



**HAL**  
open science

## LCPQ - Laboratoire de chimie et physique quantiques

Rapport Hcéres

► **To cite this version:**

Rapport d'évaluation d'une entité de recherche. LCPQ - Laboratoire de chimie et physique quantiques. 2010, Université Toulouse 3 - Paul Sabatier - UPS. hceres-02034090

**HAL Id: hceres-02034090**

**<https://hal-hceres.archives-ouvertes.fr/hceres-02034090>**

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 de l'AERES sur l'unité :  
Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques  
UMR 5626  
sous tutelle des  
établissements et organismes :  
CNRS  
Université Paul Sabatier de Toulouse

Mai 2010



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

Section des Unités de recherche

Rapport de l'AERES sur l'unité :

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

UMR 5626

sous tutelle des établissements et  
organismes :

CNRS

Université Paul Sabatier de Toulouse

Le Président  
de l'AERES

Jean-François Dhainaut

Section des unités  
de recherche

Le Directeur

Pierre Glorieux

Mai 2010



## Unité

Nom de l'unité : Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

Label demandé : UMR

N° si renouvellement : 5626

Nom du directeur : M. Fernand SPIEGELMAN

## Membres du comité d'experts

Président :

M. Daniel BORGIS, CNRS, Paris

Experts :

M. Benoît CHAMPAGNE, FNRS, Namur

M. Benoît GERVAIS, CEA, Caen

M. Maurizio PERSICO, Pise

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

M. Xavier ASSFELD, Nancy, CoNRS

## Représentants présents lors de la visite

Délégué scientifique représentant de l'AERES :

M. Georges HADZIOANNOU

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

M. J. P. LAUNAY, représentant la direction scientifique de l'UPS,

Mme. Armelle BARELLI, déléguée régionale du CNRS, représentant par délégation M. Francis SECHERESSE, directeur scientifique adjoint de l'INC du CNRS.



# Rapport

## 1 • Introduction

- Date et déroulement de la visite :

La visite s'est déroulée sur trois demi-journées les 16 et 17 décembre 2009. La première demi-journée a été consacrée à la prise de contact du comité d'experts, à l'écoute du message du directeur en présence des responsables d'équipe, enfin à l'évaluation du groupe numériquement le plus important, GMO (40 mn d'exposé et 25 mn de questions en présence de tous les membres l'équipe, puis délibération du jury en huis clos). La deuxième demi-journée a concerné l'évaluation des trois autres équipes, DF, SEM et MAD (25 mn d'exposé, 15 mn de questions, puis délibération). Une pause déjeuner/buffet a permis au comité de discuter de façon informelle avec les membres du laboratoire autour des posters (une trentaine). Enfin la dernière demi-journée a vu la rencontre avec le conseil de laboratoire, le personnel technique et administratif et les représentants des étudiants. Le comité a ensuite délibéré.

D'une façon globale, le comité a jugé cette visite agréable et organisée avec soin et professionnalisme, y compris la séance des posters qui a impliqué l'ensemble du laboratoire. Tous les exposés étaient clairs et bien préparés. De plus, le comité a pu s'appuyer pour son expertise sur deux documents écrits, bilan et projet, de grande qualité, bien rédigés, clairs et allant à l'essentiel.

- Historique et localisation géographique de l'unité et description synthétique de son domaine et de ses activités :

Le LCPO existe sous ce nom depuis janvier 2007. Il est issu du Laboratoire de Physique Quantique (LPQ), créé en 1974. Partant de moins d'une dizaine de chercheurs, il a connu une croissance importante jusqu'à inclure environ 35 permanents en 2006, 30 aujourd'hui. Il a hébergé jusqu'en 2001 le groupe de Physique Théorique devenu Laboratoire de Physique Théorique. Le LCPO, le LPT, ainsi que le Laboratoire des Collisions Atomiques et Moléculaires (LCAR) et le Laboratoire de Physico-Chimie des Nano-Objets (LPCNO), créé en 2007 sur le site de l'INSA, sont regroupés au sein de l'Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes (IRSAMC). Le LCPO, le LCAR et le LPT partagent le même bâtiment sur le site de l'Université Paul Sabatier. En 2006, un groupe de chercheurs et d'enseignants chercheurs ont quitté le LCPO pour participer à la création du LPCNO.

Le LCPO couvre plusieurs domaines de la Chimie Théorique -essentiellement quantique- et de la Physique Moléculaire Théorique. Il dispose d'une forte composante méthodologique axée principalement sur le problème de la corrélation électronique et la modélisation des agrégats et produisant des logiciels de calcul et de simulation. Il comporte aussi des équipes orientées vers des applications à des systèmes d'intérêt physico-chimiques et biologiques : magnétisme moléculaire, spectroscopie à très haute résolution, réactivité et photochimie de complexes de coordination et de biomolécules, agrégats et nanoparticules. Le laboratoire est composé de 4 équipes : Méthodes et Outils pour la Chimie Quantique (GMO), Chimie des Eléments d & f (DF), Systèmes Etendus et Magnétisme (SEM), Modélisation-Agrégats-Dynamique (MAD).



- Equipe de Direction :

Directeur : Fernand Spiegelman. Chefs d'équipe : S. Evangelisti (GMO), F. Alary (DF), N. Guihéry (SEM), F. Spiegelman (MAD). Le laboratoire est doté d'un conseil de laboratoire, d'un conseil scientifique et d'une commission informatique. Il est prévu que T. Leininger prenne bientôt la fonction de directeur adjoint.

- Effectifs de l'unité : (sur la base du dossier déposé à l'AERES) :

	Dans le bilan	Dans le projet
N1 : Nombre d'enseignants-chercheurs (cf. Formulaire 2.1 du dossier de l'unité)	15	14
N2 : Nombre de chercheurs des EPST ou EPIC (cf. Formulaire 2.3 du dossier de l'unité)	11	14
N3 : Nombre d'autres enseignants-chercheurs et chercheurs (cf. Formulaire 2.2 et 2.4 du dossier de l'unité)		
N4 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs titulaires (cf. Formulaire 2.5 du dossier de l'unité)	4	4,5
N5 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs non titulaires (cf. Formulaire 2.6 du dossier de l'unité)		
N6 : Nombre de doctorants (cf. Formulaire 2.7 du dossier de l'unité)	14	0
N7 : Nombre de personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	17	20

Par rapport au dossier écrit s'ajoute au démarrage du prochain contrat l'arrivée par mutation d'un DR-CNRS dans GMO et d'un CR CNRS dans SEM. Un MdC est en délégation prolongée et n'est pas compté dans le projet.

