LCM - Laboratoire de chimie moléculaire

Rapport Hcéres

▶ **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. LCM - Laboratoire de chimie moléculaire. 2014, École polytechnique - X, Centre national de la recherche scientifique - CNRS. hceres-02032979

HAL Id: hceres-02032979

https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02032979

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

Évaluation de l'AERES sur l'unité :

Laboratoire de Chimie Moléculaire

LCM

sous tutelle des établissements et organismes :

École Polytechnique

Centre National de la Recherche Scientifique – CNRS

Décembre 2013

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

Section des Unités de recherche

Pour l'AERES, en vertu du décret du 3 novembre 2006[1]*,*

- M. Didier HOUSSIN, président
- M. Pierre GLAUDES, directeur de la section des unités de recherche

Au nom du comité d'experts,

- M^me^ Chantal DANIEL, présidente du comité

[1] Le président de l'AERES « signe [...], les rapports d'évaluation, [...] contresignés pour chaque section par le directeur concerné » (Article 9, alinea 3 du décret n°2006-1334 du 3 novembre 2006, modifié).

Rapport d'évaluation

Ce rapport est le résultat de l'évaluation du comité d'experts dont la composition est précisée ci-dessous.

Les appréciations qu'il contient sont l'expression de la délibération indépendante et collégiale de ce comité.

Nom des unités :	Laboratoire Hétéroéléments et Coordination Laboratoire des Mécanismes Réactionnels
Acronyme des unités :	LHC et DCMR
Label demandé :	Unité mixte de recherche (fusion)
N° actuel :	UMR 7653 et UMR 7651
Nom des directeurs (2013-2014) :	Mme Corinne GOSMINI (UMR 7653) et M. Gilles OHANESSIAN (UMR 7651)
Nom du porteur de projet (2015-2019) :	Mme Corinne GOSMINI

Membres du comité d'experts

Président :	Mme Chantal DANIEL, CNRS - Université de Strasbourg
Experts :	Mme Cécile CREN-OLIVE, Institut des Sciences Analytiques, Villeurbane M. Bertrand GOUDEAU, Institut des Sciences Moléculaires, Pessac (représentant du CoNRS) Mme Muriel HISSLER, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (représentante du CNU)

Délégué scientifique représentant de l'AERES :

M. Philippe HAPIOT

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

M. Patrick LE QUERE, École Polytechnique

M. François OZANAM, École Polytechnique

M. Claude POUCHAN, CNRS-INC

Mme Francine AGBOSSOU, CNRS-INC

M. Philippe CAVELIER, Délégué CNRS

M. Pierre LEGRAIN (directeur de l'École Doctorale de l'École Polytechnique – ED 447)

1 • Introduction

Historique et localisation géographique des unités

Les unités de recherche sont issues de laboratoires implantés à l'École Polytechnique, depuis 1987 (pour le LHC) et 1974 (pour le DCMR), sur le site actuel de Paris-Saclay. Dans la période 2008-2013, les deux unités ont été marquées par des évolutions importantes en termes de ressources humaines dues à des départs en retraite programmés, au décès d'un directeur d'unité et à la mobilité de personnels. Les effets de ces départs sur les activités scientifiques et techniques ont été tempérés par l'arrivée de nouveaux personnels et une réorganisation en interne. Le LHC a recentré les activités de recherche autour de trois thématiques principales et le DCMR a réduit le nombre d'équipes de trois à deux.

Équipe de direction

Dans la période 2008-2013 le LHC a été dirigé successivement par trois directeurs d'unité assistés d'un personnel administratif-gestionnaire. Dans la même période le DCMR a été dirigé par un directeur d'unité entouré d'une assistante administrative et des responsables d'équipe.

Effectifs de l'unité

Effectifs de l'unité UMR 7653 LHC	**Nombre au 30/06/2013**	**Nombre au 01/01/2015**
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	4	4
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	4	4
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	1	
N5 : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	**12**	**8**

Effectifs de l'unité UMR 7651 DCMR	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	3	3
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	5	5
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	1	1
N5 : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	2	1
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	**11**	**10**

Effectifs de l'unité UMR 7653 LHC	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	7	
Thèses soutenues	20	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	3

Effectifs de l'unité UMR 7651 DCMR	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	7	
Thèses soutenues	11	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	2	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	4

2 • Appréciation sur l'unité

Avis global sur l'unité

Après une réorganisation en interne fondée sur un recentrage en trois thématiques de recherche pour l'UMR 7653 et deux thématiques de recherche pour l'UMR 7651, les deux unités de recherche ont lancé dès 2011 une réflexion et piloté ensemble un projet de fusion en une unité de recherche unique fondée sur trois entités de compétence : deux équipes de recherche et une plateforme instrumentation-recherche. Les organismes de tutelle et les personnels des deux unités d'origine ont largement participé à la réflexion accompagnant cette réorganisation par leur implication tout au long du processus. Ce travail d'anticipation a permis de rapprocher les personnels des deux unités constitutives à tous les niveaux et d'initier des collaborations scientifiques dont certaines se sont concrétisées par des contrats ANR permettant l'embauche de doctorants et post-doctorants sur des projets de recherche transverses.

