

HCERES

Haut conseil de l'évaluation de la recherche
et de l'enseignement supérieur

Entités de recherche

Évaluation du HCERES sur l'unité :

Laboratoire Chimie et Physique Quantiques

LCPO

sous tutelle des

établissements et organismes :

Université Toulouse 3 - Paul Sabatier - UPS

Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS

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 de l'unité :	Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques
Acronyme de l'unité :	LCPO
Label demandé :	UMR CNRS-Université Paul Sabatier, Toulouse 3
N° actuel :	UMR 5626
Nom du directeur (en 2014-2015) :	M. Fernand SPIEGELMAN
Nom du porteur de projet (2016-2020) :	M. Thierry LEININGER

Membres du comité d'experts

Président : M. Xavier ASSFELD, Université de Lorraine (représentant du CoNRS)

Experts : M. Janos ÁNGYAN, CNRS

M^{me} Isabelle DEMACHY, Université Paris-Sud (représentante du CNU)

Mme Claudine NOGUERA, CNRS

M. Olivier PARISEL, Université Pierre et Marie Curie

Déléguée scientifique représentant du HCERES :

M^{me} Nelly LACOME

Représentants des établissements et organismes tutelles de l'unité :

M. Daniel BORGIS, CNRS

M. Michel CAFFAREL (Directeur de l'ED n°482 « Sciences de la Matière » - SDM)

M. François DEMANGEOT, Université Paul Sabatier -Toulouse 3

M^{me} Virginie MADHI, CNRS Délégation régionale

M^{me} Claire-Marie PRADIER, CNRS

M. Alexis VALENTIN, Université Paul Sabatier - Toulouse 3

1 • Introduction

Historique et localisation géographique de l'unité

Le laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPO) existe depuis janvier 2007 et est situé dans le bâtiment 3R1 de l'Université de Toulouse 3. Il est issu du Laboratoire de Physique Quantique (LPQ) créé en 1974 qui s'est scindé en plusieurs UMR au fur et à mesure que les tailles critiques étaient atteintes. Les différentes unités issues du LPQ sont rassemblées dans la fédération de recherche 2568, « Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes ». Le LCPO est actuellement l'une des plus imposantes unités de Chimie et Physique théoriques en France. Ses réalisations portent sur des systèmes allant de l'électron aux macromolécules en passant par les agrégats et les aimants moléculaires.

Équipe de direction

L'unité est dirigée depuis sa création en 2007 par M. Fernand SPIEGELMAN. Durant le dernier mandat M. Thierry LEININGER assurait la direction adjointe : il porte le projet avec M^{me} Nathalie GUIHÉRY pour assurer la tâche de directrice adjointe. L'unité est divisée en quatre équipes animées par M^{mes} Fabienne ALARY et Nathalie GUIHÉRY et par MM. Trond SAUE et Fernand SPIEGELMAN.

Nomenclature AERES

Chimie ST4

Effectifs de l'unité

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	11	12
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	14	14
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	3	4
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	2	2
N5 : Autres chercheurs (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	2
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)	1	1
TOTAL N1 à N6	34	35

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
Doctorants	12	
Thèses soutenues	18,5	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	8	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	16	16

2 • Appréciation sur l'unité

Avis global sur l'unité

Le LCPO est une unité très dynamique possédant une production scientifique exceptionnelle dans les journaux internationaux correspondant aux spécialités de ses différents membres. L'organisation en quatre équipes permet la réalisation de projets ambitieux souvent soutenus par des financements issus d'appels d'offre compétitifs. Les interactions entre équipes indiquent la bonne cohésion de l'Unité (le nombre de publications inter-équipe représente environ 10 % de la production totale). L'unité est très bien intégrée dans son environnement local (Fédération IRSAMC, Labex, Idex), régional (collaborations avec d'autres laboratoires et contacts avec des entreprises), national (nombreux contrats ANR, gestion de GDR) et international (collaborations, réseaux, visites et invitations). Elle est aussi fortement impliquée dans la formation par la recherche aux niveaux pré-doctoral, doctoral et post-doctoral ainsi que dans l'insertion professionnelle de ses étudiants. Tous les indicateurs sont favorables pour que le prochain contrat quinquennal soit un franc succès.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité compte une trentaine de chercheurs et d'enseignants-chercheurs ce qui en fait une des plus importantes unités de théorie en France. La synergie due à la proximité disciplinaire lui permet de s'atteler à des problèmes allant du très fondamental au plus appliqué. Les développements méthodologiques représentent une part très importante de l'activité. La participation au Labex NEXT et l'émergence à l'Idex sont des opportunités considérables pour la stabilité de l'unité. Ces différents facteurs lui permettent de présenter une production exceptionnelle tant par la qualité que par la prodigalité.

L'unité possède une attractivité aussi bien internationale (nombreuses collaborations, recrutements) que locale (nombreux stagiaires de M2 et doctorants) exceptionnelle. Son rayonnement s'étend bien au-delà des frontières de l'hexagone.

Son implication dans la vulgarisation et la diffusion auprès du grand public des progrès scientifiques est très bonne. Les contacts avec diverses industries ou sociétés devraient, à terme, générer des liens plus étroits et plus fructueux.

Son organisation collégiale et souple est parfaitement adaptée au fonctionnement d'un laboratoire de Chimie théorique où chaque membre doit être facilement identifié à un axe de recherche et doit pouvoir évoluer dans une structure favorisant les interactions.

Les membres de l'unité sont fortement impliqués dans la formation par la recherche et attachent une attention particulière au devenir des docteurs formés. Les actions entreprises et les responsabilités occupées sont exceptionnelles tant pour leur pertinence que pour leur diversité.

L'unité présente un projet ambitieux et novateur qui reste néanmoins réaliste et réalisable au vu des compétences et des capacités des acteurs. Ce projet allie des aspects très fondamentaux à des applications à fort

potentiel d'impact sociétal. Les qualités exceptionnelles de l'unité sont un gage de réussite indiscutable pour le prochain contrat.

Points faibles et risques liés au contexte

L'activité scientifique étant principalement dédiée au développement méthodologique fondamental, le nombre de contrats industriels ou européens est faible. Le nombre de chercheurs post-doctorants est par conséquent réduit. Les ambitions affichées d'approfondir les relations universités/entreprises et de rechercher des partenariats pertinents devraient, à terme, porter leurs fruits.

D'un point de vue organisationnel, l'instabilité du pôle de gestion induit des surcharges de travail pour les chercheurs et les enseignants-chercheurs. La publication récente d'un poste CNRS "NOEMI d'hiver" devrait permettre de résoudre ce problème.

Afin d'améliorer sa présentation vers l'extérieur, l'unité devrait se doter d'un site web à la hauteur de ses réalisations.

Trop peu de membres sont titulaires d'une habilitation à diriger les recherches.

Le Comité note les inquiétudes exprimées, sur l'ensemble de l'unité, quant à l'évolution du financement du Master Erasmus Mundus TCCM et du risque, à terme, qu'il ne soit plus financé par les tutelles. Ce point serait dommageable à l'équipe et à l'unité car ce master constitue un important vivier de qualité d'étudiants M2 ou doctorants.

