



**HAL**  
open science

## Laboratoire de chimie-physique

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. Laboratoire de chimie-physique. 2009, Université Paris-Sud. hceres-02032122

**HAL Id: hceres-02032122**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02032122v1>**

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 d'évaluation

Unité de Recherche :

Laboratoire de Chimie-Physique - UMR 8000  
de l'Université Paris-Sud 11



février 2009



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

Section des Unités de recherche

# Rapport d'évaluation

Unité de recherche

Laboratoire de Chimie-Physique

de l'Université Paris-Sud 11



Le Président  
de l'AERES

Jean-François Dhainaut

Section des unités  
de recherche

Le Directeur

Pierre Glorieux

février 2009



# Rapport d'évaluation

## L'Unité de recherche :

Nom de l'unité : Laboratoire de Chimie-Physique

Label demandé : UMR

N° si renouvellement : UMR 8000

Nom du directeur : M. Mehran MOSTAFAVI

## Université ou école principale :

Université Paris-Sud 11

## Autres établissements et organismes de rattachement :

CNRS

## Date(s) de la visite :

13 et 14 janvier 2009



# Membres du comité d'évaluation

## Président :

M. Jean-Claude RAYEZ, Université de Bordeaux 1

## Experts :

M. Jean-Marie ANDRE, Université de Namur, Belgique

M. Jean-Luc BRUNEEL, Université de Bordeaux 1

M. Jacques DELWICHE, Université de Liège, Belgique

M. Bruno GUIGLIARELLI, Université d'Aix-Marseille 1

M. Yves LE MEST, Université de Brest

M. Jacques MARTINO, Ecole des Mines de Nantes

## Expert(s) représentant des comités d'évaluation des personnels (CNU, CoNRS) :

M. Philippe HAPIOT, Comité National

M. Claude POUCHAN, CNU



# Observateurs

Délégué scientifique de l'AERES :

M. Régis REAU

Représentant de l'université ou école, établissement principal :

M. Guy COUARRAZE, Président de l'Université de Paris 11

M. Alexandre REVCOLEVSCHI, Vice-Président Recherche, Université de Paris 11

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

M. Francis SECHERESSE, Directeur Scientifique Adjoint, Département Chimie CNRS



# Rapport d'évaluation

## 1 • Présentation succincte de l'unité

L'effectif impliqué dans le projet du LCP compte 28 enseignants-chercheurs (10 PR et 18 MCF), 22 chercheurs (8 DR et 14 CR), 2 DR et 1 PR émérite, 30 ingénieurs ou techniciens (5 IATOS et 25 ITA/TPN), soit un effectif total de 83 permanents. A la date de la visite, le LCP comptait 33 doctorants et 9 post-doctorants.

- 30 HDR dont 30 encadrant des thèses
- 22 thèses soutenues dans les 4 ans (2 non-financées); 33 thèses en cours, 32 doctorants financés.
- 7 enseignants-chercheurs bénéficient d'une PEDR
- Nombre de publiants : 50/50 EC/C + 3 émérites publiants

## 2 • Déroulement de l'évaluation

L'évaluation a débuté le 13 janvier à 8h45 par une rencontre entre le comité d'experts et les représentants des tutelles. A 9h15, le directeur du LCP a présenté son laboratoire durant 40 minutes suivi par une discussion avec les experts. Il s'est avéré que son exposé était suffisamment fourni en détails, de sorte que la majorité des questions préparées par les experts étaient déjà satisfaites. Nous avons ensuite écouté les présentations de trois équipes intitulées «Transfert d'Electron en Milieu Condensé», «BioPhysique et Chimie» et «Physico-chimie des Ions en Phase Gaz», discussions à l'appui. Ensuite, les plateformes techniques «Centre de Cinétique Rapide ELYSE (Radiolyse)» et «CLIO (Laser IR à électrons libres)», que nous avons visitées dans l'après-midi, ont été présentées par leurs responsables respectifs. Le mercredi 14 janvier, la visite s'est poursuivie par les présentations et discussions avec les intervenants des équipes «Thermodynamique Expérimentale et Statistique de la Matière Condensée» et «Chimie Théorique et Modélisation», puis des thèmes scientifiques transversaux «Photo-Physique des Protéines Fluorescentes», «Modelyse» et «Bioredox». L'après-midi a été consacrée à deux rencontres, l'une avec le Conseil de Laboratoire et l'autre avec les ITA/IATOS/TPN.

L'ensemble des présentations a été d'une grande qualité, supportées par des documents très bien rédigés. Les discussions et questions, qui ont accompagné ces présentations, ont révélé la grande compétence scientifique et technique des personnels de ce laboratoire. Cette visite s'est déroulée dans une atmosphère conviviale et très constructive.