Comme les appréciations détaillées et l'analyse par entité décrites en section 4 de ce rapport le démontrent, le bilan des deux unités est très positif en termes de qualité et production scientifique, rayonnement et attractivité académique, impact social, économique et culturel. Les trois thématiques développées par l'UMR 7653 LHC : hétérochimie, coordination et catalyse ont été marquées par des avancées spectaculaires lors du dernier contrat assurant une grande visibilité internationale et une production scientifique excellente. A la suite du départ de trois chercheurs en 2011-2012 un pan de l'activité de l'UMR 7651 DCMR a été abandonnée avec pour conséquence la fermeture de l'équipe "Spectrométrie de Masse BioAnalytique" et un recentrage autour des thématiques modélisation, spectroscopie et thermochimie, chimie analytique et environnement. Cette restructuration a permis de maintenir une production scientifique de grande qualité à la frontière chimie-biologie reconnue aux niveaux national et international.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'activité scientifique portée par les deux unités se caractérise par une production scientifique de grande qualité sur des thématiques d'une richesse exceptionnelle, combinant recherche fondamentale et recherche applicative. La complémentarité des compétences (synthèse-caractérisation vs. spectroscopie - modélisation et recherche en spectrométrie de masse) est un atout majeur du projet de fusions avec une interaction expérience/théorie renforcée.

Outre les prix et les nombreuses collaborations internationales, le rayonnement et l'attractivité académiques des deux unités se manifestent par la présence régulière de professeurs et chercheurs invités, de doctorants et post-doctorants étrangers. L'appartenance aux LabEx CHARMMAT (valorisation de CO_2) et PALM (Chimie Physique), à l'IDEX Paris-Saclay et autres réseaux structurants (fédération Paris-Saclay, TGE-spectrométrie de masse FT-ICR) offre un contexte local exceptionnel aux deux unités, contexte potentiellement renforcé par une fusion en termes de réponses aux appels d'offres locales, régionales et nationales.

L'impact social, économique et culturel est valorisé par le dépôt de nombreux brevets, la création d'une start-up (UMR 7653 LHC) et la diffusion de logiciels de modélisation (UMR 7651 DCMR). L'organisation de manifestations scientifiques, écoles et journées thématiques et l'obtention de nombreux contrats industriels ainsi que le placement de 50% des doctorants dans le secteur privé à l'issue de la thèse montrent l'attachement des deux unités à l'impact social, économique et culturel.

L'implication des deux unités dans la formation par la recherche se traduit par un taux élevé d'encadrement de stages, de doctorants et post-doctorants, par l'organisation d'écoles thématiques et la création de formations académiques ou professionnelles basées sur les compétences des unités (modélisation, instrumentation). La participation des deux unités à la mise en place de la nouvelle école doctorale "Chimie et Interfaces" est un gage d'une excellente implication.

L'organisation et la vie des entités passent par la mise en commun des ressources humaines administratives, du parc d'instrumentation et depuis 2011 de l'organisation de séminaires conjoints. Une mutualisation des crédits récurrents des deux UMR est prévue dès janvier 2014. Chaque unité gère les entretiens annuels des personnels techniques de façon satisfaisante. Les règles d'hygiène et sécurité et les principes de transparence et de communication sont appliqués correctement.

Points faibles et risques liés au contexte

Dans une période de restructuration importante émaillée d'incertitudes, l'activité scientifique d'excellence doit être maintenue pour pérenniser le rayonnement et l'attractivité de la structure unique aux niveaux national, européen et international, et ce malgré le départ de plusieurs chercheurs et le maintien de nombreuses thématiques allant de la synthèse à la chimie analytique en passant par la spectroscopie et la modélisation. Les projets scientifiques transverses doivent contribuer à maintenir une cohérence, l'écueil à éviter étant la dispersion.

La pérennité des séminaires conjoints, au-delà de la phase transitoire de fusion d'unités, une répartition des tâches techniques en adéquation avec les projets scientifiques transverses et la venue de nouveaux personnels techniques (informatique et rayons-X) doivent conduire à une excellente organisation et une vie d'unité harmonieuse à court terme.

L'ancrage des entités constitutives dans l'enseignement à l'École Polytechnique doit être intensifié et aller au-delà de l'encadrement de stages afin d'assurer l'attractivité de la future unité de recherche vis à vis des futurs doctorants de l'école.