## 2 • Appréciation sur l'unité

- Avis global :

Le LCPO est un laboratoire de pointe en chimie théorique avec une place unique en France et en Europe. Il est parfaitement inséré dans le tissu européen et au centre de nombreux réseaux. Que ce soit pour la corrélation électronique, le magnétisme, les éléments lourds, les agrégats, « l'école toulousaine » est parfaitement reconnue et identifiée. L'activité est bien équilibrée entre développements de méthodes de pointe (et d'une dizaine de codes originaux qui y sont associés) et applications frontières pour ces méthodes. Le laboratoire possède une palette unique de compétences multi-échelles en chimie théorique, de l'IC aux Hamiltoniens modèles et aux champs de force, de la dynamique quantique aux méthodes d'espace des phases. Dans sa configuration actuelle, avec l'arrivée récente de jeunes chercheurs, le renforcement du pôle relativiste, la création d'un pôle photochimie, l'embauche d'un IR pour valoriser ses codes, le laboratoire est en position de pouvoir renforcer son leadership sur plusieurs problèmes fondamentaux important de la chimie quantique et de pouvoir valoriser pleinement les résultats de ses recherches: calculs multiconfigurationnels en orbitales localisées, effets relativistes, QMC, définition et résolution d'Hamiltoniens modèles pour les systèmes magnétiques étendus et la mécanique statistique quantique des agrégats moléculaires. Le LCPO a bien tiré profit des recommandations du comité précédent et il a su répondre aux aléas de manière volontaire et positive. En particulier, il a bien réussi la restructuration du groupe DF autour d'une thématique porteuse. Sa place centrale au sein de l'IRSAMC, de l'UPS et de GdR nationaux ainsi que son implication forte dans l'offre de formation en chimie physique et chimie théorique à Toulouse et en région Sud-Ouest sont à souligner.



- **Points forts et opportunités :**

Le laboratoire est en position d'asseoir son leadership sur plusieurs domaines importants de la chimie quantique et de pouvoir diffuser de façon large les méthodes et codes originaux qu'il développe.

- **Points à améliorer et risques :**

La visibilité via le site web est à améliorer. La collaboration inter-équipes est à continuer et intensifier pour prendre avantage de la richesse et de la diversité des compétences du laboratoire. En particulier, la synergie entre applications frontières et méthodologie de pointe devrait être favorisée. Il faut continuer l'effort de financement externe, principalement pour le recrutement de post-doctorants. Bien qu'à la limite des missions du laboratoire, la relation avec le monde socio-économique et les pôles de compétitivité pourrait être améliorée. Il convient de renforcer encore la cohérence thématique dans certaines équipes et, dans la mesure du possible, de résoudre les problèmes de retard de carrière.

- **Recommandations au directeur de l'unité :**

- ✓ Faire fructifier la politique d'embauche récente et la continuer pour assurer le rayonnement d'équipes très performantes et en pointe ainsi que la bonne balance entre applications frontières et méthodologies innovantes.
- ✓ Continuer la politique de valorisation des recherches et des codes
- ✓ Continuer la restructuration de l'équipe D&F et si possible en resserrer encore la cohérence scientifique
- ✓ Favoriser encore le dialogue entre développements méthodologiques innovants menés dans GMO et applications frontières dans les autres groupes.

- **Données de production :**

(cf. [http://www.aeres-evaluation.fr/IMG/pdf/Criteres\\_Identification\\_Ensgts-Chercheurs.pdf](http://www.aeres-evaluation.fr/IMG/pdf/Criteres_Identification_Ensgts-Chercheurs.pdf))

A1 : Nombre de producteurs parmi les chercheurs et enseignants chercheurs référencés en N1 et N2 dans la colonne projet	27
A2 : Nombre de producteurs parmi les autres personnels référencés en N3, N4 et N5 dans la colonne projet	1
A3 : Taux de producteurs de l'unité [A1/ (N1+N2)]	96%
Nombre d'HDR soutenues	2
Nombre de thèses soutenues	10
Autre donnée pertinente pour le domaine (à préciser...)	



### 3 • Appréciations détaillées :

- Appréciation sur la qualité scientifique et la production :
  - Pertinence et originalité des recherches, qualité et impact des résultats :

Ce laboratoire fait partie des leaders mondiaux dans plusieurs domaines, que ce soit l'interaction de configurations en orbitales localisées et en méthode de Monte-Carlo Quantique, les effets relativistes, la conception et la mise en œuvre de méthodes adaptées à la structure, dynamique, spectroscopie, thermodynamique des agrégats atomiques et moléculaires ou les propriétés magnétiques des systèmes étendus. Il affiche une pondération bien équilibrée entre développements méthodologiques innovants et applications à des systèmes physico-chimiques importants, souvent en liaison directe avec des expériences. Toutes les compétences sont réunies dans ce laboratoire et de manière probablement unique en France pour une description résolument multi-échelle des processus : de l'IC au champ de force, de l'IC au Hamiltoniens modèles et aux propriétés magnétiques, de la dynamique quantique des noyaux aux méthodes d'espace des phases pour les grandes échelles de temps. Le laboratoire est parfaitement connu et identifié au niveau national et international par les thématiques qu'il développe et le savoir-faire qu'il a acquis sur nombre de sujets frontières en chimie théorique au sens large. La liste des résultats marquants obtenus pendant le plan quadriennal est remarquable et bien distribuée au sein des équipes.

- Quantité et qualité des publications, communications, thèses et autres productions :

A une ou deux exceptions près, tous les membres en activité sont publiants, incluant les 4 émérites. La production scientifique est globalement abondante --bien qu'inégalement répartie entre les équipes. Elle est remarquable alors qu'une partie importante de l'activité concerne du développement de méthodes plutôt que de l'utilisation d'outils. (~220 publications, soit 2,2/personne/an, ~60 conférences invitées et ~60 communications orales). Les publications sont de très bonne qualité et extrêmement variées par les sujets et le choix des revues, ce qui reflète le domaine de compétence étendue du laboratoire.

- Qualité et pérennité des relations contractuelles :

Aucune équipe n'entretenant des relations contractuelles avec des partenaires non-institutionnels, ce critère n'est pas actuellement applicable. Le comité recommande cependant que le laboratoire cherche à établir de tels rapports. Il apprécie la tentative de partenariat industriel qui est menée concernant le développement et la commercialisation d'un code QMC.

