 2012 à 8h30

Fin : Jeudi 20 Décembre à 16h30

### Lieu de la visite :

Institution : UPMC

Adresse: Campus de Jussieu

Locaux spécifiques visités : Laboratoire, salle des clusters informatiques

### Déroulement ou programme de visite :

#### Mercredi 19 décembre 2012

08h30 - 09h00 : Accueil, réception et installation du Comité

Sessions à huis-clos

09h00 - 09h30 : Réunion de travail du Comité, à huis clos

09h30 - 10h05 : Entretien du Comité avec le Directeur d'Unité

#### *Session plénière*

10h10 - 10h30 : Présentation générale & bilan (M. Olivier Parisel)

10h30 - 10h45 : Axe I : Faits marquants (M. Julien Toulouse)

10h45 - 11h00 : Axe II : Faits marquants (M. Jean-Philip Piquemal)

11h00 - 11h15 : Axe III : Faits marquants (M. F. Pauzat)

Pause de 15 minutes

11h30 - 11h45 : Axe IV : Faits marquants (<sup>Mme</sup> Monica Calatayud)

11h45 - 12h00 : Axe V : Faits marquants (M. Olivier Parisel)

12h15 - 12h30 : Axe VI : Faits marquants (M. Patrick Chaquin)

12h30 - 12h45 : Projet (intervenant : M. Olivier Parisel)

13h00 - 14h15 : Déjeuner et rencontres, sessions plénières

14h15 - 14h30 (session restreinte, bibliothèque) : Présentation du projet OrbiMol

14h30 - 16h45 (session plénière) : Visite du Laboratoire, rencontres et discussions avec l'ensemble des personnels, autour de posters





*Sessions à huis-clos*

- 16h45 - 17h30 : Réunion de travail du Comité, à huis clos
- 17h30 - 18h00 : Rencontres avec les tutelles de l'Unité
- 18h00 - 19h00 : Exposé et discussions relatifs à la Fédération SMART (intervenant : J.-P. Piquemal, directeur de la Fédération de Recherche) en présence des tutelles
- 19h00 - 19h55 : Réunion de travail du Comité, à huis clos.

**Jeudi 20 décembre 2012**

*Sessions à huis-clos*

- 08h45 - 09h00 : Accueil du Comité
- 09h00 - 11h00 : Réunion de travail du Comité,
- 11h00 - 11h20 (session restreinte) : Visite des salles informatiques de l'unité
- 11h20 - 11h40 : Entretien à huis-clos avec les personnels ITA/IATOSS de l'Unité
- 11h40 - 12h10 : Entretien à huis-clos avec les doctorants et post-doctorants de l'Unité
- 12h15 - 13h30 : Déjeuner du Comité
- 13h30 - 16h15 : Réunion de travail du Comité
- 16h30 : Fin de la visite du Comité