### 3 • Analyse globale de l'unité, de son évolution et de son positionnement local, régional et européen

Le Laboratoire de Chimie-Physique (LCP) de l'Université Paris 11 est un laboratoire interdisciplinaire relevant (en utilisant l'ancien découpage en départements - aujourd'hui en passe d'être remplacés par des instituts) du Département Chimie de l'Université Paris-Sud et du CNRS à travers les départements Chimie, MPPU et Sciences du Vivant. Il est également membre du RTRA « Triangle de la Physique » ainsi que du PRES UniverSud-Paris. C'est un ensemble phare de l'Université Paris 11 ainsi que du CNRS.

Le LCP compte 5 équipes de recherche, 4 axes de recherche transversaux et 2 plateformes techniques (CLIO et ELYSE) comportant chacune un équipement lourd. Les champs de recherche expérimentaux et théoriques couverts font de ce laboratoire l'un des grands centres de la Chimie-Physique française. Il est le résultat d'une politique de restructuration amorcée il y a 8 ans et conduite par les deux directeurs successifs. Une première décision d'importance a été l'ouverture de la Chimie-Physique vers la Biologie mise en place dès la création du LCP par le premier directeur. Une seconde, plus récente, a été le rattachement de la plateforme Laser IR « CLIO » au LCP.

La mise en place d'axes transversaux de recherche a entraîné une forte dynamique interne, qui se concrétise par de nombreuses publications communes associées à des travaux de thèses et post-doctoraux. La forte dynamique du LCP se traduit également par des participations à des congrès nationaux et internationaux ainsi que par l'existence de nombreuses collaborations nationales et internationales, entretenues grâce à des contrats académiques de diverses natures ainsi que par des contrats industriels. Une « start-up » est d'ailleurs née de cette dynamique. Ces collaborations ont conduit à de nombreuses publications communes.

Le LCP est doté d'équipements performants dont certains sont le fruit de la créativité d'agents chercheurs, enseignants-chercheurs, ingénieurs et techniciens du LCP. De plus, le laboratoire intègre les plateformes ELYSE et CLIO, respectivement pour la radiolyse et comme source de lumière IR, qui sont des équipements tout à fait uniques. Mise à part l'utilisation prioritaire par les agents du LCP, ces outils puissants sont *a priori* une source d'exploitations fécondes pour des chercheurs nationaux extérieurs au laboratoire ainsi que pour des chercheurs internationaux.

Le LCP, après 8 années d'existence, est bien organisé et scientifiquement bien structuré. Il atteint un rythme de fonctionnement globalement très productif. Sa réputation nationale et internationale est maintenant bien établie.



## 4 • Analyse équipe par équipe et par projet

### 1. Equipe Biophysique (BIOPhys)

L'équipe de BioPhysique est composée de 15 chercheurs et enseignants-chercheurs (4 CR, 2 DR, 6 MCF, 2 PR et 1 PR émérite). Son activité de recherche porte globalement sur l'étude des transferts de charges dans les systèmes biologiques. Elle s'appuie sur l'environnement expérimental et théorique exceptionnel du LCP pour développer des approches originales de cinétique rapide couplée aux spectroscopies résolues en temps et d'imagerie par IR associées à l'installation CLIO. Cette activité se répartit en quatre thèmes :

- Relation structure-fonction-dynamique-évolution dans les protéines de transfert d'électron
- Transferts électroniques induits par rayonnement ionisant dans les peptides et protéines
- Photobiologie des protéines fluorescentes
- Spectro-microscopie IR en milieu cellulaire (AFMIR)

Sur les quatre années de référence, l'équipe a atteint un bon niveau de production scientifique, eu égard à son origine récente et à ses très récents recrutements de jeunes chercheurs. Un point très positif est la dynamique dont a fait preuve ce groupe dans sa structuration au cours du quadriennal, ce qui se traduit par un accroissement significatif de sa production scientifique sur les 4 années (6 articles en 2004 - 19 en 2007) et par l'obtention d'un nombre important de soutiens (ACI, ANR, post-docs sur contrats,...).

L'étude des processus de transfert d'électrons et de protons dans le fonctionnement des systèmes bioénergétiques et dans les mécanismes moléculaires liés au stress oxydant est un domaine très actif et concurrentiel au niveau international. Les compétences regroupées dans l'équipe de Biophysique et les développements originaux effectués dans les domaines des spectroscopies rapides, de la spectro-imagerie et des techniques d'irradiation, lui permettent de se positionner très favorablement sur ces thématiques. Les développements instrumentaux relatifs à l'AFMIR sont particulièrement novateurs et ouvrent notamment des perspectives très prometteuses en termes d'imagerie cellulaire. La mise au point d'une imagerie d'interaction moléculaire en cellule vivante basée sur l'expertise acquise dans le domaine des protéines fluorescentes et de la photophysique constitue également une approche très intéressante pour l'exploration des mécanismes d'assemblage des édifices enzymatiques complexes.

