



# Laboratoire structures, propriétés et modélisation des solides

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. Laboratoire structures, propriétés et modélisation des solides. 2009, École centrale des arts et manufactures. hceres-02032154

**HAL Id: hceres-02032154**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02032154>**

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 Structures, Propriétés et Modélisation  
des Solides - UMR 8580

de l'Ecole Centrale de Paris



janvier 2009



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

Section des Unités de recherche

# Rapport d'évaluation

Unité de recherche

Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation  
des Solides

de l'Ecole Centrale de Paris



Le Président  
de l'AERES

Jean-François Dhainaut

Section des unités  
de recherche

Le Directeur

Pierre Glorieux

janvier 2009



# Rapport d'évaluation



## L'Unité de recherche :

Nom de l'unité : Structures, Propriétés, Modélisation des Solides - SPMS (UMR 8580)

Label demandé : UMR

N° si renouvellement : 8580

Nom du directeur : M. Jean-Michel KIAT

## Université ou école principale :

Ecole Centrale de Paris

## Autres établissements et organismes de rattachement :

CNRS

## Date de la visite :

20 janvier 2009



# Membres du comité d'évaluation

## Président :

M. Jean ETOURNEAU, Université Bordeaux 1

## Experts :

M. Carlo GATTI, CNR, Milano

M. Mario MAGLIONE, CNRS, Bordeaux

Mme Elena SAVINOVA, Université de Strasbourg

Expert(s) représentant des comités d'évaluation des personnels (CNU, CoNRS, CSS INSERM, représentant INRA, INRIA, IRD...) :

M. Philippe PAPET, Université de Montpellier (CNU)

M. Philippe THOMAS, Université de Limoge (CoNRS)



# Observateurs

Délégué scientifique de l'AERES :

M. Georges HADZIOANNOU

Représentant de l'université ou école, établissement principal :

M. Jean-Hubert SCHMITT, Directeur de la Recherche ECP

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

M. Jean-Francois BAUMARD, DSA CNRS



# Rapport d'évaluation

## 1 • Présentation succincte de l'unité

- Personnels permanents chercheurs : 14 (0 Université, 3 CNRS, 11 Ecoles, 9 Prof ou DR, 3/2 MCF/ CR, 10 HDR, 2PEDR)
- Personnels non permanents chercheurs : 1 chercheur invité, 2 Post-Doc, 17 doctorants
- Personnels support 15 (4 administratifs, 4 ingénieurs, 5 techniques, 2 autres)

Production scientifique du 15/10/2004 au 15/10/2008 :

- Publications référencées par l'AERES : 170 articles, 82 conférences, 1 chapitre de livres, 175 autres.
- Productions / Réalisations : 6 Brevets et licences, 22 Contrats industriels, 7 autres
- Descripteurs : 12 publiants ; 3 Thèses soutenues par an, 0 HdR soutenue par an.

## 2 • Déroulement de l'évaluation

L'évaluation du SPMS s'est déroulée conformément à l'ordre du jour prévu. La journée a débuté par l'écoute à huis clos du directeur en présence des responsables des opérations scientifiques OS1, OS3 et OS4, le directeur cumulant les responsabilités de directeur et de responsable de OS2. Se sont joints aux autres observateurs à ces auditions, le DSA/ST2I, CNRS, et le Délégué régional du CNRS. Cette première audition a été suivie, toujours à huis clos, de celles des responsables OS1, OS2, OS3 et OS4. Le président du comité a volontairement laissé beaucoup plus de temps que prévu pour les questions qui étaient très nombreuses, ceci a permis d'avoir une discussion très nourrie.

Le comité d'évaluation a été présenté à l'ensemble du personnel du SPMS. Le comité a ensuite écouté les représentants du Conseil de Laboratoire d'une part, et les doctorants d'autre part. La journée s'est terminée, à huis clos, par une réunion du comité d'évaluation.

Tous les experts avaient remis au président, quelques jours avant l'audition, des pré-rapports rédigés au vu du rapport écrit des activités. Cette stratégie a eu le mérite de pouvoir éclaircir et de compléter, grâce aux auditions très bien structurées, les informations manquantes dans le rapport.



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

#### A. L'évolution du SPMS depuis 2005

L'analyse qui va suivre fera référence sur certains points au rapport du comité d'Evaluation du 29-30 novembre 2004.

##### 1. Dans sa structure

Pour rendre claire la lecture du rapport indiquons que le SPMS est aujourd'hui organisé en quatre Opérations Scientifiques qui correspondent en fait à des équipes de recherche, conduites par un responsable et dénommées :

OS1 : Matériaux Fonctionnels pour l'Energie (*existante dans le contrat précédent avant 2004*)

C'est une équipe mixte, ECP-SPMS/CEA-DEN-DMN Saclay, qui existait dans le précédent contrat.

OS2 : Matériaux pour la Microélectronique (*existante dans le contrat précédent avant 2004*)

Cette équipe devient à partir de 2009 une ERC avec THALES. Elle inclut des membres de deux autres laboratoires CNRS de l'ECP : Em2C et MSSMAT, pour développer des interactions dans le domaine des propriétés mécaniques et thermiques.

OS3 : Matériaux Modèles et Molécules Pharmaceutiques : Méthodes Quantiques de Diffusion des Rayonnements (*existante dans le contrat précédent avant 2004*)

L'équipe OS3 est une opération commune avec l'UMR 8612 (Faculté de Pharmacie) sans contrat formalisé.