Le comité d'experts note, et comprend, la difficulté à développer des interactions sociétales ou économiques fortes. Il salue cependant les efforts réalisés en la matière et en particulier les liens établis avec les constructeurs informatiques.

Recommandations

Tous les indicateurs montrent clairement que les conditions sont réunies pour favoriser la réalisation de projets scientifiques d'importance. L'unité doit restée attentive aux diverses opportunités s'offrant à elle (Labex, Idex, entreprises, ...) et continuer à exercer ses activités de recherche et de formation au plus haut niveau international.

3 • Appréciations détaillées

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Avec 262 articles scientifiques dans des revues internationales spécialisées ou des revues plus générales (Chemical Reviews), sur la période d'évaluation, l'unité affiche une productivité exceptionnelle. Durant la période d'évaluation plusieurs réalisations constituent des faits marquants touchant aussi bien la physique fondamentale (dipôle électronique, violation de la parité) que la chimie théorique appliquée aux mécanismes de relaxation des états électroniques excités, aux systèmes magnétiques ou à l'astrochimie. Ils constituent de véritables avancées scientifiques saluées par la communauté internationale. Les publications réalisées en partenariat avec des équipes internationales représentent une grande part de la production. Le point fort et fondamental commun à toutes les activités est certainement le développement de méthodes ou de méthodologies innovantes et originales.

Appréciation synthétique sur ce critère

La qualité et l'originalité des travaux réalisés sont indéniables, qui se situent au meilleur niveau mondial. L'unité développe sur tous les plans de recherche des travaux d'une qualité exceptionnelle.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Les conférences internationales invitées (approximativement 100) montrent la renommée internationale de l'unité. Les membres de l'unité organisent de nombreuses écoles thématiques et de nombreux ateliers de par leur activité de direction de GDR ou du nœud CECAM-GSO (un des 3 nœuds français). Les chercheurs et enseignants-chercheurs recrutés, issus de nos frontières ou d'au-delà, sont aussi un bon indicateur de la notoriété et de l'attractivité de l'unité. L'activité contractuelle, résultant des succès aux appels d'offre très compétitifs (ANR, ERC, Labex, Idex) et dans lesquels l'unité est très souvent porteuse du projet, atteste de son dynamisme. Enfin les membres de l'unité exercent une activité d'expertise essentielle à la communauté nationale (CoNRS, CNU, ANR, AERES) et internationale (ECOS-SUD, COST, ...).

Appréciation synthétique sur ce critère

Au vu des recrutements réalisés, des nombreuses conférences invitées à l'étranger et du nombre conséquent d'étudiants désireux d'intégrer l'unité, force est de constater le caractère exceptionnel de l'attractivité de l'unité. Son rayonnement national et international va de paire avec son attractivité.

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

L'unité se distingue par la diffusion de logiciels de chimie quantique. Le choix d'insérer leurs développements dans des logiciels déjà bien établis dans la communauté est particulièrement judicieux. Le caractère très fondamental des recherches effectuées limite évidemment les possibilités de collaborations industrielles. On note cependant plusieurs contacts industriels qui permettent à l'unité de travailler selon l'état de l'art des architectures de calcul scientifique à haute performance. Les actions de communication vers le grand public, vulgarisation et diffusion des dernières avancées scientifiques, sont nombreuses et de nombreux membres s'y investissent. La borne interactive, réalisée en partenariat avec la délégation régionale du CNRS, représente une concrétisation très innovante de cette implication.

Appréciation synthétique sur ce critère

Malgré le caractère très fondamental et très en amont des applications technologiques des recherches effectuées dans l'unité, les contacts de celle-ci avec le monde industriel (architectures informatiques futures) de pointe et avec le grand public sont encourageants pour le prochain contrat.

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

L'unité est structurée en quatre équipes thématiques. Cette structuration est la conséquence des principales collaborations entre les membres de l'unité mais aussi des outils utilisés. Elle a favorisé l'émergence d'applications de très haut niveau et un certain resserrement thématique. Le budget d'équipement est centralisé au niveau de l'unité

et les moyens de calcul haute performance sont mutualisés avec, cependant, des priorités d'utilisation. Chaque équipe dispose d'un budget de fonctionnement pour ses missions. Ce type de répartition est très bien adapté à une unité homogène où les besoins de chacun sont analogues. Les services d'appui à la recherche (gestion et informatique) sont également mutualisés. Cette organisation permet de plus à chaque membre d'être identifié sur sa propre thématique tout en favorisant les échanges et les collaborations. L'unité possède un Conseil qui se réunit régulièrement et dont les comptes-rendus de réunion sont accessibles à tous. Elle dispose également d'un Conseil Scientifique composé des animateurs d'équipe et du directeur : ce Conseil peut rapidement se positionner sur un cas urgent. Le caractère souple de l'organisation est cependant suffisant pour assurer une bonne diffusion des informations et des prises de décisions, collégiales. L'animation scientifique au niveau de l'unité se traduit par l'organisation de séminaires périodiques, l'accueil de professeurs invités ainsi que par une assemblée générale, assortie d'une manifestation scientifique, en résidentiel.

Appréciation synthétique sur ce critère

La direction de l'unité a su trouver l'organisation optimale pour sa structure. Elle permet à chacun d'évoluer dans un cadre bien défini en toute liberté responsable.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'unité accueille de nombreux stagiaires de Master et doctorants. Les docteurs formés, tous inscrits dans l'ED Sciences de la Matière (ED 482), le sont dans une durée raisonnable de 40 mois et avec une production scientifique moyenne très satisfaisante (3,5 articles). L'insertion professionnelle des docteurs est excellente grâce à la double compétence Physique/Chimie et Informatique qu'ils acquièrent. L'unité participe activement au fonctionnement de l'école doctorale, aux recrutements doctoraux et à leurs suivis (direction de l'ED, membre du conseil, parrains). Les doctorants bénéficient d'un suivi constant et sont encouragés à présenter leurs travaux lors de séminaires internes. Ils sont aussi fortement incités à suivre une école thématique internationale. Les membres de l'unité sont par ailleurs très impliqués au niveau Master, spécialement dans le parcours Chimie théorique du master de Chimie et le master Erasmus Mundus dont ils assurent la responsabilité et dans le label national de Chimie Théorique. Dans une moindre mesure, ils interviennent dans les masters de Sciences Physiques et Chimiques Fondamentales et de Physique de la Matière. D'autres part, de nombreuses écoles internationales ou workshops ont été organisés par les membres de l'unité.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'attractivité de l'unité auprès des étudiants de master et des doctorants est exceptionnelle compte tenu du domaine d'activité, tout comme l'est l'implication des membres dans le suivi des doctorants, leur insertion professionnelle et la gestion des formations.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet présenté réussit un savant dosage de continuité et d'innovation. Il est évidemment le reflet des projets des équipes, ambitieux mais réalisables. Il présente une parfaite adéquation entre les objectifs et les compétences et moyens humains dont l'unité dispose, tant localement que dans le cadre de collaborations internationales. On note que les conclusions de l'auto-analyse SWOT sont prises en compte. L'unité a su insérer dans son projet les compétences apportées par les chercheurs récemment recrutés. Bien que l'évolution à cinq ans ne prévoie pas de changement majeur des périmètres scientifiques généraux, on constate un élargissement thématique notable avec plusieurs nouveaux axes de recherche. Le comité d'experts salue la volonté de renforcer les collaborations inter-équipes en délocalisant trois membres à 50 % sur deux équipes. L'ensemble du projet scientifique est particulièrement cohérent et apparaît très clairement comme mûri et réfléchi.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'unité, forte de sa connaissance fine de ses forces et faiblesses, présente un projet scientifique exceptionnel qui repose sur des innovations réfléchies et des originalités réalisables.