L'intégration réussie de ce groupe dans le LCP, grâce au soutien du laboratoire et aux nombreuses interactions établies avec les autres groupes, lui permet d'envisager de façon très optimiste son évolution et la réussite de ses projets. Une des clés de cette réussite sera d'accroître sa cohésion grâce à des approches convergentes sur des thématiques communes. Le projet proposé va clairement dans ce sens. L'émergence de thèmes fédérateurs nécessitant des approches convergentes, organisés par exemple autour de l'étude du centre réactionnel photosynthétique, de la NADPH oxydase, ou encore de la neuroglobine, ainsi que l'implication du groupe dans des axes transversaux du LCP (P3F, Biorédox) est une démarche très positive en ce sens. Le rapprochement avec l'équipe de Bioélectrochimie du groupe TEMIC est à encourager.

#### — Conclusion :

L'intégration du groupe de Biophysique au sein du LCP est une étape réussie, avec un bilan de bonne qualité. Elle doit tirer parti de ses derniers recrutements pour améliorer sa cohésion et son impact.



— Points forts :

- originalité des approches expérimentales
- développement d'instrumentations remarquables
- nombreux contrats et partenariats
- dynamisme du groupe

— Points à améliorer :

- renforcer la cohésion du groupe
- augmenter la production scientifique en qualité et en quantité
- améliorer la visibilité nationale et internationale du groupe

— Recommandations :

Il convient d'éviter une dispersion des systèmes biologiques étudiés et de profiter de la dynamique initiée afin d'atteindre une reconnaissance internationale.

Nom de l'équipe : Equipe Biophysique (BIOPhys)

Note de l'équipe	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
B	B	B	A	A

## 2. Equipe Transfert d'Electron en Milieu Condensé (TEMiC)

L'équipe TEMiC est composée de 15 chercheurs (3 PR, 4 DR, 4 MCF, 4 CR, 1 PR Em.), de 3 chercheurs associés, de 10 doctorants et 7 post-docs et ATER. La production scientifique globale de l'équipe est excellente aussi bien en quantité qu'en qualité. On note un très bon niveau de publications par chercheur, avec une production scientifique impressionnante pour certains d'entre eux. Les nombreux contrats et partenariats (3 ACI, 3 projets ANR, IFP, SAFT) sont également à souligner.

Deux des thèmes de cette équipe sont particulièrement visibles. Ils s'appuient sur des équipements remarquables (ELYSE, CLIO) et donnent à TEMiC un rayonnement international excellent :

### 1) *La radiolyse appliquée à l'étude de processus élémentaires fondamentaux.*

Elle permet d'avoir accès aux propriétés des espèces primaires générées sous rayonnement dans des milieux variés et dans des conditions extrêmes, à la caractérisation d'intermédiaires impliqués dans de nombreux processus élémentaires, ainsi qu'à l'étude de phases condensées hétérogènes. Ces approches reposent sur un savoir-faire unique associé à des équipements exceptionnels au niveau international. Cette grande expertise mériterait certainement un développement de partenariat externe plus important avec des ouvertures thématiques élargies.



## 2) La synthèse des polyoxométallates (POM) et leurs applications.

Les approches multiples développées en font un thème fortement structurant dans les partenariats du LCP. Le groupe a acquis une expertise très spécifique et reconnue internationalement dans ce domaine. Les travaux réalisés ouvrent des perspectives très intéressantes, à la fois par leurs aspects de compréhension fondamentale et leurs champs d'application, notamment dans le domaine de la chimie verte et de l'énergie (photoconversion, piles à combustibles  $O_2$ /alcool, stockage de l'hydrogène). Le développement des complexes hybrides POM-porphyrines est particulièrement prometteur. La formation de ces complexes a été rationalisée sur la base d'une classification des interactions de liaison entre les deux composants et des premiers résultats en catalyse ont été obtenus.

Un autre sujet très prometteur concerne la synthèse de nanoparticules métalliques par radiolyse. L'étude de leurs propriétés optiques, catalytiques, le contrôle de leur morphologie permet d'envisager des applications intéressantes notamment dans le domaine des capteurs et des piles à combustibles à la fois pour les matériaux de la cathode (réduction de  $O_2$ ) et de l'anode (oxydation des alcools). Ces études s'appuient également sur des développements originaux en spectroscopie de génération de fréquence somme et de différence (SFG/DFG) en utilisant notamment des modes d'amplification spécifiques (Résonance Plasmon de Surface, Laser à Electrons Libres).

Le thème Bioélectrochimie présente un intérêt certain dans l'exploration des processus élémentaires du transfert électronique dans les protéines redox. Toutefois, la pertinence des questions abordées en rapport au fonctionnement des protéines redox, notamment de leurs interactions avec leurs partenaires physiologiques reste à approfondir. Le développement de l'axe transverse BioRédox doit être mieux défini afin de conduire à un renforcement de la cohérence de ces approches.

### — Conclusion :

Le bilan passé de cette équipe est globalement excellent aussi bien pour la production scientifique que pour la richesse des thématiques développées sur les plans fondamentaux, applicatifs et instrumentaux. Les projets s'appuient sur les travaux réalisés et correspondent aux enjeux actuels des différents domaines.

