



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

Section des Unités de recherche

Rapport de l'AERES sur
l'unité :

Structure et Réactivité des

Systèmes Moléculaires Complexes

UMR 7565

sous tutelle des
établissements et organismes :

Université de Lorraine

CNRS



Novembre 2011



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

Section des Unités de recherche

Le Président de l'AERES

Didier Houssin

Section des Unités
de recherche

Le Directeur

Pierre Glaudes



| Unité

Nom de l'unité :	Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes
Acronyme de l'unité :	SRSMC
Label demandé :	UMR
N° actuel :	7565
Nom du directeur (2009-2012) :	M. Yves FORT
Nom du porteur de projet (2013-2017) :	M. Yves FORT

| Membres du comité d'experts

Président :	Mme Odile EISENSTEIN, Montpellier
Experts :	Mme Corinne AUBERT, Paris
	M. Thierry BENVENU (représentant CNU), Rennes
	Mme Elisabet DUNACH, Nice
	M. Jean FRENEY, Lyon
	M. Michel LACROIX, Lyon
	M. Hubert LE BOZEC, Rennes
	M. Jacques LEBRETON, Nantes
	M. Francois MAUREL, représentant CoNRS, Paris
	M. Richard RETOUX, Caen

| Représentants présents lors de la visite

Délégué scientifique représentant de l'AERES :

M. Pascal DUMY

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

M. Pierre MUTZENHARDT, Université de Lorraine

M. Claude POUCHAN, INC-CNRS



Rapport

1 • Introduction

Date et déroulement de la visite :

La visite a eu lieu les 3 et 4 Janvier 2012 dans les locaux de l'Université de Nancy. Le directeur de l'UMR, qui est également le porteur du projet, a exposé le bilan et les grandes lignes du projet, les détails de celui-ci étant présentés par les porteurs des 7 équipes-projets. Ces présentations au comité d'experts ont eu lieu en présence du représentant de la tutelle CNRS et du responsable AERES ainsi que de l'ensemble des personnels permanents et non-permanents de l'Unité. Pendant l'après-midi du 3 Janvier, le comité d'experts a discuté avec les membres de l'Unité devant des affiches qui résumaient les projets et les bilans sur lesquels ils ont été construits. Les plateformes étaient également présentées sur des affiches. Pendant cette séance d'affiches, un des experts a visité les locaux, les plateformes et rencontré les ITA pour s'informer sur l'infrastructure et l'hygiène et la sécurité. Le 4 janvier, le comité a rencontré le conseil du laboratoire, les ITA et les étudiants en présence du représentant de la tutelle CNRS et du représentant de l'AERES. La visite s'est terminée par une discussion avec les tutelles universitaires représentées par les VP-CS des Universités de Nancy et de Metz, les structures de l'Université de Lorraine, créée au 1er Janvier 2012, n'étant pas encore en place, et le délégué régional CNRS de la région Centre-Est. Le comité a beaucoup apprécié l'organisation de la visite, la qualité des présentations orales et le temps laissé pour les discussions dans une atmosphère conviviale.

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

Le laboratoire SRSMC (Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes) a été créé en 1997 avec un statut d'UMR à l'Université de Nancy avec une cinquantaine de chercheurs et d'enseignants-chercheurs. Il s'intéresse, dans une approche pluridisciplinaire associant Chimie, Physique et Biologie ainsi que méthodes expérimentales et théoriques, à des systèmes moléculaires tels que les liquides moléculaires, les édifices supramoléculaires, les systèmes moléculaires organisés et les assemblages de molécules ou de macromolécules biologiques. Le LIMBP (Laboratoire d'Ingénierie Moléculaire et Biochimie Pharmacologique) composé d'une dizaine d'enseignants-chercheurs et de personnels techniques universitaires est une EA de l'Université de Metz. Ce laboratoire, bi-disciplinaire, développe i) des méthodologies de synthèse pour des molécules cytotoxiques et cytoprotectrices et ii) étudie l'action des molécules synthétisées sur les cellules. Le LPMC (Laboratoire de Physique des Collisions), composé d'une demi-douzaine d'enseignants-chercheurs et de personnels techniques universitaires, est une EA de l'Université de Metz. Cette équipe s'intéresse à l'étude et à la modélisation des processus collisionnels induits par des particules chargées. Ces trois laboratoires sont les constituants de l'UMR-projet.



Equipe de Direction : M. Yves FORT (Directeur Unité)

M. Manuel RUIZ-LOPEZ (Directeur-Adjoint)

Effectifs de l'unité : 110

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	34	43	38 (+4)
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	10	10	10
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	10	5	5
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	21 (18)	23 (21,2)	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	2		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	16		
N7 : Doctorants	20		
N8 : Thèses soutenues	44		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	3		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	27	31	
TOTAL N1 à N7	113	81	57

Notes: (a) dans le bilan global de SRSMC (colonne 2008-2011) n'est pas pris en compte les EAs 3940 et 3941. (b) 4 MCF nommés en 2011 sont publiants dans leur unité de rattachement antérieur.



2 • Appréciation sur l'unité

Avis global sur l'unité :

L'évaluation a porté sur 3 unités, l'UMR (SRSMC) de l'Université de Nancy et deux EA de l'Université de Metz, ces deux universités s'étant associées dans l'Université de Lorraine à partir du 1er janvier 2012. Les trois unités qui relèvent des mêmes écoles doctorales ont des missions convergentes qui sont de modéliser, élaborer, synthétiser, évaluer, expliquer et simuler de nouveaux systèmes moléculaires. Ces trois unités composantes ont une activité reconnue internationalement dans le domaine de la chimie théorique et physique théorique moléculaire, de la méthodologie de synthèse d'hétérocycles par la chimie organométallique et émerge dans le domaine des antimicrobiens. La production, bonne à très bonne, n'est pas répartie de façon suffisamment équilibrée entre tous. Il en est de même de la notoriété, mesurée par les invitations à des conférences. La reconnaissance internationale, mesurée par le nombre de collaborations, de visiteurs confirmés et débutants, et par le pourcentage important de publications réalisées en collaboration avec des laboratoires étrangers, est tout à fait notable. Les trois unités composantes ont de bonnes à très bonnes capacités de répondre à des appels d'offres (ANR) mais le nombre de contacts avec le monde économique est encore modeste. Le nombre de brevets est très faible mais les développements notables en logiciels devraient également être considérés. Les trois unités composantes sont bien insérées et soutenues par la région Lorraine et font partie de trois Pôles de compétitivité. Les trois unités composantes sont très actives dans les actions de formation (présence du responsable d'une ED, bon nombre de thèses encadrées et de stages M2) mais aussi dans des actions de communication envers le grand public et les écoles. La formation continue est bien mise en place. La gouvernance du SRSMC est de qualité avec un conseil scientifique impliqué dans le projet, une mutualisation des moyens techniques et administratifs. Le projet, monté avec l'ensemble du personnel (Nancy et Metz), modifie fortement les frontières des anciennes équipes. Fortement imprégné de la collaboration entre l'expérience et la théorie, le projet met en place trois équipes centrées sur des aspects fondamentaux (théorie, interactions intermoléculaires et méthodologie de synthèse) et quatre projets à caractère plus appliqué (traceurs, systèmes nano-organisés, membranes- infectiologie-cancérologie, composés photo et électroactifs pour les cellules photovoltaïques). Cette importante restructuration devrait redynamiser l'ensemble et aider les jeunes à mieux se saisir de leur thème. La structure proposée est ouverte et dynamique et pourrait encore évoluer dans le futur. Les moyens financiers et humains pour faire fonctionner le projet, encore en discussion, n'apparaissent pas comme un point critique. Le nombre relativement important de départs à la retraite peut être l'occasion de recrutements stratégiques. L'intégration des EA de Metz, toutes les deux de qualité, apparaît comme particulièrement pertinente en renforçant les frontières avec la physique et les sciences de la vie. Elle est de plus basée sur des collaborations déjà existantes. Ce projet et ces intégrations seront aidés par un renforcement de l'animation scientifique.



3 • Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Les unités évaluées sont constituées du SRSMC, une UMR dont la tutelle universitaire était l'Université de Nancy, et de deux EA (EA 3940 LIMBP et EA 3941 LPMC), dont la tutelle universitaire était l'Université de Metz. Depuis le 1er janvier 2012, ces deux universités sont réunies sous la dénomination de l'Université de Lorraine (UDL). Les trois unités composantes font partie du pôle Chimie et Physique Moléculaires, de la Fédération Barriol et de deux écoles doctorales, SESAME et BIOSE. Ces unités relèvent des sections 11, 12, 13 (rattachement principal) et 16 de l'INC et, pour le CNU, principalement des sections 31 et 32 et secondairement des sections 30, 39, 40, 41, 64 et 65.

Au 30 juin 2011, le SRSMC de Nancy comprenait 35 EC et deux EC en éméritat, 10 chercheurs, 12 ITA, 9 IATOS plus 2 en CDD, 8 ATER et post-doctorants et 20 doctorants. Le LIMBP (EA 3940) comprenait 5 EC, 2 IATOS ET 10 doctorants et le LPMC (EA 3941) 5 EC, 1 IATOS, 1 ATER et 5 doctorants. La pyramide des âges montre une double bosse en 2011 qui devrait disparaître en 2013 pour une distribution équilibrée de 35 à 65 ans.

Cet ensemble, constitué du SRSMC et des deux EA, s'est fixé comme mission de modéliser, élaborer, synthétiser et évaluer de nouveaux systèmes moléculaires en se basant sur trois domaines de compétence i) chimie quantique et modélisation moléculaire, ii) synthèse organique et organométallique, iii) chimie physique moléculaire et microbiologique moléculaire et virologie. Les trois axes du bilan s'articulent autour de la méthodologie et réactivité en chimie moléculaire, la chimie et chimie-physique pour les sciences du vivant et les matériaux et assemblages moléculaires pour les nanosciences. L'unité est reconnue dans le domaine de développements et d'applications en chimie, physique et en interface avec la biologie. Elle est également reconnue en méthodologie de synthèse hétérocyclique par voie organométallique, et émerge fortement dans le domaine des antimicrobiens. Des thèmes interdisciplinaires transversaux (vectorisation, physico-chimie des assemblages pour le développement de matériaux à propriétés contrôlées ainsi que des recherches pour la réalisation de photosensibilisateurs) ajoutent de la force à l'ensemble.

De 2007 à avril 2011, l'UMR SRSMC et les deux EA ont publié 527 ACL et 24 chapitres d'ouvrages et ouvrages, c'est-à-dire 121 ACL/an soit 3,59 ACL/an/ETPT. L'ensemble des personnels a présenté 69 conférences invitées dans des congrès internationaux ainsi que 13 dans des congrès nationaux, 55 séminaires dans des laboratoires internationaux, 46 en France. De plus, 175 communications et 337 affiches ont été présentées. Ce nombre est en augmentation par rapport au contrat précédent. Il faut cependant noter que la production tant en publications qu'en conférences invitées reste inégalement répartie entre les équipes, un point déjà remarqué dans l'évaluation précédente et sur lequel il faut encore veiller. De plus, la qualité des publications n'est pas égale entre toutes les équipes et un effort pour publier dans des journaux de meilleur impact doit être généralisé. La communication à des réunions scientifiques doit être encouragée pour tous. Il n'y a pas de non-productifs et le nombre de très peu productifs est très faible. Quelques permanents sont engagés dans des activités notables de vulgarisation et de diffusion de la chimie.

Les trois unités composantes ont encadré 66 thèses et 6 HDR ont été soutenues sur Nancy et Metz. La durée moyenne des thèses (41 mois) est en baisse par rapport au contrat précédent. De plus 44 Master2 et 35 chercheurs en CDD (post-doctorants, ATER) ont été présents. Le comité encourage tous ceux qui n'ont pas encore passé leur HDR à le faire dans les meilleurs délais.

Appréciation sur l'intégration de l'unité dans son environnement :

Le succès aux appels d'offre du secteur public (ANR, bilatéral, contrats région, etc...) est très notable. Il en résulte que la part des ressources propres de l'Unité est passée de 52% à 78% de 2007 à 2010. Le CPER et la Région Lorraine amènent en moyenne respectivement 13% et 8% des ressources.

Le nombre de contrats avec le secteur privé est encore faible. Conscient de cette faiblesse, le SRSMC a pris l'initiative de la mise en place d'un service Valosciences afin de mieux s'ouvrir sur le monde socio-économique. Cette cellule fonctionne depuis peu et commence à porter ses fruits. Il est donc recommandé d'amplifier les actions visant à valoriser leur travail et à augmenter les contacts avec les organismes privés. Ceci est l'affaire de tous y compris des théoriciens qui développent des codes.

L'Unité est labellisée par trois Pôles de compétitivité, elle a bénéficié de 2 CPER, de nombreuses actions pluri-annuelles nationales et d'actions Région Lorraine ciblées notamment sur des doctorants. Elle est impliquée dans des actions CERES visant à faciliter les transferts de projets innovants vers le tissu économique. Tous ces



soutiens démontrent clairement la forte implantation régionale de cet ensemble et le fort soutien qu'apporte la Région aux trois laboratoires de Nancy et Metz.

Les acteurs des trois laboratoires sont impliqués dans une quarantaine de collaborations internationales concrétisées par des publications en commun (1/3 des publications co-signées avec des laboratoires étrangers). Beaucoup de ces collaborations sont formalisées par des soutiens comme un PICS, un LIA et des accords bi-latéraux. Une ERC grant est portée par l'Unité.