Recommandations

Cette période transitoire qui débouche sur un projet de fusion construit et anticipé soulève des inquiétudes légitimes : i) budget, répartition des ressources financières (récurrent, ressources propres, contrats) ; ii) priorités dans la gestion des ressources humaines ; iii) déstabilisation par l'accueil d'une nouvelle équipe ; iv) report d'activités techniques incontournables (Rayon-X, Informatique) sur d'autres personnels si les embauches prévues se font attendre.

L'équipe de direction doit anticiper et travailler sur ces différents points afin de mener à son terme la fusion des UMR 7651 et 7653 et aborder le prochain contrat dans les meilleures conditions possibles. A terme la création d'un conseil d'UMR pourrait être envisagée. Le comité d'experts a été impressionné par le dynamisme et l'enthousiasme des responsables juniors pressentis pour animer les projets scientifiques dans le cadre du prochain contrat. La mise en œuvre de la fusion des deux unités de recherche ne devra pas entamer cet état d'esprit positif.

Le comité d'experts recommande une réflexion profonde sur le rôle et l'organisation de la plateforme au sein de la future unité.

3 • Appréciations détaillées

Avertissement : Une appréciation détaillée sur l'activité des unités de recherche UMR 7653 et 7651 engagées dans la fusion en une UMR unique « Chimie Moléculaire » est rédigée en section 4 (analyse équipe par équipe). Seul le critère C6 « Stratégie et projet à cinq ans » commun aux deux entités de recherche est détaillé dans cette section, les critères C1 à C5 présentés dans cette section sont résumés à l'échelle globale des deux unités.

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Les deux unités constitutives sont reconnues nationalement et internationalement pour leurs compétences et leurs travaux de recherche en hétérochimie, chimie organométallique des lanthanides et des métaux de transition, en spectrométrie de masse, en spectroscopie vibrationnelle et en modélisation. Parmi les nombreuses applications issues de cette activité de recherche intense et de haut niveau on peut noter la découverte de nouvelles molécules à forte activité catalytique ou l'identification structurale et dynamique de peptides à la frontière chimie-biologie.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Les deux unités bénéficient d'une visibilité nationale et internationale qui se traduit par l'invitation à des conférences, l'accueil d'étudiants, post-docs, chercheurs et professeurs de nationalités variées, de multiples collaborations internationales certaines formalisées par des contrats et des publications conjointes.

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

Les deux unités sont très engagées dans la recherche de ressources externes et l'interaction avec l'environnement en répondant à des appels d'offres, en tissant des liens étroits avec le monde socio-économique et en participant à de nombreux réseaux, non seulement de recherche mais aussi de formation.

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

Trois assemblées générales annuelles sont organisées au sein des unités constitutives ainsi que des séminaires internes à chaque entité et plus récemment des séminaires conjoints dans le cadre du projet de fusion. La communication au sein des unités est qualifiée de bonne et les personnels de soutien à la recherche se montrent satisfaits des entretiens annuels. Les formations H&S sont adaptées aux activités des deux unités et en particulier aux risques chimiques. Une gestion administrative des deux unités récemment mutualisée facilite la vie de l'unité.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Les deux unités sont impliquées dans l'enseignement à l'EP et à l'université de Paris Sud à tous niveaux. La formation par la recherche est assurée par l'encadrement de stages et de thèses. Les deux unités de recherche entretiennent des liens étroits avec l'ED 447 de site (EDX) et la future ED «Chimie et Interfaces» sur une base constructive.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Projet de fusion des UMR 7653 Laboratoire Hétéroéléments et Coordination (LHC) et UMR 7651 Laboratoire des Mécanismes Réactionnels (DCMR)

Le projet à cinq ans est basé sur une stratégie de fusion des deux unités de recherche dans un contexte complexe et faisant suite à une période déstabilisante à mi-parcours du dernier contrat. La structure intitulée Laboratoire de Chimie Moléculaire se décline en trois entités de compétence : deux équipes de recherche et une plateforme instrumentation/recherche. La capacité d'adaptation et de réorientation a permis d'anticiper un projet cohérent structuré qui doit atteindre sa maturité lors du prochain contrat à cinq ans.

Dans le cadre d'un projet de recherche d'excellence et lisible, les thématiques existantes sont renforcées par l'interaction expérience-théorie et/ou par des projets transverses. La conception et la valorisation de ligands complexes (non-innocents, polyfonctionnels) en chimie organométallique et en catalyse doivent contribuer à une production scientifique de qualité, aussi bien en recherche fondamentale qu'en recherche appliquée pour une ouverture vers des partenaires non-académiques. Un volet important du projet de recherche de la nouvelle structure sera consacré à l'étude des ions bioorganiques et bioinorganiques par combinaison de la modélisation quantique et classique et des techniques avancées de spectrométrie de masse, dans la continuité des projets développés ces dernières années avec succès par l'UMR 7651 (DCMR). L'originalité du projet réside dans la mise en place de trois projets transverses d'importance pour améliorer la synergie entre équipes. Ces projets transverses combinent synthèse et analyse environnementale, réactivité organométallique et modélisation ou encore calculs de structure électronique et mesure de propriétés physico-chimiques des complexes « PsalenM » synthétisés dans l'unité.