OS4 : Matériaux et Technologies de l'Hydrogène (*créée depuis 2004*)

L'OS4 est une création récente qui résulte en partie d'une séparation de l'activité « piles à combustibles » qui était partie intégrante de OS1 dans le contrat précédent. Si ce thème se justifie toujours avec un accent maintenant plus prononcé sur la filière « hydrogène », il n'est pas certain que la formation de deux équipes donne plus de visibilité au SPMS quant à ses thèmes sur l'Energie.

##### 2. Dans ses thèmes

Les thèmes, toujours porteurs, n'ont pas subi une évolution drastique.

Les thèmes de OS1, centrés sur le comportement des céramiques sous irradiations, sont toujours très peu étudiés par rapport aux métaux et alliages et deviennent stratégiques pour le développement de réacteurs de nouvelles générations. Notons que ces études sont accompagnées du développement d'outils de caractérisation in-situ performants sur les lignes neutroniques et celles du rayonnement synchrotron.

Les thèmes de OS2 restent dans la tradition de ceux qui ont fait et font toujours la réputation internationale du SPMS. Il s'agit des matériaux diélectriques pour les composants passifs la microélectronique et pour lesquels des études expérimentales, théoriques et de modélisation se focalisent maintenant sur les échelles nanométriques (nanoparticules, nanograins, films, multicouches et nanocomposites).





Les thèmes de OS3 concernent (i) les développements méthodologiques pour le calcul des propriétés électroniques dans les cristaux (ii) les propriétés électroniques et électrostatiques de molécules pharmaceutiques (iii) la détermination expérimentale et le calcul des cartes de densité et les affinements conjoints de données de diffraction et de diffusion inélastique (iv) les méthodes semi-empiriques LCAO appliquées aux surfaces des solides (v) les développements théoriques de la fonctionnelle de densité (DFT). Ces outils développés de manière plus ou moins indépendante au sein de OS3, devraient être portés à la connaissance de l'ensemble des chercheurs du SPMS qui s'intéressent à des études fines concernant les structures et les propriétés électroniques de leurs matériaux.

Les thèmes de OS4 se positionnent dans ceux nombreux de la filière « hydrogène » et plus particulièrement sur les piles à combustible à oxydes solides (SOFC) en mettant l'accent sur de nouveaux matériaux d'électrolytes conducteurs ( $O^{2-}$  et  $H^+$ ) et d'électrodes et dans une certaine mesure sur la production et le stockage de l'hydrogène.

### 3. *Dans sa production scientifique*

La production scientifique du SPMS est globalement satisfaisante et de très bonne qualité : publications (160), conférences invitées (68), présentations orales et par affiches (146). Le rayonnement du SPMS se traduit par des publications en collaboration avec d'autres laboratoires, français (130) et étrangers (70). Sur les 146 communications (soit entre 4 et 2 par chercheur et par an), 61 communications ont pour auteurs un doctorant du SPMS. Sur les 68 conférences invitées, 19 ont pour auteur un doctorant du laboratoire.

Quatre brevets (+ deux extensions) ont été pris (3 pour OS1 et 1 pour OS2).

*Globalement* la production scientifique du laboratoire est en nette progression par rapport au contrat précédent (publications :115, conférences invitées :38, communications :151, brevets :2). Le précédent comité avait noté que « la production était très inégale par rapport aux chercheurs ». Si l'on se rapporte au nombre moyen de publications, *référéncées par l'AERES*, par chercheur permanent et par an, la production moyenne reste très honorable : OS1 (~3), OS2 (~5), OS3 (~4), OS4 (~4).

### 4. *Dans ses relations avec l'industrie*

Les relations industrielles ne sont pas à la hauteur de ce qu'un laboratoire est à même d'espérer dans une grande école. L'industrie ne semble réellement impliquée qu'à travers des projets Oseo-Anvar, l'ADEME, « CERAMHYD » et l'Institut Carnot. Notons toutefois l'implication de Thales dans les matériaux piézoélectriques (Equipe commune + thèses cofinancées) et du CEA LETI dans le financement d'une thèse sur les couches minces ferroélectriques.

### 5. *Dans la valorisation des recherches*

La valorisation des recherches se trouve illustrée par la prise de 4 brevets dont 3 par OS1 et 1 par OS2. Notons par ailleurs la création, en août 2008, d'une start-up intitulée Nano-E, formée de 4 personnes dont 3 jeunes centraliens. L'activité est de produire des nanopoudres de très haute qualité, adaptées au frittage de pièces céramique haute performance. Un des enjeux est l'utilisation de ce type de matériaux pour les supercondensateurs. Nano-E a remporté plusieurs concours d'aide à la création d'entreprise et a obtenu un prix d'honneur et une subvention. Attention à terme à ne pas confondre chiffre d'affaires et subventions.

### 6. *Dans ses ressources financières*

Les crédits viennent de sources très diverses et sont en augmentation constante depuis 2005 du fait de la participation très forte de SPMS dans des contrats européens et dans des projets ANR.



Les ressources proviennent des opérations contractuelles générées par OS2 et OS4. Le SPMS prélève entre 5 et 10 % sur les contrats. Ce prélèvement pourrait être plus important dans la mesure où les contractants, sans vouloir minimiser leurs mérites, bénéficient de la notoriété de ECP et du SPMS, des infrastructures exceptionnelles que met cette école à leur disposition et des équipements collectifs du SPMS.