Appréciation sur la gouvernance et la vie de l'unité :

La gouvernance de l'unité, évaluée pour le SRSMC uniquement, est satisfaisante. Le comité a constaté que le conseil scientifique joue son rôle consultatif actif auprès de la direction de l'unité sur les nombreuses facettes de la vie du laboratoire comme cela est bien apparu lors de la discussion avec le conseil. Le comité a tout particulièrement apprécié son rôle participatif et celui d'acteur majeur dans la mise en place du projet et le processus de restructuration de l'unité en 7 équipes-projets intégrant les deux EA de Metz. La communication entre la direction, le conseil scientifique et l'ensemble de l'Unité est correctement assurée.

L'unité a fait un effort considérable de mutualisation de ses moyens et a mis en place plusieurs plateformes (analyse et caractérisation, synthèse, AntiBactérienne Chimique (ABC), calcul). Ces plateformes, qui sont bien structurées et qui travaillent de façon soutenue, ne sont pas rattachées à la Fédération Barriol. Par ailleurs, les membres de l'Unité accèdent aux plateformes de la Fédération. Un mésocentre de calcul sur la Lorraine est en cours d'étude. Le groupe 'Soutien administratif et logistique' comprend gestion, maintenance ainsi que la chimiothèque. La plupart des 23 ITA-IATOS relève maintenant de l'UMR.

Les problématiques d'Hygiène et de Sécurité sont bien prises en compte dans les différentes activités du laboratoire. Au cours du contrat évalué, un important effort a été entrepris par le laboratoire pour mettre à niveau, au fur et à mesure de la mise à disposition par l'UDL, de surfaces pour l'accueil/regroupement des différents acteurs du SRSMC. Les travaux ne sont pas terminés et les moyens pour les poursuivre et les terminer ne sont pas encore clairement identifiés. Des demandes auprès des tutelles universitaires sont encore en cours d'arbitrage. Selon le comité, il paraît important que l'unité soit rapidement dans des conditions optimales pour poursuivre ses travaux dans les meilleures conditions.

L'animation scientifique existe à plusieurs niveaux et en particulier au niveau des Ecoles Doctorales (journées de l'école Doctorale, présentations par des doctorants dans des journées de l'unité, journée des entrants, etc...). Des congrès ont également été organisés. Cependant l'animation scientifique transversale à toute l'UMR-projet doit être amplifiée, ceci étant d'autant plus important que l'UMR-projet ne sera pas mono-site. Il apparaît que des actions récentes d'animation ont été entreprises dans ce sens par plusieurs jeunes permanents. Cet effort est à maintenir.

Les trois unités constitutives ont un nombre important d'enseignants-chercheurs. Le responsable de l'une des écoles doctorales (SESAMES) est sur le site de Nancy. Le nombre de doctorants est raisonnable et le nombre de Master2 important. Des actions de vulgarisation et de communication auprès du grand public et des écoles, et pour la fête de la Science, ont été entreprises avec succès. Les doctorants expriment leur satisfaction pour le soutien qu'ils reçoivent pendant la réalisation de leur thèse ainsi que pour la poursuite de leur activité après leur thèse. L'encouragement qu'ils reçoivent à présenter leurs travaux dans des réunions scientifiques est appréciable. Le comité recommande également de généraliser la mise en place de séminaires intra- et inter-équipes dont le nombre apparaît pour le moment comme insuffisant. Le devenir de plusieurs anciens doctorants n'a pas pu être reporté et il est important que ce nombre soit minimisé.

Une bonne partie des permanents est fortement impliquée dans les tâches d'intérêt collectif au niveau des instances universitaires et régionales, et également au niveau national.

L'Unité est labellisée par trois pôles de compétitivité. Elle a bénéficié de 2 CPER, de nombreuses actions pluri-annuelles soutenues par des actions Région Lorraine ciblées notamment sur des doctorants. Elle est impliquée dans des actions CERES visant à faciliter les transferts de projets innovants vers le tissu économique. L'ensemble de ces soutiens démontre clairement la forte implantation régionale de cet ensemble et le fort soutien qu'apporte la Région aux trois unités constitutives de Nancy et Metz.



Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Le projet, établi en concertation avec l'ensemble du personnel, est en forte rupture avec le passé. Le comité a apprécié l'enthousiasme de tous et en particulier des plus jeunes à porter ce projet. Ce projet se propose d'associer deux équipes EA de Metz, de restructurer les forces des 8 équipes du bilan en sept équipes-projets. Dans le projet, on distingue trois équipes qui se retrouvent autour de métiers (Chimie Théorique et Physique Théorique Moléculaires, Etudes physico-chimique expérimentales et théoriques des interactions intermoléculaires, Méthodologie de synthèse organique, en particulier synthèse hétérocyclique organométallique). Autour de ces trois thèmes dont les recherches ont un aspect fondamental se positionnent quatre équipes-projets sur des thèmes plus appliqués et plus ciblés : traceurs, systèmes nano-organisés, membranes- infectiologie-cancérologie, composés photo et électroactifs. Les deux équipes de Metz, qui collaboraient déjà avec des équipes de Nancy, s'insèrent de manière tout à fait pertinente dans le projet en apportant une plus value scientifique notable (augmentation de l'interface avec la physique et les sciences de la vie). La complexité du projet est que la plupart des permanents appartiendront à plus d'une équipe. Cette organisation, au demeurant complexe, devrait permettre de focaliser les compétences et d'associer des expertises complémentaires pour redynamiser l'ensemble et créer des synergies. Ce projet est vital pour cette unité dont le dynamisme semblait affaibli comme le signalait l'évaluation précédente. La politique d'affectation des moyens est en place même si des affinements sont nécessaires : elle est basée sur une très forte mutualisation des moyens et l'obligation pour chaque équipe d'obtenir des financements extérieurs. L'Unité se garde aussi la capacité d'aider à la mise en place de projets scientifiques émergents soit par ses moyens propres soit en aidant à des montages financiers.

Les thématiques globales qui ont été présentées dans les bilans par l'ensemble des acteurs (Nancy et Metz) sont maintenues. L'originalité provient d'une plus grande interdisciplinarité et de collaboration renforcée entre les études expérimentales et les études théoriques, une des forces de cet ensemble. L'importante restructuration devrait également aider les plus jeunes à se saisir de leur projet. La structure proposée est ouverte et dynamique et pourrait encore évoluer dans le futur en remplaçant les affectations partielles dans des équipes-projets par des programmes de recherche transversaux tout aussi visibles et efficaces. Par ailleurs, il sera probablement nécessaire de hiérarchiser et de sélectionner les programmes de recherche de façon à faire avancer en priorité les thèmes les plus porteurs.

Points forts et opportunités :

On note une grande qualité des publications et une production bonne à très bonne de plusieurs équipes, de plus un nombre important de publications a été fait en collaboration avec des laboratoires internationaux.

L'unité possède des acteurs visibles à très visibles sur la scène internationale.

Le projet apparaît en rupture avec le passé, il a été mis en place en concertation avec l'ensemble du personnel ce qui devrait permettre de redynamiser l'ensemble.

L'intégration des deux EA de Metz, jugée de bonne à très bonne qualité, renforce scientifiquement le projet par l'apport de compétences scientifiques complémentaires. Cette intégration est en cohérence avec le champ thématique de l'ensemble des équipes qui appartiennent aux mêmes ED SESAME et BIOSE.

L'unité présente de nombreuses collaborations internationales de qualité et souvent soutenues financièrement.

Le nombre de non permanents à tous les niveaux (Master2, Doctorants, CDD) est très raisonnable.

Le nombre notable d'ANR démontre une très bonne capacité de répondre à des appels d'offres.

L'intégration locale est très bonne et le soutien des instances régionales est important.

L'unité a mis en place des plateformes techniques efficaces qui bénéficient d'une bonne mutualisation des services soutien et logistique.

Le nombre de départs à la retraite est relativement important ce qui peut être l'opportunité de soutenir le projet par des recrutements adaptés.



Points faibles et risques:

La production est inégalement répartie entre les équipes.

Le rayonnement des permanents est inégal comme le montrent notamment les invitations à des congrès portées par un petit nombre de personnes.

L'animation scientifique est encore peu visible. La généralisation de séminaires intra- et inter-équipes est recommandée, le nombre actuel apparaît insuffisant.

Les liens avec le monde économique et les contrats industriels qui en résultent sont encore trop peu nombreux. Le comité encourage tous les membres à poursuivre leurs efforts sur cet aspect. Il encourage aussi le laboratoire à poursuivre le développement de la cellule Valoscience. L'activité de celle-ci, encore récente, devrait porter ses fruits. Il est cependant difficile d'évaluer l'efficacité de cette cellule qui est encore trop jeune.

La distribution des moyens financiers et la prioritarisation des emplois est encore en discussion ce qui est compréhensible pour une unité aussi fortement restructurée.

En raison de la présence importante de la théorie et de la modélisation sur une partie importante des activités scientifiques de l'unité, il est important de s'assurer que le matériel informatique soit maintenu dans des conditions correctes et que les ressources humaines pour le faire soient présentes. Il serait en particulier bon d'avancer sur le dossier du Mésocentre Informatique de Lorraine et d'en voir les conséquences sur l'informatique devant rester dans les laboratoires.

Synthèse

Le SRSMC (Nancy) et deux EA, LIMBP et LPMC (Metz), ont les missions convergentes de modéliser et synthétiser de nouveaux systèmes moléculaires. Ces équipes ont une activité reconnue internationalement en chimie et physique théorique, méthodologie de synthèse organométallique et émergent dans le domaine des antimicrobiens. La production est bonne à très bonne mais n'est pas équilibrée. Il en est de même de la notoriété mesurée par les invitations dans des réunions scientifiques. Cependant, l'attractivité est bonne à tous les niveaux, d'étudiants à chercheurs confirmés. Les capacités de répondre à des appels d'offres sont bonnes mais le nombre de contacts avec le monde économique est modeste. Les trois unités-bilan sont bien insérées et soutenues par la région Lorraine et font partie de trois Pôles de compétitivité. Le projet, réalisé en concertation avec tous, modifie fortement les frontières des anciennes équipes. Le projet, auquel l'intégration des équipes de Metz apporte une force réelle, est centré sur trois thèmes d'intérêt fondamental, entouré de quatre projets à caractère plus appliqué. Cette structuration, dynamique et ouverte, devrait redynamiser l'ensemble et aider les jeunes à se saisir de leurs projets.



4 • Analyse équipe par équipe

Équipe 1 : Physico-chimie des Colloïdes (PCC)

Nom du responsable : Mme Marie-José STEBE

Effectifs : 10

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	2	-	3 (a)
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	1	-	1
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	1	-	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	0		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	3		
N7 : Doctorants	3		
N8 : Thèses soutenues	4		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	0		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	2	-	
TOTAL N1 à N7	11	-	4

(a) un MCF recruté en 2011



• Appréciations détaillées

Compte tenu de la discontinuité entre les équipes bilans et celles proposées pour le projet, une évaluation sur les critères 1-3 a été faite pour les premières, le critère 4 étant évalué sur le nouveau périmètre en prenant en compte l'évaluation sur le bilan.

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Le cœur de métier de l'équipe relève de la physico-chimie des interfaces et des assemblages moléculaires et supramoléculaires d'amphiphiles fluorés dont la maîtrise permet l'élaboration de matériaux inorganiques ou hybrides organo-minéraux hiérarchisés. La connaissance fondamentale de la physico-chimie de ces processus d'autoassemblage qui orientent la formation des matériaux solides à architecture contrôlée, représente un point fort et original qui donne une spécificité nancéienne dans le domaine.

Durant la période évaluée, l'équipe PCC était constituée de deux chercheurs permanents (1Pr et 1 DR), un jeune MCF ayant rejoint ce groupe en janvier 2011. La production scientifique de l'équipe se compose de 23 publications dont 21 de rang A soit une moyenne de 3,21 publications/an/ETPT (facteur d'impact moyen 2,84). Cette production écrite est très bonne si on la compare à celle de la communauté nationale ou internationale. La participation de l'équipe à des manifestations scientifiques internationales se traduit par 12 communications orales et 2 séminaires. Cette présence sur la scène internationale est un peu faible et doit être améliorée dans le prochain quinquennal.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe entretient des relations partenariales académiques efficaces et fructueuses avec des universités françaises et étrangères et évidemment avec son environnement immédiat et est porteuse d'une ANR JCJC. L'équipe a su s'associer à des partenaires socio-économiques : Pôle de compétitivité Fibres Grand Est (financement FUI), contrats privés avec Ge Energy et Arcelor Mittal. Cette ouverture vers le secteur industriel a permis à l'équipe d'accroître de manière très significative ses ressources propres. Le comité encourage les acteurs à poursuivre dans cette voie en sachant placer le curseur entre recherche fondamentale et recherche applicative au bon endroit pour ne pas dénaturer le cœur de métier de l'équipe, mais au contraire le valoriser.

L'équipe participe activement à l'organisation des enseignements et à la vie universitaire. Elle a su recruter de bons étudiants et 4 thèses ont été soutenues dans le présent quadriennal. Ceci est très honorable compte tenu de la taille de l'équipe.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Des collaborations académiques internationales existent avec la Grèce, la Fédération de Russie et l'Université d'Uppsala de Suède, dans les domaines de la caractérisation des systèmes mixtes de surfactants et des bioréacteurs basés sur l'encapsulation d'enzymes dans des matériaux poreux. La durabilité de ces actions coopératives internationales démontre l'attractivité et le savoir-faire de l'équipe de Nancy.