- Appréciation sur le rayonnement, l'attractivité, et l'intégration de l'unité de recherche dans son environnement :
  - Nombre et renommée des prix et distinctions octroyés aux membres de l'unité, y compris les invitations à des manifestations internationales :

Le nombre d'invitation à des conférences et séminaires internationaux est raisonnable mais inégalement réparti. De manière générale, le comité le juge en deçà de ce qu'il devrait être vu la qualité et l'originalité des travaux effectués.





- Capacité à recruter des chercheurs, post-doctorants ou étudiants de haut niveau, en particulier étrangers :

Le laboratoire a réussi à recruter un professeur, 2 CR CNRS et un IR développement logiciel pendant le contrat passé ce qui marque une politique de recrutement très volontaire et efficace. L'arrivée récente par mutation de 3 CR et un DR montre l'excellente attractivité. On peut cependant regretter le manque de stagiaires post-doctoraux qui reflète le nombre relativement faible de contrats et financements extérieurs.

- Capacité à obtenir des financements externes, à répondre ou susciter des appels d'offres, et à participer à l'activité des pôles de compétitivité :

Le laboratoire a participé ou participe à 3 projets ANR (dont une comme coordinateur) et reçoit quelques autres financements non-récurrents au travers de programmes internationaux type COST ou PICS ou nationaux type GdR. Il a répondu récemment à plusieurs appels d'offre ANR et est conscient de la nécessité de poursuivre et intensifier cet effort. Les liens thématiques avec les pôles de compétitivité régionaux ne sont pas évidents vu la spécificité « théorie » du laboratoire. Le comité suggère cependant que ces liens soient explorés. On peut suggérer par exemple l'aspect modélisation moléculaire ou biomoléculaire en liaison avec cancer/bio/santé. La collaboration entamée récemment par GMO avec l'École d'Ingénieur Purpan de Toulouse sur l'interaction de molécules herbicides avec des ions illustre les efforts possibles dans ce sens.

- Participation à des programmes internationaux ou nationaux, existence de collaborations lourdes avec des laboratoires étrangers:

Le laboratoire est fortement impliqué dans de nombreux programmes de collaboration internationaux (COST, PICS) ou nationaux (GdR) ou dans des réseaux de développement de code (DIRAC, DeMon, ...). Il a joué un rôle moteur dans la structuration de la recherche sur les agrégats (GdR « Agrégation, fragmentation, thermodynamique »), sur les matériaux magnétiques (GdR «magnétisme et Commutation Moléculaire»), sur l'interopérabilité des codes (COST D23). Il entretient des collaborations suivies avec plusieurs laboratoires étrangers, en particulier en Italie, en Allemagne ou en Angleterre, mais aucune que l'on pourrait qualifier de lourde.

- Valorisation des recherches, et relations socio-économiques ou culturelles :

Le laboratoire a intensifié récemment son effort pour valoriser les nombreux codes originaux qui sont développés en son sein, avec en particulier l'embauche d'un IR dévolu à cette tâche importante. Il s'agit de rendre ces codes accessibles et largement utilisés par la communauté des chimistes avec une politique de logiciels libres téléchargeables sur le site du laboratoire. Le comité encourage cette démarche. Il tient cependant à attirer l'attention des membres sur la protection de la propriété intellectuelle des logiciels développés, qui doit être mise en accord avec les recommandations des tutelles. Il estime par ailleurs que les enseignants-chercheurs ainsi que les chercheurs devraient s'attacher individuellement et collectivement à la promotion et à la valorisation de leurs travaux en ne se reposant pas exclusivement sur les compétences de l'ingénieur de recherche. Encore une fois, bien que les thématiques du laboratoire s'y prêtent difficilement, les relations avec le monde socio-économique ou culturel pourraient être étoffées. L'effort récent de valorisation du code QMC est à souligner.



- **Appréciation sur la stratégie, la gouvernance et la vie de l'unité:**

- **Pertinence de l'organisation de l'unité, qualité de la gouvernance et de la communication interne et externe :**

L'unité est bien gouvernée et organisée avec une communication qui semble limpide et une bonne synergie entre les équipes. Le conseil de laboratoire se réunit régulièrement et permet aux différentes catégories de s'exprimer. La politique scientifique est élaborée collectivement en conseil scientifique. Les personnels techniques et administratifs et les étudiants sont satisfaits de la gouvernance et de l'ambiance du laboratoire. L'intégration au sein de l'IRSAMC semble harmonieuse. Le site web est en cours d'amélioration.

- **Pertinence des initiatives visant à l'animation scientifique, à l'émergence, et à la prise de risques :**

L'animation scientifique locale est bien structurée, avec un séminaire hebdomadaire par des intervenants extérieurs, un séminaire mensuel IRSAMC et des journées annuelles organisées hors laboratoire. Les nombreux réseaux et collaborations où le laboratoire est impliqué sont favorables à l'animation et à l'émergence. Il faut encore une fois noter l'effort constant d'animer des GdR ou des projets COST et de penser la communauté au-delà des limites du laboratoire. De part l'originalité et la difficulté des sujets choisis dans chaque équipe, la prise de risque est constante.

- **Implication des membres de l'unité dans les activités d'enseignement et dans la structuration de la recherche en région :**

L'implication du laboratoire au niveau de l'enseignement est importante, avec la responsabilité de nombreuses filières à l'UPS. On soulignera aussi la direction de l'Ecole Doctorale qui est assumée par un DR CNRS. Au niveau régional, on notera la coordination du pôle sud-ouest du Réseau Français de Chimie Théorique, l'implication forte dans le Master Européen de Chimie Théorique, enfin le projet en cours de mettre en place le nœud CECAM Grand-Sud-Ouest, faisant partie des trois nœuds français ayant reçu l'aval et le soutien des organismes (CEA, CNRS).

- **Appréciation sur le projet :**

- **Existence, pertinence et faisabilité d'un projet scientifique à moyen ou long terme :**

Le projet scientifique est globalement clair, ambitieux et novateur. Il rentre parfaitement dans les compétences des équipes. Si les résultats attendus sont clairement valorisés, ils auront un impact important.

- **Existence et pertinence d'une politique d'affectation des moyens :**

Les moyens humains et matériels sont discutés collectivement au niveau de l'unité. Une politique de recrutement, active et équilibrée, a été menée et le laboratoire a su répondre de façon très positive aux aléas et rebondir, en particulier sur la nécessité de restructuration et de renforcement de l'équipe D&F ou le départ d'un élément moteur dans MAD.

