

RÉSUMÉ FINAL DE L'ÉVALUATION DE L'UNITÉ :

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques
(LCPOQ)

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES :

Université Toulouse 3 - Paul Sabatier - UPS
Centre national de la recherche scientifique -
CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2019-2020
VAGUE A

Rapport publié le 12/03/2020



Pour le Hcéres¹ :

Nelly Dupin, Présidente par
intérim

Au nom du comité d'experts² :

Olivier Parisel, Président du comité

En vertu du décret n°2014-1365 du 14 novembre 2014 :

¹ Le président du Hcéres "contresigne les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts et signés par leur président". (Article 8, alinéa 5) ;

² Les rapports d'évaluation "sont signés par le président du comité". (Article 11, alinéa 2).

Les données chiffrées présentées dans les tableaux de ce document sont extraites des fichiers déposés par la tutelle dépositaire au nom de l'unité.

PRÉSENTATION DE L'UNITÉ

Nom de l'unité :	Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques
Acronyme de l'unité :	LCPO
Label et N° actuels :	UMR5626
ID RNSR :	199512055E
Type de demande :	Renouvellement à l'identique
Nom du directeur (2019-2020) :	M. Thierry LEININGER
Nom du porteur de projet (2021-2025) :	M. Thierry LEININGER
Nombre d'équipes et /ou de thèmes du projet :	4

MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

Président :	M. Olivier PARISEL, CNRS, Paris
Experts :	M. Frédéric CASTET, Université de Bordeaux (représentant du CNU) M. Laurent GALMICHE, ENS Paris-Saclay (personnel d'appui à la recherche) M ^{me} Valérie MARVAUD, CNRS, Paris M. François MAUREL, Université Sorbonne Paris Cité (représentant du CoNRS) M ^{me} Valérie VALLET, Université de Lille

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. François GUILLAUME, Université de Bordeaux

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ

M. Marc BAADEN, CNRS / INC - Paris
M^{me} Claire-Marie PRADIER, CNRS / INC - Paris
M. Alexis VALENTIN, Université Paul Sabatier - Toulouse

INTRODUCTION

HISTORIQUE, LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE ET ÉCOSYSTEME DE RECHERCHE

Le Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPO, UMR 5626) fut créé en 2007 et relève de l'Institut de Chimie du CNRS comme institut principal et de l'Institut de Physique comme institut secondaire. Au niveau universitaire, il relève de l'Université de Toulouse III – Paul Sabatier.

Le LCPO est localisé au bâtiment 3R1 de l'Université Paul Sabatier (UPS) qu'il partage avec le Laboratoire de Physique Théorique (LPT) et le Laboratoire des Collisions Agrégats et Réactivité (LCAR). Le Laboratoire de Physico-Chimie des Nano-Objets (LPCNO) est, quant à lui, localisé sur le même site mais à l'Institut National des Sciences Appliquées (INSA) de Toulouse. Cette proximité géographique a permis depuis des années aux LCPO, LPT, LCAR et LPCNO de faire vivre une Fédération de Recherche (FR) extrêmement dynamique, à savoir l'Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes (IRSAMC), essentielle dans le contexte local et reconnue comme modèle au niveau national. L'unité a fortement participé à la création du labex Nano, mesures Extrêmes & Théorie (NEXT), reconduit dans le projet Écoles Universitaires de Recherche (EUR) Nano-X. Elle s'est également impliquée dans le projet IDEX de l'Université de Toulouse (UNITI) et reste indispensable, au niveau national, au bon fonctionnement de structures telles que le Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT), le Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM) ou le master européen « *Theoretical Chemistry and Computational Modelling* » (TCCM).

DIRECTION DE L'UNITÉ

Le directeur de l'unité (DU) est, depuis 2016, Thierry Leininger assisté de Nathalie Guihéry en tant que directrice adjointe. Cette équipe de direction est proposée pour le prochain contrat.

NOMENCLATURE HCÉRES

ST4 : chimie.

THÉMATIQUES

L'unité se fédère et se structure autour des thématiques « méthodes et outils de la chimie quantique » (équipe GMO), « modélisation, agrégats et dynamique » (équipe MAD), « photochimie théorique et computationnelle » (équipe PTC), Systèmes étendus et magnétisme (équipe SEM).

À ces équipes viennent s'ajouter, de façon transverse, un support informatique et un support de gestion.

EFFECTIFS DE L'UNITÉ

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques		
Personnels en activité	Nombre au 30/06/2019	Nombre au 01/01/2021
Professeurs et assimilés	5	5
Maitres de conférences et assimilés	9	9
Directeurs de recherche et assimilés	5	3
Chargés de recherche et assimilés	7	7
Conservateurs, cadres scientifiques EPIC, fondations, industries...	0	0
Professeurs du secondaire détachés dans le supérieur	0	0
ITA-BIATSS, autres personnels cadre et non cadre EPIC...	4	4

Sous-total personnels permanents en activité	30	28
Enseignants-chercheurs non titulaires, émérites et autres	1	
Chercheurs non titulaires, émérites et autres (excepté doctorants)	3	
Doctorants	9	
Autres personnels non titulaires	3	
Sous-total personnels non titulaires, émérites et autres	16	
Total personnels	46	28

AVIS GLOBAL SUR L'UNITÉ

Le LCPQ a su se hisser au plus haut niveau international. Au-delà de cette reconnaissance indiscutable, il a renforcé son rôle d'acteur majeur dans le domaine de la physico-chimie théorique au sein du paysage national, que ce soit dans les développements méthodologiques qu'il propose ou dans les applications que ses membres mettent en œuvre pour modéliser des systèmes chimiques de natures particulièrement complexes.

Sa production scientifique est tout à fait remarquable en qualité et quantité. Le LCPQ s'illustre également en matière de formation par la recherche (niveau doctoral ou pré-doctoral) et au niveau des manifestations scientifiques qu'il initie ou auxquelles ses membres participent (congrès, écoles, ...).

Organisée en quatre équipes, l'unité a su se développer et se pérenniser dans un mode de fonctionnement collégial extrêmement pertinent. Le comité d'experts tient à souligner la cohésion et le dynamisme de l'unité de même que sa réactivité auprès des AAP locaux (labex, IRSAMC), nationaux (ANR) ou internationaux (ERC). Le rapport Hcéres antérieur (novembre 2014) concluait dans son appréciation générale : « *Tous les indicateurs sont favorables pour que le prochain contrat quinquennal soit un franc succès* ». Le bilan du contrat quinquennal écoulé montre que le succès s'avère être bien plus que « *franc* » : il est brillant.

L'ambitieux projet scientifique proposé pour les années à venir s'inscrit, selon un contexte local mouvant, dans la naturelle continuité d'une excellence incontestablement avérée et reconnue qu'il convient de préserver et soutenir.

Les rapports d'évaluation du Hcéres
sont consultables en ligne : www.hceres.fr

Évaluation des coordinations territoriales
Évaluation des établissements
Évaluation de la recherche
Évaluation des écoles doctorales
Évaluation des formations
Évaluation et accréditation internationales



2 rue Albert Einstein
75013 Paris, France
T. 33 (0)1 55 55 60 10

hceres.fr

[@Hceres_](https://twitter.com/Hceres_)

[Hcéres](https://www.youtube.com/Hceres)

