

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ  
CMC - Chimie de la matière complexe

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET  
ORGANISMES :

Université de Strasbourg

Centre national de la recherche scientifique -  
CNRS

---

**CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2022-2023**  
VAGUE C

Rapport publié le 27/03/2023



Au nom du comité d'experts<sup>1</sup> :

Sabine Szunerits, Présidente du comité

Pour le Hcéres<sup>2</sup> :

Thierry Coulhon, Président

En vertu du décret n° 2021-1536 du 29 novembre 2021 :

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

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

Ce rapport est le résultat de l'évaluation du comité d'experts dont la composition est précisée ci-dessous. Les appréciations qu'il contient sont l'expression de la délibération indépendante et collégiale de ce comité. Les données chiffrées de ce rapport sont les données certifiées exactes extraites des fichiers déposés par la tutelle au nom de l'unité.

## MEMBRES DU COMITÉ D'EXPERTS

**Présidente :** Mme Sabine Szunerits, université de Lille

Mme Laurence Charles-Coulibeuf, Aix-Marseille université (représentante du CNU)

**Experts :**

Mme Julia Contreras-Garcia, Sorbonne universités

M. Arnaud Desmedt, CNRS Talence

Mme Aurélie Macé, université Rennes 1 (personnel d'appui à la recherche)

M. Jean-Baptiste Sortais, université Toulouse 3 - Paul Sabatier - UPS (représentant du CoNRS)

## REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. François Guillaume

## CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Chimie de la matière complexe
- Acronyme : CMC
- Label et numéro : UMR 7140
- Nombre d'équipes : 7
- Composition de l'équipe de direction : Mme Petra Hellwig (directrice), M. Alexandre Varnek (directeur adjoint) et Mme Emmanuelle Leize-Wagner (directrice adjointe)

## PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies  
ST4 Chimie

## THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

L'UMR 7140 Chimie de la Matière Complexe (CMC) est une unité de recherche multidisciplinaire actuellement composée de sept équipes avec trois axes de recherche principaux. Le premier axe « chimie moléculaire et supramoléculaire » comprend deux équipes, Synthèse et Fonction des Architectures Moléculaires (SFAM) et Tectonique Moléculaire (TM). Le deuxième axe « chimie physique et analytique » comprend trois équipes, Bioélectrochimie et Spectroscopies (BES), Systèmes Complexes Hors Équilibre (SCHE) et Spectrométrie de Masse des Interactions et des Systèmes (SMIS). Le troisième axe « Chimio-informatique, Modélisation et Simulations » est composé de deux équipes, Modélisation et Simulations Moléculaires (MSM) et Chemoinformatique (CI).

## HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

Cette unité de recherche multidisciplinaire a été créée en 2013 et se composait à l'origine de cinq groupes de recherche. Deux groupes de chimie moléculaire étaient installés dans le bâtiment de l'Institut le Bel et les groupes travaillant dans les domaines de la bioélectrochimie, de la spectroscopie, de la spectroscopie de masse ainsi que de la chimio-informatique étaient installés dans la tour de la Chimie du campus central de l'université de Strasbourg. En 2016, toutes les équipes ont déménagé à différents étages du bâtiment de l'Institut le Bel. La direction a été assumée jusqu'à la fin de 2017 par M. Mir Wais Hosseini avec M. Jean Marc Planeix et Mme Petra Hellwig comme directeurs adjoints. En janvier 2018, Mme Petra Hellwig est devenue directrice de l'unité de recherche avec M. Alexandre Varnek et Mme Emmanuelle Leize-Wagner comme directeurs adjoints. En septembre 2020, une réorganisation majeure de l'unité a eu lieu afin de préparer le départ à la retraite de trois chercheurs et de développer de nouveaux axes de recherche. Avec l'arrivée de M. Thomas Hermans en septembre 2019, sept équipes de recherche ont été formées. Il faut mentionner que cette réorganisation majeure a concerné principalement les équipes de chimie moléculaire SFAM et TM.

## ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

L'unité s'inscrit dans l'excellent environnement de recherche de l'université de Strasbourg, lauréate de l'appel d'offre idex depuis 2021. L'unité fait partie de l'école doctorale des sciences chimiques (ED222) et participe activement à de nombreuses structures fédératives et Programmes d'Investissements d'Avenir (PIA). Mme Petra Hellwig est directrice de l'ED222 et donc membre des comités de pilotage de plusieurs Instituts Thématiques Interdisciplinaires (ITI) de l'université créés en janvier 2012, dans le prolongement des structures labex.

M. Mir Wais Hosseini est directeur de l'ITI chimie des systèmes complexes (SysChem). L'unité est également visible dans l'École Universitaire de Recherche (EUR) *Complex System Chemistry*, un établissement d'enseignement supérieur interne qui fait partie de l'ITI SysChem et dont le directeur pédagogique est M. Thomas Hermans. Plusieurs projets de recherche ont été soutenus par l'ITI SysChem et le labex centre de chimie des systèmes complexes. L'EUR *Complex System Chemistry* a financé un certain nombre de thèses.