- **Originalité et prise de risques :**

Le projet est bien équilibré entre d'une part des sujets novateurs à la limite des connaissances et la poursuite des lignes de recherche déjà entamées et d'autre part des applications frontières (états excités en milieu complexes, magnétisme, ions lourds et effets relativistes, PAH et agrégats d'eau...) et les développements méthodologiques de pointe qu'ils suscitent.



#### 4-1 • Analyse équipe par équipe et/ou par projet : GMO

**Intitulé de l'équipe :** Groupe Méthodes et Outils de la Chimie Quantique (GMO)

**Nom du responsable :** M. Stéfano EVANGELISTI

- Effectifs de l'équipe ou affectés au projet (sur la base du dossier déposé à l'AERES) :

	Dans le bilan	Dans le projet
N1 : Nombre d'enseignants-chercheurs (cf. Formulaire 2.1 du dossier de l'unité)	6	6
N2 : Nombre de chercheurs des EPST ou EPIC (cf. Formulaire 2.3 du dossier de l'unité)	3	4
N3 : Nombre d'autres enseignants-chercheurs et chercheurs (cf. Formulaire 2.2 et 2.4 du dossier de l'unité)		
N4 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs titulaires (cf. Formulaire 2.5 du dossier de l'unité)		
N5 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs non titulaires (cf. Formulaire 2.6 du dossier de l'unité)		
N6 : Nombre de doctorants (cf. Formulaire 2.7 du dossier de l'unité)	4	1
N7 : Nombre de personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	7	8

Par rapport au document écrit s'ajoute l'arrivée par mutation d'un DR CNRS

- **Appréciation sur la qualité scientifique et la production :**
  - **Pertinence et originalité des recherches, qualité et impact des résultats :**

Cette équipe est l'un des leaders mondiaux dans le domaine de l'interaction de configurations en orbitales localisées et en méthode de Monte-Carlo Quantique. Avec le recrutement récent d'un professeur et la prochaine incorporation d'un directeur de recherche CNRS, tous deux spécialistes de relativité, ce sera incontestablement le plus grand groupe national sur le sujet. Les apports récents de développements méthodologiques originaux rendent les méthodes beaucoup plus applicables et de fait renforcent l'impact sur la communauté, comme on peut le voir sur le nombre très important de collaborations nationales et internationales. Les méthodes développées représentent « l'état de l'art » pour les systèmes nécessitant un traitement multiconfigurationnel.



- **Quantité et qualité des publications, communications, thèses et autres productions :**

Le nombre et la qualité de la production scientifique sont tout à fait remarquables et ce d'autant plus qu'il s'agit d'un groupe de développeurs de méthodes plutôt que d'utilisateurs.

- **Qualité et pérennité des relations contractuelles :**

Cette équipe n'entretenant pas encore de relations contractuelles avec des partenaires non-institutionnels, ce critère n'est pas actuellement applicable. Le comité recommande cependant que l'équipe tente d'établir de tels rapports, comme la tentative de partenariat industriel concernant le développement et la commercialisation d'un code QMC.

- **Appréciation sur le rayonnement, l'attractivité, et l'intégration de l'équipe ou du projet dans son environnement :**

- **Nombre et renommée des prix et distinctions octroyés aux membres de l'équipe ou à ceux qui participent au projet, y compris les invitations à des manifestations internationales :**

Au vu du nombre de membres de l'équipe il apparaît que le nombre d'invitations à des manifestations internationales (-0,5/chercheur/an) ne reflète pas la qualité des recherches effectuées

- **Capacité à recruter des chercheurs, post-doctorants ou étudiants de haut niveau, en particulier étrangers :**

L'équipe a réussi à recruter un professeur sur le contrat passé et va incorporer prochainement un directeur de recherche en mutation ce qui montre son attractivité. On peut cependant regretter le manque de stagiaires post-doctoraux certainement lié à l'absence de contrats.

- **Capacité à obtenir des financements externes, à répondre ou susciter des appels d'offres, et à participer à l'activité des pôles de compétitivité :**

Les seuls financements, autres que récurrents, concernent des programmes internationaux type COST ou PICS. L'équipe a répondu récemment à l'appel d'offre ANR et doit poursuivre dans cette direction. De plus, une prise de contact avec les pôles de compétitivité locaux pourrait voir l'émergence de nouvelles collaborations contractuelles.

- **Participation à des programmes internationaux ou nationaux, existence de collaborations lourdes avec des équipes étrangères :**

L'équipe est fortement impliquée dans des programmes de collaboration internationaux (COST, PICS) ou dans des réseaux (DIRAC), mais ne dispose pas de collaborations « lourdes » en tant que telles. Les demandes de GDR et de projets rentrant dans l'appel FP7 pourraient permettre ce type de collaborations.

- **Valorisation des recherches, et relations socio-économiques ou culturelles :**

Un effort important de valorisation des logiciels développés a été conduit. Le comité tient d'ailleurs à attirer l'attention des membres du groupe sur la protection de la propriété intellectuelle des logiciels développés. Les enseignants-chercheurs ainsi que les chercheurs pourraient s'investir plus avant dans la promotion et la valorisation de leurs travaux en ne se reposant pas exclusivement sur les compétences de l'ingénieur de recherche. L'application des méthodes développées à des systèmes moléculaires pratiques pourrait, par exemple, être renforcée pour valoriser le travail.



- **Appréciation sur la stratégie, la gouvernance et la vie de l'équipe ou du projet :**

- **Pertinence de l'organisation, qualité de la gouvernance et de la communication interne et externe :**

L'équipe est organisée en différents sous-groupes de tailles variables, la partie MRCI étant plus importante que les autres. Chaque chercheur ou enseignant-chercheur possède sa thématique personnelle qu'il met à la disposition de l'équipe. La communication semble très directe et limpide.

- **Pertinence des initiatives visant à l'animation scientifique, à l'émergence, et à la prise de risques :**

Les nombreux programmes de collaboration offrent des possibilités d'échanges importants via les réunions, workshop et colloques. La plupart des sujets développés sont des grands défis de la chimie théorique et en tant que tels représentent des prises de risques importantes.

- **Implication des membres dans les activités d'enseignement et dans la structuration de la recherche en région :**

Le comité tient à souligner l'implication d'un directeur de recherche dans la direction de l'École Doctorale. L'équipe, en générale, est fortement engagée dans la promulgation, l'animation et la coordination des cours et des formations (Master Européen de Chimie Théorique et coordination du pôle sud-ouest du Réseau Français de Chimie Théorique, par exemple).

- **Appréciation sur le projet :**

- **Existence, pertinence et faisabilité d'un projet scientifique à moyen ou long terme :**

Le projet est très clair et ambitieux. Il rentre parfaitement dans les compétences de l'équipe tout en étant novateur (QMC, MR-CI-PT2). Les résultats attendus devront être clairement valorisés car leur impact sera conséquent.