4 • Analyse équipe par équipe

Équipe 1 : E1

Groupe Méthode et Outils (GMO)

Nom du
responsable :

M. Trond SAUE

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	5	4,5
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	4,5	3,5
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	0,5	0,5
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)	2	1,5
N5 : Autres chercheurs (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	1	1
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	13	11

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
Doctorants	8	
Thèses soutenues	9	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	7,5	7,5

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Les recherches menées au sein de l'équipe GMO visent à développer, implémenter et appliquer les méthodologies de chimie quantique permettant de déterminer la structure électronique et les propriétés de systèmes moléculaires ou étendus présentant une complexité particulière provenant : a) de la corrélation électronique, b) des effets relativistes, et/ou c) de leur environnement. De façon plus précise, il convient de noter les développements novateurs réalisés dans le cadre des approches relevant de la fonction d'onde (interaction de configurations en

orbitales localisées et, plus généralement, approches multi-référentielles à croissance réduite) ou de la densité électronique (approches hybrides DFT/IC, fonctionnelles de la densité de courant, fonctionnelles à séparation de portée). De même, des innovations majeures y sont réalisées dans le cadre des traitements de type Monte Carlo Quantique (QMC : algorithmique massivement parallèle, développement de meilleures fonctions d'essai basées sur l'approche CIPSI) ou dans le développement et l'application du formalisme relativiste aux grandeurs et propriétés permettant de tester la physique fondamentale (parité, chiralité, moment dipolaire de l'électron). De manière générale, les travaux menés dans l'équipe GMO constituent souvent de réelles ruptures théoriques et méthodologies qui font l'objet d'importants efforts d'implémentation, au meilleur niveau de programmation, soit dans les codes portés localement (DIRAC, QMC=Chem) et mis à la disposition de la communauté soit dans ceux développés en collaboration (ADF, AbInit, MOLPRO...). À cet égard, il convient de signaler l'importante implication de l'ingénieur de recherche en informatique qui vient en support à l'équipe.

Les recherches menées se situent au plus haut niveau international. Elles se trouvent valorisées, sur la période considérée par 125 publications (ACL et OUV) soit environ 23 par an (2.8 par an et par ETPC). 73 % de ces publications sont en collaborations internationales, 17 % en collaborations nationales et 10 % en collaborations internes ou sans collaboration. Les travaux sont publiés dans les meilleurs journaux de la discipline (en général chimie-physique, mais on mentionnera plusieurs publications dans des revues de physique ou d'astrophysique).

Appréciation synthétique sur ce critère

De par la variété et l'originalité des thématiques qu'elle aborde et de par le caractère remarquablement novateur des développements mis en œuvre pour les traiter au plus haut niveau de compétition internationale, l'équipe GMO dispose d'une production et qualité scientifiques exceptionnelles.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

L'équipe est fortement impliquée dans de nombreuses collaborations dont plusieurs sont formalisées. On note en particulier l'implication dans quatre projets ANR ainsi qu'un projet relevant du Labex NEXT. On signalera également l'existence d'un projet de type PRACE. Au niveau national, l'équipe est porteuse du GDR CORREL (GDR 3314) et participe activement au nœud CECAM-GSO. Elle a organisé elle-même 4 manifestations nationales et 4 manifestations internationales. L'équipe émerge au Réseau Français de Chimie Théorique (GDR 3333) et bénéficie d'un programme PICS (n°4263). Les travaux de ses membres ont par ailleurs donné lieu à 43 conférences invitées et 23 communications sur la période considérée. 4 couvertures de journaux les ont valorisés. L'équipe a également accueilli 7 chercheurs de notoriété internationale, chacun pour au moins un mois, ainsi que deux stagiaires post-doctoraux de haut niveau. Elle a pu recruter à l'international, sur la période considérée, en externe, 1 chargé de recherche CNRS ainsi qu'un maître de conférences UPS. Ses membres sont régulièrement sollicités pour des travaux d'expertise (*peer reviewing*), pour participer à des jurys de thèse ou d'habilitation à diriger les recherches ou encore par les instances telles que l'ANR, le CNU ou l'AERES. De façon plus générale, ses membres sont impliqués dans de nombreuses instances locales (direction de l'École Doctorale, par exemple) ou nationales, tant au niveau recherche qu'au niveau enseignement.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe dispose d'un dynamisme et d'une ouverture aux niveaux local, national et international impressionnants qui lui confèrent un rayonnement et attractivité scientifiques exceptionnels.

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

Comme indiqué précédemment, l'équipe GMO adosse ses travaux aux connaissances scientifiques les plus récentes ; elle est d'ailleurs à l'origine de nombreuses avancées méthodologiques majeures et diffuse les logiciels qu'elle développe vers la communauté scientifique. On notera également plusieurs actions de diffusion de la culture scientifique vers le grand public ainsi que la mise en place de relations avec les constructeurs développant de nouvelles architectures informatiques.

Appréciation synthétique sur ce critère

Les thématiques développées par l'équipe GMO ne se prêtent pas immédiatement aux interactions avec l'environnement social, économique et culturel. Cependant, de notables et prometteurs efforts ont été réalisés dans ce sens, qui doivent être salués et poursuivis.