## B. Le positionnement du SPMS

### 1. *Sur le plan local*

Le SPMS bénéficie de toute évidence de la notoriété de ECP bien que cela ne se traduise pas comme cela été dit par un recrutement des doctorants. Néanmoins la proximité du CEA et de Thales ont permis de créer deux équipes mixtes. L'implication du SPMS dans les grands instruments doit être notée avec le LLB et SOLEIL. De même doit être soulignée la participation du SPMS au RTRA «Triangle de la Physique» pour lequel les activités ne concernent encore que très partiellement la «Science des Matériaux» et en particulier leur élaboration et leur mise en forme. D'autres participations dans C'NANO IDF, PRES Univ Paris-sud, SESAME montrent le rayonnement local de SPMS.

### 2. *Sur le plan national*

Malgré un effectif de permanents relativement réduit (26/53) le SPMS participe à 8 GDR avec une présence équilibrée pour chaque OS. La présence du SPMS dans plusieurs contrats ANR (5) montre son ouverture vers la communauté scientifique.

### 3. *Sur le plan international*

L'ouverture du SPMS à l'international est bien apparente à travers les publications communes (70) avec des laboratoires étrangers (e.g. réseaux internationaux, doctorants en co-tutelles etc...). La création de l'Ecole Centrale de Pékin permet des échanges privilégiés avec des étudiants et des post-docs de qualité. On note la participation du SPMS à des réseaux et contrats européens. Bien que le taux de réussite du laboratoire dans l'obtention des contrats européens se situe entre 5 et 10%, cela ne doit pas décourager les chercheurs de déposer des demandes et d'en assurer la coordination. Il faut reconnaître qu'il est plus facile de participer que de coordonner. La coordination permet néanmoins d'acquérir un «leadership» et donc une reconnaissance internationale.

## 4 • Analyse équipe par équipe et par projet

### 1. Opération scientifique OS1: Matériaux Nanostructurés pour l'Energie

Cette équipe mixte CNRS-ECP avec le CEA/DEN/DMN de Saclay travaille sur la thématique «matériaux fonctionnels pour l'énergie» et plus particulièrement sur les matériaux potentiellement utilisables dans les réacteurs nucléaires de la nouvelle génération.

Il s'agit principalement de céramiques «hautes températures» oxydes (zircone non dopée, oxydes  $UO_{2+x}$  purs ou dopés) et carbures (ZrC, TiC) et pour lesquelles peu d'études ont été menées à ce jour sur leur comportement, leur résistance à l'endommagement, sous irradiations neutronique et ionique. Le «design» de nouveaux matériaux sous irradiation est également l'un des axes porteurs de ce groupe. Dans cette optique, la constitution d'une équipe mixte avec le CEA est pleinement justifiée et est très judicieuse.



L'ensemble de ces études s'appuie sur les compétences reconnues de ces chercheurs en caractérisation structurale fine des matériaux par diffraction des rayons X et des neutrons. Il est cependant important de souligner les compétences acquises au cours de ces quatre dernières années, à savoir : la synthèse de nanopoudres et de nano-cristaux, les relations entre les défauts structuraux ponctuels générés par irradiation et les propriétés, l'étude par diffraction des rayons X sous incidence rasante des matériaux irradiés afin de bien étudier uniquement la zone irradiée.

La production scientifique est importante et régulière (30 articles publiés en 4 ans pour une équipe de 5 chercheurs/enseignants-chercheurs/ingénieurs permanents). Les travaux sont publiés dans des revues de qualité (Nuclear Instrument and Methods B, Solid State Phenomena, Journal of Nuclear Materials, Solid State Ionics et 2 articles dans PRB). De plus cette activité scientifique semble équilibrée entre les papiers publiés, les brevets (2), le développement de l'instrumentation et d'un logiciel, et la recherche de financements extérieurs (contrats industriels avec le CEA). Le dynamisme de ce groupe de chercheurs est illustré par une bonne implication dans les actions structurantes (GDR PAMIR (modélisation des défauts d'irradiation dans les isolants), GDR SPS, GDR PACTE), les programmes européens (Réseau d'excellence FP6 « Complex Metallic Alloys » coordonné par un membre de l'équipe) et les projets ANR (2 en 4 ans).

Ce dynamisme se traduit également par des actions collectives au service de la communauté scientifique : le développement d'un logiciel DART de modélisation des irradiations ioniques et neutroniques dans les matériaux, une forte implication sur la ligne CRISTAL du synchrotron SOLEIL et la création d'une plateforme expérimentale d'étude par diffraction in-situ de défauts créés par des particules de haute énergie.

— **Points forts :**

L'un des points fort de ce groupe est l'originalité du projet de recherche sur le comportement de matériaux sous irradiation. Afin de mener à bien une analyse structurale fine des défauts, ce groupe de chercheurs a su développer avec succès à la fois une instrumentation spécifique (ligne CRISTAL de SOLEIL ; instrument de DRX sous incidence rasante ; outils de modélisation....) et utiliser des méthodes de « résolutions structurales » modernes (fonctions de distribution de paires (PDF), méthode Monte Carlo inverse (RMC), calculs ab initio (DFT), affinements Rietveld sur des couches irradiées). L'approche multi-échelle (de la liaison chimique à l'étude de la microstructure) des caractérisations a également permis de relier la nature des défauts à la modification de la propriété.

— **Points à améliorer :**

Le nombre de thèses soutenues sur cette thématique est relativement faible (1 thèse depuis 4 ans et 2 en cours). On peut également s'interroger sur l'absence de financement de thèse du partenaire CEA. Il est à souligner une implication faible dans la diffusion des connaissances, l'enseignement et donc la participation à l'école doctorale, ce qui est dommage vu les compétences spécifiques de ces chercheurs notamment dans les techniques de caractérisation par diffraction. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'aucun enseignant chercheur ne faisait partie de ce groupe, ce qui est maintenant partiellement résolu par le recrutement depuis septembre 2007 un jeune Maître de Conférences.