### — Points forts :

- qualité et originalité des projets attestées par une production scientifique de très haut niveau
- rayonnement national et international
- nombreux contrats et partenariats
- équipements remarquables

### — Points à améliorer :

- augmenter l'ouverture thématique et s'ouvrir plus largement aux collaborations externes, notamment autour des grands instruments
- le positionnement de la thématique Bio-électrochimie est à préciser. Ses interactions avec les autres groupes du LCP sont à améliorer, notamment les contacts entre la thématique « Bio-électrochimie et l'équipe « BioPhys ». Ces contacts ont lieu grâce à l'axe transversal « BioRedox » dont il conviendrait de mieux définir la finalité

### — Recommandations :

L'avenir et la pérennité de certains projets peuvent à terme poser des problèmes, compte tenu du départ prévisibles de certains cadres. L'équipe doit impérativement veiller à permettre l'émergence de nouveaux projets reposant sur les éléments les plus jeunes.



Nom de l'équipe : Equipe Transfert d'Electron en Milieu Condensé (TEMiC)

Note de l'équipe	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
A+	A+	A+	B	A+

### 3. Equipe Physico-chimie des Ions en Phase Gazeuse (IPG)

L'équipe IPG est une petite structure composée de 5 chercheurs permanents (2 CR, 1 DR, 1 MCF, 1 PR). Elle a été fortement perturbée au cours de la période 2004-2008 suite au départ, en 2006, de 3 scientifiques de haut niveau. La direction de l'équipe a été reprise par un chercheur pour qui cela a impliqué un changement profond de culture scientifique, passant de la théorie à l'expérience.

Les activités de l'équipe IPG sont très diversifiées. On distingue la spectroscopie infrarouge d'ions moléculaires en phase gazeuse, la modélisation des ionosphères planétaires (photoionisation et réactions ion-molécules contrôlées) et l'analyse de traces. Tous les thèmes abordés sont d'une grande actualité et d'un grand intérêt. Beaucoup de développements instrumentaux ont été réalisés au sein de l'équipe IPG. L'un d'entre eux, très abouti, a permis la création d'une société « spin off » avec, pour conséquence, la perte d'une unité du potentiel chercheur de l'équipe.

Le démarrage de l'installation de rayonnement synchrotron Soleil, avec laquelle l'équipe IPG est en forte interaction, lui permet d'envisager des développements très intéressants dans le domaine de l'étude des ions présents dans les atmosphères planétaires. En outre, la proximité du centre CLIO lui permet d'effectuer des travaux de première importance sur la spectrométrie de masse de matériaux biologiques. L'équipe bénéficie d'un support théorique adéquat grâce à l'équipe CTM. L'équipe IPG présente un excellent niveau de production scientifique. Le choix des revues est judicieux. Il y a aussi de bonnes collaborations internationales et l'activité de cette équipe est excellente, avec 3 projets ANR, une participation à 2 projets européens, dont un contrat STREPS-NEST coordonné par IPG.

#### — Conclusion :

L'IPG est une petite équipe de bonne qualité et très dynamique, avec un très bon niveau de production scientifique malgré le fait qu'elle ait été fragilisée par le départ de chercheurs importants. Elle assure son rayonnement au travers de collaborations internationales de qualité. Le projet de l'unité est très prometteur et en parfaite adéquation avec ses moyens techniques et humains.

#### — Points forts :

- méthodes originales d'étude des réactions ion-molécules
- instrumentation très performante pour l'étude des édifices biologiques et pour l'analyse des polluants sous forme de traces
- implication progressive dans l'enseignement au niveau doctoral
- bonne ouverture nationale et internationale, compte tenu du personnel modeste de ce groupe (contrats ANR et européens, développement de plateformes expérimentales à SOLEIL au CLUPS et à CLIO)



— Points à améliorer :

- compte-tenu de sa petite taille, l'équipe doit veiller à ne pas se disperser et à garder la maîtrise de ses sujets de recherche et du pilotage de ses projets
- la communication et la vulgarisation de haut niveau et surtout au niveau grand public

— Recommandations :

- faire clairement les choix scientifiques stratégiques qui s'imposent en raison de la faible taille de l'équipe
- envisager des expériences sur les réactions ion-molécule dans des conditions de température en concordance avec les conditions rencontrées dans les atmosphères planétaires extraterrestres
- veiller à ne pas se substituer à l'activité de la société « spin off » issue des recherches de l'équipe

Nom de l'équipe : Equipe Physico-chimie des Ions en Phase Gazeuse (IPG)

Note de l'équipe	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
A	A	A	B	A

#### 4. Thermodynamique Expérimentale et Statistique de la Matière Condensée (TESMaC)

L'équipe TESMaC est composée de 7 permanents (1 CR, 2 DR, 4 MCF), 2 contractuels (ATER, Post-doc ANR) et 6 doctorants. Elle a été affectée ces dernières années par le départ de cadres de recherche seniors en partie compensée en flux par 2 recrutements. L'activité de cette équipe peut être qualifiée d'excellente au travers de ses publications et de ses nombreuses invitations à présenter des conférences dans des Congrès Internationaux (30 durant la période quadriennale de référence). L'activité contractuelle de cette équipe est aussi excellente avec 3 ANR (2 en qualité de porteur), une participation aux projets C-nano IdF et Astre et ses collaborations partenariales avec l'IFP et Michelin.