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

L'équipe GMO travaille selon une gouvernance souple et informelle qui assure cependant une logique scientifique cohérente et définie par un objectif commun qui est le développement de méthodologies visant à la détermination de la structure électronique et des propriétés de systèmes variés. Les réunions d'équipe sont organisées avec une périodicité bimensuelle. C'est l'endroit où s'optimisent en particulier les répartitions de missions (les investissements et acquisitions sont discutés au niveau de l'unité avant éventuelle présentation à la Fédération IRSAMC). Des séminaires de groupe sont organisés autour des thématiques scientifiques abordées. Les doctorants sont incités à participer à l'ensemble des séminaires (équipe, unité, IRSAMC) et se voient offrir au moins une école de formation durant leurs années doctorales. L'équipe dispose des moyens de calculs gérés par l'Unité et de ceux mis à disposition par l'IRSAMC. L'ensemble a récemment été regroupé dans un bâtiment plus adapté. Elle accède également aux ressources offertes par la région (CALMIP) ou mis à disposition au niveau national (GENCI). Ces moyens lui permettent de développer les projets innovants qui la caractérisent en bénéficiant de l'aide de la cellule informatique qui occupe une fonction transversale au sein de l'unité et de celle d'un ingénieur de recherche en informatique en charge du développement et de la valorisation des logiciels, également transversal. L'équipe dispose d'une page WEB spécifique sur le site de l'unité. Il serait souhaitable de l'actualiser plus régulièrement.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'organisation et la vie de l'équipe sont remarquablement bien adaptées à la taille et au fonctionnement optimal de l'équipe en privilégiant la souplesse.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'équipe accueille régulièrement des stagiaires M1 ou M2. Elle participe dans ce dernier cas à la très forte implication de l'unité et de l'Université de Toulouse dans le Master Erasmus Mundus TCCM et de l'attractivité qu'offrent l'équipe, l'unité et l'ensemble de l'environnement universitaire toulousain. 10 thèses ont été soutenues durant la période considérée et 8 sont en cours, certaines en codirection ou en cotutelle étrangères. L'origine des doctorants est très variée et est à nouveau un indicateur de l'attractivité de l'équipe. La durée des thèses soutenues est estimée à environ 41 mois, durée qui correspond d'ailleurs à la moyenne de l'unité, et le nombre de publications moyen par doctorant de l'équipe est de 2,7. Les financements de ces contrats doctoraux proviennent de sources variées et ne reposent donc pas uniquement sur les seuls financements ministériels. Sur 18 doctorants formés, 8 poursuivent leur formation en séjour post-doctoral et les autres sont insérés professionnellement. Les doctorants sont régulièrement invités à présenter leurs travaux soit dans les séminaires de groupe, soit dans les manifestations organisées par l'École Doctorale de rattachement et/ou l'IRSAMC ou au-delà dans les écoles thématiques. Deux stagiaires post-doctoraux ont également été accueillis. On notera que le directeur de l'école doctorale est membre de l'équipe GMO. Le potentiel d'encadrement doctoral de l'équipe pourrait être renforcé au moyen de l'obtention de nouvelles HDR : même s'ils participent aux encadrements, aucun des maîtres de conférences ou des chargés de recherche de l'équipe n'en dispose à ce jour.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe GMO est particulièrement active dans le domaine de la formation par la recherche. Les étudiants retenus en thèse sont excellents et fournissent des thèses souvent exceptionnelles dans les diverses thématiques scientifiques qui constituent le périmètre de l'équipe.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

La stratégie d'évolution à 5 ans de l'équipe GMO ne prévoit pas de modification majeure de périmètre scientifique. On notera cependant la volonté de renforcer les collaborations inter-équipes au moyen en particulier de l'accueil de personnels partageant leur temps à 50 % entre l'équipe GMO et une des trois autres équipes qui constituent l'unité. Cette volonté de renforcer les collaborations transverses est à saluer. Le projet scientifique est particulièrement cohérent et apparaît très clairement comme mûri et réfléchi. S'il s'inscrit pour une large part dans la

continuité naturelle, il présente d'ores et déjà quelques points innovants annonce de futures réalisations majeures. On citera, sans exhaustivité, le calcul des forces ou le calcul direct de différences d'énergie en QMC, l'application des méthodes multi-référentielles à croissance réduite à l'étude des états excités de systèmes peptidiques, l'extension MRCI des études de (supra)conductivité au moyen du tenseur TPS, la poursuite des développements liés aux fonctionnelles à séparation de portée dans le but d'étudier les états électroniques excités, l'extension dépendante du temps de la théorie de la densité de courant, le calcul de raies spectrales dans la problématique de la détection d'exo-planètes ou encore la poursuite des études relatives aux tests spectroscopiques de la physique fondamentale ou aux calculs de propriétés moléculaires relativistes (absorption X de complexes d'actinides, QED variationnel). Il s'agit d'un projet très ambitieux mais qui n'est pas irréaliste car l'équipe présente une parfaite adéquation entre ses objectifs et les compétences et moyens humains dont elle dispose et disposera, tant localement que dans le cadre de collaborations académiques et extra-académiques existant ou à créer.

Appréciation synthétique sur ce critère

Le projet proposé est ambitieux mais réaliste au vu de ce qui a déjà été réalisé et des compétences réunies au sein de l'équipe. Il traduit une exceptionnelle maturité scientifique et une profonde réflexion quant aux évolutions à venir de la discipline et de l'extension de ses champs d'application.

Conclusion

▪ Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe GMO constitue un acteur majeur, aux niveaux national et international, du développement de méthodologies novatrices et souvent uniques, en matière de détermination de structures électroniques et de propriétés moléculaires.

Sa dynamique scientifique en fait une force motrice importante tant pour son Unité de rattachement que pour l'IRSAMC. Son implication dans cette Fédération, dans le Labex NEXT et dans l'Equipex equip@meso lui ouvre plusieurs opportunités de nouvelles collaborations visant à renforcer sa visibilité locale et nationale. Son implication dans l'École Doctorale est importante de même que son implication dans la formation par la recherche, en particulier au moyen du programme Erasmus Mundus TCCM.

L'équipe bénéficie - comme les autres composantes de l'unité - de l'ensemble de ces soutiens avérés et est particulièrement réactive, souvent avec succès, aux AAP (ANR, par exemple).

▪ Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe dispose actuellement de plusieurs contrats de recherche, ce qui est un point positif dans un contexte de financement institutionnel difficile. La gouvernance de l'équipe doit cependant veiller à ce que les réponses aux divers AAP ne nuisent pas à la cohérence de l'ensemble et ne génèrent pas (trop) de diversifications thématiques.

Le comité d'experts souhaite que les conditions d'accueil puissent être favorisées par des locaux rénovés.

L'équipe a bénéficié durant la période considérée de 46 conférences invitées : leur analyse montre que deux permanents, soit moins de 20 % des effectifs de l'équipe, réalisent plus de 60 % de telles conférences.

▪ Recommandations

Afin d'affirmer et d'augmenter sa reconnaissance locale, nationale et internationale, l'équipe - et l'unité - devrait se doter d'un site WEB régulièrement mis à jour, en particulier pour les listes de publications et les "actualités", et si possible de mettre également en ligne une version en langue anglaise.

Le comité d'experts encourage l'équipe à inciter et à soutenir l'obtention de nouvelles HDR afin de renforcer son potentiel d'encadrement doctoral. Dans la même veine, il invite les plus jeunes chercheurs ou enseignants-chercheurs à participer à plus de conférences, ce qui ne pourra que favoriser leur épanouissement scientifique.

Il invite également à développer plus avant - autant que faire se pourra - les collaborations avec les constructeurs d'architectures informatiques de manière à renforcer ses liens avec le tissu économique et social. Des financements doctoraux de type CIFRE pourraient alors être obtenus. Les interactions sociétales menées dans le cadre de la diffusion de la connaissance scientifique déjà menées par l'équipe sont encourageantes, mais mériteraient d'être développées plus avant de manière à mieux faire connaître les possibilités ouvertes par la chimie théorique.