— **Recommandations:**

Bien qu'un effort ait été réalisé dans le domaine des synthèses et en particulier par voie sol-gel et combustion, il semble encore indispensable d'approfondir les connaissances acquises en interne et si besoin de développer des collaborations avec des laboratoires français et internationaux compétents.

Les perspectives annoncées sont tout à fait pertinentes et originales mais semblent néanmoins nombreuses par rapport au nombre de chercheurs impliqués.

La tenue mécanique des matériaux irradiés mérite certainement d'être caractérisée ce qui pourrait être envisagé en interaction avec d'autres laboratoires de l'ECP.



Nom de l'équipe : Matériaux Nanostructurés pour l'Énergie

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

## 2. Opération Scientifique OS2 : Matériaux pour la Microélectronique

Le bilan scientifique de cette équipe est très satisfaisant, comme l'attestent :

- le nombre et la qualité de publications de très haut niveau international,
- les collaborations avec des équipes internationales qui sont parmi les meilleures dans ces domaines de recherche,
- le nombre très conséquent de conférences invitées,
- le soutien de cette thématique par plusieurs contrats (ANR),
- les contrats industriels et la coopération forte avec Thalès,
- l'implication dans les réseaux et programmes européens.

Ces éléments illustrent la reconnaissance des membres de l'OS2 dans la communauté des matériaux ferro/piézoélectriques.

Les chercheurs de cette équipe, y compris les doctorants participent de manière active aux débats les plus actuels : symétrie cristalline dans la zone morphotropique, fluctuations structurales dans les relaxeurs, influence de la pression externe sur les transitions de phase, ingénierie des domaines polaires...

L'attractivité de cette équipe est confirmée par l'arrivée à sa tête d'un jeune Professeur, chercheur de réputation internationale dans le domaine des calculs de DFT appliqués aux ferroélectriques et relaxeurs.

Du point de vue des applications des matériaux ferroélectriques, les interactions avec Thales pour l'utilisation de monocristaux et de céramiques texturées à coefficients piézoélectriques « géants » se sont poursuivies. Il faut espérer que le départ récent d'un chercheur n'entraînera pas une diminution de cette activité reconnue qui a permis dans le passé au SPMS de participer à plusieurs réseaux Européens. Toujours concernant les applications des matériaux ferroélectriques, la création de la start-up NANO-E pour le développement de super-condensateurs est mentionnée à plusieurs reprises. Cependant, s'il y a un lien dans le domaine des nanopoudres avec les travaux de l'OS2, aucune des activités et des publications de cette équipe ne fait référence à des recherches sur des supercondensateurs.

### — Points forts :

Etudes structurales des matériaux ferroélectriques, influence des effets de taille et de contrainte sur les matériaux relaxeurs, effet de confinement sur les propriétés ferroélectriques des couches minces, relation entre les études structurales des ferroélectriques et des relaxeurs avec les prévisions des calculs DFT. Sur ces différents points, l'OS2 occupe une position de premier plan au niveau national voire au-delà. Cette position de leader rend cette équipe très attractive pour les doctorants et pour les jeunes chercheurs.



– **Points à améliorer :**

Pour passer de la synthèse des (nano) matériaux ferroélectriques à la compréhension et à la modélisation de leurs propriétés, on doit tenir compte des contributions des défauts de différentes nature et localisation. L'implication de chimistes du solide devra être recherchée en permanence pour tenir compte de ce point crucial.

– **Recommandations :**

- Poursuivre et renforcer les travaux dans l'ingénierie des domaines ferroélectriques et leur lien avec les coefficients piézoélectriques « géants ».
- Eviter une trop grande dispersion thématique dans les projets (polymères, supercondensateurs, multiferroïques).
- Inciter les jeunes chercheurs brillants à soutenir leur HDR.

Nom de l'équipe : Matériaux pour la Microélectronique

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

**3. Opération Scientifique OS3: Matériaux Modèles et Molécules Pharmaceutiques/Méthodes Quantiques de Diffusion des Rayonnements**

At variance with the other 3 OSs which all have a reasonably focused project/target, OS3 consists of at least five different topics with relatively small or even no overlap among them, though most of these subjects have "modeling", "electron density" and "diffraction" as their common ingredients. A notable exception concerns the methodological and software developments for calculating electrostatic properties in crystals from X-ray diffraction data - tools which are increasingly being applied in the project related to drugs and pharmacophers research. No interaction with other OSs is visible, despite OS3 is mostly related to theoretical and computational modeling and could probably offer a valuable help to other OSs (see for comparison the fruitful interaction between one computational researcher of OS4 with OS2 unit).

The scientific production is generally of high quality, numerically relevant [36 papers in 4 years by 6 permanent researchers and 1 post-doc; 3 (ACL 34-36) out of the 40 reported papers are essentially half-page congress communications/talk and one paper (ACL 31) reported for 2005 has been actually published in 2004 and thus have all 4 removed from the count) but necessarily disperse over various subjects and in a very large number of different journals. This unit may thus run the risk not to be "visible" enough (in terms of citations, average h-indexes, etc.) compared to others, or at least somewhat less than the high scientific value and potentialities of its components would foresee. One has however to recognize that this unit has delivered a quite large number of invited conferences, which is a clear indication of the interest raised by the fundamental character of the performed research. A non negligible part of these conferences is related to the project aimed at reconstructing 1-electron reduced density matrices from X-ray diffraction and deep inelastic scattering data, but an inspection of published papers by OS3 reveals that only 3 papers explicitly report on this project. Thanks (also) to the developments brought about by OS3, this "Holy Grail" of charge/spin/momentum densities research is probably more within reach, but one could suggest that more application cases or more detail on the intermediate steps of the project should be published. It is expected that the project will acquire the proper "momentum" with the recently approved ANR project and the planned cooperation with a group in Nancy and a group at the SPRING-8 synchrotron to develop suitable SW and collect the required X-ray diffraction and inelastic scattering data.