Les recherches de TESMaC sont consacrées essentiellement à l'étude de la structure, de la dynamique et de la thermodynamique de fluides moléculaires en phase condensée. Ces activités de recherche sont organisées autour de trois thématiques :

- fluides confinés à l'échelle nanométrique, où sont étudiées les modifications des propriétés thermodynamiques et dynamiques des fluides sous confinement
- dynamique aux échelles spatiales et temporelles, où sont analysés les liens entre les processus de relaxation à une échelle donnée et les propriétés du matériau
- thermodynamique et transport, où la nature des interactions moléculaires est mise à profit pour étudier les propriétés macroscopiques des phases étendues



Les projets du prochain quadriennal reposent sur les acquis de l'équipe avec des ouvertures vers de nouvelles applications de nature diversifiée. Pour les mener à bien, elle devra veiller à prendre en compte les recommandations qui apparaissent ci-dessous dans la rubrique '*Points à améliorer*'.

La forte activité de TESMaC en thermodynamique expérimentale est grandement soutenue par son expertise en modélisation où elle a produit 2 logiciels enregistrés NEWTON et GIBBS grâce à l'appui d'une logistique informatique légère mais efficace.

— **Conclusion :**

Sur les quatre dernières années, l'équipe a un bilan de qualité qui peut être qualifié d'excellent. L'équipe privilégie une très bonne continuité des projets de recherche prometteurs et les adapte en fonction des départs, parfois inévitables pour des raisons personnelles et en fonction des opportunités d'engagement plus définitifs.

— **Points forts :**

- une politique cohérente d'équilibre entre modélisation et expérimentation de la thermodynamique, science parfois trop négligée aujourd'hui
- une politique de choix judicieux de sujets difficiles, potentiellement porteurs pour une prospection industrielle (Michelin, par exemple)
- une politique de publications en collaboration (1/3 LCP, 1/3 national, 1/3 international) qui ne tombe pas dans l'obsession du Science Citation Index ou de la position en facteur H, mais qui montre une assurance dans le choix des revues porteuses de leur domaine de recherches : JCP, JPC, PCCP, CPL, PR, Mol. Simul., PRL, J. Mol. Liquid, ...
- une saine politique de développement des logiciels "home made" avec protection et garantie de droit d'auteur (logiciels NEWTON pour les simulations de dynamique, GIBBS pour les simulations Monte-Carlo). Un logiciel comme GIBBS apparaît, d'ores et déjà, comme un des "maître achats" pour l'utilisation par la communauté scientifique française

— **Points à améliorer :**

- une politique d'identification des groupes porteurs étrangers dans les sujets abordés (dynamique des polymères). En d'autres termes, identifier clairement les meilleurs groupes étrangers travaillant dans le domaine et tâcher d'établir des coopérations efficaces avec eux
- une ouverture à des techniques de simulation plus globales (coarse graining), qui sont privilégiées par des physiciens par rapport aux méthodes plus atomiques/moléculaires (QM/MM) prônées par les chimistes. L'environnement LCP paraît particulièrement favorable pour cet élargissement. Cette généralisation nous paraît indispensable pour aborder des sujets inaccessibles actuellement à cause de la difficulté de traitement des systèmes conjugués comme la simulation des protéines, acides nucléiques, ...

— **Recommandations :**

- conserver la ligne d'excellence développée jusqu'à présent, malgré le départ de chercheurs cadres
- veiller à la programmation du remplacement des personnes clés tel qu'un informaticien développeur de logiciel. Le maintien de cette fonction, voire son renforcement, paraît essentiel
- envisager une interaction, sinon un ancrage plus fort, avec le groupe CTM.



Nom de l'équipe : Thermodynamique Expérimentale et Statistique de la Matière Condensée (TESMaC)

Note de l'équipe	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
A	A+	A	A	A

### 5. Equipe Chimie Théorique et Modélisation (CTM)

L'équipe Chimie Théorique et Modélisation est composée de 10 permanents (3 PR, 3 MCF, 1 DR, 3 CR) et renforcée par l'activité notable de 2 chercheurs associés. Elle bénéficie en moyenne du concours de 2 post-doctorants et 3 doctorants y sont actuellement encadrés.

Les thématiques scientifiques du CTM s'articulent autour de la Chimie Quantique (Méthode « Valence Bond » et applications à la structure et la réactivité de systèmes complexes), de la Statistique et la Dynamique (contrôle et logique moléculaire, spectroscopie vibrationnelle, photophysique des protéines fluorescentes au travers de l'axe transverse P3F) et de la gestion des incertitudes dans les modèles physico chimiques. Ce dernier axe thématique, dont l'originalité est incontestable, trouve de plus en plus toute sa place dans les méthodes de simulation. Toutes ces thématiques donnent lieu à une très bonne production scientifique et s'expriment au travers du développement de méthodes et de codes qui sont le cœur même de cette discipline. L'équipe de Chimie Théorique et Modélisation est bien intégrée dans les réseaux européens (COST, Europlanet) et nationaux grâce à sa participation à 3 projets ANR. Elle est un des piliers du Laboratoire de Chimie Physique et ses membres participent à la majorité des actions transverses au sein de l'actuelle UMR.