## 5 • Statistiques par domaine : ST au 10/06/2013

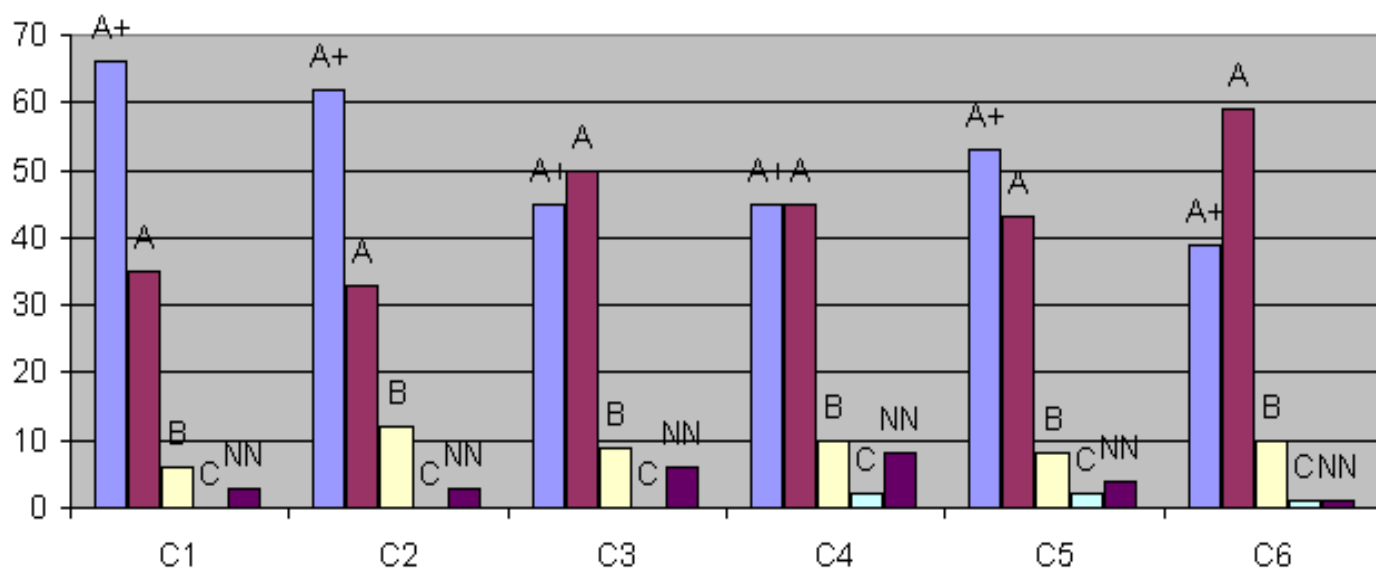
### Notes

| Critères | C1 Qualité scientifique et production | C2 Rayonnement et attractivité académiques | C3 Relations avec l'environnement social, économique et culturel | C4 Organisation et vie de l'entité | C5 Implication dans la formation par la recherche | C6 Stratégie et projet à cinq ans |
|----------|---------------------------------------|--|--|------------------------------------|---|-----------------------------------|
| A+       | 66                                    | 62   | 45   | 45                                 | 53  | 39                                |
| A        | 35                                    | 33   | 50   | 45                                 | 43  | 59                                |
| B        | 6                                     | 12   | 9  | 10                                 | 8   | 10                                |
| C        | 0                                     | 0  | 0  | 2                                  | 2   | 1                                 |
| Non Noté | 3                                     | 3  | 6  | 8                                  | 4   | 1                                 |

### Pourcentages

| Critères | C1 Qualité scientifique et production | C2 Rayonnement et attractivité académiques | C3 Relations avec l'environnement social, économique et culturel | C4 Organisation et vie de l'entité | C5 Implication dans la formation par la recherche | C6 Stratégie et projet à cinq ans |
|----------|---------------------------------------|--|--|------------------------------------|---|-----------------------------------|
| A+       | 60%                                   | 56%  | 41%  | 41%                                | 48%   | 35%                               |
| A        | 32%                                   | 30%  | 45%  | 41%                                | 39%   | 54%                               |
| B        | 5%                                    | 11%  | 8%   | 9%                                 | 7%  | 9%                                |
| C        | 0%                                    | 0%   | 0%   | 2%                                 | 2%  | 1%                                |
| Non Noté | 3%                                    | 3%   | 5%   | 7%                                 | 4%  | 1%                                |

Domaine ST - Répartition des notes par critère





## 6 • Observations générales des tutelles

Paris le 25 04 2013

Le Président  
Didier Houssin  
Agence d'évaluation de la recherche  
et de l'enseignement supérieur  
20 rue Vivienne - 75002 PARIS

M. le Président,

Nous avons pris connaissance avec le plus grand intérêt de votre rapport concernant le projet du Laboratoire de chimie théorique, porté par M. Parisel. Nous tenons à remercier l'AERES et le comité pour l'efficacité et la qualité du travail d'analyse qui a été conduit.

Ce rapport a été transmis au directeur du laboratoire qui nous a fait part en retour de ses commentaires que vous trouverez ci-joint. Nous espérons que ces informations vous permettront de bien finaliser l'évaluation du laboratoire.

Restant à votre disposition pour de plus amples informations, je vous prie de croire, M. le Président, à l'expression de mes salutations respectueuses.

Le Vice -Président Recherche et Innovation

Paul Indelicato



**Olivier PARISEL**

Directeur de Recherches CNRS

Directeur du LCT – UMR 7616

Téléphone : + 33 1 44 27 40 53

Fax : + 33 1 44 27 41 17

Mail : [parisel@lct.jussieu.fr](mailto:parisel@lct.jussieu.fr)

Paris, le 22 avril 2013

Monsieur le Président,

L'Unité a pris connaissance du rapport du Comité de Visite AERES qui s'est tenue en décembre 2012. Elle remercie l'ensemble de ses membres pour le travail d'analyse réalisé ainsi que pour le temps dédié tant à la visite sur site qu'à la rédaction du rapport subséquent.

Plusieurs précisions, non exhaustives vis-à-vis de l'ensemble et de la variété des différents points abordés dans ce rapport, doivent cependant être apportées.

1. Le Comité s'interroge (haut de la page 8) sur l'impact des recherches menées dans le cadre de l'actuel Axe Thématique II en mentionnant la difficulté à l'évaluer. Une publication de 1999 (code TOPMOD) a été citée 180 fois sur la période considérée. On signalera également que sur l'ensemble des publications rattachées à cet Axe et parues depuis 2007, au moins 10 ont déjà un nombre de citations supérieur à 20. Ainsi, une publication de 2007 dédiée aux champs de forces polarisables présente déjà plus de 90 citations et figure dans le "[Top 20 des publications les plus citées](#)" du *J. Chem. Theory Comput.* depuis la création de ce journal. Dans ce même journal, la publication relative au programme NCILOT (approche NCI, 2011, plus de 45 citations) figure parmi le "[Top 20 des publications les plus citées](#)" depuis trois ans. Cette dernière figure également dans les [Highly Cited Papers de Web of Knowledge](#). Signalons que chacun des Axes Thématiques I à V peut se prévaloir d'au moins une publication distinguée, soit par les éditeurs, soit par une analyse ou une reprise dans un autre journal, soit par la couverture du périodique, etc...