Being essentially formed by "Enseignant chercheurs", OS3 appears to have on average heavier teaching duties and greater ECP teaching organization responsibilities than other OSs. This is clearly a positive aspect, but also a time-consuming one, which could be in part compensated for if a greater ease of attracting PhD students would result. It is instead surprising that the 2005-2008 period-averaged number of PhD students of OS3 is comparatively low, especially if related to the corresponding "normalized" number (in terms of permanent staff) for OS2 and OS4.

— **Strong points (points forts) :**

- High quality fundamental research and ongoing development of innovative SW tools: a) to compute electrostatic properties in crystals from X-ray diffraction experiments, including the electrostatic potential, the electric field and their topological features; b) to obtain model one-electron density matrices from the joint refinement of "elastic" and deep inelastic scattering data; c) to devise and test new DFT functionals based on the rigorous fulfillment of a set of physical constraints, rather than on a fitting scheme to a given data set of properties; d) to calibrate and use semiempirical LCAO approaches for the interpretation of photoemission and inverse photoemission experiments on surfaces.
- Ongoing fruitful collaboration with a worldwide recognized research team (Pharmacy Faculty, Chatenay-Malabry) in the field of drug development, to determine the crystal structure and the electrostatic properties of molecular systems of great pharmaceutical relevance. Relevant is also the recent acquisition of a specific skill on the Non-Photochemical Light Induced Nucleation technique, which enables one to select the targeted pharmaceutically active drug polymorph(s) from a supersaturated solution.
- Extremely high involvement in teaching and teaching organization at ECP. Important teaching and scientific cooperation with China and India has been promoted and it is currently pursued. Two projects "ANR blanche", though one soon expiring. New important collaborations being recently started (Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris for the DFT) or planned to be soon strengthened (Spring-8).

— **Points to be improved (points à améliorer) :**

- Too small scientific overlap among the various OS3 projects and consequently among its researchers. This could explain why this unit has not been able to be involved in EU scientific projects, or to attract industry contracts.
- Too high average age of permanent researchers.
- Too small effort within the past years to distribute the developed SW to the scientific community or to include this SW in widely distributed packages. However, important changes in this respect have been already planned or have been just achieved in the case of the DFT developments (presented during the audition, but not listed in the report).

— **Recommendations (recommandations) :**

- Try to increase the scientific cohesion within OS3, while not abandoning the ongoing promising researches; find at least one topic where to join the efforts in view of becoming able to participate as OS3 to international well-funded cooperative projects (e.g. FP7 EU projects); try to attract industrial interest (in particular, that of pharmacological industry, which should be/become quite natural).
- Exploit whether other OS units at SPMS (OS2?) could benefit from the competences of OS3 in view of enhancing their mutual capabilities to attract external funding.
- Try to attract and form a greater number of PhD students.
- Try to make the developed SW more available to the scientific community



- Try to publish more application cases or more detail on the various steps of the density-matrix reconstruction project.
- As suggested, a young researcher with competences in biological nanosciences, protein modeling and crystallography should be possibly hired to complement the skills already present in the unit in view of strengthening the synergic interaction with the Faculty of Pharmacy. To start with, this new researcher could be just a post-doc paid through a EU or an industrial contract. Proceeding this way could force OS3 to coagulate efforts to get soon a common funded project.

Nom de l'équipe : Matériaux Modèles et Molécules Pharmaceutiques/Méthodes Quantiques de Diffusion des Rayonnements

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. Opération scientifique OS4: Matériaux et Technologie de l'Hydrogène

The group was established beginning of 2007 and consists of two permanent staff members : one researcher (CR2) and one « enseignant-chercheur ». The group hosted 1 PostDoc for 18 months within 2006-2007, and at present hosts 4 doctoral students. Two out of these doctoral students are funded by the grants of Chinese Scientific Committee, and the other two received grants of ECP Doctoral School.

Scientific interests of OS4 during the evaluation period have been focused on ceramic materials of interest as electrodes and electrolytes for solid oxide fuel cells (SOFC) and hydrogen storage. The activities of the group cover preparation and development of novel materials, their structural characterization, investigation of their electrophysical and electrochemical properties and theoretical modeling (ab initio and semi-empirical). Of particular interest is the influence of nanostructure on electrophysical and electrochemical properties, which is investigated using both experimental and computational tools. In the area of solid electrolyte materials the objective is to find conducting materials (oxygen and proton conducting) with enhanced conductivities below the operation temperature of conventional SOFC (800-1000°C) thus allowing to decrease the operation temperature of SOFC to 500-650°C. Application of novel preparation routes, namely freeze-drying and spark plasma sintering allows unprecedented densification of solid electrolyte materials which cannot be achieved by conventional routes and which are highly demanded in the area of SOFC.