L'unité fait partie de la fédération de chimie Le Bel et plusieurs de ses membres participent activement à son fonctionnement.

L'équipe CI de l'unité est membre de l'infrastructure de recherche ChemBioFrance et l'équipe MSM participe à la plateforme de calcul haute performance (HPC) à Strasbourg et au Grand équipement national de calcul Intensif (Genci) à Paris.

## EFFECTIFS DE L'UNITÉ : en personnes physiques au 31/12/2021

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	8
Maîtres de conférences et assimilés	8
Directeurs de recherche et assimilés	3
Chargés de recherche et assimilés	4
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	9
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>32</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	3
Personnels d'appui à la recherche non permanents	1
Post-doctorants	11
Doctorants	31
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>46</b>
<b>Total personnels</b>	<b>78</b>

RÉPARTITION DES PERMANENTS DE L'UNITÉ PAR EMPLOYEUR : en personnes physiques au 31/12/2021. Les employeurs non tutelles sont regroupés sous l'intitulé « autres ».

Employeur	EC	C	PAR
Université de Strasbourg	16	0	4
CNRS	0	7	5
<b>Total</b>	<b>16</b>	<b>7</b>	<b>9</b>

## BUDGET DE L'UNITÉ

Budget récurrent hors masse salariale alloué par les établissements de rattachement (tutelles) (total sur 6 ans)	669
Ressources propres obtenues sur appels à projets régionaux (total sur 6 ans des sommes obtenues sur AAP idex, i-site, CPER, collectivités territoriales, etc.)	2 020
Ressources propres obtenues sur appels à projets nationaux (total sur 6 ans des sommes obtenues sur AAP ONR, PIA, ANR, FRM, INCa, etc.)	771
Ressources propres obtenues sur appels à projets internationaux (total sur 6 ans des sommes obtenues)	3 520
Ressources issues de la valorisation, du transfert et de la collaboration industrielle (total sur 6 ans des sommes obtenues grâce à des contrats, des brevets, des activités de service, des prestations, etc.)	1 062
<b>Total en k€</b>	<b>8 042</b>

## AVIS GLOBAL

L'unité Chimie de la Matière Complexe (CMC), créée en 2013, est une UMR multidisciplinaire composée de sept équipes de tailles très variables (de 2 à 7 chercheurs et enseignants-chercheurs) et travaillant dans des domaines définissant trois axes : la chimie moléculaire et supramoléculaire (axe 1) ; la chimie physique et analytique (axe 2) et la modélisation ; la simulation et la chimio-informatique (axe 3). Cette structuration thématique est le résultat d'une réorganisation approfondie et réfléchie au cours des dernières années qui a donné naissance à une unité de recherche attrayante pour les jeunes chercheurs et enseignants-chercheurs. La démarche scientifique autour des systèmes complexes a ainsi permis d'attirer de nouveaux personnels, notamment un enseignant-chercheur porteur d'une ERC « *Starting Grant* ». L'atmosphère positive qui règne dans la structure actuelle peut être soulignée, ainsi que la qualité scientifique des jeunes chercheurs, post-doctorants et doctorants, contribuant activement aux échanges scientifiques au sein de l'unité (réunions scientifiques biannuelles). Le comité a été très impressionné par la qualité du dialogue avec les doctorants et les post-doctorants, témoignant de la bonne ambiance régnant dans l'unité.

CMC est un acteur important en recherche fondamentale, couvrant plusieurs domaines porteurs, allant de la synthèse des architectures moléculaires et de la tectonique moléculaire à la chémoinformatique et aux simulations moléculaires, en passant par une recherche de pointe et des développements originaux sur les systèmes complexes (ERC). L'unité couvre également des activités de recherche très pertinentes à l'interface de la biologie, de la chimie et des techniques spectroscopiques et analytiques avancées. Par la mise en place récente de thèmes transversaux (santé, durabilité et environnement), l'unité affiche sa volonté de répondre aux enjeux sociétaux de premier plan qu'il conviendra de cibler plus précisément pour leur donner une réelle visibilité nationale et internationale.

La production scientifique est excellente et se reflète notamment par le haut niveau des publications, y compris dans des revues de tout premier rang international (par exemple, *Science*, *Nature Commun*, *PNAS*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Angew. Chem.*, etc.) et le nombre conséquent de financements aux niveaux local, national et international obtenus par les chercheurs de l'unité. Les indices de reconnaissance aux échelles nationale et surtout internationale sont nombreux, avec le nombre élevé de séminaires et conférences invités (environ 200) à l'international. Tout ceci est révélateur du choix pertinent des thèmes de recherche à la fois d'actualité et innovants, ce qui a permis à l'unité d'être lauréate d'un programme *Erasmus Mundus*. L'unité s'engage également dans des actions de valorisation de sa recherche sur le plan industriel, avec, par exemple, la start-up Qfluidics d'intérêt pour le secteur biomédical.