L'équipe a su attirer un maître de conférences en 2011 et un technicien CNRS en 2009. Plusieurs stagiaires master, doctorants, post-doctorants ou chercheurs contractuels sont d'origine étrangère, ce qui témoigne de l'attractivité de l'équipe.



Conclusion :

- **Avis global sur l'équipe :**

Globalement, l'activité en physico-chimie des interfaces et des assemblages supramoléculaires pour l'élaboration de matériaux nanostructurés est de grande qualité, avec une très bonne production scientifique et un impact important dans le domaine de recherche. Le rayonnement de l'équipe en termes de conférences invitées doit être amélioré.

- **Points forts et opportunités**

Le point fort de l'équipe est l'ingénierie et la physico-chimie des systèmes moléculaires et supra moléculaires organisés qui orientent la structuration de matériaux à porosité contrôlée. Elle dispose d'un solide réseau de collaborations et son activité est contractuellement soutenue.

- **Points faibles et risques**

Le rayonnement à l'international doit être renforcé (conférences invitées).

L'interaction avec le secteur privé pourrait être améliorée.



Équipe 2 : Groupe d'Etudes des Vecteurs Supramoléculaires du Médicament (GEVSM)

Nom du responsable : M. Jean-Bernard REGNOUF DE VAINS

Effectifs : 22

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	9 (+2 (a))	-	9 (b)
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	0	-	0
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	3	-	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	5 (3,6)	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	0		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	4		
N7 : Doctorants	4		
N8 : Thèses soutenues	11		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	1		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	6 (+2(a))	-	
TOTAL N1 à N7	25(+2(a))	-	10

(a) Dont 2 départs en 2008

(b) Dont un recrutement en 2011



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe est constituée exclusivement d'enseignants-chercheurs dans les domaines de la synthèse organique, la physico-chimie des interfaces, la galénique, la microbiologie-virologie et bactériologie (secteurs CNU 31-32-33-39-40-41-64). Cet ensemble permet au groupe d'aborder des thématiques liées à la conception, la synthèse et l'évaluation biologique de molécules d'intérêt thérapeutique, au développement de nanovecteurs pour la délivrance de principes actifs et à la mise au point d'assemblages métallo-supramoléculaires en particulier pour le magnétisme moléculaire. Ces travaux s'appuient à la fois sur des recherches de nouveaux milieux et nouveaux réactifs plus 'éco-compatibles' pour la synthèse, sur la mise au point de modèles de membranes biologiques pour l'étude des interactions avec des molécules (bio)actives et sur l'évaluation des propriétés biologiques en particulier au sein de la plateforme ABC (criblage d'antibactériens) du laboratoire. Ce regroupement de compétences multidisciplinaires est pertinent et cohérent par rapport aux objectifs de recherche (développement de vecteurs supramoléculaires du médicament) même si certains domaines d'applications étudiés ne concernent pas vraiment ce secteur d'application (magnétisme moléculaire).

Au 30 juin 2011, l'équipe comprenait 15 permanents, 3 ATER, 4 doctorants (2 allocataires et 2 salariés) et deux chercheurs contractuels (post-doctorants). Onze thèses ont été soutenues ainsi que 3 Master2. Six sur les 9 permanents (« scientifiques ») de l'équipe (66 %) possèdent l'Habilitation à Diriger les Recherches (HDR).

L'équipe est de bonne qualité avec des compétences variées. La production des publications apparaît régulière (56 Publications, 2,94 ACL/an/ETPT avec un facteur d'impact moyen de 2,99) mais est très inégale selon les membres de l'équipe dont certains font preuve d'un dynamisme évident. Un brevet a été déposé et deux demandes sont actuellement en cours.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

Une action de valorisation est en cours via le programme Cérés avec un brevet dans le domaine de la recherche de nouveaux agents anti-infectieux, antiviraux et antibactériens. Deux contrats ont été établis avec l'ADEME sur les aspects 'nouveaux milieux'. Par contre, aucun partenariat national, européen ou international conduisant à un budget affecté à l'unité n'a été mentionné, cas unique dans l'unité.

Plusieurs membres de l'équipe sont fortement impliqués dans des fonctions administratives (Doyen, Vice Doyen) en particulier au sein de la Faculté de Pharmacie de l'Université Henri Poincaré.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Un maître de conférences de l'équipe a reçu le prix « ICAAC Infectious Diseases Fellows Grant program » de l'American Society for Microbiology lors du 50th annual Interscience Conference on Antimicrobial and Chemotherapy en 2010 à Boston. Néanmoins, le nombre total de conférences (une ou deux) et séminaires invités (deux) reste faible. Deux MCF ont intégré l'équipe en 2008 et un recrutement d'enseignant-chercheur a été réalisé en 2011. La participation à des programmes internationaux et nationaux est modeste (deux programmes Hubert Curien, « Polonium » et « Procope »).



Conclusion :

- **Avis global sur l'équipe :**

L'équipe présente une bonne à très bonne activité scientifique avec des projets construits autour des axes liés au développement de molécules d'intérêt thérapeutique et des vecteurs supramoléculaires. Néanmoins, la valorisation de ces travaux dans le cadre de partenariats industriels et dans le cadre d'appels d'offre nationaux et/ou internationaux semble insuffisante ce qui peut constituer un frein pour assurer une bonne visibilité des membres de l'équipe (notamment au niveau international).

- **Points forts et opportunités :**

L'équipe possède une bonne expertise en chimie à l'interface Chimie-Biologie, avec des jeunes chercheurs motivés. La mise en place de la plate-forme ABC pourrait renforcer la visibilité des activités de recherche du laboratoire.

- **Points faibles et risques**

Il manque des collaborations avec des équipes académiques et/ou industrielles pour l'évaluation biologique des molécules, notamment in vivo.

Les aspects d'identification et de caractérisation physico-chimiques des édifices supramoléculaires semblent peu abordés et mériteraient des développements plus conséquents. Ces développements ne pourraient être mis en œuvre qu'à condition de diminuer sensiblement le nombre, actuellement trop important, de programmes de recherches. Cette dispersion thématique affaiblit l'équipe.



Équipe 3 : Synthèse Organométallique et Réactivité (SOR)

Nom du responsable : M. Philippe GROS

Effectifs : 20

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	5	-	4
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	2	-	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	2	-	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	4 (3)	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	0		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	5		
N7 : Doctorants	4		
N8 : Thèses soutenues	6		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	1		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	6	-	
TOTAL N1 à N7	22 (21)	-	7



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe est composée de 7 enseignants-chercheurs et chercheurs (4,5 ETPT). La production scientifique est très satisfaisante (73 publications, 3 chapitres d'ouvrages), et bonne en terme d'impact scientifique (IF moyen 3,13) avec 9 publications (12%) parues dans des revues avec un indice d'impact > 5 soit sur le contrat 2,2 publication/personne/an (3,6/ETPT/an) ; tous les chercheurs et enseignants-chercheurs sont producteurs. Durant la période, l'équipe a encadré 8 post-doctorants et chercheurs contractuels et 6 thèses ont été soutenues sur le contrat.

L'équipe possède un savoir-faire largement reconnu dans la communauté scientifique sur les métallations d'hétérocycles avec des bases fortes et la synthèse contrôlée d'hétérocycles complexes polyfonctionnels. Elle aborde également des thèmes nouveaux et originaux sur les agrégats de type "ate-complexes", thème soutenu par une ANR. Outre la méthodologie de synthèse organique, l'équipe a développé des applications variées amenant à des perspectives porteuses dans le domaine des matériaux (composants photo-actifs dans des cellules solaires, fonctionnalisation de nanoparticules et de nanotubes).

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe est dynamique avec une bonne participation dans des réseaux : 1 européen, 1 national (GDR nano-hybride) et 2 régionaux (Cnano et Photovoltaïque Grand-Est) et de nombreuses collaborations nationales et internationales, ainsi que l'organisation de congrès. Son domaine d'activité est soutenu par 3 ANR. La valorisation industrielle reste cependant à renforcer. Les membres de cette équipe font foi d'un dynamisme local et national au niveau des responsabilités collectives (Direction de l'Unité, membre commissions AERES et ANR, membre CS établissement, directions de Diplôme et filière, présidence SCF et membre SCF nationale...)

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

L'équipe encadre actuellement 4 doctorants ; 6 thèses ont été soutenues. Un post-doctorant est actuellement dans l'équipe, 8 post-doctorants et chercheurs contractuels ont effectué leur recherche pendant la période évaluée. Tous les docteurs sont actuellement placés (post-doctorant ou emploi CDI). Toutefois, au vu de l'intérêt de ces thématiques et de sa notoriété, le nombre des conférences invitées dans des congrès est faible (1), même si le nombre de séminaires (19) et communications orales (25) est satisfaisant.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'équipe SOR présente une bonne activité scientifique. Elle possède une très bonne notoriété dans le domaine des métallations et des super-bases et dans la conception de composés hétérocycliques avec des applications intéressantes amenant à des perspectives porteuses dans le domaine des matériaux (composants photo-actifs dans des cellules solaires, fonctionnalisation de nanoparticules et de nanotubes). L'équipe est dynamique comme le montre sa capacité à obtenir des financements ANR. Toutefois, le nombre des conférences invitées dans des congrès est relativement faible et la valorisation de ses travaux dans le cadre de partenariats industriels doit être renforcée.

▪ Points forts et opportunités :

La notoriété est indiscutable dans le domaine des métallations de dérivés hétérocycliques.

La productivité scientifique en termes de publications et d'impact est bonne.

Les thématiques sont bien soutenues par des financements ANR et on note une ouverture vers des sujets originaux.

▪ Points faibles et risques:

Le nombre de conférences invitées dans des congrès est faible.

La valorisation industrielle doit être renforcée.



Équipe 4 : Chimie et Biochimie Théorique (CBT)

Nom du responsable : M. Manuel RUIZ-LOPEZ

Effectifs : 25

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	7	-	7
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	2 (+1(a))	-	4 (b)
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	2	-	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	2	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	8		
N7 : Doctorants	5		
N8 : Thèses soutenues	5		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	0		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	8 (+1(a))		
TOTAL N1 à N7	26(+1(a))	-	12

(a) 1 DR arrivé en Janvier 2011 (b) 1 CR recruté en 2011



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Cette équipe est constituée au 1er Janvier 2012 de 5 Professeurs dont 1 émérite, 4 McF dont une chaire d'excellence et 1 en détachement, 2 DR dont un est arrivé en janvier 2011 par mobilité intra-UMR, 1 CR2, et 2 ITA. Le nombre de non-permanents est relativement important surtout pour un groupe de théorie : 5 thèses soutenues et 5 en cours dont 1 en cotutelle. Par ailleurs l'équipe a accueilli pour des séjours de longue durée 8 doctorants d'universités étrangères, ainsi que 5 Master, 2, 6 ATER et 2 post-doctorants. Cette équipe a subi des mouvements importants puisque 6 permanents (3 EC, 3C) sont partis depuis 2007.

L'équipe CBT possède des compétences reconnues internationalement dans le domaine de la conception et le développement d'outils de calcul adaptés à la modélisation de systèmes moléculaires complexes notamment dans la représentation des solvants et solutions avec des extensions originales dans le domaine des systèmes biologiques et macromoléculaires. Les points forts de l'équipe sont la mise au point de méthodes mixtes QM/MM/MD, via l'approche LSCF du traitement des frontières, une approche efficace du calcul de l'énergie libre et la mise au point d'une méthode du calcul des états excités efficace pour les gros systèmes. Ces méthodes qui permettent de lever des verrous importants de l'étude théorique des systèmes complexes ont été utilisées pour des applications intéressantes comme la capture électronique dans des macromolécules (ANR), le docking de composés d'intérêt pharmacologique (développement d'une méthode intégrant la chimie quantique) ou la simulation des liquides moléculaires et de divers solvants (eau, CO₂ sub- et supercritique) qui reste une des grandes compétences de l'équipe. Des études de nucléation et de polymorphisme sont également abordées. L'arrivée récente d'un chercheur par mobilité intra-UMR a augmenté la force de l'équipe dans le domaine de la biologie et la modélisation des membranes.

La production de cette équipe est très bonne et régulière: 87 publications avec un taux moyen de 4,2 ACL/an/ETPT ainsi que 7 ouvrages. Il n'y a pas de non-produisants dans l'équipe. Une seule personne a un taux de publication faible, les autres ayant tous un taux notable à très important. Le facteur d'impact moyen des publications est de 2,8, ce qui correspond à un très bon niveau dans ce domaine. L'équipe favorise la publication dans les journaux de premier ordre de la chimie physique, de la biologie et chimie organique et publie aussi dans des journaux généralistes de haut niveau.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe a eu un fort taux de succès sur les appels d'offres (3 ANR, 2 CPER et un soutien de région) ainsi qu'une ERC grant et une chaire d'excellence pour un McF. Un des soutiens de la région a été accordé dans le cadre d'un projet « jeune chercheur ». Un membre de l'équipe est impliqué dans un LEA avec la Slovénie. Plusieurs contrats bilatéraux ont été obtenus.

Cette équipe est fortement impliquée dans la formation puisque le responsable d'une des écoles doctorales (SESAME) est un membre de cette équipe.