Afin d'optimiser et d'ouvrir le parc d'équipements des unités constitutives, la mise en place d'une plateforme instrumentation/recherche est proposée. Celle-ci doit assurer une activité de service en spectroscopie pour la chimie et en spectrométrie de masse en interne en plus d'un volet recherche en chimie analytique environnementale. Cette plateforme de recherche du projet de fusion est principalement issue d'une équipe de recherche, à savoir l'équipe "Chimie analytique et environnementale" du laboratoire DCMR. De par son origine, la plateforme a vocation à poursuivre une activité de recherche, activité à laquelle son personnel est très attaché. Ce souhait a été confirmé lors de la rencontre à huis-clos avec les personnels de la plateforme. Toutefois, le comité d'experts n'a pas ressenti lors des discussions une ouverture aux activités de service à destination des autres composantes de l'unité, y compris celles issues de la fusion. Ce dernier point peut poser des problèmes importants pour le devenir de certaines activités de l'unité qui dépendent des matériels et du savoir-faire de la plateforme et demande une réflexion quant à son organisation et son rôle au sein de la future unité.

La fusion a été anticipée par le dépôt de projets scientifiques conjoints, dont certains sont en cours de financement, par l'organisation de séminaires conjoints, par une mutualisation de la gestion administrative et financière de la future unité, par des échanges informels entre personnels créant un dynamisme partagé à tous les niveaux. Un objectif de progression de la formation par la recherche est clairement affiché et soutenu localement. Le développement des compétences scientifiques, techniques et administratives des personnels pour atteindre les objectifs ambitieux du projet de fusion est assuré par des plans de formation en interne et en externe.

Compte tenu des éléments connus à ce jour quelques incertitudes et inquiétudes légitimes persistent concernant le budget de la future structure et sa répartition. L'arrivée d'une nouvelle équipe avec le recrutement annoncé d'un professeur pose également question.

Néanmoins ce projet de fusion construit et anticipé prouve la capacité des deux unités à se réorganiser pour une meilleure adaptation aux évolutions de l'environnement, une optimisation des ressources humaines et instrumentales et la création d'une dynamique pour renforcer la synergie des thématiques de recherche.

4 • Analyse équipe par équipe

Équipe 1 : Laboratoire Hétéroéléments et Coordination (LHC) - UMR 7653

Nom du responsable : M^me Corinne GOSMINI

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	4	4
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	4	4
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	1	
N5 : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	**12**	**8**

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	7	
Thèses soutenues	20	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	3

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Le laboratoire LHC est reconnu internationalement pour ses compétences en hétérochimie, en chimie organométallique des lanthanides et des métaux de transition dans leurs applications en catalyse. Les activités de recherche s'articulent autour de trois thématiques qui sont complémentaires et qui ont une forte visibilité :

- *l'hétérochimie et application* : L'équipe développe des ligands sophistiqués pour former des complexes organométalliques. Ces ligands comportent des insaturations (P=C, P=N) permettant de moduler les propriétés des atomes donneurs et les propriétés des centres métalliques. Ces travaux ont débouché sur le développement de nouveaux complexes à base de métaux de transitions ou de lanthanides présentant une importante activité catalytique. Par exemple, le potentiel de complexes de lanthanides ou de terres rares pour la polymérisation du 1,3-butadiène a été exploité dans le cadre d'une collaboration avec la société Michelin.

- *la coordination :* L'interaction entre les ligands mis au point au laboratoire et différents centres métalliques (métaux de transition et lanthanides) est au cœur des projets de recherche ayant pour ambition de bien comprendre la structure électronique fine des complexes. Ceci nécessite de coupler l'expérience avec des calculs théoriques et diverses méthodes spectroscopiques. Par exemple, l'équipe a mis au point le premier carbène de scandium et elle a étudié en détail la nature de la liaison carbénique. Cette découverte a été publiée dans un article à fort impact (*J. Am. Chem. Soc.*), qui a fait l'objet de 2 highlights dans Nature Chemistry. L'équipe a réussi à activer des petites molécules telles que N_2 en utilisant la réactivité des lanthanides divalents.

- *la catalyse* : Lors du dernier contrat, l'utilisation des complexes mis au point au laboratoire ou le développement de méthodologies en catalyse a porté sur la catalyse de polymérisation de diènes (contrat Michelin) et les réactions de couplages pour la création de liaisons C-C et C-N. Les complexes d'yttrium(III) à base de ligands phosphasalen ont été utilisés comme initiateurs très efficaces et sélectifs de la polymérisation par ouverture de cycle de lactide.