La qualité de la recherche menée par l'équipe justifie le dépôt de projets européens (ERC) aux niveaux "junior" et "consolidate".

Le comité d'experts recommande et soutient le développement des collaborations entre l'équipe GMO et les autres équipes le LCPO, ainsi qu'avec les autres unités constituant l'IRSAMC : de réelles synergies peuvent s'y établir, pour le plus grand bénéfice de l'équipe et de la Fédération.

Équipe : E2

Modélisation, Agrégats, Dynamique

Nom du
responsable :

M. Fernand SPIEGELMAN

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	2	2,5
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	3,5	3,5
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		0,5
N5 : Autres chercheurs (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	1	
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	6,5	6,5

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
Doctorants	2	
Thèses soutenues	3,5	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	1	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2,5	2,5

- **Appréciations détaillées**

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Au cours de la période d'évaluation, l'équipe MAD a réalisé plusieurs avancées méthodologiques et thématiques. Du point de vue des méthodes, la plus remarquable est la variété des nouvelles fonctionnalités introduites dans le code DFTB (Density Functional Tight Binding) de MonNano dont l'équipe assure maintenant la gestion. En particulier, l'introduction de la méthode MFQ (Mean Field with Quenching) pour la dynamique des états excités, des gradients analytiques dans un traitement en interaction de configurations, d'une approche en matrices creuses permettant de réaliser des calculs quantiques sur des millions d'atomes, de la combinaison de la DFTB avec

un champ de forces, ont ouvert la voie à des applications jusque-là hors de portée de la simulation quantique. Parmi les travaux applicatifs, le comité d'experts a particulièrement apprécié l'originalité de ceux qui se situent à la frontière avec d'autres disciplines : l'astrophysique pour l'étude des molécules du milieu interstellaire et la médecine pour les travaux portant sur le transport dans les plasmas froids d'hélium. L'ensemble de ces travaux s'est traduit par une importante production scientifique de qualité (50 ACL ; 1 OUV, soit 2 publications par an et par ETPC). Les résultats ont été généralement publiés dans des revues à bon ou fort facteur d'impact (PNAS, JCTC) et sont déjà bien cités. En outre l'équipe a reçu 33 invitations en conférences, la plupart internationales.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe MAD a réalisé des travaux originaux, tant du point de vue méthodologique qu'applicatif, d'une exceptionnelle qualité scientifique, qui ont eu un remarquable impact international.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

L'équipe MAD jouit d'une solide renommée nationale et internationale qui se traduit par de nombreuses collaborations, offres de participations à des projets de recherche (appels d'offres locaux, nationaux tels l'ANR, européens tels ERC synergie) et participation à des réseaux scientifiques (GDR) ou des réseaux développeurs de codes (DFTB). Un de ses membres a participé à quatre comités scientifiques de conférences, a été coorganisateur de deux conférences internationales et est responsable du nœud Grand Sud-ouest du réseau européen CECAM. Cette attractivité s'est traduite par la venue de professeurs invités, par le recrutement d'un maître de conférences à l'université, par l'insertion d'une chercheuse venue d'une autre équipe de l'unité, et se prolongera par la venue à mi-temps de deux enseignantes dans le prochain contrat. En outre deux post-docs et cinq doctorants ont enrichi les activités de l'équipe.

Appréciation synthétique sur ce critère

Grâce à son dynamisme et à la qualité de la science produite, l'équipe MAD jouit d'une visibilité nationale et internationale exceptionnelle, qui lui permet d'attirer et de recruter des jeunes et moins jeunes chercheurs de qualité.

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

L'équipe MAD a toujours eu une forte activité de développement original de logiciels de modélisation. Celle-ci s'est renforcée et enrichie grâce au recrutement de deux jeunes chercheurs qui ont apporté des compétences de modélisation nouvelles. Les logiciels développés sont actuellement mis à la disposition de la communauté dans le cadre de collaborations ; une réflexion sur leur mise en accès libre est en cours. Outre cette activité, l'équipe s'implique dans des actions de diffusion de la culture scientifique auprès du grand public dans le cadre de la Fête de la Science et de publication d'articles de vulgarisation auprès des professeurs de physique et des élèves de collèges, lycées ou écoles d'ingénieurs. Un de ses membres est correspondant communication de l'unité.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe MAD développe d'excellents logiciels de modélisation qui ont, pour certains, vocation à s'ouvrir à l'ensemble de la communauté. Son implication dans la diffusion de la culture scientifique est très bonne.

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

L'équipe MAD est une petite équipe de six personnes dont le coordinateur est le directeur de l'unité. Son fonctionnement scientifique est plutôt pyramidal mais n'exclut pas des interactions synergiques entre les membres de l'équipe pour aborder certains sujets. Au quotidien, grâce à sa petite taille, les réflexions sur les évolutions et les prises de décision peuvent se faire de manière informelle. Les ressources informatiques sont mutualisées comme dans le reste de l'unité. Les plus jeunes permanents bénéficient d'invitations en conférence et peuvent trouver là un cadre de travail épanouissant.

Appréciation synthétique sur ce critère

On a là l'exemple d'une excellente vie d'équipe dont l'organisation très souple et collégiale est parfaitement adaptée à sa taille.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'équipe MAD ne possédant que deux jeunes maîtres de conférences n'a pas de responsabilité dans des filières d'enseignement de l'université. En revanche, elle participe à la formation par la recherche de doctorants (5) et post-doctorants (2), d'une manière proportionnée à sa taille et au nombre d'habilités (2 jusqu'à octobre 2014). Un membre de l'équipe vient de soutenir son HDR. Les étudiants bénéficient de réunions de groupe et de séminaires organisés à l'échelle de l'Unité ou de l'IRSAMC. Parmi les trois diplômés au cours de la période d'évaluation, il est remarquable de voir que, malgré une durée de thèse un peu supérieure à la moyenne, deux ont trouvé un emploi dans le privé comme ingénieurs, soit en informatique soit en charge de développements en chimie quantique. Ces contacts dans l'entrepreneuriat privé pourraient être mis à profit dans le futur pour établir d'éventuelles collaborations industrielles.

Appréciation synthétique sur ce critère

Compte tenu de l'investissement du coordinateur de l'équipe dans la direction de l'unité, de la jeunesse des deux enseignants-chercheurs et du faible nombre d'habilités, on peut qualifier d'excellente l'implication de MAD dans la formation par la recherche.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet de l'équipe MAD inclut plusieurs volets qui se situent dans la continuité des travaux antérieurs, en particulier sur le développement de codes de modélisation, sur les agrégats et sur les systèmes d'intérêt astrophysique. Toutefois, on constate un élargissement thématique notable, avec plusieurs nouvelles lignes de recherche dont une particulièrement originale, et sans doute partiellement risquée, sur les pesticides à la surface des argiles, à l'interface avec la science de l'environnement. Cette dernière ligne de recherche va renforcer la coloration interdisciplinaire des travaux de l'équipe. Globalement très ambitieux, le projet reste néanmoins réaliste, car il est pensé en cohérence avec une augmentation des moyens humains de l'équipe qui va s'agrandir par la venue à mi-temps de deux enseignantes-chercheuses.