L'équipe joue un rôle moteur au sein de l'unité au travers de ses collaborations internes en développant des projets avec des expérimentateurs des équipes SUCRES (réactivité au sein de nouvelles cyclodextrines, docking de ligands sur un récepteur PPAR), SOR (chimie des organolithiens et complexes de ruthénium) et GEVSM (cyclodextrine en milieu supercritique). Cette collaboration expérience/théorie est une des signatures visibles de l'équipe et un moteur pour l'ensemble de l'UMR.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

La visibilité internationale de l'équipe est démontrée par le grand nombre (25) de conférences invitées ainsi que par le nombre notable de communications orales. Par ailleurs, six congrès et workshop nationaux et internationaux ont été co-organisés ou organisés par plusieurs membres de l'équipe démontrant le dynamisme et la reconnaissance de la communauté envers cette équipe.



Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

Cette équipe qui a subi une très forte évolution pendant la période en raison de départs à la retraite et d'arrivées de permanents a su garder une très bonne activité, maintenir sa très forte expertise en chimie théorique (méthodologies et applications) et s'ouvrir vers les macromolécules biologiques.

L'équipe joue un rôle moteur au sein de l'unité au travers de ses collaborations internes en développant des projets en interaction avec des expérimentateurs des équipes SUCRES (réactivité au sein de nouvelles cyclodextrines, docking de ligands sur un récepteur PPAR) SOR (chimie des organolithiens et complexes de ruthénium) et GEVSM (cyclodextrine en milieu supercritique). Ce rôle moteur est un atout très important du projet de l'UMR.

▪ Points forts et opportunités :

Les approches permettant d'étudier des systèmes complexes sont originales.

Il y a un bon équilibre et une synergie de développements et d'applications dans le cadre de la collaboration expérience-théorie

Plusieurs des membres ont une visibilité et une notoriété internationales.

Les membres récemment recrutés ont une forte activité et une grande implication.

Les collaborations théorie/expérience au sein de l'UMR constituent une activité structurante.

▪ Points faibles et risques :

En dépit de la réussite éclatante de l'ensemble des projets entrepris, l'équipe doit veiller à ne pas s'affaiblir en se dispersant sur un trop grand nombre de thématiques. Elle doit par ailleurs encourager les collaborations internes entre membres de l'équipe.

La valorisation des codes de calcul doit être un souci permanent.



Équipe 5 : Dynamique des Assemblages Membranaires (EDAM)

Nom du responsable : M. Christophe CHIPOT

Effectifs : 9

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	0	-	0
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	3 (-1(a))	-	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	0	-	-
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	-	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2		
N7 : Doctorants	2		
N8 : Thèses soutenues	3		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	1		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	-	
TOTAL N1 à N7	7	-	2

(a) 1 départ DR en 2011



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe EDAM (Dynamique des Assemblages Membranaires) comprenait, pendant la période d'exercice, 3 permanents (1 CR et 2 DR). Un DR a quitté cette équipe pour une mutation inter-équipe dans le laboratoire en janvier 2010. L'équipe travaille sur la description de la structure et des propriétés dynamiques de la membrane cellulaire à l'aide de simulations numériques tous atomes ou gros grains réalisées sur des modèles et des échelles de temps compatibles avec les processus biologiques étudiés. L'équipe étudie plus particulièrement les mécanismes moléculaires associés au transport membranaire (transport mitochondrial, canaux potassiques, aquaporines) et la transduction du signal. Elle apporte également des éléments de compréhension sur l'interaction de cycles peptidiques avec des membranes bactériennes. Un développement vers les nanosciences et la solvatation des nanotubes de carbone est également mené en parallèle des recherches sur les membranes biologiques.

Le développement méthodologique est une part importante de l'activité de l'équipe. Elle a, par exemple, acquis une réputation mondiale pour le calcul des énergies libres. L'équipe contribue activement au développement du code NAMD, logiciel de référence dans la communauté. Un prolongement de ces développements concerne les calculs de solubilité que l'équipe s'attache à mettre en œuvre au moyen d'une méthode combinant données expérimentales et calculs d'énergies libres. Un autre développement qui est dans le droit fil des compétences des théoriciens de Nancy, concerne le traitement des potentiels intermoléculaires polarisables dans l'approximation classique. L'équipe contribue également à l'amélioration des potentiels utilisés pour les modèles « gros grains ».

Des résultats tout à fait remarquables ont été acquis dans le domaine du transport membranaire et ont donné lieu à 46 ACL, soit 3,4 ACL/an/ETPT pour un facteur d'impact moyen de 4,2, 7 ouvrages, 26 conférences invitées, 29 séminaires internationaux, 8 séminaires nationaux. Les résultats sont publiés dans les meilleurs journaux du domaine de la physico-chimie, biophysique et de la chimie théorique mais aussi dans les journaux généralistes de plus haut niveau. Plusieurs articles ont eu l'honneur de la couverture du journal.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe collabore très activement avec des laboratoires français et étrangers (IBS Grenoble, University of Urbana-Champaign, NASA Ames Research Center, University of Chicago, Universitat Barcelona, University of Nankai). Ces collaborations actives, et en particulier, celle avec Urbana Champaign, sont particulièrement efficaces pour les développements méthodologiques.

L'équipe possède une capacité importante à obtenir des financements (PICS, Egide) et présente un taux de réussite élevé aux appels d'offre de l'ANR (5 contrats). On note également une relation industrielle avec la société Sanofi Aventis.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Les activités de l'équipe dans le domaine de la modélisation des membranes la place au tout premier plan mondial. Ce très haut niveau scientifique est attesté par les nombreuses conférences et communications sur invitations (26 conférences invitées et 29 séminaires invités).

Deux thèses et une habilitation à Diriger des Recherches ont été soutenues pendant la période, 2 thèses sont en cours ce qui dénote une bonne capacité à attirer les étudiants.



Conclusion

- **Avis global sur l'équipe:**

L'équipe EDAM relève avec succès les défis de la modélisation « tous atomes » des propriétés et de la dynamique des membranes biologiques. L'activité s'appuie sur un développement méthodologique fort et des applications riches et variées en lien avec les membranes biologiques. En dépit de sa petite taille, l'équipe possède une très grande visibilité et une excellente notoriété. La grande qualité des résultats obtenus en fait un acteur incontournable dans l'étude et la modélisation des systèmes membranaires. L'équipe EDAM possède une renommée internationale. La production scientifique est très bonne en qualité et quantité.

Le départ récent d'un permanent fragilise l'avenir de cette équipe et il serait souhaitable qu'elle développe localement des collaborations pour assurer son ancrage dans les thématiques de l'UMR.

- **Points forts et opportunités :**

La taille et la complexité des systèmes étudiés rendent les sujets de recherche particulièrement difficiles et porteurs d'un risque certain. Le développement d'outils de modélisation originaux pour le calcul de l'énergie libre, les énergies de solvation ou les potentiels polarisables est une compétence reconnue de l'équipe.

- **Points faible et risques:**

L'équipe est de petite taille et elle doit renforcer sa capacité d'encadrement, notamment par l'HDR du permanent qui n'est pas encore habilité. Le départ récent d'un permanent fragilise l'avenir de cette équipe et il serait souhaitable qu'elle développe localement des collaborations pour assurer son ancrage dans les thématiques de l'UMR.



Équipe 6 : S.U.C.R.E.S.

Nom du responsable : M. Yves CHAPLEUR

Effectifs :

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	8	-	8
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	3	-	3
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	2	-	-
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	0		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	4		
N7 : Doctorants	3		
N8 : Thèses soutenues	12		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	0		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	6	-	
TOTAL N1 à N7	21	-	11



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe s'intéresse à la recherche et la synthèse de molécules bioactives et d'outils moléculaires pour la biologie. Elle est reconnue pour son activité dans le domaine des glucides et des mimes moléculaires. Les travaux ont visé le développement de plateformes comme supports de pharmacophores, comme molécules d'adressage vers les cellules tumorales et pour la mise au point d'outils pour la modulation de voies de signalisation impliquant les récepteurs nucléaires PPAR. Une autre thématique, initiée en 2005, concerne la recherche de principes actifs à partir de sources naturelles. L'équipe s'est également tournée vers l'étude physico-chimique d'interactions dans le cas de modèles de systèmes biologiques impliquant en particulier des phénomènes de transfert de protons, des interactions cations-biomolécules ainsi que vers la préparation de catalyseurs biomimétiques. Enfin, des activités ont été menées dans le domaine des traceurs pour l'imagerie médicale à partir de glucides, de macrocycles azotés et de polymères cationiques.

Au 30 juin 2011, l'équipe comprenait 12 permanents dont un TCS CNRS (50%), 2 post-doctorants, 3 doctorants et 4 chercheurs contractuels. Douze thèses ont été soutenues ainsi que 4 Master2. Six des 11 permanents (« scientifiques ») de l'équipe (54 %) possèdent l'Habilitation à Diriger les Recherches (HDR).

Le personnel permanent est de qualité mais le nombre de publications ramené à l'équivalent temps plein par an est seulement de 1,73 ce qui en fait le chiffre le plus bas des équipes de l'unité.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe a maintenu des liens avec l'industrie pharmaceutique sous la forme de contrat de recherche ou de service (Sanofi-Aventis, CISBio International) et elle est (ou a été) impliquée dans trois contrats ANR en tant qu'équipe partenaire. Des responsabilités administratives importantes (Directeur de l'Unité) ont été assurées par l'un de ses membres jusqu'au 31 décembre 2008.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Le rayonnement apparaît comme étant relativement faible avec une seule conférence invitée et deux séminaires. Néanmoins, l'équipe a mis en place plusieurs collaborations au niveau national et international. Elle participe à plusieurs programmes de recherche qui lui ont permis de recruter des doctorants et chercheurs contractuels.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'activité scientifique est de bonne qualité dans l'ensemble, avec plusieurs collaborations, mettant notamment à profit l'expertise de l'équipe dans le domaine de la glycochimie. Néanmoins, le rayonnement de l'équipe en termes de publications et de conférences invitées aurait pu être meilleur. Elle a participé à des programmes de recherche académiques mais compte tenu des compétences et de l'expertise des différents chercheurs, l'équipe aurait dû porter des ANR et ne pas seulement être partenaire.

▪ Points forts et opportunités :

L'équipe possède une bonne expertise en chimie des sucres et à l'interface Chimie-Biologie et elle compte des jeunes chercheurs motivés.

▪ Points faibles et risques :

La production scientifique pour cette équipe reste modeste, une seule conférence invitée et deux séminaires. Compte tenu de sa taille, le nombre de contrats de financements publics et privés mériterait d'être plus important.

On note une dispersion des sujets qui nuit à la visibilité. Certaines activités (catalyseurs biomimétiques) sont un peu éloignées des thèmes principaux de l'équipe (molécules bioactives et radiotraceurs).

Les membres de l'équipe ne participent pas suffisamment aux réunions scientifiques, ce qui entraîne une visibilité insuffisante de l'ensemble.



Équipe 7 : EA 3940 - LIMBP

Nom du responsable : M. Gilbert KIRSCH

Effectifs 21

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	6	-	4
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	0	-	0
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	2	-	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	2	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	1		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	1		
N7 : Doctorants	10		
N8 : Thèses soutenues	13		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	1		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	3	-	
TOTAL N1 à N7	22	-	5



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

L'équipe d'accueil LIMBP (Metz) était composée de 6 enseignants-chercheurs jusqu'en 2009, actuellement 5 EC, elle est divisée en deux groupes : un groupe de chimistes de synthèse (1 PR et 1 MCF) et un groupe de biochimistes (1PR, 2 MCF) qui accueille également 2 EC extérieurs à l'université (1 PR et 1 MC). Cette équipe est globalement homogène puisque composée de membres appartenant aux sections 32 et 65 du CNU. Quinze thèses ont été soutenues, 8 sont en cours ainsi que 9 Master2 et 1 post-doctorant est présent. Trois membres de l'équipe possèdent l'Habilitation à Diriger les Recherches (HDR).

Les activités de l'équipe de synthèse visent le développement de méthodes de synthèse dans diverses séries hétérocycliques simples (thiophènes, sélénophènes) et sur des systèmes polycycliques plus complexes dans le but de préparer des molécules à activités biologiques potentielles (cancer et maladies dégénératives). Les activités biologiques des molécules préparées sont testées soit par les biochimistes du LIMBP soit à travers des collaborations extérieures. La chimie développée est classique, s'appuie sur des réactions connues, apparaît assez peu novatrice mais efficace. Le nombre de publications est important (67, soit 5,2 ACL/an/ETPT) relativement au nombre d'EC impliqués, avec un IF moyen de 2,5 ce qui est correct pour ce type de chimie. Le savoir-faire du groupe dans le domaine de la chimie hétérocyclique est bien reconnu internationalement puisqu'il est partenaire ou coordinateur de trois programmes importants (ITN Marie Curie, Interreg IV, AME).

Les activités de l'équipe de biochimistes s'inscrivent dans l'étude de la relation stress oxydant et cycle cellulaire notamment l'inhibition de la prolifération des cellules cancéreuses via l'interaction avec la protéine CDC 25 ou les proliférateurs de peroxysomes (PPAR). Une autre thématique de recherche concerne la préparation de nouvelles sondes photoactivables et le marquage par photoaffinité des protéines du système du glutathion.

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'intégration de l'équipe LIMBP dans son environnement est très bonne et sa capacité à obtenir des financements est certaine car elle est partenaire ou coordinateur de 3 programmes importants : ITN Marie Curie (RedCat), un programme Interreg IVa (Corena) et un projet régional Biopolor (projet en relation avec les PME lorraines).

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche:

Dans le contexte local où l'équipe est isolée, la production scientifique des trois chercheurs « publiants » est importante, même si les journaux en terme d'IF dans le domaine de la synthèse hétérocyclique est moyen. A l'inverse, il est à noter que 2 permanents publient peu ou pas de tout. On note 5 conférences invitées. L'équipe attire un nombre relativement important de doctorants (15 thèses soutenues dans la période évaluée, 8 en cours et 9 Master2) mais un seul post-doctorant (depuis juin 2011).