Au cours du dernier contrat la production du groupe LHC a été excellente tant sur le plan quantitatif (149 publications et 4 chapitres d'ouvrage sur la période, soit 7,65 pub/ETP/an) que qualitative (6 Angew. Chem, 9 J. Am. Chem. Soc., 26 Organometallics, 1 Chem. Rev., 17 Chem. Comm. …). Ces résultats confèrent à l'équipe une forte visibilité nationale et internationale, bien illustrée par la nature et le nombre important de conférences invitées et de communications orales et par affiche (50 conférences invitées, 70 communications orales, 81 communications par affiche).

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Le laboratoire LHC bénéficie d'une forte visibilité nationale et internationale illustrée par la nature et le nombre important de conférences et de séminaires invités (50 conférences invitées, 70 communications orales). La qualité scientifique des travaux réalisés dans le groupe a été saluée par la communauté scientifique, via l'attribution de distinctions (médaille de Bronze, Prix Paul Pascal de l'Académie des Sciences) et de nombreux prix de thèse.

L'unité a développé de nombreuses collaborations nationales et internationales et est impliquée, au niveau européen, dans deux réseaux COST (Phoscinet(CM00802), European f-element network (CM1006)) et dans deux contrats européens (SUSCHEM impliquant 3 partenaires industriels (DSM, Arkéma, Thermphos) et Artizyme, STREP).

L'unité se caractérise par une très bonne attractivité au niveau des étudiants et chercheurs (environ 50% du personnel est de nationalité étrangère avec des provenances très variées) et bénéficie annuellement de la visite de professeurs ou de chercheurs invités.

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

La capacité de l'UMR 7653 à obtenir des financements externes, à répondre à des appels d'offres, et à participer à des réseaux d'excellence est excellente. L'unité a obtenu, durant la période de référence, le financement de cinq projets ANR, deux contrats européens, un financement européen Marie Curie FP7 et un financement de thèse de l'état chinois. L'UMR a également tissé des liens avec des partenaires industriels, par le biais de travaux réalisés en partenariat avec l'industrie formalisés par deux contrats industriels (*IFP, Michelin).* Douze brevets ont été déposés durant la période de référence. La start-up MAGPIE Polymer a été créée à partir d'un brevet. Dans la cadre des pôles de compétitivité, l'unité est partenaire du LabEX CHARMMAT dans le domaine de la valorisation du CO_2. 60% des doctorants issus du LHC trouvent un emploi dans le secteur non-académique. Le laboratoire a co-organisé des manifestations scientifiques sous forme de journées (14) et d'une conférence.

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

La direction de l'UMR 7653 organise régulièrement des assemblées générales (deux à trois fois par an) afin de gérer la vie du l'unité et des séminaires scientifiques internes. Des réunions hygiène et sécurité sont organisées pour informer les étudiants (stagiaires, thésards et post-doctorants) sur le mode de fonctionnement du laboratoire et sur les principes de sécurité (ACMO, document unique…).

Dans le cadre de l'information scientifique, les membres de l'équipe peuvent assister aux nombreuses conférences organisées à l'école Polytechnique mais l'accès restreint ou inexistant à certaines ressources numériques (par exemple Science Finder) pose des problèmes pour accéder à l'information scientifique.

Les instruments de mesure et les stocks de produits chimiques sont mis en commun entre les différents chercheurs et ils sont au service de la recherche et de l'enseignement. Suite au départ de personnels techniques et de chercheurs, la gestion et l'entretien des instruments de mesures sont actuellement assumés par les chercheurs en place et les étudiants.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'unité LHC est impliquée dans la formation, que ce soit initiale - avec des encadrements et soutenances de stages, des travaux dirigés ou travaux pratiques - continue ou doctorale - avec 24 thèses soutenues et 4 en cours (ED 447 École Doctorale École Polytechnique EDX). Les chercheurs participent aux jurys des épreuves orales du master international de chimie moléculaire.

L'unité souhaite renforcer son implication dans la formation à l'école polytechnique notamment en donnant des cours dans cet établissement. Ceci se traduit par la forte implication du futur responsable de l'UMR dans la mise en place de la nouvelle école doctorale disciplinaire « Chimie et Interfaces » dans le cadre du campus Paris-Saclay. Le personnel de l'UMR est également impliqué dans la diffusion de la culture scientifique et dans la formation des professeurs des classes préparatoires.

L'unité de recherche entretient des liens étroits avec l'ED 447 de site (EDX) et la future ED «Chimie et Interfaces» sur une base constructive.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Avertissement : L'appréciation sur le critère C6 ainsi que l'analyse point fort, point faible et recommandations sont communes aux deux entités. (cf. analyse détaillée sections 2 et 3).