Appréciation synthétique sur ce critère

Le projet de l'équipe MAD propose une stratégie bien pensée qui allie originalité et diversification scientifiques à une réflexion réaliste en termes de ressources humaines.

Conclusion

▪ Points forts et possibilités liées au contexte

Il s'agit d'une excellente équipe qui ne cesse d'évoluer en s'ouvrant à de nouvelles techniques de modélisations, portées par de jeunes recrutés, et à de nouvelles thématiques initiées par des collaborations à la frontière de sa discipline. Elle bénéficie d'une forte reconnaissance internationale, non seulement pour la qualité de ses travaux, mais aussi par la prise de responsabilité de son coordinateur dans le nœud GSO du CECAM.

▪ Points faibles et risques liés au contexte

Elle partage avec beaucoup d'autres équipes/unités les risques liés au faible nombre d'étudiants, à la diminution des possibilités de recrutement et de promotion, en particulier à l'Université, et à la diminution des crédits pouvant venir des appels d'offres ANR.

- **Recommandations**

L'équipe devra être attentive au renouvellement des générations puisque deux de ses séniors vont atteindre l'âge de la retraite dans quelques années. Sans que son activité cesse d'être essentiellement fondamentale, il serait bon qu'elle tente de tirer profit de son contact avec les entreprises où se sont placés ses doctorants, et de son ouverture à des problématiques, tel l'environnement, qui sont largement financées par des appels d'offres spécifiques en vue de maintenir ses ressources à un niveau compatible avec l'ambition de ses projets.

Équipe 3 : E3

Photochimie Théorique et Computationnelle (PhotoTeC)

Nom du
responsable :M^{me} Fabienne ALARY

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	2	2
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	3	3
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
N5 : Autres chercheurs (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)		
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	5	5

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
Doctorants	1	
Thèses soutenues	3	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	3	
Nombre d'HDR soutenues	0	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	2

- **Appréciations détaillées**

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

L'équipe PhotoTeC est constituée de 2 enseignants-chercheurs et de 3 chercheurs. Au cours de ce contrat et à l'occasion de départs ou d'arrivées, l'objectif de l'équipe s'est recentré sur la thématique photoscience. La thématique générale concerne ainsi l'utilisation des méthodes et outils théoriques les plus récents pour élucider les mécanismes des phénomènes photoinduits dans des systèmes moléculaires complexes, notamment des complexes de métaux de transition. Elle se place systématiquement dans un fort dialogue théorie-expérience.

L'équipe maîtrise les méthodes les plus avancées qu'elles soient ab initio ou issues de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour décrire des états excités, leurs surfaces d'énergie potentielle, les voies de relaxation, les mécanismes réactionnels et donc la réactivité dans l'état excité. Des résultats marquants ont été obtenus pour les complexes polypyridyl de ruthénium par la caractérisation des états triplet 3MC et leur rôle dans les mécanismes de photoisomérisation. C'est un apport décisif pour analyser et prévoir la photoréactivité des complexes de ruthénium et nourrir le dialogue théorie-expérience. Ces résultats apportent un renforcement d'interactions à l'échelle nationale et internationale notamment avec des équipes expérimentales. La production scientifique de l'équipe sur la période a été de 33 articles à comité de lecture (1,5 ACL par an et par ETPC), 3 chapitres d'ouvrage, 4 conférences invitées, 13 communications orales, 18 affiches, 3 workshops et 6 séminaires. Une excellente synergie théorie-expérience permettant de pousser les limites des méthodes théoriques se manifeste par des publications dans des journaux à très fort impact. Cette production de grande qualité mérite néanmoins d'être renforcée pour stabiliser, à une échelle internationale, la portée des résultats récents.

Appréciation synthétique sur ce critère

La très bonne production scientifique de l'équipe et l'excellence des résultats obtenus sur ce contrat rendent l'équipe visible au sein de la communauté des photochimistes théoriciens ou expérimentateurs.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

L'équipe est partenaire d'un programme ANR et a bénéficié d'un programme IDEX transversal. Les membres ont organisé des réunions scientifiques locales et fournissent un travail d'expertise varié. Le recentrage récent de l'équipe sur la thématique photoscience peut expliquer une participation encore modeste à des réseaux et un nombre faible de conférences invitées. L'originalité des travaux proposant des interprétations nouvelles des propriétés photophysiques, voire même des prédictions, apporte une forte visibilité auprès des équipes expérimentales nationales et internationales et nourrit un nombre important de collaborations actives qui ont conduit à l'implication dans trois pré-projets ANR cet automne.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe a établi une très bonne dynamique de collaborations académiques ; elle dispose de tous les éléments pour affirmer et renforcer sa visibilité internationale.

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

L'équipe n'a ni collaborations ni interactions avec des entreprises. En revanche, elle est très fortement impliquée dans des activités de diffusion de la culture scientifique. Outre sa participation aux manifestations courantes comme les Journées Portes Ouvertes et la Fête de la Science, un de ses membres est chargé de mission scientifique auprès du service communication de la DR14 du CNRS, à 20 % de son temps. Cela se traduit par la coordination d'une brochure annuelle dans la série Petits Illustés, le soutien, montage et suivi des années internationales, le développement d'ateliers interactifs, la rédaction de nouvelles scientifico-policières, l'organisation de manifestations et la présence d'une borne interactive au sein du laboratoire. Cette borne affiche des animations (également disponibles sur le Web) qui illustrent, pour des élèves de différents niveaux, les principaux concepts de la chimie-physique. Certains aspects intègrent des systèmes étudiés au sein du laboratoire.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe PhotoTeC bénéficie, avec l'unité, d'une excellente contribution dans le domaine de la diffusion de la culture scientifique, associée à une très bonne implication dans toutes les actions de promotion des sciences. Les interactions avec le monde socio-économique restent à développer.

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

La vie de l'équipe est harmonieusement organisée autour de discussions scientifiques régulières et dont la fréquence s'adapte aux besoins. Elle permet une grande fluidité dans la communication et les transferts d'informations bottom-up et top-down, elle donne à chacun une large expression et implique fortement les étudiants dans les présentations et discussions.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'organisation et la vie de l'équipe sont remarquablement menées et répondent de façon parfaitement cohérente à l'organisation et au fonctionnement global de l'unité.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Trois doctorants ont soutenu leur thèse et trois post-doctorants ont travaillé dans l'équipe durant le contrat écoulé, tous ces travaux ont conduit à des publications. Les doctorants sont sollicités pour donner des séminaires et incités à participer à une école pendant la durée de leur thèse. L'encadrement des doctorants durant leur thèse, l'accompagnement dans l'après-thèse et le suivi de leur devenir sont excellents. Les enseignants-chercheurs assurent des responsabilités au sein des formations de Licence et master et un de ses membres a été acteur de la création du master Erasmus Mundus TCCM et du parcours spécial de licence. Un projet de master franco-syrien a été préparé. L'équipe est impliquée dans l'accueil de stagiaires de master et a contribué à des supports pédagogiques originaux pour la vulgarisation scientifique.