Conclusion :

- **Avis global sur l'équipe :**

Dans un contexte local où l'équipe est isolée, la production scientifique des trois chercheurs « publiants » (5 permanents publient peu ou pas de tout) est importante, même si les journaux en terme d'IF dans le domaine de la synthèse hétérocyclique est moyen, avec cependant une reconnaissance internationale (5 conférences invitées). L'équipe LIMBP est dynamique comme le montre sa capacité à obtenir des financements. Elle est certaine car elle est partenaire ou coordinateur de 3 programmes importants : ITN Marie Curie (RedCat), un programme Interreg IVa (Corena) et un projet régional Biopolor (projet en relation avec les PME lorraines).

- **Points forts et opportunités :**

Compte tenu du nombre de chercheurs publiants (3) et du contexte géographique, cette équipe est très dynamique avec un savoir-faire reconnu dans la chimie hétérocyclique, en particulier dans le domaine des composés soufrés et sélénés. Cette équipe a su tisser un réseau de collaborations académiques pour les évaluations biologiques des composés issus des différentes méthodologies étudiées.

- **Points faibles et risques :**

Il y a un manque d'interaction avec des groupes pharmaceutiques qui sont pourtant des « utilisateurs » de molécules hétérocycliques.



Équipe 8 : EA 3941 - LPMC

Nom du responsable : M. Ugo ANCARANI

Effectifs : 15

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	5	-	4
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	0	-	0
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	0	-	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires*	1	-	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	0		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	4		
N7 : Doctorants	5		
N8 : Thèses soutenues	9		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	2		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	5	-	
TOTAL N1 à N7	15	-	5

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la qualité scientifique et la production :

Cette équipe, constituée de 5 enseignants-chercheurs (1PRCE, 2PR1 et 2MCF) et d'1 IE (Université de Metz), est localisée sur le site de Metz de l'Université de Lorraine. L'équipe développe une recherche centrée autour de la modélisation des processus collisionnels induits par des particules chargées sur des atomes et/ou molécules. Originellement né du domaine de la physique, ce thème a su évoluer et dépasser ce cadre disciplinaire pour investir désormais le domaine de la biologie. L'équipe s'intéresse par exemple à l'évolution des particules chargées dans le milieu biologique. L'équipe s'appuie également sur une forte activité méthodologique visant à déterminer les sections efficaces des processus collisionnels par les outils quantiques. La production de l'équipe est excellente : 95 publications dans des journaux de premier plan, soit un taux moyen de 7,6 ACL/an/ETPT (le plus élevé de toutes les équipes évaluées) pour un facteur d'impact moyen de 2,6 ce qui situe l'équipe à un très bon niveau de qualité, 14 actes de congrès, 5 ouvrages.

Cette équipe a un taux d'encadrement élevé : 9 doctorants ont soutenu leur thèse pendant la période (dont 3 en cotutelles) et 5 autres sont en cours ce qui démontre la forte attractivité de l'équipe et sa capacité à attirer les jeunes talents nonobstant un contexte peu favorable pour les études théoriques. L'équipe a également accueilli 5 chercheurs étrangers pour des séjours longs (durée moyenne supérieure à 1 an).

Appréciation sur l'intégration de l'équipe dans son environnement :

L'équipe est remarquablement bien insérée dans son environnement : elle est rattachée à l'école doctorale n°412 - SESAME ce qui a permis aux membres de l'équipe de nouer des relations étroites avec, notamment, les équipes de chimie théorique et de modélisation du SRSMC de Nancy. Sur le plan national et scientifique, elle participe aux GDR « Modélisation et instrumentation pour l'imagerie biomédicale » et « Dynamique quantique dans les systèmes moléculaires : théorie, modélisation et simulation ».

Chacun des membres de l'équipe possède au moins une responsabilité importante au sein de l'Université de Metz (conseil d'administration, bureau du conseil scientifique, commission des relations internationales, bureau du président) ou du laboratoire (directeur et directeur adjoint).

L'activité de l'équipe est fortement tournée vers l'international. Le LPMC a développé un nombre important de relations internationales qui s'inscrivent dans la durée. Ces échanges internationaux sont soutenus financièrement et sont concrétisés par des publications communes ainsi qu'un nombre important de thèses en cotutelles. Durant la période d'exercice, l'équipe a obtenu un nombre considérable de mois d'invitations (plus de 80 mois) pour des chercheurs étrangers.

L'équipe a obtenu des soutiens contractuels essentiellement par la Région Lorraine et une ANR dans la période. On note également l'obtention d'une chaire internationale d'accueil.

Un des logiciels développés par l'équipe est à la base d'un logiciel utilisé dans le milieu hospitalier pour analyser les doses de rayonnement dans les tissus.

Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité de l'équipe de recherche :

Sans conteste, cette équipe possède une très bonne visibilité internationale. Le nombre d'invitations à des congrès est important : 29 conférences dans des congrès nationaux et internationaux. Ces invitations couvrent les aspects méthodologiques et les applications ce qui révèle le caractère bien équilibré des recherches. L'ensemble des permanents et non permanents manifeste par ailleurs un bon dynamisme et une forte présence à l'extérieur dans les congrès comme l'atteste le nombre très élevé d'affiches dans les congrès (107) et de séminaires (13).

Elle attire également un nombre élevé de doctorants et un nombre impressionnant de visiteurs étrangers.



Conclusion

- **Avis global sur l'équipe :**

L'équipe LPMC possède une remarquable activité dans le domaine de la modélisation des processus collisionnels. Les sujets, à la frontière entre la physique, chimie et biologie sont novateurs et à fort potentiel autant pour les développements fondamentaux que pour des applications. Une ramification de cette activité vers le domaine de la biologie conduit à un thème très original et unique dans le paysage régional. Le LPMC porte efficacement des relations internationales nourries et productives.

L'intégration de l'équipe dans le SRSMC est stratégiquement pertinente. Elle permet à cette équipe de trouver un écho à ses recherches actuelles, en particulier dans le domaine de la biologie. Sur le plan de l'avenir de l'équipe, l'intégration au sein des équipes théoriques du SRSMC assure la pérennité de cette équipe qui sera probablement fragilisée à terme par des départs à la retraite. Il faut cependant veiller à ce que le savoir-faire unique de l'équipe perdure au sein de l'unité et un soutien de cette thématique sera nécessaire à moyen terme pour anticiper ces départs.

- **Points forts et opportunités :**

La thématique est importante avec un impact notable dans le domaine de la biologie et de la santé : les développements méthodologiques de grande qualité, validés sur des applications prometteuses autant en physique qu'en biologie sont un point fort de l'équipe.

L'activité et la visibilité de l'équipe sont très bonnes. L'équipe possède également une bonne reconnaissance internationale. Tous les membres de l'équipe (EC et ITA) sont productifs et fortement investis dans les travaux de recherche. Par ailleurs, ils sont également très impliqués dans la gestion ou les formations de l'Université.

- **Points faibles et risques :**

Plusieurs départs à la retraite de membres de l'équipe sont à venir.

Il faudrait penser à valoriser les codes informatiques réalisés.



Équipe-Projet 1 : TMS (Théorie-Modélisation-Simulation)

Nom du responsable : M. Xavier ASSFELD

Effectifs : 16 (5,9 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	10 (3,6)	10
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	4 (1,8)	4
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	1	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	1 (0,5)	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	12	
TOTAL N1 à N7 *	-	16 (5,9)	15



• Appréciations détaillées

Préambule important valable pour toutes les équipes-projets.

Les personnels EC et C sont souvent impliqués dans plus d'une équipe-projet. Le nombre de ETPT dans les équipes-projet tient donc compte des pourcentages déclarés ainsi que de la qualité enseignant-chercheur ou chercheur.

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Cette équipe est formée de l'ensemble des membres de l'équipe CBT, de l'équipe EDAM et de l'EA LPMC de l'Université de Metz. Elle sera constituée de 16 membres permanents dont 5 chercheurs, 10 enseignants-chercheurs et 1 ITA CNRS rattaché à l'équipe (développement de code). En tenant compte de la multi-appartenance de plusieurs membres de cette équipe-projet à d'autres équipes-projets, cette équipe aura 5,9 ETPT. Un chercheur supplémentaire a demandé récemment son rattachement partiel à TMS, portant ainsi le nombre des ETPT à 6,2. Les membres de l'ex-LPMC (Metz) sont les seuls à être affectés à 100% à cette équipe.

Elle regroupera donc physiciens et chimistes théoriciens impliqués dans le développement de méthodes de description de la matière allant de l'atome à l'assemblage de macromolécules et de l'influence de l'environnement sur les propriétés physiques et chimiques de la matière. Les points forts de cette équipe sont de rassembler des compétences complémentaires en méthodologies et en applications pour s'intéresser à des problèmes particulièrement ardues comme i) l'interaction rayonnement-molécule pour des molécules de taille petite à très grande (macromolécule et molécule biologique), ii) les interactions intermoléculaires et à l'état liquide, iii) les interactions biomoléculaires. La richesse de cette équipe réside dans la grande variété de méthodes allant de la mécanique quantique aux simulations 'Gros Grains' en passant par le calcul des sections efficaces, les champs de forces évolués et les méthodes hybrides. Ce rassemblement de méthodes multi-échelle est un atout pour l'étude des systèmes complexes, un but qui focalise l'intérêt de la plus grande partie des théoriciens/modélisateurs actuels. Il est à noter que la collaboration entre les membres de l'ex-LPMC existe depuis 2007 avec des publications communes.

Les acteurs de cette équipe proviennent d'équipes-bilans très bien évaluées avec des acteurs très actifs et reconnus internationalement. Compte tenu des expertises de chacune des équipes un des points forts de l'intégration des physiciens dans une équipe de chimistes théoriciens est d'améliorer le calcul des sections efficaces de collision en y incluant la description quantique des molécules impliquées, permettant d'accéder à des évaluations plus quantitatives pour des systèmes de grande taille et notamment biologiques. Elle permettra également de s'affranchir d'un modèle empirique des systèmes en présence.

L'ensemble des partenaires bénéficie d'accès à des ressources de calculs conséquentes. La distance géographique, faible par ailleurs, n'est pas un handicap pour des théoriciens qui par ailleurs se rencontrent régulièrement au sein de l'Ecole Doctorale. Les collaborations Metz-Nancy sont déjà préexistantes.

Les membres de cette équipe avaient un taux de succès important dans les ANR et les appels à projets ce qui leur permet d'espérer le maintien des ressources contractuelles.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

Il existe dans cette équipe de nombreux acteurs productifs et reconnus internationalement ainsi que des recrues récentes à fort potentiel. L'intégration de l'équipe LPMC ouvre de nouvelles perspectives et nourrira mutuellement les expertises de chacune des composantes originelles.

▪ Points forts et opportunités :

L'équipe dispose de méthodologies complémentaires qui devraient permettre de concrétiser l'élargissement des sujets de recherches et l'ouverture vers de nouveaux projets.

▪ Points à améliorer et risques :

Deux permanents (Pr) actifs en recherche prendront leur retraite avant 2017. Il est nécessaire de veiller à ce que ces départs n'affaiblissent pas le potentiel de recherche de cet ensemble de qualité.



- **Recommandations :**

Pour pallier la distance géographique entre les deux sites, on ne peut qu'encourager le renforcement de l'animation scientifique et en particulier la mise en place de rencontres régulières impliquant permanents et non permanents de cette équipe. En dépit de la capacité démontrée par tous de s'engager dans de nombreux projets, il serait dommage de risquer de s'affaiblir en se dispersant sur un nombre trop important de sujets. Les membres de l'équipe doivent veiller à valoriser les codes développés.

Synthèse

Cette équipe est constituée de permanents de très grande qualité scientifique dont plusieurs sont reconnus internationalement. Elle est reconnue pour ses développements théoriques originaux pour la représentation des systèmes moléculaires complexes et de l'interaction molécule-milieu ainsi que l'action du rayonnement sur les molécules. Un point fort est la présence de compétences méthodologiques complémentaires et la grande pertinence dans le choix des applications dans les domaines de physique, chimie et biologie. La production, dans des journaux de tout premier plan généralistes et thématiques, est abondante. La forte visibilité de certains des membres est prouvée par les invitations dans des congrès. La présence de jeunes permanents particulièrement dynamiques est un point fort de cette équipe qui prouve par ailleurs sa capacité à répondre avec succès à des appels d'offre notamment de l'ANR. L'intégration de l'équipe de physiciens théoriciens de Metz est bénéfique à l'équipe et est effective puisque la collaboration existe et est concrétisée par des publications communes. L'appartenance à la même école doctorale facilite les actions mais il sera nécessaire d'assurer une bonne animation scientifique pour l'ensemble des membres.



Équipe-Projet 2 :

Résolve (Réactivité, solvation et effets d'environnement dans les milieux non-conventionnels éco-compatibles)

Nom du responsable :

M. Manuel RUIZ-LOPEZ

Effectifs :

15 (5,75 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	11 (3,75)	11
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	3 (1,5)	3
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	0	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	1 (0,5)	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	8	
TOTAL N1 à N7 *	-	15 (5,75)	14



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Cette équipe est constituée de 5 PR, 6 MCF, 2 DR, 1 CR et 1 ITA (développement de code) provenant essentiellement de CBT et de Sucres. En raison des appartenances multiples, le nombre des ETPT est de 5,75.