Scientific production: 11 papers in peer reviewed journals, including Chem. Comm. (ISI impact factor: 4.521) Appl. Phys. Lett. (ISI impact factor: 3.977), J. Power Sources (ISI impact factor: 3.521), Phys Rev B (ISI impact factor : 3.17), J. Chem Phys (ISI impact factor : 3.044), etc. 7 international conferences, 3 workshops.

Future plans: It is planned to extend research activities also to hydrogen production by high temperature electrolysis and by photolysis and development of hydrogen storage materials; create new computational tools adapted to fuel cell research including kinetic Monte Carlo, molecular modeling, etc.).



– **Strong points (points forts) :**

Very young, dynamic and ambitious group. Despite the youth of the group, it has already shown its high research potential. Actively publish in highly reputed international journals with high impact factors. The number of citations on ISI Web of Knowledge is constantly increasing. The head of the group is often invited to national and international conferences.

A number of promising research topics is being developed. The strong characteristics of the group are in (i) combining theoretical and experimental studies and (ii) finding balance between fundamental research of high quality and development of new materials of interest for practical applications in the field of SOFC and in the hydrogen storage. The group developed impressive national and international collaborations with Spain, China and Norway. Very successful in attracting PhD students and finding means to finance them. Has already been successful in attracting third means for research from public institutions in France (ANR, Institut Carnot) and industry (Contract with the SME "CERAMHYD") and continues these activities.

Praiseworthy are efforts of the group in scientific management and research organization, namely improving the Web site of the laboratory, in translating it into foreign languages and updating its content regularly, in building common computer resources, in setting up regular seminars and scientific discussions.

– **Points to be improved (points à améliorer) :**

Since the group is very young, obviously it has not become yet one of the key players in the field of development and investigation of materials for SOFC. The aspect to be improved is to obtain recognition in France, Europe and worldwide.

Considering large number of projects (already financed and submitted), there is a danger of dissipating the energies and ending up with performing numerous superficial research projects.

Ion conducting materials so far investigated in the group show conductivities which do not conform to the application objectives declared (decrease the operation temperature of SOFC to 500-650°C).

– **Recommendations (recommandations) :**

After the period of initial search of promising research directions and positioning of the group, it is recommended to focus on a few most promising subject matters without dissipating the energy in too many directions.

Continue high level fundamental research in order to achieve scientific excellence and international recognition. Extend computational capabilities. Use ab initio calculations to determine activation energies for ion transport and to ultimately predict materials with enhanced conductivities.

Consider participation in EU and other international projects.

Continue and strengthen development of novel materials for « low temperature » SOFC in order to acquire more industrial contracts.

It is recommended that both permanent group members complete their HDR.

Hiring a researcher experienced in material preparation may help to better understand synthesis-structure-function relationships.

Strengthen collaborations with OS1 and OS2.





Nom de l'équipe : Matériaux et Technologie de l'Hydrogène

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	A	B	A

## 5 • Analyse de la vie de l'unité

### – En termes de management :

Le schéma d'organisation du SPMS est celui qu'on trouve dans les laboratoires de même taille dont l'effectif est autour d'une cinquantaine de personnes dont 26 permanents. Le directeur est entouré de quatre responsables d'Opérations Scientifiques assimilés à des chefs d'équipes.

La discussion entre le comité d'experts et le conseil de laboratoire montre que la structure organisationnelle semble convenir et la présence d'un directeur adjoint n'a pas été revendiquée, ce qui paraît compréhensible vu la taille du SPMS. Pour des raisons pratiques liées au départ du responsable de OS2 dans la période 2005-2008, le directeur du SPMS, du fait de ses compétences scientifiques, a dû cumuler sa fonction avec celle de responsable de OS2.

Sauf de manière transitoire, pour pallier une situation qui n'est pas prévisible, un directeur d'une Institution, quelle qu'elle soit, ne peut être à la fois chef d'équipe et directeur de l'unité dans laquelle se trouve cette équipe. Conscient d'une telle situation, le SPMS a levé cette ambiguïté passagère pour le prochain contrat.

Le SPMS est doté d'un conseil de laboratoire constitué de membres élus, nommés et responsables d'OS. Il se réunit une fois par mois et est chargé d'assister le Directeur dans toutes les décisions prises concernant la politique scientifique, la politique de recrutement, l'organisation, le budget etc... Les décisions gagneraient en qualité et en pertinence si le SPMS mettait en place une animation scientifique horizontale entre les différentes OS ce qui permettrait ainsi discuter de manière plus approfondie et pertinente de la politique scientifique du SPMS. Cette observation avait déjà été formulée par le précédent Comité d'évaluation.

Le directeur du SPMS a un entretien annuel individuel avec l'ensemble du personnel. Le contenu écrit de ces entretiens est transmis à la Direction de l'ECP.

Les équipes ou OS sont entourées de 10 services collectifs (administratifs et techniques) avec une attention toute particulière aux problèmes d'hygiène et sécurité.

### – En termes de ressources humaines :

Pour mieux comprendre la vie du SPMS qui est une UMR avec deux tutelles ECP et CNRS, il est utile de souligner que le nombre global d'enseignants-chercheurs (7 Pr+4 MDC) est trois fois plus élevé que le nombre de chercheurs CNRS (1DR+2 CR), situation sensiblement équivalente à celle observée en 2004 avec toutefois une diminution de nombre de chercheurs CNRS qui passe de 6 à 3. Sur le plan des ITA/IATOS les effectifs en permanents sont sensiblement ceux de 2004 avec 13 permanents (9 ECP+ 4 CNRS) et deux CDD. Le rapport (EnCh, Ch)/ITA-IATOS (permanents) est globalement de l'ordre de l'unité ce qui, à prime abord, semble satisfaisant si l'on compare à d'autres unités de recherche en France. Cet aspect quantitatif du personnel n'a pas suscité de remarques particulières de la part du conseil de laboratoire si ce n'est qu'à l'unanimité le personnel a souhaité que l'ingénieur de recherche dédié au service de Diffraction X, service central et incontournable du SPMS, soit stabilisé au CNRS.