Appréciation synthétique sur ce critère

La contribution à la formation par la recherche de l'équipe PhotoTec est excellente de par sa qualité et sa diversité.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet proposé est construit autour de quatre thèmes, en parfaite cohérence avec les compétences de l'équipe dans la description de processus impliquant un changement d'état électronique dans des systèmes métalliques ou organiques de grande taille. Trois de ces thèmes intègrent une forte collaboration avec des expérimentateurs. De plus, la détermination de mécanismes de photoréactivité dans des complexes de coordination sera étendue à la prise en compte du rôle du solvant à l'aide de calculs de métadynamique, en collaboration avec l'équipe MAD. Chacun de ces quatre thèmes élargit les activités actuelles de l'équipe et combine de façon remarquablement efficace des problématiques théoriques liées aux limites des méthodes de calcul actuelles à des enjeux expérimentaux et applicatifs up-to-date.

Appréciation synthétique sur ce critère

Au regard des enjeux théoriques et expérimentaux visés, de la richesse des partenariats et collaborations impliqués et de l'originalité des compétences de l'équipe PhotoTeC, la cohérence du projet de recherche et son ouverture en terme de partenariat et de fertilisation croisée expérience-théorie sont remarquables.

Conclusion

▪ Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe a réalisé un apport décisif dans l'analyse et la compréhension des processus photoinduits dans des complexes de coordination, se positionnant ainsi parmi les acteurs de référence de la discipline. Son expertise et sa capacité à développer des collaborations notamment avec des équipes expérimentales sont des leviers importants pour les projets à venir.

▪ Points faibles et risques liés au contexte

La visibilité internationale actuelle de l'équipe et la production scientifique restent perfectibles par rapport à l'impact des travaux réalisés. Le nombre d'HDR est à augmenter.

▪ Recommandations

L'équipe doit veiller à augmenter sa visibilité au moyen de conférences, écoles, réseaux. Les interactions avec le monde socio-économiques sont à développer notamment dans le cadre de couplages avec l'industrie et du renforcement des synergies théorie-expérience.

Équipe 4 : E4

Systèmes étendus et Magnétisme (SEM)

Nom du
responsable :M^{me} Nathalie GUIHERY

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
N1 : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	2	3
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	2	2
N3 : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
N4 : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
N5 : Autres chercheurs (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	1	1
N6 : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
TOTAL N1 à N6	5	6

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2014	Nombre au 01/01/2016
Doctorants	1	
Thèses soutenues (depuis 01/01/2009)	3	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	4	4

- **Appréciations détaillées**

Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Avec ses 4 chercheurs permanents (2EC+2C), 70 publications ACL pour la période 2009-2014 (3,2 par an et par ETPC), 70 communications orales (dont 16 conférences invitées), l'équipe SEM a une production largement au-dessus de la moyenne. L'équipe est un des leaders mondiaux dans la modélisation des systèmes magnétiques moléculaires, proposant des méthodologies et des outils théoriques innovants. Son expertise est sollicitée à la fois par des partenaires nationaux et internationaux (Espagne, Italie, Allemagne, Pays-Bas, USA, Chine) et sa reconnaissance est

bien reflétée par un nombre important de citations (plus de 11 par article en moyenne pour des articles de la période d'évaluation), des invitations pour rédiger des articles de revue, y compris dans le prestigieux *Chemical Reviews*.

Appréciation synthétique sur ce critère

La production scientifique de l'équipe SEM pour la période examinée est exceptionnelle à la fois du point de vue quantitatif et du point de vue qualitatif.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Les membres de l'équipe participent à de nombreux réseaux internationaux (3 actions COST, EGIDE) et nationaux (PPF, PICS, 4 GDR, ANR, PEPS) dont ils assument le pilotage ou la coordination (COST, ANR, GDR) de plusieurs. Un membre émérite de l'équipe est devenu Docteur honoris causa de l'Université de Tarragone. Étant des acteurs incontournables dans leur spécialité, ils sont invités régulièrement (19 fois) comme conférenciers aux cours internationaux. Ils organisent des rencontres internationales (CF-CAM, JUJOLS). L'équipe vient de recruter un MCF disposant d'un excellent curriculum. Par ailleurs, l'équipe a accueilli 2 post-doctorants lors de la période d'évaluation.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe SEM, de par son implication dans de nombreux réseaux et de par ses invitations, a un rayonnement et une attractivité académiques exceptionnels.

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

Les méthodologies développées au sein de l'équipe, notamment avec l'approche DDCI, sont maintenant incorporées dans des logiciels populaires de chimie quantique (par exemple ORCA), ce qui est très prometteur pour la diffusion la plus large possible de ses outils théoriques. Ses membres ont su identifier plusieurs actualités brûlantes dans le domaine du magnétisme moléculaire, pour lesquelles ils ont su fournir l'interprétation théorique adéquate. Un chercheur de l'équipe est impliqué dans les réflexions philosophiques concernant le rôle de la science et des scientifiques dans la société, donnant ainsi lieu à publications de livres et d'entretiens radiophoniques sur les chaînes nationales. Au niveau local, l'équipe est très active dans les manifestations comme la Fête de la Science ou InfoSup et entretient des liens avec l'enseignement secondaire par des présentations et conférences, ainsi que par un partenariat avec une classe de lycée.

Appréciation synthétique sur ce critère

La très bonne interaction de l'équipe avec son environnement social, culturel et économique reste néanmoins perfectible, surtout en ce qui concerne les liens tissés avec des partenaires extra-académiques.

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

L'équipe SEM est de taille relativement petite, qui ne nécessite pas de structure formelle pour assurer son bon fonctionnement. La priorité est donnée aux réunions de caractère scientifique dont la fréquence est particulièrement soutenue en présence des stagiaires, ainsi que des doctorants, fortement sollicités à prendre la parole régulièrement pour présenter leurs projets et résultats. Les questions de gestion et d'organisation sont débattues à l'occasion des réunions d'équipe ou par des discussions spontanées, apparemment en très bonne ambiance collégiale. Les bureaux des membres permanents situés sur un même étage, ainsi que l'existence d'un espace de convivialité facilitent les contacts spontanés. Les réunions sont organisées en tenant compte des séminaires du laboratoire et de l'Institut. Les membres de l'équipe se répartissent le pilotage des différents projets de manière équitable et plusieurs membres partagent leur activité avec d'autres équipes du laboratoire. Une bonne organisation au niveau de laboratoire (et de l'Institut) assure une accessibilité mutualisée aux ressources de calcul et aux supports techniques. Des membres de l'équipe participent aux Conseils du laboratoire. Un membre de l'équipe fait partie du CoNRS (Section 13). Le manque d'un site Web actif du laboratoire est, pour l'instant, un sérieux handicap pour la communication vers l'extérieur et il serait souhaitable que cette situation s'améliore rapidement.