L'intérêt de cette équipe-projet est de rassembler expérimentateurs et théoriciens experts dans l'étude des effets d'environnement sur la réactivité chimique dans les nouveaux milieux réactionnels de la chimie verte. Il s'agit de comprendre la nature des interactions intermoléculaires, d'établir les principes et de développer des concepts.

Le thème retenu pour cette équipe est d'une grande pertinence, car la compréhension des interactions intermoléculaires et molécules-milieu est un enjeu particulièrement important pour développer des méthodes éco-compatibles. Cette équipe s'appuie sur l'une des expertises reconnues de l'UMR dans le domaine de la modélisation des effets d'environnement et des interactions moléculaires. Les chimistes organiciens participant à ce projet ont une compétence sur les solvants CO₂ supercritique, sur les milieux micellaires, sur la détermination des constantes d'acidité, la complexation sélective de métaux et la cinétique de réactions biomimétiques. La réactivité en milieu micellaire est un thème qui présente une réelle prise de risque.

Les trois axes identifiés CO₂ supercritique, milieux aqueux micellaires et liquides ioniques rassembleront expérimentateurs et théoriciens. Une ANR, coordonnée par l'animateur de cette équipe est financée sur le thème de la catalyse biomimétique par des cyclodextrines fonctionnalisées en milieu aqueux et d'autres ont été déposées. L'équipe cherche donc à se donner les moyens de ses ambitions. Ces collaborations se seront pas limitées à l'UMR mais impliqueront des laboratoires français et internationaux dans la continuité des actions passées.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

Cette structuration est intéressante et originale. Elle s'appuie sur des chercheurs dont une grande partie est très active et qui pourrait entraîner ceux qui le sont moins.

▪ Points forts et opportunités :

Le projet vise à rapprocher expérimentateurs et théoriciens sur un sujet très porteur pour favoriser l'interdisciplinarité permettant la mise en place d'un dialogue renforcé.

Cette association permettra d'aborder par une approche couplée expérience/théorie des systèmes identiques ou très proches. La collaboration entre les physico-chimistes et les théoriciens déjà existante et soutenue par une ANR en cours, renforce la crédibilité de cette équipe-projet.

Il faudra être actif au niveau des opportunités de recrutement.

▪ Points à améliorer et risques :

Si le choix de la modélisation des liquides ioniques peut être considérée comme stratégiquement intéressant, l'équipe doit préciser la position de ses travaux par rapport à ceux d'autres groupes au niveau national. La modélisation dans ce domaine doit pouvoir également s'appuyer sur des données expérimentales.

La production et la visibilité ne sont pas équilibrées entre les membres de cette équipe.

L'équipe doit veiller à valoriser ses résultats.



▪ **Recommandations :**

Il est nécessaire de mettre en place des actions pour encourager ceux qui sont moins visibles à présenter plus souvent leurs résultats en congrès.

Il est souhaitable de viser à publier les résultats dans les journaux de plus fort impact possible.

Il faut poursuivre les projets concertés expérience-théorie et utiliser les recrutements futurs pour favoriser les synergies.

Synthèse:

Le regroupement d'expérimentateurs physico-chimistes et de théoriciens intéressés à la compréhension des interactions intermoléculaires et des interactions molécules-milieu est tout à fait intéressant. Cette association favorisera les projets collaboratifs dans lesquels des systèmes chimiques similaires seront étudiés avec des points de vue complémentaires. L'association de mesures physico-chimiques précises et de modélisation est particulièrement pertinente et importante pour comprendre la complexité des systèmes en solution. Construite sur l'une des réputations de l'UMR sur les développements méthodologiques en interactions moléculaires et des applications ambitieuses comme les interactions dans les micelles, elle peut faciliter le démarrage de projets novateurs. Une ANR en cours valide cette association et apporte une garantie de réussite du projet. Cette association encouragera aussi tous les personnels à augmenter leur production, à publier dans les meilleurs journaux, à présenter des résultats dans des congrès et à augmenter l'autonomie scientifique de tous. Les études de CO₂ comme solvant sont très pertinentes en raison de l'importance de CO₂ comme solvant vert. Les études sur les solvants ioniques doivent être précisées pour bénéficier de la synergie possible au niveau national.

**Équipe-Projet 3 :**

HÉCRIN (HétéroCycles: Réactivité et Interaction. Du réactif sélectif à l'édifice complexe)

Nom du responsable : M. Yves FORT

Effectifs : 14 (4,35 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	12 (3,15)	12
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	2 (1,3)	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	0	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	0	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	9	
TOTAL N1 à N7 *	-	14 (4,45)	14



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

Cette nouvelle équipe compte, après restructuration, un total de 14 personnes (12 EC, 2 C) avec des membres permanents provenant des équipes SOR (4), GEVSM (4 + 1 recrue 2011), SUCRES (3) et LIMBP (2), ayant des implications diverses, allant de 20-100%. Le nombre des ETPT est de 4,35.

Le projet proposé s'inscrit principalement dans la continuité des travaux développés par l'équipe SOR (synthèse hétérocyclique par voie organométallique) et est une suite logique, avec un aspect étude mécanistique plus important. Compte tenu de l'expérience de cette équipe, le développement de nouvelles méthodologies en chimie organométallique avec un accès rapide à des structures hétéroaromatiques originales, de type biarylique chirale est original. L'arrivée de l'équipe de synthèse du LIMBP apporte un savoir-faire complémentaire en synthèse d'hétérocycles soufrés et séléniés. Cette association est pertinente et une bonne synergie devrait s'en dégager.

Une autre thématique de l'équipe concerne la synthèse d'édifices complexes fonctionnalisés à propriétés spécifiques.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'équipe HéCRIN est constituée de membres permanents provenant des équipes SOR (4) GEVSM (4 +1), SUCRES (3) et LIMBP(2), soit au total 14 permanents ayant, pour l'instant, des implications allant de 20 à 100%.

Les thématiques développées sont centrées sur la synthèse hétérocyclique, principalement par voie organométallique. L'aspect mécanistique tient une place importante. Globalement, il y a des savoir-faire complémentaires qui par leurs synergies devraient conduire à l'optimisation et aux développements de nouvelles méthodologies. L'arrivée de l'équipe messine apporte à la fois une expertise dans la chimie des dérivés soufrés et séléniés hétéroaromatiques et une expérience en chimie médicinale.

▪ Points forts et opportunités :

On trouve dans cette équipe une association de chercheurs qui ont une excellente maîtrise de la réactivité organométallique dans le domaine des hétérocycles avec des chercheurs qui proposent des applications variées.

▪ Points à améliorer et risques :

Il faudra bien gérer les collaborations impliquant les diverses applications pour ne pas disperser les forces.

Il faudra bien gérer l'adéquation entre l'investissement pour la synthèse et l'intérêt des molécules hétéroaromatiques ciblées pour les diverses applications.

Les aspects de valorisation des molécules hétérocycliques polyfonctionnelles devront être considérés et bien intégrés dans les projets.

Une plus forte diffusion scientifique à travers des conférences devrait permettre d'augmenter le rayonnement de l'équipe.



- **Recommandations:**

L'équipe devra porter une réflexion approfondie sur les différents points à améliorer qui ont été mis en exergue.

L'équipe HéCRIN interagira de manière transversale dans plusieurs projets avec d'autres équipes de l'unité. Compte-tenu du savoir-faire en chimie hétérocyclique et de la production de molécules originales à travers les différentes méthodologies étudiées, il pourrait être intéressant de développer des collaborations pour des applications en chimie médicinale, en particulier avec les autres équipes de l'unité plus impliquées dans l'aspect santé.

De plus, un permanent très actif en recherche, ayant une expertise en chimie hétérocyclique, prendra sa retraite en 2013, il faudra veiller à la pérennité de l'axe chimie du soufre et du sélénium.

Synthèse

Le bilan des équipes composant l'équipe-projet HéCRIN (SOR, GEVSM, SUCRES, LIMBP) s'appuie sur des connaissances et un savoir-faire reconnus en synthèse organique. Les thématiques proposées s'inscrivent pour une large part dans la continuité des travaux de recherche de l'équipe SOR, notamment les fonctionnalisations sélectives d'hétérocycles. Les applications envisagées dans le domaine de la synthèse d'hétérocycles complexes seront élargies avec l'intégration des activités des membres du LIMBP. Cette association est pertinente, complémentaire et une bonne synergie devrait se dégager de ce regroupement. Cette thématique s'accompagne de nouveaux projets orientés vers le développement de réactions énantiosélectives par l'emploi de réactifs chiraux.

Une autre thématique de l'équipe concerne la synthèse d'édifices complexes fonctionnalisés à propriétés spécifiques, utilisant des hétérocycles associés à des plateformes de type calixarène et cyclodextrine.

L'équipe HéCRIN interagira de manière transversale dans plusieurs projets avec d'autres équipes de l'unité. Compte-tenu du savoir-faire en chimie hétérocyclique et de la production de molécules originales à travers les différentes méthodologies étudiées, il pourrait être intéressant de développer des collaborations pour des applications en chimie médicinale, en particulier avec les autres équipes de l'unité plus impliquées dans l'aspect santé.



Équipe-Projet 4 : MoBAT (Molécules Bioactives et Traceurs)

Nom du responsable : M. Jean-Bernard REGNOUF de VAINS

Effectifs : 12 (5,45 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	10 (3,45)	10
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	2 (2)	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	0	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	0	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	6	
TOTAL N1 à N7 *	-	12 (5,45)	12

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

L'équipe MoBAT propose un projet de recherche qui repose sur les activités développées dans l'équipe SUCRES (9 permanents) auxquelles s'ajoutent certains thèmes initiés dans l'équipe GEVSM (3 permanents). Le nombre des ETPT est de 5,45.

A partir des plateformes moléculaires polyfonctionnelles (sucres, peptides, calixarènes, ...), ce projet vise la synthèse de molécules anti-infectieuses et antiprolifératives ainsi que de fluorophores et de traceurs marqués utilisables dans l'imagerie médicale.

On a du mal à se rendre compte de la répartition du travail en fonction des collaborateurs au vu des très nombreux projets qui sont proposés dans les deux thématiques (molécules bioactives et traceurs pour l'imagerie).

Les sujets envisagés (traitement du diabète, cancers, infections, etc ...) sont passionnants mais immenses et constituent un challenge difficile à réaliser pour une seule équipe. Il serait sans doute plus opportun de se concentrer sur un seul de ces sujets, par exemple les anti-infectieux avant d'envisager d'autres développements.

Le projet semble correspondre essentiellement à une juxtaposition de programmes existants déjà engagés dans les équipes d'origine avec un manque de réflexion sur la hiérarchisation des priorités. Les conséquences des limites du criblage aléatoire dans la conception de nouvelles molécules pour des applications dans des domaines très variés reflètent les difficultés à établir des relations avec des partenaires industriels et/ou académiques.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'équipe est structurée autour d'axes de recherche déjà développés dans les deux équipes d'origine. Il y a indiscutablement une cohérence dans le projet d'association du fait des thématiques complémentaires et des domaines d'expertise respectifs. Le nombre trop important de projets et de domaines d'application visés (infectiologie, cancérologie, maladies dégénératives et cardiovasculaires) pourrait conduire à une dispersion des forces et donc à un manque de lisibilité dans les domaines ciblés.

▪ Points forts et opportunités :

Le groupe possède une forte reconnaissance en chimie bioorganique, plus particulièrement dans la chimie des sucres avec peu de concurrents à l'intersection sucres-radiotraceurs. L'arrivée du cyclotron devrait apporter une réelle opportunité et un outil unique pour le développement de la thématique des radiotraceurs pour l'imagerie médicale.

▪ Points à améliorer et risques :

Le projet de l'équipe est trop dispersé et compte un nombre de sujets de recherche trop important.

▪ Recommandations :

Une réflexion sur la hiérarchisation des priorités doit être menée et une orientation stratégique plus claire doit être donnée au projet. Par exemple, un resserrement des thématiques de recherche autour des axes les plus originaux (ligands du récepteur NRP1, agents anti-infectieux), et les plus porteurs (radiotraceurs pour l'imagerie médicale en appui sur le cyclotron) pourrait permettre de renforcer la lisibilité de l'équipe et de faciliter la valorisation des travaux (brevets, partenariats industriels).



Synthèse

Le projet-équipe MoBAT provient de la fusion partielle des équipes GEVSM et SUCRES. Dans leur domaine d'expertise, les deux équipes présentent un niveau de production différent : 2,94 ACL/ETPT pour GEVSM versus 1,73 pour SUCRES. Néanmoins, il y a indiscutablement une cohérence dans leur projet d'association du fait des thématiques complémentaires. Un premier objectif du projet vise à développer les plateformes moléculaires glucidiques, hétérocycliques et macrocycliques ou à utiliser des biotechnologies végétales pour la synthèse ou l'isolement de nouvelles molécules bio-actives. Le deuxième axe concerne la mise au point de nouveaux traceurs radioactifs ou fluorescents pour l'imagerie. Le projet semble correspondre essentiellement à une juxtaposition de programmes existants déjà engagés dans les équipes d'origine. Si les domaines d'application des molécules visées sont importants, une hiérarchisation des priorités doit être apportée au projet en lui donnant une orientation stratégique plus claire. Un resserrement des thématiques de recherche autour des axes les plus originaux et/ou porteurs (ligands du récepteur NRP1, agents anti-infectieux, radiotraceurs pour l'imagerie médicale en appui sur le cyclotron) pourrait permettre de renforcer la lisibilité de l'équipe et de faciliter la valorisation des travaux.