- **Existence et pertinence d'une politique d'affectation des moyens :**

Les moyens humains et matériels sont discutés directement au niveau de l'unité et non de l'équipe. Il faudra cependant veiller à bien identifier les tâches de chaque membre de l'équipe plutôt que de les regrouper dans des sous-groupes de tailles très inégales.

- **Originalité et prise de risques :**

Le projet est équitablement réparti en poursuite de certaines activités (méthode TD-DFT/EOM-CC par exemple) et en création de nouvelles directions de recherche (MR-CI-PT2 par exemple). La prise de risques est grande mais maîtrisée par les compétences.

- **Conclusion :**

- **Avis :**

Très bonne équipe de développeurs, proposant des méthodes originales et uniques. Le comité tient à apporter son soutien à ces activités de développements qui sont réellement le cœur du métier de Chimiste Théoricien.



- Points forts et opportunités :

Le développement de logiciels aux propriétés uniques (QMC, MRCl, ...) est l'un des points phares.

- Points à améliorer et risques :

Le travail de valorisation (communication, distribution, application, collaboration) doit être poursuivi. Attention aux problèmes de propriété intellectuelle.

- Recommandations :

Poursuivre le travail comme cela a été fait lors de ce contrat, en mettant plus l'accent sur les applications pratiques plutôt que spéculatives, en particulier en contact avec l'équipe DF.

## 4-2 • Analyse équipe par équipe et/ou par projet : DF

**Intitulé de l'équipe :** Chimie des éléments d & f (DF)

**Nom du responsable :** Mme Fabienne ALARY

- Effectifs de l'équipe ou affectés au projet (sur la base du dossier déposé à l'AERES) :

	Dans le bilan	Dans le projet
N1 : Nombre d'enseignants-chercheurs (cf. Formulaire 2.1 du dossier de l'unité)	4	3
N2 : Nombre de chercheurs des EPST ou EPIC (cf. Formulaire 2.3 du dossier de l'unité)	3	4
N3 : Nombre d'autres enseignants-chercheurs et chercheurs (cf. Formulaire 2.2 et 2.4 du dossier de l'unité)		
N4 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs titulaires (cf. Formulaire 2.5 du dossier de l'unité)		
N5 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs non titulaires (cf. Formulaire 2.6 du dossier de l'unité)		
N6 : Nombre de doctorants (cf. Formulaire 2.7 du dossier de l'unité)	1	1
N7 : Nombre de personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	4	4

Un MdC est en délégation et n'est plus comptabilisée dans le projet.



- **Appréciation sur la qualité scientifique et la production :**
  - **Pertinence et originalité des recherches, qualité et impact des résultats :**

Il s'agit d'un ensemble de recherches très originales, dont le point fort est l'exploration de processus photochimiques et photophysiques. Les systèmes considérés sont de grand intérêt pour des raisons à la fois fondamentales et technologiques, et sont aux limites des outils théoriques et numériques disponibles aujourd'hui.

- **Quantité et qualité des publications, communications, thèses et autres productions :**

Les résultats des recherches ont été publiés dans des journaux de très haut niveau et auront un impact important dans les domaines de la chimie des complexes, des composés biologiques photoactifs et de la chimie des métaux très lourds. Quantitativement, la production des différents membres est assez inégale.

- **Qualité et pérennité des relations contractuelles :**

Critère non applicable, pas de relations contractuelles.

- **Appréciation sur le rayonnement, l'attractivité, et l'intégration de l'équipe ou du projet dans son environnement :**
  - **Nombre et renommée des prix et distinctions octroyés aux membres de l'équipe ou à ceux qui participent au projet, y compris les invitations à des manifestations internationales :**

Certains membres de l'équipe ont été invités plusieurs fois à tenir des conférences et des séminaires internationaux, mais l'effort de visibilité doit être nettement intensifié.

- **Capacité à recruter des chercheurs, post-doctorants ou étudiants de haut niveau, en particulier étrangers :**

L'équipe a pu recruter un jeune membre très actif qui s'inscrit pleinement dans les principales lignes de recherche poursuivies.

- **Capacité à obtenir des financements externes, à répondre ou susciter des appels d'offres, et à participer à l'activité des pôles de compétitivité :**

Il y a eu peu de financements externes, bien que maintes recherches, dont quelques unes conduites en collaboration avec des expérimentateurs, pourraient avoir des retombées technologiques. L'équipe n'a aucune participation aux pôles de compétitivité, mais a répondu à un certain nombre d'appels d'offre. Le comité encourage l'équipe à poursuivre dans cette démarche de demandes en espérant qu'elles soient fructueuses. Compte tenu de la qualité des recherches, elle devrait par exemple pouvoir déposer avec succès une demande d'ANR ou de projets européens permettant de formaliser les relations avec l'Imperial College de Londres et le MPI de Göttingen, via des postdocs ou des thèses.



- Participation à des programmes internationaux ou nationaux, existence de collaborations lourdes avec des équipes étrangères :

Les collaborations nationales et internationales sont très actives, mais peu structurées sous forme de réseaux ou de collaborations lourdes.

- Valorisation des recherches, et relations socio-économiques ou culturelles :

Les résultats des recherches devraient être mieux valorisés par une participation accrue à des conférences nationales et internationales.

- Appréciation sur la stratégie, la gouvernance et la vie de l'équipe ou du projet :

- Pertinence de l'organisation, qualité de la gouvernance et de la communication interne et externe :

L'équipe semble fonctionner efficacement, par exemple avec une intégration rapide du nouveau CR dans le cœur de ses activités (chimie et photochimie des complexes). On peut noter un certain manque de cohérence dans l'ensemble des lignes de recherche, sans que cela ne semble engendrer de conséquence négative au niveau de la gouvernance ou de l'organisation.

- Pertinence des initiatives visant à l'animation scientifique, à l'émergence, et à la prise de risques :

Certains sujets explorés sont tout à fait innovants et les résultats peu prévisibles ; ils comportent donc des risques en termes de difficultés de recherche et de publications. Par rapport à l'importance et à l'originalité des recherches, les efforts d'animation et d'émergence, par exemple au travers de réseaux, pourraient être plus efficaces.

- Implication des membres dans les activités d'enseignement et dans la structuration de la recherche en région :

Les activités d'enseignement menées au sein de l'UPS sont très importantes, aussi bien au niveau de cours universitaires que d'organisation de la formation. La structuration régionale des recherches n'est pas évidente.