Il est à souligner que le personnel ITA/IATOS est dédié exclusivement aux 11 services collectifs du SPMS et non pas aux Opérations Scientifiques qui néanmoins pour une ou deux d'entre elles bénéficient de manière naturelle de par leurs thématiques d'une utilisation plus importante de certains services collectifs que les autres. Notons que l'ensemble du personnel est satisfait de ce type d'organisation.

Un effort notable a été fait depuis quatre ans en ce qui concerne le recrutement de jeunes chercheurs répartis principalement dans OS1, OS2 et plus particulièrement dans OS4 créée dans les quatre dernières années. Par ailleurs le SPMS montre son ouverture vers l'étranger par le recrutement d'un professeur étranger de haut niveau qui, pour le prochain contrat, sera le responsable de OS2 en remplacement du responsable actuel, aussi directeur du SPMS. Le recrutement du personnel est discuté en conseil de laboratoire aussi bien pour les permanents que pour les CDD.

Le nombre de doctorants est globalement satisfaisant mais reste encore déséquilibré entre les différents OS. *Cette remarque avait déjà été faite par le précédent comité d'évaluation.* Ceci résulte de l'histoire du SPMS et aussi de la présence de jeunes équipes qui éprouvent le besoin de s'affirmer notamment OS1 et OS4. Pour les thèses soutenues ou en cours on note : OS1 (2), OS2 (18), OS3 (3) et OS4. En revanche la situation est beaucoup mieux équilibrée en ce qui concerne les post-docs présents ou partis : OS1 (2), OS2 (3), OS3 (2) et OS4 (1). Le recrutement des étudiants se fait en deux étapes, un entretien individuel en présence du futur directeur de thèse et de membres extérieurs au SPMS puis soumission des candidatures à l'école doctorale.

Le SPMS bien que situé au cœur d'une grande école (ECP) connaît les difficultés de recrutement au niveau des doctorants. La formation doctorale n'est pas une valeur ajoutée aux yeux des jeunes ingénieurs. Il apparaît que sur l'ensemble des ingénieurs diplômés ECP, seulement une quinzaine sur plus de 400 élèves préparent un doctorat. Un effort doit être fait pour promouvoir le doctorat à l'extérieur de l'ECP par une forte participation des chercheurs et des enseignants-chercheurs dans les écoles doctorales dépassant le périmètre de l'ECP.

En résumé le SPMS est un laboratoire dont la pyramide des âges montre une distribution assez bien équilibrée jusqu'à la tranche 55-60 ans, tant pour les ITA/IATOS que pour les enseignants-chercheurs et chercheurs. Ceci indique que les recrutements ont été bien conduits et que pour l'instant le SPMS est à l'abri de pertes de savoir et de savoir-faire.

— **En termes de communication :**

La communication dans un laboratoire présente plusieurs aspects en dehors de la diffusion naturelle de résultats scientifiques à travers les publications, conférences, séminaires etc...

- *Vulgarisation vers les médias et le grand public* : cet aspect apparaît comme un point faible. Aucune mention n'est faite à ce sujet dans le rapport écrit et dans les présentations orales.
- *Site Web* : il serait souhaitable que le site soit traduit en anglais puisque ce type d'outil est un vecteur d'information qui doit dépasser largement nos frontières. Cet aspect est très important pour la diffusion de l'information vers l'étranger et notamment vers les étudiants. Par ailleurs il est recommandé que le SPMS garde une certaine homogénéité en ce qui concerne ce type de communication. Par exemple, OS4 a son propre site traduit en plusieurs langues alors que celui du SPMS n'est qu'en français et qu'aucun lien n'existe entre les deux.
- *Communication en interne* : des séminaires sont organisés dans chaque OS mais rien n'est fait quant à l'organisation de séminaires transversaux aux différentes OS. Cette remarque, déjà faite par le comité précédent, devrait être prise en considération dans le nouveau contrat. Ces réunions d'informations contribueraient à définir une politique scientifique plus équilibrée et plus pertinente dans certains choix thématiques. Elles auraient aussi l'avantage de permettre une meilleure intégration du personnel dans la vie scientifique du SPMS.



## 6 • Conclusions

Les points forts, les points à améliorer et des recommandations ont été formulés par les experts pour chaque Opération Scientifique dans les quatre chapitres précédents.

Le SPMS a sa place dans la recherche sur les matériaux à Centrale Paris en apportant une dimension chimique et physico-chimique de la matière et des matériaux. Dès lors que l'on parle matériaux (matière+propriétés) et de leur utilité, on part sur une voie qui met au premier plan l'élaboration, les procédés, en liaison directe avec des approches atomiques, nanoscopiques et microscopiques pour mieux comprendre et maîtriser la matière en jouant sur les relations entre structures, nanostructures, microstructures et propriétés. L'art sera de combiner les approches du chimiste des matériaux, du physicien du solide, du mécanicien, du thermicien, des théoriciens et des modélisateurs à toutes les échelles. ECP offre déjà en partie ces différentes facettes.