2. A la remarque concernant l'intitulé de l'actuel Axe Thématique VI ("Métachimie") qui pourrait sembler *inapproprié* (milieu de la page 10), on rappellera simplement le caractère polysémique du préfixe grec *méta* qui traduit, entres autres sens, l'autoréférence. C'est cette acception qu'il faut entendre par cette dénomination qui invite à la réflexion sur la discipline. Cette réflexion inclut évidemment des aspects épistémologiques ou pédagogiques voire didactiques, mais ne se cantonne pas à ces seuls champs.
  
3. Le futur Axe Thématique III regroupe effectivement les trois axes actuels de modélisation (actuels Axes III, IV & V) : le but de ce regroupement est, comme indiqué dans le rapport du Comité, d'obtenir une structure plus compacte. Celle-ci limite la dispersion des moyens humains liés à ces thématiques dans plusieurs axes du laboratoire. Elle favorise en outre la lisibilité vis-à-vis de l'extérieur. Le choix a cependant été fait dans la partie *Projet* de proposer une présentation conservant essentiellement la structure des trois axes ayant coexisté durant le précédent contrat quinquennal. Ce choix découle de la conservation des domaines d'expertises, quel que puisse être le cadrage qu'on leur donne, de même que de la conservation des protocoles méthodologiques ou collaborations à mettre en œuvre pour étudier les objets concernés dans leur environnement (phases gaz, milieux complexes, surfaces) : c'est en effet dans ce cadre que se définissent les compétences des intervenants. La partie *Projet* vise donc, dans ce nouveau cadre, à informer quant aux possibilités de développements des thèmes de recherche présentés dans la partie *Rapport*, mais sans préjuger *a priori* de ceux-ci.

Le regroupement permettra néanmoins de mettre en valeur et d'augmenter significativement la visibilité des grands domaines applicatifs étudiés dans ce nouvel Axe Thématique, domaines qui sont d'ailleurs des sujets de recherche soutenus et bien identifiés dans le *Rapport de Conjoncture 2010* rédigé par le Comité National de la Recherche Scientifique (pp. 243-247), à savoir :

- *chimie (poly)-radicalaire* : laquelle s'étend de la réactivité sous radiation (interstellaire ou biologique) aux problématiques de localisation électronique dans les solides et passant par les problématiques d'oxydation électrochimique ;
- *catalyse* : enzymatique, homogène (en particulier organométallique) ou hétérogène (catalyse supportée, grains interstellaires) ;
- *énergies* (production, stockage, transferts) : extension des réactions biologiques (par exemple activation de O<sub>2</sub>) aux diverses problématiques liées à la photosynthèse artificielle, études sur le stockage de H<sub>2</sub> ou

encore sur les batteries, systèmes intéressant l'univers proche ou lointain (structures, réactivité, signatures spectrales à hauts et faibles *red-shifts*).

Il est espéré qu'en communiquant les compétences disponibles sous cet aspect de problématiques généralistes, il sera possible d'attirer plus d'interactions tant avec les expérimentateurs qu'avec les partenaires industriels, gardant en tête que toutes ces problématiques relèvent de prises de risque importantes au vu des complexités d'origines diverses que tous les objets moléculaires ou supramoléculaires considérés impliquent.

A cette fin, il sera possible de s'appuyer sur les partenaires privilégiés du LCT que sont l'Institut Parisien de Chimie-Physique et Théorique et l'École Doctorale 388 multi-sceaux, mais aussi, par exemple, les LABEX ou programmes régionaux DIM dans lesquels le Laboratoire est impliqué.

4. Le rapport du Comité sous-estime les profonds bouleversements qu'a vécu le LCT avec le départ en retraite de trois professeurs UPMC au cours du contrat écoulé : cette transition générationnelle a pu être gérée au moyen de la promotion de deux jeunes MCF au rang de professeur (ce que le rapport mentionne), lesquels ont dû s'investir immédiatement dans les structures de gouvernances de l'UPMC afin de redonner une visibilité locale et dynamique tant de la discipline que de l'Unité, et ce tout en poursuivant une recherche de haute qualité malgré ces tâches institutionnelles chronophages (particulièrement durant la période de localisation à Ivry-sur-Seine). Cette visibilité s'est également affirmée par la forte implication des maîtres de conférences (rappelons ici deux recrutements MCF et un recrutement CR, tous externes) dans les structures d'enseignement et dans l'organisation de manifestations scientifiques telles que l'Année Internationale de la Chimie ou congrès/workshops de rayonnement international.

En renouvelant mes remerciements au Comité pour son travail, je vous prie de croire, Monsieur le Président, en l'assurance de mes meilleures salutations.



O. PARISEL

Directeur du Laboratoire de Chimie Théorique – UMR 7616

LABORATOIRE DE CHIMIE THÉORIQUE  
Université Pierre et Marie Curie & CNRS  
O. PARISEL, directeur  
Barré 12/13 - CC 137  
4, place Jussieu  
PARIS CEDEX 05 - FRANCE