- Appréciation sur le projet :

- Existence, pertinence et faisabilité d'un projet scientifique à moyen ou long terme :

Le projet est très clairement énoncé, il rentre bien dans les compétences de l'équipe, et des résultats, bien que peu prévisibles, pourront être obtenus avec les méthodes et les moyens techniques envisagés.

- Existence et pertinence d'une politique d'affectation des moyens :

Il faut remarquer que la politique des ressources est discutée au niveau du laboratoire et que les moyens de calcul sont communs. Ceci dit, cette équipe a pu réagir très positivement à la perte de plusieurs membres dans les années passées. Un nouveau CR qui rejoindra l'équipe apportera de nouvelles compétences de chimie des complexes métalliques. Une ligne de recherche (éléments très lourds) sera graduellement abandonnée lors de la retraite d'un des membres. Le renforcement des activités centrales de l'équipe est une politique louable.





- Originalité et prise de risques :

Le projet est tout à fait original, avec un mélange de sujets à fort risque et d'autres qui poursuivent des lignes de recherche déjà entamées pendant les dernières années, qui se présentent aux limites des connaissances et des outils théoriques disponibles.

• Conclusion :

- Avis :

Bilan et projet très appréciés.

- Points forts et opportunités :

Compétences et production scientifique de très haut niveau.

- Points à améliorer et risques :

Chercher une plus grande collaboration avec agences et entreprises qui pourraient être intéressées au développement technologique des résultats obtenus.

Chercher une plus grande synergie avec l'équipe «Méthodes et Outils», pour exploiter leur expertise sur des applications frontières et lui offrir des feedbacks sur l'efficacité des techniques qu'ils ont développées.

- Recommandations :

Veiller à inciter tous les membres de l'équipe à publier leurs travaux. Formaliser si possibles les relations internationales existantes. La cohérence scientifique pourrait être encore renforcée.



### 4-3 • Analyse équipe par équipe et/ou par projet : SEM

Intitulé de l'équipe : Systèmes étendus et magnétisme (SEM)

Nom du responsable : Mme Nathalie GUIHERY

- Effectifs de l'équipe ou affectés au projet (sur la base du dossier déposé à l'AERES) :

	Dans le bilan	Dans le projet
N1 : Nombre d'enseignants-chercheurs (cf. Formulaire 2.1 du dossier de l'unité)	3	3
N2 : Nombre de chercheurs des EPST ou EPIC (cf. Formulaire 2.3 du dossier de l'unité)	1	2
N3 : Nombre d'autres enseignants-chercheurs et chercheurs (cf. Formulaire 2.2 et 2.4 du dossier de l'unité)		
N4 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs titulaires (cf. Formulaire 2.5 du dossier de l'unité)		
N5 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs non titulaires (cf. Formulaire 2.6 du dossier de l'unité)		
N6 : Nombre de doctorants (cf. Formulaire 2.7 du dossier de l'unité)	5	3
N7 : Nombre de personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	4

Par rapport au projet écrit, il faut noter l'intégration d'un CR-CNRS

- **Appréciation sur la qualité scientifique et la production :**
  - Pertinence et originalité des recherches, qualité et impact des résultats :

Recherches très originales couvrant un large spectre allant de l'extraction de Hamiltonien à la caractérisation des propriétés magnétiques, en passant par le traitement de la corrélation électronique. Les études théoriques s'intègrent souvent dans une approche multidisciplinaire incluant des groupes d'expérimentateurs locaux ou à l'étranger.

- **Quantité et qualité des publications, communications, thèses et autres productions :**

Les résultats des recherches ont été publiés dans les meilleurs journaux de la discipline dont le JACS et PRL. 4 thèses ont été présentées dans le précédent quadriennal. De nombreuses communications ont été présentées.



- Qualité et pérennité des relations contractuelles :

Critère non applicable, pas de relations contractuelles.

- Appréciation sur le rayonnement, l'attractivité, et l'intégration de l'équipe ou du projet dans son environnement :

- Nombre et renommée des prix et distinctions octroyés aux membres de l'équipe ou à ceux qui participent au projet, y compris les invitations à des manifestations internationales :

Les membres de l'équipe ont été invités de façon conséquente pour donner des conférences ainsi que des formations à l'étranger.

- Capacité à recruter des chercheurs, post-doctorants ou étudiants de haut niveau, en particulier étrangers :

L'équipe a recruté un grand nombre de doctorants et a encadré un grand nombre de stages de master, ce qui démontre son attractivité et son dynamisme.

- Capacité à obtenir des financements externes, à répondre ou susciter des appels d'offres, et à participer à l'activité des pôles de compétitivité :

L'équipe a répondu à un grand nombre d'appels à projet. En particulier, elle a obtenu une ANR dont elle est coordinatrice.

- Participation à des programmes internationaux ou nationaux, existence de collaborations lourdes avec des équipes étrangères :

L'équipe a mis sur pieds un grand nombre de collaborations fructueuses, tant au niveau national qu'à l'échelle internationale. Certaines de ces collaborations sont simplement bilatérales alors que d'autres sont à la base de réseaux. Citons ainsi les COST, PICS, GDR et ANR.

- Valorisation des recherches, et relations socio-économiques ou culturelles :

Les résultats des recherches sont valorisés par une participation active aux conférences nationales et internationales. Toutefois, la valorisation pourrait être accrue en participant à l'activité des pôles de compétitivités locaux. A noter également la participation de l'équipe à des activités de présentation des études supérieures, un point de départ à la valorisation culturelle.

- Appréciation sur la stratégie, la gouvernance et la vie de l'équipe ou du projet :

- Pertinence de l'organisation, qualité de la gouvernance et de la communication interne et externe :

L'équipe est bien structurée et les expertises des membres sont complémentaires. A remarquer la collaboration étroite et fructueuse avec l'équipe méthodologie (GMO) sur le sujet commun de la corrélation électronique et son application importante aux systèmes magnétiques. L'excellente présentation du bilan et du projet par la responsable de l'équipe témoigne aussi d'une excellente communication interne et externe.



- Pertinence des initiatives visant à l'animation scientifique, à l'émergence, et à la prise de risques :

Des nouveaux projets voient continuellement le jour - généralement assortis de collaborations - dont certains sont plus risqués que d'autres. Les collaborations avec les expérimentateurs sont autant des challenges que stimulantes vu la complexité des phénomènes physico-chimiques sous-jacents. L'arrivée récente d'un CR CNRS amène une compétence nouvelle et complémentaire sur les atomes lourds.