Équipe 2 : Laboratoire des Mécanismes Réactionnels (DCMR) - UMR 7651

Nom du responsable : M. Gilles OHANESSIAN

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	3	3
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	5	5
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	1	1
N5 : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	2	1
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	**11**	**10**

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	7	
Thèses soutenues	11	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	2	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	4

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Le laboratoire DCMR est reconnu nationalement et internationalement pour ses compétences et ses travaux de recherche en spectrométrie de masse, en spectroscopie vibrationnelle dans un spectromètre de masse (IRMPD) et en modélisation et pour ses études mécanistiques de dissociation par capture d'électrons (ECD). Plusieurs applications particulièrement notables, à la frontière chimie-biologie, sont soutenues par une activité en développement méthodologique incontournable dans le domaine de la chimie-physique expérimentale et théorique pour maintenir un niveau d'excellence. Certains thématiques phares développés dans le cadre de collaborations internationales assurent une grande visibilité au laboratoire (liste non exhaustive) :

- *Mécanisme de dissociation de peptides par capture d'électrons* : Les aspects fondamentaux des mécanismes de fragmentation de peptides sont étudiés en combinant les différentes techniques maîtrisées au DCMR et en travaillant sur des systèmes modèles de complexité chimique et biologique croissante. En combinant les techniques ECD et de spectrométrie de masse FT-ICR il a ainsi été montré que l'espèce transitoire radical-cation se fragmente en différents types d'ions via trois voies principales, les intensités des ions détectés dépendants de la nature et de la taille des peptides.
- *Identification structurale et dynamique de peptides* : En combinant spectroscopie IRMPD et modélisation il devient possible de déterminer des structures de groupes fonctionnels et par une approche bottom-up d'attribuer des spectres vibrationnels de peptides de taille croissante jusqu'à une douzaine de résidus. La méthode de dynamique moléculaire, utilisée ici de façon non routinière, permet d'explorer les structures complexes de peptides dont les spectres IR expérimentaux déterminés conformation par conformation sont inexploitables sans l'apport de la modélisation.
- *Structure et réactivité en chimie de coordination et catalyse* : Ici l'outil théorique est exploité pour étudier les structures électroniques et géométriques de ligands à propriétés contrôlées pour une coordination à un métal de transition ou à un lanthanide. Une approche topologique complète l'analyse des interactions spécifiques (covalentes ou ioniques) entre métal et ligands. L'originalité de ces travaux réside dans leur capacité à décrire des propriétés non accessibles par l'expérience.

L'activité scientifique du laboratoire DCMR est également soutenue par les travaux de recherche en chimie analytique et environnement développés dans le cadre de la plateforme recherche-instrumentation qui renforce le lien entre fondamental et applications. Ces travaux menés le plus souvent en collaboration académique et non-académique combinant expérience et théorie s'intéressent notamment à la dégradation de fongicides sous l'effet du rayonnement solaire à travers l'étude des structures fines des photoproduits ou à la spéciation de composés organohalogénés issus de la désinfection des eaux brutes de rivières par oxydants chlorés (avec EDF).

Au cours du dernier contrat la production du groupe DCMR a été excellente tant sur le plan quantitatif (144 publications, 3 ouvrages et 2 chapitres d'ouvrage sur la période, soit 3,4 pub/ETP/an) que qualitative (1 Science, 1 Angew. Chem., 6 *J. Am. Chem. Soc.*, 3 Anal. Chem…..). Ces résultats confèrent à l'équipe une visibilité nationale et internationale, qui se traduit par des conférences invitées et communications orales ou par affiche (18 conférences invitées, 61 communications orales, 69 communications par affiche).

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Le laboratoire DCMR bénéficie d'une visibilité nationale et internationale qui se traduit par 18 conférences invitées, 70 communications orales dont 15 invitées et 16 séminaires invités. L'unité entretient de nombreuses collaborations internationales au niveau européen dont certaines formalisées (STREP, PHC…) et d'autres (Berkeley, Univ. Washington, Harvard, Tokyo, Univ. Melbourne, Univ. Waterloo, NUS Univ. Singapour…) formalisées par l'accueil de neuf chercheurs ou professeurs invités et se traduisant par des publications conjointes. 50% des doctorants de l'unité sont de nationalité étrangère.

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

La capacité de l'UMR 7651 à obtenir des financements externes, à répondre à des appels d'offres, et à participer à des réseaux est excellente. Durant la période de référence, l'unité s'est impliquée comme porteur ou partenaire dans douze contrats publics et a obtenu par ce biais un financement global important (5 contrats ANR, 1 STREP, PIR, DIM, AAP, GDR…). L'unité entretient des liens étroits avec le monde de l'entreprise et a obtenu 8 contrats pour un financement conséquent. L'unité est partenaire du LabEx PALM et fortement impliquée dans le réseau TGE FT-ICR en étant site d'accueil. L'unité s'investit énormément dans les formations en spectrométrie de masse et spectroscopie par le biais de formations permanentes, de journées et d'écoles thématiques. Si l'activité du laboratoire n'a pas généré de brevets, elle participe à la diffusion de logiciels de modélisation, en particulier de nouveaux champs de force pour la dynamique moléculaire. 50% des doctorants issus du DCMR trouvent un emploi dans le secteur non-académique. Les personnels de l'unité sont impliqués fortement dans des tâches d'intérêt collectif et à ce titre sont membres de conseils (Conseil scientifique de l'INC au CNRS), réseaux (TGE, LabEx, GDR), comités éditoriaux (Int. J. Mass Spectro. ; Mass Spectro. Review…) et comités de pilotage (fédération Paris-Saclay…).

Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Le mode de fonctionnement du laboratoire a été modifié durant le dernier contrat à la suite du départ d'une équipe et dans le cadre du projet de fusion. Pendant cette période transitoire les choix budgétaires sont faits en commun et la mutualisation des ressources a été renforcée.

La direction organise trois assemblées générales par an. Des séminaires réguliers en interne et un cycle de séminaires présentés par des collègues extérieurs animent la vie de laboratoire. La communication est qualifiée de bonne mais les étudiants et post-docs regrettent la fermeture de l'accès à certaines ressources bibliographiques. Les entretiens annuels des personnels de soutien à la recherche sont satisfaisants et constructifs. Une formation hygiène et sécurité est assurée en interne (ACMO, document unique…).

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'UMR 7651 est impliquée dans la formation par le biais des encadrements et soutenances de stages, de cours, de travaux dirigés et travaux pratiques à l'EP et à l'université de Paris Sud et sous forme de stages de formation professionnelle en instrumentation dans le cadre de la formation permanente. 8 thèses ont été soutenues pendant le précédent contrat et 7 sont en cours. La création d'un module de modélisation moléculaire et l'organisation de journées et d'une école thématique viennent compléter l'activité de formation de l'unité. De nombreux doctorants étrangers sont accueillis au laboratoire pour des stages de courte durée (quelques mois à un an). Enfin l'unité est impliquée dans la mise en place de la nouvelle ED « Chimie et Interfaces ». L'unité de recherche entretient des liens étroits avec l'ED 447 de site (EDX) et la future ED «Chimie et Interfaces» sur une base constructive.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Avertissement : L'appréciation sur le critère C6 ainsi que l'analyse point fort, point faible recommandation sont communes aux deux entités. (cf. analyse détaillée sections 2 et 3)

Plateforme de recherche et instrumentation : précisions

Préambule : Les éléments ci-dessous ont pour but de préciser le fonctionnement futur de la plateforme recherche et instrumentation. Les appréciations sur les critères C1 à C5 décrits ci-dessus pour l'UMR 7651 (DCMR) tiennent compte des activités de celle-ci sur la période de référence.

Dans le cadre de la fusion des UMR 7651 et 7653, le projet prévoit la création d'une plateforme de recherche et instrumentation regroupant les moyens spectroscopiques des deux laboratoires (deux RMN, un diffractomètre à rayons X, six spectromètres de masse, quatre chromatographes gaz/liquide).

Les personnels IR-X, IE-X et AI-X spécialistes de spectrométrie de masse et/ou de chromatographie sont très impliqués dans une activité de recherche qui devra être renforcée par le recrutement à terme d'un chercheur. Ces travaux font l'objet de collaborations avec VEOLIA, EDF, l'INERIS (une thèse), le Muséum d'Histoire Naturelle…

L'ITA de l'équipe « Hétérochimie et Coordination » sera chargée des expériences de son équipe réalisées sur la plateforme. Concernant les prestations de service plus inhabituelles ou spécifiques, les membres de la plateforme accompagneront les utilisateurs ou traiteront intégralement les expériences. L'utilisation de la RMN est assurée par un IR CNRS du Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (UMR 7643). La procédure Noemi au printemps 2013 pour remplacer l'IE CNRS responsable du diffractomètre de rayons X (mobilité en 2012) a été infructueuse et n'a pas été reconduite.

Les crédits de la plateforme proviennent de différentes sources : crédits récurrents, formation permanente contrats publics et privés, prestations de service. L'achat et la jouvence des équipements sont assurés par des financements publics: région, CNRS, École Polytechnique, Paris Saclay, et l'ONEMA/Office Nationale de l'Eau et des Milieux Aquatiques.

5 • Déroulement de la visite

Dates de la visite

Début :	Mardi 10 Décembre 2013 à 12h
Fin :	Mercredi 11 Décembre 2013 à 16h30

Lieu de la visite

Institution :	École Polytechnique Campus Paris-Saclay
Adresse :	Route de Saclay, 91128 Palaiseau France
Locaux spécifiques visités :	Laboratoires DCMR et LHC, Plateforme de recherche analyse et environnement, Services techniques LHC, Service de soutien administratif – Les réunions se sont tenues dans la Salle Lavoisier sur le site de l'École Polytechnique.