De nombreux thèmes nouveaux ont été abordés durant ce quadriennal, aussi, les projets 2010-2013 s'inscrivent essentiellement dans la continuité des actions récemment engagées et reconnues au travers des appels à projets retenus. Une perméabilité plus grande entre les thématiques pourrait peut-être enrichir la réalisation de projets émergents. La qualité et l'originalité des travaux du groupe de Chimie Théorique, dont un bon nombre sont le résultat de fécondes collaborations, confèrent à ce groupe un rayonnement international indéniable. Il serait d'ailleurs souhaitable qu'ils profitent de cette notoriété pour mettre en place une filière de doctorants franco-étrangers.

#### – Conclusion :

Equipe de très bon niveau scientifique alliant un développement méthodologique pertinent et fort à celui du traitement par l'écriture de codes de calculs. Les 3 axes développés concourent à des percées dans les traitements et les domaines d'applications concernés.

#### – Points forts :

- Les publications sont d'un très bon niveau dans des journaux à fort impact, dans les domaines de la chimie physique et de la chimie théorique.
- Ce groupe se caractérise par une forte diversité d'origine des membres permanents, ce qui est une force dans les échanges et dans l'élaboration des programmes de recherches.
- La force mentionnée ci-dessus se reflète dans les collaborations nationales et internationales.
- Les membres de l'équipe CTM participent à tous les axes transverses du laboratoire et plus particulièrement à P3F dans lequel leur activité est un puissant support.



– Points à améliorer :

- Compte tenu de la qualité des publications et des échanges, on pourrait s'attendre à un nombre de conférences invitées plus important.
- Le nombre de doctorants est faible mais cette caractéristique est vraie aujourd'hui dans toutes les équipes de Chimie Théorique en France, malgré l'effort notable du groupe dans la formation au niveau du réseau français de Chimie Théorique.
- L'activité prometteuse sur la gestion des incertitudes dans les modèles physico-chimiques pourrait être mise à profit dans l'approche des techniques multi-échelles du laboratoire.

– Recommandations :

L'équipe pourrait profiter de ses relations internationales pour accroître le nombre de ses doctorants (vide supra). De plus, compte tenu de la qualité scientifique de l'équipe, il faut veiller à être plus présent au niveau international (conférences, congrès).

Nom de l'équipe : Equipe Chimie Théorique et Modélisation (CTM)

Note de l'équipe	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
A	A+	A	A	A+

Compte tenu de leur importance et de leur impact sur la recherche du LCP, le comité d'experts a tenu à donner une analyse des deux plates-formes CLIO et ELYSE

## 6. Centre Laser Infra-rouge d'Orsay

CLIO est un centre de service fournissant aux utilisateurs un rayonnement électromagnétique dans un domaine de l'infrarouge pour lequel, jusqu'à présent et pour un terme de 5 à 10 ans au moins, il n'existe aucune autre source de radiation fiable et économique sur le marché. Il s'agit d'un centre quasiment unique au monde. La seule installation comparable en Europe n'offre pas une gamme de services et de possibilités expérimentales aussi étendues que celle de CLIO.

Le centre fonctionne selon un mode analogue à celui des installations de rayonnement synchrotron. Il a mis sur pied un comité de programme qui sélectionne les projets soumis. Une part importante du temps de faisceau est consacrée à l'accueil d'utilisateurs extérieurs.

– Conclusion :

Le centre remplit très bien sa mission de structure d'accueil et de service. Son intégration au LCP a permis de renforcer considérablement le potentiel de recherche de ce dernier.



— **Points forts :**

- source de lumière unique pour laquelle il n'existe à l'heure actuelle aucune autre alternative
- très bonne production scientifique des thématiques utilisant CLIO
- projets de collaboration prometteurs
- bonne implication au niveau européen
- bonne implication dans la vulgarisation scientifique tant de haut niveau que grand public (site Web)

— **Points à améliorer :**

- augmenter le nombre d'heures de faisceau disponible afin d'optimiser l'exploitation de CLIO

— **Recommandations :**

- continuer à rechercher activement les modes de fonctionnement et les technologies les plus adéquates pour assurer et conserver le haut niveau de qualité des prestations fournies
- envisager une synergie entre les équipes techniques de CLIO et d'ELYSE, peut-être au sein d'une structure commune

## 7. Centre de Radiolyse pulsée ELYSE

Le centre ELYSE possède un très haut niveau de maîtrise des équipements expérimentaux et des techniques associées. Il est à l'origine de développements très originaux à la pointe des technologies. L'équipement proposé par ELYSE est unique en Europe. Il existe un centre analogue aux USA, trois au Japon et des projets sont en cours d'élaboration aux Pays-Bas et en Inde, ce qui prouve, si besoin était, la nécessité scientifique de ce type d'installation. Le personnel travaillant sur ELYSE est jeune, bien soudé, très motivé et bien « managé ».