- Implication des membres dans les activités d'enseignement et dans la structuration de la recherche en région :

Les membres de l'équipe sont très impliqués dans l'enseignement et la formation. 4 des 5 permanents sont E-C. L'équipe fait partie du bureau d'un GDR et pilote une ANR.

- Appréciation sur le projet :

- Existence, pertinence et faisabilité d'un projet scientifique à moyen ou long terme :

Le projet témoigne d'une vraie vision pour la recherche. Il est en adéquation avec les compétences de l'équipe et en phase avec les développements les plus récents dans le domaine.

- Existence et pertinence d'une politique d'affectation des moyens :

Les besoins futurs ont été clairement identifiés et consistent en le recrutement d'un CR CNRS sur la thématique des calculs DFT périodiques, une compétence nouvelle et complémentaire à celles déjà présentes dans l'équipe.

- Originalité et prise de risques :

Un souci particulier est porté à la construction de Hamiltoniens modèles originaux et, pour cela, à l'utilisation des développements méthodologiques nouveaux mis au point dans l'équipe GMO. Le renouvellement des projets est constant et sur des systèmes souvent difficiles.

- Conclusion :

- Avis :

L'équipe SEM a présenté un rapport et un projet de recherches de très grande qualité, très convaincant en termes de réalisations et démontrant une vraie vision pour la recherche et la formation. Dans de nombreux cas, les études théoriques s'intègrent dans une approche multidisciplinaire incluant des groupes d'expérimentateurs locaux ou à l'étranger. Le comité tient à apporter son soutien total à cette jeune équipe (équipe qui se rajeunit) qui développe des méthodes quantiques performantes ayant un grand potentiel à la valorisation.

- Points forts et opportunités :

Originalité des recherches, complémentarité et dynamisme de l'équipe, excellent rayonnement extérieur, vraie vision pour la recherche et la formation.

- Points à améliorer et risques :

Poursuivre la recherche de collaborations avec l'industrie et l'Union Européenne et ainsi, le travail de valorisation.



- **Recommandations :**

Le recrutement d'un CR CNRS sur la thématique des calculs DFT périodiques, lequel amènera une compétence nouvelle, complémentaire à celles déjà présentes dans l'équipe et donnera encore plus de potentiel pour collaborer avec les pôles de compétitivité locaux.

#### 4-4 • Analyse équipe par équipe et/ou par projet : MAD

**Intitulé de l'équipe :** Modélisation, Agrégats, Dynamique (MAD)

**Nom du responsable :** M. F. SPIEGELMAN

- Effectifs de l'équipe ou affectés au projet (sur la base du dossier déposé à l'AERES) :

	Dans le bilan	Dans le projet
N1 : Nombre d'enseignants-chercheurs (cf. Formulaire 2.1 du dossier de l'unité)	1	1
N2 : Nombre de chercheurs des EPST ou EPIC (cf. Formulaire 2.3 du dossier de l'unité)	4	5
N3 : Nombre d'autres enseignants-chercheurs et chercheurs (cf. Formulaire 2.2 et 2.4 du dossier de l'unité)		
N4 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs titulaires (cf. Formulaire 2.5 du dossier de l'unité)		
N5 : Nombre d'ingénieurs, techniciens et de personnels administratifs non titulaires (cf. Formulaire 2.6 du dossier de l'unité)		
N6 : Nombre de doctorants (cf. Formulaire 2.7 du dossier de l'unité)	4	
N7 : Nombre de personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	3

- **Appréciation sur la qualité scientifique et la production :**

- **Pertinence et originalité des recherches, qualité et impact des résultats :**

L'équipe MAD réalise des études très complètes, sur des problématiques généralement en lien avec des observations expérimentales, permettant d'aller de la structure électronique obtenue par des approches ab initio, jusqu'à l'observable expérimentale, en mettant en oeuvre des modèles originaux et variés, adaptés aux systèmes étudiés. Ces développements permettent en particulier d'étudier la dynamique de systèmes moléculaires complexes, sur de très grandes échelles de temps. Les résultats obtenus sont à la pointe du savoir actuel et constitue une réelle avancée en ce qui concerne les PAH. Cette équipe possède un savoir unique quant à la conception et la mise en oeuvre de méthodes (de l'IC au champ de force, des dynamiques quantiques de noyau aux méthodes MC classiques) adaptées à la description de chacun des systèmes étudiés.



- **Quantité et qualité des publications, communications, thèses et autres productions :**

Les publications sont très nombreuses, de très bonne qualité et extrêmement variées, ce qui révèle la créativité de l'équipe. Ces travaux ont fait l'objet de plusieurs communications dans des conférences internationales et nationales. L'expertise de l'équipe s'est également concrétisée dans la rédaction de chapitres de livres.

- **Qualité et pérennité des relations contractuelles :**

Critère non pertinent pour cette équipe.

- **Appréciation sur le rayonnement, l'attractivité, et l'intégration de l'équipe ou du projet dans son environnement :**

- **Nombre et renommée des prix et distinctions octroyés aux membres de l'équipe ou à ceux qui participent au projet, y compris les invitations à des manifestations internationales :**

L'équipe MAD a été invitée 24 fois dans des congrès, soit en moyenne une fois par an et par chercheur.

- **Capacité à recruter des chercheurs, post-doctorants ou étudiants de haut niveau, en particulier étrangers :**

L'équipe a recruté d'excellents chercheurs, sur une thématique nouvelle (PAH) et plusieurs doctorants dont un issu de l'ENS. L'accueil de 2 nouveaux jeunes chercheurs démontre indéniablement la forte attractivité de l'équipe.

- **Capacité à obtenir des financements externes, à répondre ou susciter des appels d'offres, et à participer à l'activité des pôles de compétitivité :**

L'équipe a fait plusieurs demandes de financement auprès de l'ANR, en particulier des moyens humains, indispensables à la vitalité de la recherche. Ces demandes se sont concrétisées par la participation à 2 projets ANR en collaboration avec le LCAR. L'équipe s'inscrit actuellement dans une demande de création d'un réseau européen sur les PAH, ce qui renforce de manière très cohérente la dynamique impulsée par le recrutement de deux CR.

- **Participation à des programmes internationaux ou nationaux, existence de collaborations lourdes avec des équipes étrangères :**

L'équipe a un rôle moteur dans la structuration de la recherche sur les agrégats après la création et par la participation au pilotage du GDR agrégat (GDR 2758). Elle collabore de manière active au développement du code DeMon pour l'activité DFTB avec des équipes allemandes de manière non formalisée.