Déroulement ou programme de visite

Mardi 10 Décembre

12h00 :	Repas du comité d'experts à huis clos
13h00 :	Mise en place du comité d'experts (huis clos)
13h30 :	Présentation de l'activité du DCMR et du LHC par les directeurs d'unité du contrat de référence
	Présentation du projet de fusion pour le prochain contrat par le porteur de projet (en présence du personnel du laboratoire)
15h00 :	Présentation de l'équipe Hétérochimie et Coordination par le porteur de projet
15h30 :	Présentation de la plateforme de recherche et instrumentation par le porteur de projet
16h00 :	Visite du laboratoire LHC et discussions devant les affiches
17h00 :	Rencontre avec les tutelles : École Polytechnique et Centre National de la Recherche Scientifique

Mercredi 11 Décembre

08h30 :	Mise en place du comité d'experts
09h00 :	Rencontre avec le directeur de l'École doctorale ED n°447 (EDX)
09h15 :	Présentation de l'équipe Modélisation, Spectroscopie et Interactions non covalentes par le porteur de projet
09h45 :	Rencontre avec les permanents du laboratoire
10h05 :	Réunion à huis clos avec les ITA
10h25 :	Réunion à huis clos avec les doctorants
10h45 :	Visite du DCMR et discussions devant les affiches
12h30 :	Repas sous forme de buffet
13h30 :	Rencontre avec les directeurs et porteurs de projet

14h00 :	Réunion du comité d'experts à huis clos pour préparer le rapport
16h30 :	Fin de la visite du comité d'experts

Points particuliers à mentionner

La visite s'est déroulée selon un programme préalablement établi et les membres du comité d'experts ont eu la possibilité de rencontrer toutes les catégories de personnel lors des réunions prévues à huis clos et lors de séances d'affiches pour des discussions scientifiques. Le temps imparti à chaque rencontre a été suffisant pour une communication de qualité en particulier au niveau de l'écoute des personnels.

6 • Observations générales des tutelles

ÉCOLE
POLYTECHNIQUE
UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY

Patrick Le Quéré
Directeur adjoint de l'Enseignement et de la Recherche

Madame Nathalie Dospital
Déléguée Administrative
Section des unités
AERES
20 rue Vivienne
75002 PARIS

Objet : Evaluation AERES du LCM
Référence : DAER /LL/14 – n° 68
PJ : Réponse au rapport d'évaluation du LCM - S2PUR150008025 - 005303

Palaiseau, le 18 mars 2014.

Chère Madame,

Je vous prie de trouver ci-joint les remarques qu'a suscitées le rapport du comité d'évaluation ainsi que les corrections factuelles que le LCM (UMR 9168) souhaiterait voir prises en compte dans la version finale du rapport.

Nous tenons également à vous faire savoir que nous avons été très sensibles à la qualité du rapport, et vous prions de remercier en notre nom l'ensemble des membres du comité et sa présidente pour le temps qu'ils ont consacré à cette évaluation.

En vous souhaitant bonne réception de la présente, je vous prie de croire, Chère Madame, à l'assurance de mes meilleures salutations.

Patrick Le Quéré
Directeur adjoint de l'Enseignement et de la Recherche

DIRECTION DE L'ENSEIGNEMENT ET DE LA RECHECHE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE - F 91128 PALAISEAU CEDEX - T. +33 (0)1 69 33 40 01 - F. +33 (0)1 69 33 40 02

Dr Corinne Gosmini
Directrice du Laboratoire de Chimie Moléculaire
UMR 9168
Tel: (33) 1.69.33.44.12
Fax: (33) 1.69.33.44.40
Email: corinne.gosmini@polytechnique.edu

Palaiseau le 18 mars 2014

Réponse sur le rapport du comité d'experts AERES

Le laboratoire est satisfait du rapport AERES et remercie les membres du comité pour la qualité de leur expertise. Nous sommes globalement d'accord avec les conclusions du rapport et nous avons pris bonne note des recommandations émises par le comité. Nous n'avons pas de commentaires particuliers à émettre.

Corinne Gosmini

Dr Corinne Gosmini
Directrice du Laboratoire de Chimie Moléculaire
UMR 9168
Tel: (33) 1.69.33.44.12
Fax: (33) 1.69.33.44.40
Email: corinne.gosmini@polytechnique.edu

Palaiseau le 18 mars 2014

Corrections factuelles du rapport AERES

Nous avons constaté très peu d'erreurs dans ce rapport:

- dans les tableaux des pages 4, 9, et 12, il y a des erreurs (les tableaux corrigés sont joints dans les pages suivantes)

- le terme "déstabilisation" par l'accueil d'une nouvelle équipe en page 6 dans recommandations, nous parait excessif, le terme questionnement nous parait préférable et plus en cohérence avec ce qui est écrit dans l'avant dernier paragraphe de la page 8.

- enfin pour être homogène à la page 15, il faudrait remplacer DCPH par LHC dans le déroulement du programme à 13h30 et 16h.

Corinne Gosmini