— **Conclusion :**

ELYSE est centre expérimental d'excellence, un outil de pointe central et indispensable à de nombreux projets du LCP et de la communauté scientifique concernée par la radiolyse. Les performances permettent des études uniques en radiolyse pulsée. C'est un centre à soutenir et à maintenir impérativement.

— **Points forts :**

- outil unique et de très haute pertinence
- maîtrise instrumentale remarquable
- démarche de progrès très bien menée, qui porte ses fruits quant à l'ouverture extérieure

— **Points à améliorer :**

- mieux s'inscrire dans les actions de diffusions de culture scientifique vis-à-vis des étudiants et du public
- amplifier la politique d'ouverture afin de mieux exploiter le potentiel d'ELYSE

— **Recommandations :**

- mettre en place une structure d'accueil et un comité de programme (et de distribution des temps de faisceau) pour les utilisateurs extérieurs
- envisager une synergie entre les équipes techniques de CLIO et d'ELYSE, peut-être au sein d'une structure commune



## 5 • Analyse de la vie de l'unité

### – En termes de management :

La gouvernance du LCP est assurée par l'équipe de direction (Directeur, Directeur-adjoint et Secrétaire générale) assistée de son Conseil de Laboratoire. Les décisions élaborées après une concertation entre l'équipe de direction et le collège des chefs de groupe sont entérinées de façon très démocratique au Conseil de Laboratoire. Il s'est établi une grande confiance entre le Directeur et les membres du LCP. Un climat de quiétude, propice à la réflexion et au développement scientifique, est tout à fait perceptible au sein du laboratoire, comme cela fut ressenti lors des entretiens que nous avons eus avec le personnel. Des investissements importants sur l'hygiène et la sécurité, ainsi que l'aménagement des laboratoires et bureaux ont été réalisés.

### – En termes de ressources humaines :

Le personnel de recherche du LCP est constitué de façon équilibrée d'enseignants-chercheurs (28) et de chercheurs CNRS (22). Les ITA/IATOS/TPN constituent une force importante en nombre (30), indispensable au bon fonctionnement du laboratoire. On notera un très fort déséquilibre entre le nombre d'ITA (25) et celui des IATOS (5).

La gestion des ressources humaines est une réalité au sein du LCP. Des entretiens annuels pour chaque agent ont lieu avec le Directeur du LCP. L'initiative de les étendre aux doctorants (dont le nombre est en croissance) est également très bien perçue. Le suivi des dossiers de carrière, les possibilités d'évolution des agents et l'attribution des primes PPRS se font dans la transparence et en totale concertation avec les membres du Conseil de Laboratoire où siègent également 5 ITA/IATOS.

### – En termes de communication :

Les personnels ITA/IATOS/TPN participent activement à la vie du laboratoire à travers les journées scientifiques annuelles, où même l'équipe de gestion a exposé ses propres travaux et les complexités qu'elle rencontre. C'est une attitude à souligner, car elle donne aux autres membres du laboratoire une bien meilleure compréhension et acceptation des difficultés rencontrées. A côté de ces journées scientifiques annuelles, il y a également la Journée des Doctorants organisée par les doctorants du LCP. Il est important de noter que pour préparer la visite du comité d'évaluation, des enquêtes de satisfaction ont été réalisées par les ITA/IATOS/TPN et par les doctorants et communiquée aux experts.

Les agents des services techniques sont régulièrement cités dans les publications et deux d'entre eux sont dépositaires d'un brevet en 2008 sur le développement d'un générateur de flash lumineux aux applications multiples. La demande et le suivi de formations sont encouragés par la Direction et, à cet effet, des moyens sont mis à la disposition des agents.

On notera aussi le travail de vulgarisation (articles et livres pédagogiques) mené par un certain nombre de chercheurs qui d'ailleurs participent régulièrement aux fêtes de la science.



## 6 • Conclusions

Le LCP est un très bon laboratoire scientifique qui a réussi l'intégration de plusieurs équipes de recherche performantes et de la plate forme CLIO. L'intégration récente de l'équipe BIOPhys, qui est un élément porteur et essentiel pour l'avenir du LCP, doit être finalisée au travers de la réalisation de ses projets. Les thématiques scientifiques développées au sein du LCP sont généralement d'un haut niveau scientifique. Le potentiel recherche du LCP est fort et une marge de progression au niveau du rayonnement international existe. Ce laboratoire est bien structuré et sa direction est conduite de manière éclairée.