Équipe-Projet 5 : MICMAC (Membrane Infectiologie Cancérologie Modélisation Application Conception)

Nom du responsable : M. Raphaël DUVAL

Effectifs : 11 (5,35 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	9 (3,45)	9
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	2 (2)	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	0	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	0	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	6	
TOTAL N1 à N7	-	11	11

• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

L'équipe constituée de permanents issus des équipes-bilan EDAM, GEVSM et LIMBP, soit 9 EC et 2 C pour un total de 5,35 ETP, se propose de mettre en commun ses compétences et savoir-faire en chimie théorique, physico-chimie des interfaces et biologie pour étudier des systèmes membranaires cellulaires ou modèles ainsi que leurs mécanismes d'interactions avec des (macro)molécules d'intérêt biologique et/ou thérapeutique. Ces travaux visent notamment à mettre au point de nouvelles stratégies thérapeutiques à partir de molécules issues de la synthèse chimique. La nature des outils physico-chimiques et biologiques permettant d'appréhender ces études est dans certains cas insuffisamment renseignée. Si les techniques physico-chimiques pour étudier les systèmes lipidiques en 'monocouche' et les méthodes d'évaluation de l'activité biologique des agents bioactifs (plateforme ABC entre autres) sont identifiées, les outils plus spécifiques liés à l'étude des édifices supramoléculaires pour la vectorisation et le ciblage sont peu explicités. Si l'association des approches théorique, expérimentale et biologique autour de l'étude du fonctionnement des membranes biologiques semble pertinente et originale, les connexions/synergies visées par l'équipe sont moins évidentes à cerner. Elle doit pouvoir s'appuyer sur des objets d'études communs pour apporter un impact fort dans la compréhension du rôle des membranes dans les processus de vectorisation ou en présence de molécules d'intérêt thérapeutique.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe

L'équipe propose une association originale de thématiques de recherche qui n'interagissaient pas entre elles dans le précédent contrat. Elle s'appuiera sur des compétences reconnues dans les différents champs disciplinaires. Elle regroupe les compétences reconnues et au plus haut niveau dans les différents champs disciplinaires, de l'équipe théorique (développements et applications) EDAM et expérimentales des équipes GEVSM et LIMBP. L'ambition est de contribuer à une meilleure compréhension de la dynamique des membranes et de leur rôle dans la vectorisation d'agents thérapeutiques. Cette équipe s'appuie sur le potentiel théorique fort de l'équipe EDAM. Les études expérimentales déjà menées au laboratoire, tant sur des membranes modèles que sur des membranes biologiques, offrent un terrain d'études privilégié pour des modélisations moléculaires classiques. L'apport de l'expertise des membres de l'équipe-bilan EDAM dans cette nouvelle équipe ne peut que constituer un atout considérable pour la compréhension des études expérimentales et l'avancée des connaissances dans le domaine.

Le choix des molécules et des nanovecteurs qui seront étudiés devrait être plus clairement explicité.

▪ Points forts et opportunités :

Le dynamisme du porteur du projet constitue un gage de réussite à moyen terme. D'autre part, l'expertise méthodologique et de simulation des systèmes biologiques portée au plus haut niveau de description est un point fort de l'équipe.

▪ Points à améliorer et risques :

Une collaboration active et forte doit résulter du regroupement de théoriciens et d'expérimentateurs au sein de cette équipe. Par ailleurs, cette collaboration ne peut être que plus fructueuse si les objets d'étude sont voisins. Théoriciens et expérimentateurs devront donc veiller à porter leurs efforts sur des systèmes membranaires communs ou du moins semblables.

▪ Recommandations :

Il faudra éviter que l'activité de l'équipe ne soit qu'une juxtaposition de thèmes de recherche issus des trois équipes EDAM, GEVSM et LIMBP et favoriser les synergies entre les approches et les projets (choix de systèmes de vectorisation communs). Des liens avec l'équipe NANO pourraient également être envisagés sur les aspects liés à la bioencapsulation (même si les systèmes de vectorisation ciblés sont différents).



Synthèse

Le but de l'équipe MICMAC est d'étudier et comprendre le fonctionnement et les mécanismes membranaires en réponse à un événement chimique afin d'évaluer les nouveaux agents thérapeutiques (agents anti-infectieux, cancérologie, vectorisation) dans une perspective globale qui concernerait aussi bien la membrane eucaryote que procaryote. Le projet est rationnel puisqu'il regroupe des compétences dans le domaine des antimicrobiens (antibactériens et antiviraux) apportées par l'équipe GEVSM et des anticancéreux apportées par le LIMBP ainsi que le potentiel théorique fort apporté par l'équipe EDAM.

L'équipe propose une association originale de thématiques de recherche qui n'interagissaient pas entre elles dans le précédent contrat. Elle s'appuiera sur des compétences reconnues dans les différents champs disciplinaires. Le choix des molécules et des nanovecteurs qui seront étudiés devrait être plus clairement explicité. Si l'association des approches théorique, expérimentale et biologique autour de l'étude du fonctionnement des membranes biologiques semble pertinente et originale, les connexions/synergies visées par l'équipe sont moins évidentes à cerner. Cependant, on peut noter qu'une demande d'ANR commune aux trois équipes a été tentée mais pour le moment sans succès. Elle démontre néanmoins la volonté des futurs partenaires de collaborer.



Équipe-Projet 6 : NANO (Nouveaux Assemblages Nano-Organisés)

Nom du responsable : M. Jean-Luc BLIN

Effectifs : 8 (3,75 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de produisants du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	6 (2,45)	6
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	2 (1,30)	2
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	0	0
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	0	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	4	
TOTAL N1 à N7	-	8 (3,75)	8



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

L'équipe-projet NANO rassemble 8 chercheurs et enseignants-chercheurs productifs qui représentent 3,75 ETPT recherche, et qui sont issus des équipes PCC (1PR1, 2 MCF, 1 DR2), SOR (1 PRCE, 1 MCF, 1 CR1), et GEVSM (1 MCF).

Le projet de l'équipe « Nouveaux Assemblages Nano-Organisés » (NANO) s'articule autour de trois grands axes thématiques :

i) La synthèse de nano-objets (métalliques, nanotubes de carbone ...) en utilisant l'expertise nancéenne de la physico-chimie des interfaces systèmes moléculaires organisés-tensioactifs et surfactants fluorés ou non en vue de contrôler l'architecture et la morphologie des matériaux,

ii) La fonctionnalisation des précurseurs et/ou nano-objets, afin de contrôler leur état de surface pour leur conférer une ou plusieurs propriétés spécifiques (complexation, chimisorption, greffage, etc ...),

iii) Le développement des applications potentielles des objets synthétisés en visant par exemple, la bio et photocatalyse, les propriétés piézoélectriques, optiques ou magnétiques, les techniques séparatives.

Ces trois axes s'appuient sur d'excellentes compétences scientifiques complémentaires et un savoir-faire reconnu tant sur le plan national qu'international. L'équipe comporte des jeunes motivés et qui ont fait preuve d'un grand dynamisme durant les discussions avec les membres du comité. La faisabilité du projet est donc tout à fait réaliste et pertinente sous réserve de maintenir au moins le potentiel humain actuel.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'équipe est bien structurée autour d'axes de recherche clairs, ciblés et d'actualité. Les projets proposés sont d'excellente qualité et en bonne adéquation avec les compétences et la complémentarité des expertises de chaque membre de l'équipe.

▪ Points forts et opportunités :

Les domaines d'expertise sont larges, ils couvrent les aspects fondamentaux de la compréhension des mécanismes de formation des nano-objets et de leur caractérisation.

▪ Points à améliorer et risques :

Le principal risque réside dans les applications potentielles des objets qui seront préparés au laboratoire en raison de la diversité probable de leurs propriétés d'usage. La recherche de compétences via des partenariats académiques et industriels sera une nécessité.

▪ Recommandations :

Il est recommandé de veiller à la valorisation des résultats de la recherche en développant une politique plus agressive de recherche de partenaires industriels.

Il faudra maintenir les forces et l'excellence de l'expertise en physico-chimie des assemblages en solution.

La présence dans les manifestations scientifiques de haut niveau devra être augmentée de même que la production orale.



Synthèse

L'équipe-projet NANO regroupe un ensemble d'expertises centrées sur l'élaboration de phases oxydes hiérarchisées, de nanoparticules métalliques et de nanotubes de carbone. Les grands objectifs fondamentaux des projets de recherche concernent la physico-chimie des interactions entre les agents structurants et les précurseurs qui orientent et gouvernent la formation des solides ainsi que la fonctionnalisation des surfaces afin de conférer aux objets synthétisés une propriété d'usage particulière selon le domaine applicatif visé. Les grandes lignes du projet sont dans la continuité des actions menées au sein de l'équipe-bilan PCC, mais l'apport de compétences en chimie organique moléculaire et chimie organométallique est un formidable atout aussi bien pour le développement du front de connaissances que pour accroître les interactions et les partenariats avec le secteur socioéconomique. Cette complémentarité des savoir-faire rend le projet proposé tout à fait réaliste et opportun. L'orientation des applications vers les domaines porteurs et d'actualité que sont la photocatalyse, les bioréacteurs, la piézoélectricité ou les matériaux pour la séparation devrait permettre à l'équipe nancéienne de trouver toute sa place dans un domaine où la compétition internationale est rude.



Équipe-Projet 7 :

PHOTOSENS (Photosensibilisateurs et conducteurs organiques: Design, propriétés électroniques et applications)

Nom du responsable : M. Philippe GROS

Effectifs : 6 (1,65 ETPT)

Effectifs	Nombre au 30/06/2011	Nombre au 01/01/2013	2013-2017 Nombre de producteurs du projet **
N1 : Enseignants-chercheurs	-	3 (0,65)	3
N2 : Chercheurs des EPST ou EPIC	-	1 (0,5)	1
N3 : Autres enseignants-chercheurs et chercheurs	-	1 (1)	1
N4 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs titulaires *	-	1 (0,5)	
N5 : Ingénieurs, techniciens et personnels administratifs non titulaires*	-		
N6 : Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	-		
N7 : Doctorants	-		
N8 : Thèses soutenues	-		
N9 : Nombre d'HDR soutenues	-		
N10 : Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	-	3	
TOTAL N1 à N7	-	6 (2,15)	5



• Appréciations détaillées

Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans :

L'équipe-projet PHOTOSENS comprend 5 enseignants-chercheurs et chercheurs permanents (4 EC dont 1 PREM, 1C, soit 1,65 ETPT) provenant essentiellement de permanents des équipes-bilans SOR et CBT. Un IE affecté à 50% à cette équipe-projet porte le nombre des ETPT effectifs à 2,15. Il s'agit d'un rassemblement original de chimistes de synthèse (organique et coordination) et de chimistes théoriciens dont le but est d'optimiser la conception de photosensibilisateurs pour des applications dans les cellules solaires DSSC. Les chimistes de synthèse ont déjà une bonne expérience dans ce domaine et proposent de nouvelles pistes pertinentes et intéressantes soit pour synthétiser de nouveaux sensibilisateurs couvrant tout le spectre solaire, soit pour concevoir des systèmes associant le colorant avec le médiateur redox. L'apport des calculs théoriques (DFT et TD-DFT) doit permettre non seulement de rationaliser les propriétés photo-physiques des complexes synthétisés, mais aussi de développer une approche prédictive permettant d'optimiser les performances des photosensibilisateurs. Un autre volet du projet concerne l'étude du transport de charge au sein d'arrangements colonnaires de phthalocyanines par une approche couplée théorie / expérience. La faisabilité du projet est également confortée par des collaborations nationales et internationales avec des partenaires experts dans le domaine, ainsi que par l'appartenance de l'équipe au réseau photovoltaïque Alsace-Lorraine.

Il s'agit d'un domaine de très forte compétition internationale, mais l'originalité réside dans le savoir-faire avéré de l'équipe en synthèse de composés hétérocycliques fonctionnalisés et dans la compréhension fine et la prédiction fiable des spectres d'absorption électronique à l'aide des outils de la chimie théorique pour orienter les synthèses. On peut donc attendre une forte plus-value de l'association synthèse/modélisation.

Conclusion :

▪ Avis global sur l'équipe :

L'équipe souhaite développer un projet homogène qui présente un fort potentiel de développement. L'expertise et les compétences des membres de l'équipe sont reconnues, les interactions sont déjà en place, autant d'éléments qui permettent d'espérer l'obtention d'avancées significatives dans le domaine des cellules photovoltaïques relativement rapidement. Pour développer ses recherches, l'équipe a, en outre, obtenu un soutien financier conséquent par l'intermédiaire d'un contrat avec IS2-SAS et le soutien d'OSEO de la région Lorraine.

▪ Points forts et opportunités :

Ce projet présente une bonne association chimie de synthèse/ chimie théorique et il devrait s'en dégager une bonne synergie.

▪ Points à améliorer et risques :

Compte tenu de la forte compétition dans le domaine au niveau national et international, l'équipe doit se positionner sur le développement de systèmes originaux. A cet égard, il serait opportun de renforcer le potentiel humain dans le domaine de la chimie de coordination et de la photophysique.