### – Points forts :

Le SPMS est reconnu pour :

- Ses recherches sur les matériaux diélectriques (ferroélectriques et relaxeurs) notamment pour (i) les études structurales fines (transitions de phases, morphotropisme : entre l'état normal ferroélectrique et l'état relaxeur) (ii) le comportement de ces matériaux sous pression et leurs propriétés en fonction de leur dimensionnalité (de la nanoparticule à la couche mince) (iii) les prévisions par les calculs utilisant la DFT.

Il serait dommage d'abandonner les travaux sur l'ingénierie des domaines ferroélectriques et leur lien avec les coefficients piézoélectriques « géants » pour lesquels le SPMS s'est forgé une réputation.

- L'étude des matériaux céramiques (e.g. oxydes) sous irradiation avec une approche multi-échelle (de la liaison chimique à l'étude de la microstructure) ; les relations défauts-propriétés.
- Les études expérimentales (diffraction X haute résolution) en relation avec les approches théoriques (calculs quantiques) pour déterminer les densités électroniques, les potentiels électrostatiques et les champs électriques et leur topologie dans les molécules pharmaceutiques. Notons également les développements récents et originaux faits sur l'optimisation de la partie cinétique de l'énergie d'échange-corrélation définie par une nouvelle fonctionnelle de la densité, qui ont suscité de l'intérêt chez les chercheurs travaillant sur des codes ab-initio bien connus.

### – Points à améliorer :

- L'équipe OS4 est encore très jeune et offre une potentialité exceptionnelle pour percer dans le domaine des piles à combustibles SOFC où de par le monde un nombre considérable de chercheurs est mobilisé. L'équipe est dynamique et très structurée et présente déjà une production scientifique d'un très bon niveau. Cependant l'effectif de l'équipe est encore trop réduit pour se disperser sur les différents sujets annoncés au risque de les traiter trop superficiellement. Une réflexion sur un recentrage semble s'imposer.
- Organisation de séminaires communs aux quatre Opérations Scientifiques pour créer plus de synergie entre les équipes OS1, OS2, OS3 et OS4, donner une « colonne vertébrale » à la politique scientifique du SPMS et réfléchir sur des choix stratégiques de manière à éviter des dispersions thématiques.
- Augmentation des interactions avec l'industrie pour toutes les OS et en particulier pour OS3 qui devrait attirer l'industrie pharmaceutique.
- Equilibre dans la répartition des doctorants entre les différentes OS.
- Diffusion de l'information scientifique et technique vers le grand public.



– **Recommandations :**

- Insérer dans le tissu du SPMS des chimistes des matériaux au sens de l'élaboration et de la synthèse dont les compétences seront fonction des thèmes sur lesquels le SPMS souhaite porter ses efforts. Ce ne peut être un chercheur isolé dans une OS ou encore moins un chercheur « itinérant » qui à la demande deviendrait un prestataire de service pour les uns et les autres. Ce doit être une politique de l'ECP dont la tradition n'a pas été jusqu'à présent de développer une véritable culture en Chimie des Matériaux. Cette approche serait d'autant plus pertinente que l'ECP souhaiterait s'orienter par exemple vers les composites fonctionnels (e.g. métamatériaux, biomatériaux etc...).
- Vue de l'extérieur, la structure du SPMS telle qu'elle est présentée actuellement manque de visibilité quant à ses activités sur les matériaux pour l'Energie. OS1 et OS4 devrait être présentées comme un seul groupe avec deux opérations scientifiques. Une réflexion devrait s'engager sur cette question sans pour autant froisser les ambitions.
- Les experts sont unanimes pour dire qu'il y a un manque d'interactions entre les OS. Si de nouveaux thèmes devaient se développer, il serait opportun de réfléchir par exemple sur des projets communs entre OS qui pourraient alors impliquer des post-docs ou des doctorants communs (une sorte de co-tutelle interne).

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	B	A

----- Message original -----

Sujet : rapport Aeres SPMS

Date : Fri, 20 Mar 2009 13:13:23 +0100

De : Jean-Michel Kiat <[jean-michel.kiat@ecp.fr](mailto:jean-michel.kiat@ecp.fr)>

Pour : <[Jean-Francois.Baumard@cns-dir.fr](mailto:Jean-Francois.Baumard@cns-dir.fr)>, "JHS" <[schmitt@ads.ecp.fr](mailto:schmitt@ads.ecp.fr)>, "Martine BEURTON" <[martine.beurton@ecp.fr](mailto:martine.beurton@ecp.fr)>

Copie à : CL <[spms.cl@list.ecp.fr](mailto:spms.cl@list.ecp.fr)>

Bonjour

Nous n'avons pas d'observation à transmettre à l'AERES concernant notre rapport.

Nous pensons en effet qu'il donne une image réaliste du laboratoire, tant dans ses points forts que ses points faibles.

Bien sincèrement

Jean-Michel Kiat

Directeur de Recherche au C.N.R.S.

Directeur du Laboratoire Structures, Propriétés, Modélisation des Solides (UMR 8580)

Ecole Centrale, Grande Voie des Vignes

92295 Châtenay Malabry Cedex

Tel : 01 41 13 12 11

E-Mail : [jean-michel.kiat@ecp.fr](mailto:jean-michel.kiat@ecp.fr) <<mailto:jean-michel.kiat@ecp.fr>>

[www.spms.ecp.fr](http://www.spms.ecp.fr) <<http://www.spms.ecp.fr>>

Chercheur associé au Laboratoire Léon Brillouin

CEN Saclay

91191 Gif sur Yvette Cedex

Tel : 01 69 08 60 69

[www-llb.cea.fr](http://www-llb.cea.fr)