### — Points forts :

- laboratoire de haut-niveau scientifique dans le panorama de la chimie-physique française
- notoriété nationale et internationale reconnue
- projets novateurs liés à la forte collaboration inter-équipes et aux relations académiques et industrielles avec des laboratoires nationaux et internationaux
- gouvernance éclairée et efficace conduite par les deux directeurs successifs
- implication de jeunes chercheurs comme responsables des axes transversaux
- implication notable en communication, formation, enseignement et vulgarisation
- l'existence de deux équipements lourds exceptionnels : ELYSE et CLIO

### — Points à améliorer :

- le potentiel de recherche de certaines équipes telles que l'équipe « Physico-chimie des Ions en Phase Gaz », est sous-critique compte tenu des projets envisagés
- le personnel technique de CLIO devrait être renforcé
- les plates-formes ELYSE et CLIO sont sous-exploitées
- la proportion de chercheurs et d'enseignants-chercheurs habilités à diriger des recherches (HDR) est trop faible
- le rayonnement international du LCP doit être augmenté

### — Recommandations :

- veiller à ce que tous les axes transversaux soient de réels viviers d'idées communes et de collaborations réellement transversales vers un but commun
- poursuivre une politique d'ouverture internationale plus rayonnante, compte tenu du fort potentiel scientifique dont le LCP dispose (par exemple, le nombre de participations à des congrès internationaux pourrait être accru)
- mener une politique volontariste pour accroître le nombre d'HDR
- pour ce qui est des équipements ELYSE et CLIO, ils devraient être plus mutualisés, optimisés dans leur gestion et plus ouverts vers l'extérieur



- l'évolution du personnel administratif est une source d'inquiétude car, compte tenu de la loi LRU, seule l'université va devoir faire face aux remplacements dans les branches professionnelles concernées dus à de nombreux départs en retraite dans un futur proche. L'université devra donc renforcer le LCP en personnel technique, ce qui aura comme conséquence de rééquilibrer le rapport IATOS/ITA qui n'est actuellement que de 1 pour 5.

Note de l'unité	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Stratégie, gouvernance et vie du laboratoire	Appréciation du projet
A	A+	A	A+	A

Le Président de l'Université Paris-Sud 11

à

Monsieur Pierre GLORIEUX  
Directeur de la section des unités de recherche  
**AERES**  
20, rue Vivienne  
75002 Paris

Orsay, le 20 mars 2009.

N/Réf. : 69/09/GCo/LM/LS

Objet : Rapport d'évaluation d'unité de recherche  
N° S2100012373

Monsieur le Directeur,

Vous m'avez transmis le six mars dernier, le rapport d'évaluation de l'unité de recherche « Laboratoire de Chimie-Physique » - LCP – UMR 8000 et je vous en remercie.

L'université se réjouit de l'appréciation portée par le Comité sur cette unité et prend bonne note de ses suggestions.

Les points à améliorer seront discutés avec le directeur d'unité dans un esprit constructif pour l'avenir de la recherche à l'université.

Vous trouverez en annexe les éléments de réponse de monsieur Mehran MOSTAFAVI Directeur de l'unité de recherche.

Je vous prie d'agréer, Monsieur le Directeur, l'expression de ma sincère considération.

Guy COURRAZE  
Président



PJ : Commentaires de Mr MOSTAFAVI



33 - (0)1 69 15 78 87



33 - (0)1 69 15 61 88

mehran.mostafavi@u-psud.fr

Mehran Mostafavi,  
Directeur

Orsay, le 12 mars 2009

### Réponse et commentaires sur le rapport du comité d'experts AERES

Le laboratoire a pris connaissance avec satisfaction du rapport du comité d'experts, qu'il remercie pour la qualité de son travail et des échanges.

Quelques points méritent cependant d'être commentés :

- malgré la demande expresse de l'AERES de fournir deux dossiers indépendants sur le Bilan et le Projet de l'unité, nous regrettons que ce rapport donne trop peu de poids à l'analyse des projets des groupes. Nous sommes bien conscients que cela demanderait une visite plus longue que deux jours pour un grand laboratoire comme le LCP.
- concernant le groupe IPG, il est dommage que l'importance de ses contrats (ANR, Europe) ne soit pas mentionnée dans les points forts, comme cela a été fait pour d'autres groupes. De plus, il n'apparaît pas dans le rapport que le groupe développe des plateformes expérimentales à SOLEIL, au CLUPS (Centre Laser de l'Université Paris-Sud) et à CLIO, et il contribue à l'implication au niveau européen et, fortement, à la production scientifique de CLIO.
- la recommandation « d'une politique volontariste pour accroître le nombre d'HDR au sein du laboratoire » ne rend pas justice aux efforts de la direction en ce sens, même si nous sommes bien d'accord que ces efforts doivent être poursuivis.
- concernant la plateforme CLIO, l'augmentation notable du nombre d'heures de faisceau disponible ne nous paraît pas actuellement possible sans une ouverture les week-ends et pendant les vacances, ce pour quoi nous n'avons pas le personnel nécessaire, ni les autorisations de l'INB qui héberge la plateforme. Nous tenons à noter que ces deux dernières années, la réorganisation des équipes techniques nous a déjà permis une nette amélioration dans le cadre actuel, qui sera poursuivie. D'autre part, comme le montrent les résultats du comité de programme 2007-2008-2009, CLIO offre la grande majorité des heures de faisceau à des équipes extérieures au LCP.

M. Mostafavi