Appréciation synthétique sur ce critère

La vie de l'équipe SEM est organisée en parfaite adéquation avec ses besoins et assure un fonctionnement exceptionnellement fluide et consensuel, créant des conditions de travail où chaque membre trouve son épanouissement scientifique.

Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'équipe considère l'encadrement des étudiants comme un devoir prioritaire. Elle accueille des candidats à des niveaux allant de M1 au doctorat, en assumant la charge financière des stages de master. Le parcours des étudiants de M2 (douze M2 accueillis pendant la période d'évaluation) conduit souvent à une publication et les meilleurs candidats sont retenus pour une thèse. Les stagiaires et les doctorants sont invités à donner des séminaires, et les derniers participent systématiquement aux manifestations internationales. Actuellement, il y a deux thèses en cours, trois soutenues (allocations ministérielles), avec une durée moyenne de 38 mois, donnant lieu de 4 à une dizaine de publications. Les nouveaux docteurs sont bien insérés dans leur milieu professionnel (CR2 à Nantes par exemple). L'équipe accueille également des doctorants issus du Master Erasmus Mundus. Les membres de l'équipe organisent et interviennent comme enseignants dans les écoles thématiques nationales et internationales.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe SEM, grâce à ses EC qui suscitent un goût pour la recherche parmi les étudiants rencontrés dans les cours, attire de nombreux stagiaires de très bon niveau et assure un encadrement des stages et des thèses à un niveau exceptionnel. L'activité de formation par la recherche est de très haut niveau aussi bien dans un cadre national qu'international.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet présenté réussit un bon dosage de continuité et d'innovation. L'équipe a su mettre à son profit les compétences apportées par des chercheurs qui ont rejoint l'équipe depuis le début du contrat actuel, et compte sur un jeune EC qui vient d'être recruté pour le traitement DFT des systèmes périodiques et pour ses compétences en DMFT. Le projet est centré sur la compréhension des effets quantiques à l'origine des propriétés électroniques remarquables, notamment dans le domaine du magnétisme, pour des systèmes très variés, allant des systèmes moléculaires organiques (complexes formés par des métaux d et f) jusqu'aux solides. L'équipe propose un grand nombre de projets, d'une part applicatifs, d'autre part méthodologiques, au total une quinzaine, ce qui ne semble pas être irréaliste vu la grande capacité de travail de chaque membre et l'apport espéré des collaborateurs internes et externes. Des projets émergents proposés autour de la DFT périodique et de la DMFT, à la fois applicatifs et méthodologiques, sont liés à l'arrivée du nouveau MCF ; toutefois il faut veiller à ce qu'une partie de ces projets se réalise en collaboration avec les membres de l'équipe. Les compétences en calculs relativistes et détermination des couplages hyperfins, apportées depuis quelques années, vont continuer à donner lieux aux applications et développements intéressants en espérant que la synergie avec le reste de l'équipe se renforcera. Parmi les projets innovants on doit mentionner les travaux planifiés sur la manipulation des *qbits* par des champs électriques et les efforts poursuivis pour le développement des méthodes de perturbation pour traiter la corrélation dynamique dans les systèmes multi-référentiels. Ainsi le projet contient à la fois des éléments de forte coloration théorique et des applications avec un débouché possible pour des technologies nouvelles. Même si la faisabilité du projet dans la constitution actuelle de l'équipe ne laisse aucun doute, les départs éventuels pour limite d'âge au cours du prochain contrat doivent être anticipés afin de ne pas fragiliser l'équipe par une baisse d'effectifs.

Appréciation synthétique sur ce critère

L'équipe SEM a présenté un projet de qualité exceptionnelle, très ambitieux, mais réalisable pour la période des cinq prochaines années. Le projet exploite toutes les possibilités dues à l'évolution du personnel et couvre un spectre large de thématiques allant du fondamental aux applications.

Conclusion

- **Points forts et possibilités liées au contexte**

L'équipe SEM rassemble des chercheurs et enseignants-chercheurs très dynamiques qui maîtrisent des techniques leur permettant de traiter des phénomènes électroniques spécifiques, notamment ceux liés au magnétisme. C'est un domaine où les membres de l'équipe sont considérés comme leaders mondiaux, surtout par leur capacité à utiliser et surtout à développer des outils théoriques novateurs. Leurs approches ne se limitent pas au seul aspect numérique, mais ils arrivent à combiner plusieurs techniques complémentaires, notamment celle des Hamiltoniens modèles qui rend possible de décrire des systèmes de grande taille et permet d'approfondir la compréhension aux niveaux conceptuel et qualitatif. Leur dynamisme s'affirme aussi par leur capacité à recruter de nouveaux collaborateurs en élargissant ainsi le spectre des compétences disponible au sein de l'équipe. La forte implication de l'équipe dans la formation par la recherche est un autre point fort.

- **Points faibles et risques liés au contexte**

Le fait que plusieurs thématiques appliquées aient un fort potentiel technologique à moyen et long termes devrait être plus exploité afin d'accéder aux financements d'origine industrielle. Des départs éventuels doivent être anticipés par des recrutements afin d'éviter que le groupe ne s'affaiblisse trop du point de vue des effectifs.

- **Recommandations**

L'équipe doit continuer sur la même voie d'excellence et d'originalité, qui les place dans une catégorie exceptionnelle parmi les équipes de recherche théorique en France et au niveau international.

5 • Déroulement de la visite

Dates de la visite

Début : Lundi 17 Novembre 2014 à 11h00

Fin : Mardi 18 Novembre 2014 à 16h00

Lieu de la visite

Institution : Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

Adresse : Bâtiment 3R1, route de Narbonne, Toulouse

Locaux spécifiques visités

Le comité d'experts a été accueilli dans les locaux de l'unité. Aucune installation expérimentale n'était à visiter.

Déroulement ou programme de visite

Le comité d'experts a apprécié la parfaite organisation de la visite. Il tient à souligner le professionnalisme de l'unité tant du point de vue de la qualité des supports papiers ou projetés que du respect des horaires.

17 novembre 2014

11h00 - 11h30	Huis Clos comité d'experts
11h45-12h45	Présentation LCPO
13h00 - 14h00	Pause
14h00 - 14h40	Bilan - Projets - Équipe GMO
14h50 - 15h20	Bilan - Projets - Équipe MAD
15h30 - 16h00	Bilan - Projets - Équipe PHOTOTEC
16h10 - 16h40	Bilan - Projets - Équipe SEM
16h50 - 17h10	Rencontre avec directeur de l'IRSAMC
17h20 - 18h20	Visite laboratoire / posters
18h30- 19h00	Huis Clos comité d'experts

18 novembre 2014

8h30 - 9h15	Projets LCPO
9h30-10h00	Rencontre avec les tutelles (Université - CNRS)
10h15 - 10h45	Rencontre avec Conseil de laboratoire
11h00 - 11h30	Rencontre avec ITA / Biats
11h45 - 12h15	Rencontre avec doctorants et Post-doctorants
12h30 - 12h50	Rencontre avec le directeur de l'ED
13h00 - 16h00	Huis-Clos comité d'experts