- **Valorisation des recherches, et relations socio-économiques ou culturelles :**

La valorisation des recherches se fait par la participation à des séminaires, des écoles et des GDR qui permettent de diffuser les connaissances à la communauté scientifique. Il n'existe pas de relations avec des acteurs socio-économiques non institutionnels. Ce type de relation ne semble pas pertinent de par la nature des recherches menées dans l'équipe.



- **Appréciation sur la stratégie, la gouvernance et la vie de l'équipe ou du projet :**

- **Pertinence de l'organisation, qualité de la gouvernance et de la communication interne et externe :**

L'équipe est bien organisée, avec un leadership bien accepté, ce qui lui donne solidité et efficacité. Les thématiques sont bien définies et le choix des priorités scientifiques clairement affiché. Les moyens mis en œuvre correspondent parfaitement à ces choix.

- **Pertinence des initiatives visant à l'animation scientifique, à l'émergence, et à la prise de risques :**

L'équipe joue un rôle moteur essentiel dans la structuration et l'animation de la communauté « Agrégats » en France, en particulier avec l'animation du GdR « Agrégation, fragmentation, thermodynamique ». La volonté constante d'animation au travers d'initiative type GdR est une spécificité de l'équipe et du laboratoire qui est extrêmement louable et essentielle pour le fonctionnement collectif et la compétitivité du CNRS.

- **Implication des membres dans les activités d'enseignement et dans la structuration de la recherche en région :**

L'équipe participe à la formation d'étudiants et intervient au niveau des enseignements de chimie. Elle intervient par ses collaborations dans la vie scientifique locale, en particulier par ses relations privilégiées avec les équipes d'autres laboratoires au sein de l'IRSAMC, et par des collaborations avec les laboratoires toulousains.

- **Appréciation sur le projet :**

- **Existence, pertinence et faisabilité d'un projet scientifique à moyen ou long terme :**

Le projet scientifique est ambitieux, de très bonne qualité

- **Existence et pertinence d'une politique d'affectation des moyens :**

Le projet utilise pleinement les compétences des différents membres de l'équipe, dans la continuité de leurs savoir-faire respectifs. Il existe une réelle synergie sur la thématique des PAH, en interne, avec l'équipe DF et avec des équipes extérieures au laboratoire. Cette thématique fait l'objet d'une demande de réseau européen. Les moyens affectés sont en adéquation avec l'ensemble du projet, et on peut espérer qu'une ou plusieurs thèses seront affectées à ce projet.

- **Originalité et prise de risques :**

Les problèmes choisis tels que les agrégats moléculaires d'eau ou de PAH sont des sujets frontières qui réclament des outils théoriques de pointe que l'équipe est à même de contribuer à développer.

- **Conclusion :**

- **Avis :**

L'équipe MAD mène des recherches originales autour d'une problématique de modélisation visant à décrire des systèmes moléculaires de la structure à la dynamique dans une démarche de compréhension/interprétation des phénomènes observés.



- **Points forts et opportunités :**

L'arrivée de 2 jeunes chercheurs au sein de cette équipe, parallèlement au recrutement d'un CR dans l'équipe DF, offre une opportunité unique de progresser dans la connaissance des PAH. Cette thématique devrait être renforcée par une ANR en collaboration expérience-théorie afin d'obtenir un financement de thèse ou un post-doctorant. La thématique sur les agrégats de gaz rare pourrait faire l'objet d'un renouvellement orienté vers la dynamique et la stabilité de systèmes plus fortement chargés.

- **Recommandations :**

Cette équipe très dynamique doit être soutenue dans sa démarche.





### LCPO - Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques UMR 5626

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+

Nom de l'équipe : Méthodes et outils de la Chimie Quantique (GMO)

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+	B	A	A

Nom de l'équipe : Chimie des éléments d & f (DF)

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+	B	A	A

Nom de l'équipe : Systèmes étendus et magnétisme (SEM)

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+



Nom de l'équipe : Modélisation, Agrégats, Dynamique (MAD)

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+

Toulouse, le 9 mars 2010

Affaire suivie par  
Ghislaine MACONE-FOURIO  
téléphone  
05 61 55 66 05  
télécopie  
05 61 55 69 53  
courriel  
seccs@adm.ups-tlse.fr  
GF/GMF/FW

Le Président

au

Président du comité d'experts de l'AERES

**Objet : Observations de portée générale** sur le rapport d'évaluation  
de l'unité «**Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques**» – LCPQ – UMR 5626  
portée par **Fernand SPIEGELMAN** (Directeur) et **Thierry LEININGER** (Directeur adjoint  
dans le projet)

Le LCPQ considère comme très pertinent le rapport du comité d'experts de l'AERES. Il a bien analysé le coeur d'activité du laboratoire qui porte sur les développements en théorie, méthodologie et outils de calcul et de simulation ainsi que sur des applications frontières en chimie et physique moléculaire, s'exerçant dans un tissu de collaborations régionales, nationales et internationales. Le LCPQ considère que le comité a également bien perçu les efforts de structuration des équipes entrepris dans la période 2007-2009, ainsi que l'implication de ces équipes pour animer recherche et formation au plan local, national et international. Le LCPQ estime fondées les suggestions émises par le comité et le remercie pour son travail.

La seule observation que le LCPQ souhaite faire concerne le positionnement du laboratoire par rapport aux pôles de compétitivité : tout en soulignant la spécificité « amont » du LCPQ, le comité conseille au laboratoire de faire des efforts pour se rapprocher des pôles de compétitivité régionaux. Le LCPQ tiendra compte de cette suggestion, mais observe cependant que les trois pôles de compétitivité labellisés en Midi-Pyrénées sont « Aéronautique, Espace et Systèmes Embarqués – Aerospace Valley », « Cancer-Bio-Santé » et « AgriMiP Innovation ». Un rapprochement avec le premier pôle semble difficile, en dehors de la thématique astrochimie, tout de même très marginale par rapport aux objectifs essentiellement technologiques du pôle « Aerospace Valley ». Des possibilités de collaborations pourraient être étudiées pour le pôle Cancer-Bio-Santé dans le cadre de l'activité « photoréactivité de complexes avec des biomolécules » développée dans l'équipe Chimie de éléments DF, même si les applications menées au LCPQ portent surtout sur l'élucidation des mécanismes photochimiques fondamentaux et s'inscrivent donc là aussi dans une activité de recherche amont.

Le Président de l'Université Paul Sabatier  
Par Délégation  
Le Secrétaire Général

Jean-Pierre ROUGÉ

Gilles FOURTANIER