Synthèse

L'objectif de l'équipe PHOTOSENS est la conception de nouveaux photosensibilisateurs moléculaires pour les cellules solaires DSSC. Le point fort de l'équipe est de s'appuyer sur le savoir-faire largement reconnu dans la communauté, de chimistes de synthèse (organique et coordination) et de chimistes théoriciens (chimie quantique). Cette association, déjà existante et avérée par la production d'un travail en commun, doit conduire à l'optimisation des performances de photosensibilisateurs, de médiateurs redox et de transporteurs de charges dans les cellules solaires à colorant. Les projets s'orientent selon 3 grands axes : synthèse - caractérisation - modélisation, l'idée étant de développer une approche prédictive de la structure des composés à synthétiser à partir du calcul théorique. Les dispositifs seront également étudiés à partir des composés les plus prometteurs et en collaboration avec le réseau MATEO-PV (Photovoltaïque Alsace-Lorraine). Le projet est déjà soutenu par un contrat. Le domaine d'application est extrêmement compétitif. Toutefois l'originalité de l'équipe réside dans la complémentarité théorie - expérience et dans la qualité des partenaires engagés qui peut conduire à un développement ciblé et rationnel de systèmes originaux et plus performants.

5 • Notation

À l'issue des visites de la campagne d'évaluation 2011-2012, les présidents des comités d'experts, réunis par groupes disciplinaires, ont procédé à la notation des unités de recherche relevant de leur groupe (et, le cas échéant, des équipes internes de ces unités).

Cette notation (A+, A, B, C) a porté sur chacun des quatre critères définis par l'AERES. Elle a été accompagnée d'une appréciation d'ensemble.

Dans le cadre de cette notation, l'unité de recherche concernée par ce rapport (et, le cas échéant ses équipes internes) a (ont) obtenu l'appréciation d'ensemble et les notes suivantes :

Appréciation d'ensemble de l'unité : Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes

Unité dont la production, le rayonnement, l'organisation, l'animation et le projet sont très bons.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	A	A

Appréciation d'ensemble de l'équipe : Physico-chimie des Colloïdes (PCC)

Équipe dont la production et le rayonnement sont très bons.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	-	NN

Appréciation d'ensemble de l'équipe : Groupe d'Etudes des Vecteurs Supramoléculaires du Médicament (GEVSM)

Équipe dont la production est très bonne, le rayonnement est bon mais pourrait être amélioré.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	B	-	NN



Appréciation d'ensemble de l'équipe : Synthèse Organométallique et Réactivité (SOR)

Équipe dont la production et le rayonnement sont très bons.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	-	NN

Appréciation d'ensemble de l'équipe : Chimie et Biochimie Théorique (CBT)

Équipe dont la production et le rayonnement sont excellents.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A+	-	NN

Appréciation d'ensemble de l'équipe : Dynamique des Assemblages Membranaires (EDAM)

Équipe dont la production et le rayonnement sont excellents.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A+	-	NN



Appréciation d'ensemble de l'équipe : S.U.C.R.E.S.

Équipe dont la production et le rayonnement sont bons mais pourraient être améliorés.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
B	B	-	NN

Appréciation d'ensemble de l'équipe : LIMBP

Équipe dont la production et le rayonnement sont très bons.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A	A	-	NN

Appréciation d'ensemble de l'équipe : LPMC

Équipe dont la production et le rayonnement sont excellents.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
A+	A+	-	NN



Appréciation d'ensemble de l'équipe : TMS (Théorie-Modélisation-Simulation)

Excellent projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A+

Appréciation d'ensemble de l'équipe : Résolve (Réactivité, solvation et effets d'environnement dans les milieux non-conventionnels éco-compatibles)

Très bon projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A

Appréciation d'ensemble de l'équipe : HéCRIN (HétéroCycles: Réactivité et Interaction. Du réactif sélectif à l'édifice complexe)

Très bon projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A



Appréciation d'ensemble de l'équipe : MoBAT (Molécules Bioactives et Traceurs)

Le projet de cette équipe reconfigurée est bon mais pourrait être amélioré.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	B

Appréciation d'ensemble de l'équipe : MICMAC (Membrane Infectiologie Cancérologie Modélisation Application Conception)

Très bon projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A

Appréciation d'ensemble de l'équipe : NANO (Nouveaux Assemblages Nano-Organisés)

Très bon projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1	C2	C3	C4
Qualité scientifique et production.	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	Gouvernance et vie du laboratoire.	Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A



Appréciation d'ensemble de l'équipe : PHOTOSENS (Photosensibilisateurs et conducteurs organiques: Design, propriétés électroniques et applications)

Très bon projet pour cette équipe reconfigurée.

Tableau de notation :

C1 Qualité scientifique et production.	C2 Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement.	C3 Gouvernance et vie du laboratoire.	C4 Stratégie et projet scientifique.
NN	NN	-	A



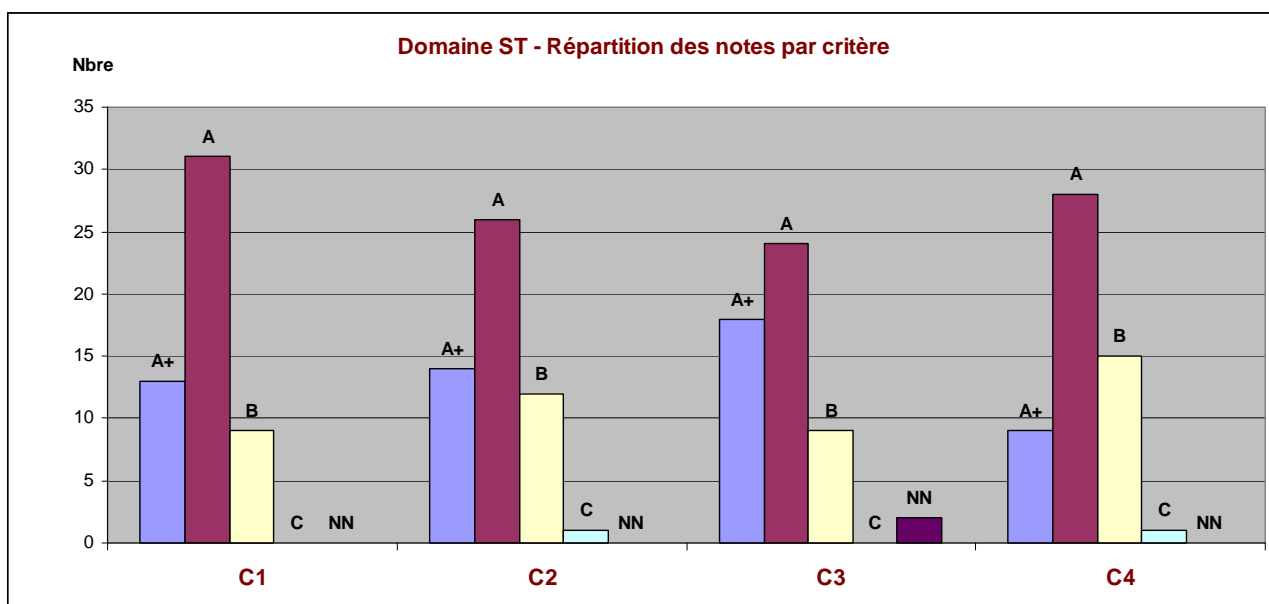
6 • Statistiques par domaine : ST au 10/05/2012

Notes

Critères	C1	C2	C3	C4
	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Gouvernance et vie du laboratoire	Stratégie et projet scientifique
A+	13	14	18	9
A	31	26	24	28
B	9	12	9	15
C	-	1	-	1
Non noté	-	-	2	-

Pourcentages

Critères	C1	C2	C3	C4
	Qualité scientifique et production	Rayonnement et attractivité, intégration dans l'environnement	Gouvernance et vie du laboratoire	Stratégie et projet scientifique
A+	25%	26%	34%	17%
A	58%	49%	45%	53%
B	17%	23%	17%	28%
C	-	2%	-	2%
Non noté	-	-	4%	-





7 • Observations générales des tutelles

L'Administrateur Provisoire
Jean-Pierre Finance

à

Monsieur Pierre GLAUDES
Directeur de la section des unités de l'AERES
20 rue Vivienne
75002 PARIS

Objet : rapport d'évaluation de l'UMR SRSMC
Référence du document : C2013-EV-0542493S-S2PUR130004696-RT

Monsieur le Directeur,

Vous m'avez transmis le 16 mars dernier le rapport d'évaluation de l'UMR « Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes (SRSMC) » et je vous en remercie.

Je vous prie de trouver ci-dessous les éléments de réponse de Monsieur Y. FORT, directeur de l'unité, ainsi que ceux de Monsieur C. Pouchan au titre du CNRS, établissement cotutelle de cette structure.

En tant que tutelle du laboratoire nous n'avons pas de remarque particulière à émettre sur le rapport du Comité d'évaluation. Nous prenons bonne note de ses recommandations qui nous semblent tout à fait recevables à ce jour.

Je vous prie d'agréer, cher collègue, l'expression de mes sentiments distingués.

L'Administrateur Provisoire



Jean-Pierre Finance



Observations de Monsieur Claude Pouchan, Directeur Adjoint Scientifique à l'INC, CNRS

Nous avons pris bonne note de la réponse apportée par le DU au rapport de l'AERES du SRSMC – UMR CNRS UL 7565. Sans se prononcer sur les corrections factuelles apportées au document, l'INC n'a rien à ajouter à la réponse apportée par le DU.

Pr. Y. FORT
Directeur

Nancy, 25 Mars 2012

N/Ref : YF/2012.65

Objet : Commentaires SRSMC sur le rapport d'évaluation AERES 2012

**Commentaires généraux sur le rapport AERES d'évaluation 2012
du Laboratoire Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes (SRSMC)**

Le Directeur et l'ensemble des membres du Laboratoire tiennent à remercier les membres du Comité d'experts pour le déroulement de la visite, apprécié par chacun, son rapport, ses analyses et recommandations.

Le Conseil de Laboratoire et la Direction de l'Unité partagent l'analyse constructive du Comité et notent, avec satisfaction, l'avis très favorable donné sur la nouvelle structure proposée avec l'intégration scientifiquement pertinente de deux nouvelles équipes messines. Nous sommes confiants dans les potentialités de cette restructuration, dynamisante et ouverte (selon le comité), qui doit permettre à l'ensemble des acteurs du Laboratoire, et plus particulièrement aux jeunes chercheurs, d'exprimer tout leur potentiel et leurs compétences afin d'accroître encore la qualité et l'impact de leurs travaux.

La lecture du rapport d'évaluation nous conduit à préciser trois points spécifiques concernant certaines recommandations faites par le comité. Dans notre esprit, ces précisions, non polémiques, permettront d'affirmer la politique du Laboratoire qui va à notre sens dans l'esprit des recommandations effectuées.

Hygiène et Sécurité

Les problématiques d'Hygiène et de Sécurité auxquelles est confrontée l'Unité, ont parfaitement été relevées par le Comité, qui a d'ailleurs reconnu l'important travail effectué dans le domaine par le Laboratoire.

L'Unité remercie le Comité du message adressé aux tutelles en espérant que ce message sera entendu. La Direction de l'Unité et son conseil de Laboratoire s'engagent bien évidemment à mettre tout en œuvre pour que les engagements soient tenus et les actions prévues réalisées.

Animation scientifique

Le comité semble avoir relevé une animation interne insuffisante ("nombre insuffisant de séminaires intra- et inter- équipes"). L'Unité tient à souligner que, dans le cadre de sa restructuration, l'animation interne a été assurée de façon permanente sur les trois dernières

années par une prospective d'envergure: assemblées générales spécifiquement dédiées à l'activité scientifique, journées thématiques ayant réuni l'ensemble de l'unité, nombreuses réunions prospectives thématiques et séminaires au sein des équipes-projet en création.

Comme le recommande le Comité, cette dynamique d'animation sera remplacée dans le contrat à venir par des séminaires au sein des équipes-projet sous la responsabilité des animateurs. Compte tenu de la transversalité et de l'ouverture scientifique des projets proposés, l'animation intra- et inter-équipe sera, à n'en pas douter, effective.

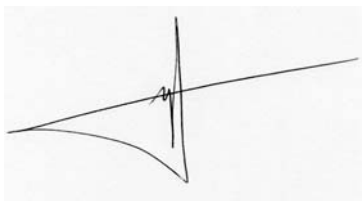
Relations avec le secteur socio-économique

La remarque du comité concernant les relations de l'Unité avec le monde socio-économique est pertinente mais ne constitue pas à notre sens une spécificité de notre Laboratoire, notamment dans le contexte économique régional peu favorable.

Nous souhaitons rappeler que l'ouverture de l'Unité est cependant présente avec plusieurs contrats d'équipe-conseil ou des relations avec des industriels français mais aussi étrangers.

Suivant la recommandation du Comité, nous poursuivrons bien entendu l'action Valosciences dont l'objectif est l'intensification de la valorisation des résultats et savoir-faire du Laboratoire. Nous tenons à rappeler qu'après six mois de fonctionnement, cette cellule de valorisation interne a déjà obtenu des résultats marquants avec plusieurs contrats signés ou en cours de signature.

Enfin, concernant le point spécifique de la valorisation des codes, nous souhaitons rappeler que certains logiciels ont été intégrés dans la version officielle de plateformes utilisées par la communauté internationale (Gaussian 09, NAMD en particulier), ou sont en cours d'intégration (AMBER). Nous rappellerons également que les codes que nous développons font partie (indirectement) des outils de simulation aujourd'hui utilisés en routine clinique dans les services de médecine nucléaire puisque l'outil GEANT4 est intégré à la plateforme GATE (dédiée à la reconstruction tomographique en imagerie médicale de type TEP). Comme le recommande le comité, nous poursuivrons et intensifierons l'intégration des travaux du Laboratoire dans ces logiciels.



Yves FORT
Directeur SRSMC