En parallèle de ces activités de recherche de tout premier plan, une grande majorité des membres de CMC est fortement impliquée dans l'enseignement, les responsabilités associées et également dans des tâches d'intérêt collectif aux niveaux local (direction de l'école doctorale des Sciences Chimiques) et national (membres du CNU et du CoNRS, par exemple).

# ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

## A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Les recommandations du précédent rapport ne concernaient pas la qualité scientifique des travaux de l'unité mais concernaient son organisation et son fonctionnement, les principales recommandations étant le renforcement des activités transversales entre les équipes, la préparation de l'unité aux départs à la retraite prévus, de redéfinir le fonctionnement de l'unité et la formalisation des étapes de prise de décision.

L'importante restructuration réalisée en 2018-2020 visait à répondre à ces recommandations.

Huit projets communs impliquant des étudiants de master ont été engagés. Des projets complexes de chimie ont émergé depuis 2016 et répondent à des questions en suspens sur la santé et l'environnement. Ces deux axes de recherche sont devenus des thèmes transversaux dans l'unité.

Les départs à la retraite ont été anticipés avec l'intégration de M. T. Hermans et la création de l'équipe SCHE dont il est le responsable. Un nouveau MCF a été recruté en septembre 2022.

D'importantes restructurations et surtout les réorganisations des équipes SFAM et TM ont eu lieu.

L'équipe de direction est composée d'une directrice, également responsable de l'équipe BES, et de deux directeurs adjoints responsables des équipes SMIS et CI. Les décisions de fonctionnement sont prises de façon collégiale par le directoire composé des sept responsables d'équipes. Les décisions sont communiquées au personnel par courriel et lors des réunions du conseil d'unité (mis en place en 2021). Le conseil d'unité se réunit trois fois par an et tous les personnels permanents y sont invités et peuvent s'exprimer. Ce mode de fonctionnement convient aux personnels de CMC.

## B - DOMAINES D'ÉVALUATION

### DOMAINE 1 : PROFIL, RESSOURCES ET ORGANISATION DE L'UNITÉ

#### Appréciation sur les ressources de l'unité

L'unité fait preuve d'une capacité remarquable à obtenir des financements puisqu'environ 9 M€ ont été acquis entre 2016 et 2021. En particulier, ont été obtenus dix projets ANR, une subvention ERC *starting grant* *Life CYCLE*, deux programmes *International Training Network* (ITN) MAMI et CREANET comme coordinateur et trois autres comme partenaire. À ces financements institutionnels s'ajoutent ceux provenant du secteur industriel (1 M€ environ).

Aucune mise en commun des fonds n'est effectuée et chaque équipe est donc financièrement entièrement autonome.

#### Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

L'unité a des objectifs de recherche fondamentale dans les domaines de la chimie moléculaire et supramoléculaire, de la chimie physique et théorique et du développement d'outils analytiques. Des projets ont émergé depuis 2016 et sont devenus des thèmes transversaux, santé et environnement, qui sont des priorités des autorités locales, de la commission européenne et de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS). Ces thèmes transversaux offrent la possibilité de valoriser la recherche scientifique.

## Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

L'unité est structurée en équipes entièrement indépendantes, à la fois financièrement et aussi dans leur politique scientifique. La direction s'appuie sur un directoire composé des responsables d'équipe, sur un pôle de gestion administrative et financière et sur un conseil de laboratoire se réunissant trois fois par an dans lequel tous les personnels permanents sont systématiquement invités. Ce mode de fonctionnement a l'approbation de tous les personnels, titulaires et non-permanents ; il est conforme aux réglementations en matière de gestion des ressources humaines, de sécurité et de protection du patrimoine scientifique. La parité y est particulièrement bien respectée, des actions positives et intéressantes pour la préservation de l'environnement sont prises.

### *1/ L'unité possède des ressources adaptées à son profil d'activités et à son environnement de recherche.*

#### Points forts et possibilités liées au contexte

La force de l'unité réside dans son leadership dynamique et dans la grande indépendance de ses équipes. Les personnes nouvellement recrutées sont excellentes sur le plan scientifique et apporteront une grande valeur ajoutée à l'unité dans les années à venir. Les futurs départs à la retraite ont été soigneusement évalués par l'unité et des recrutements par concours sont engagés.

Les nouveaux thèmes transversaux autour de la santé et de l'environnement renforceront la visibilité de CMC. L'unité parvient à attirer des financements considérables aux niveaux national et européen, les équipes étant attractives pour les collaborateurs nationaux et internationaux.

#### Points faibles et risques liés au contexte

Comme dans toutes les unités, l'argent pour acquérir des équipements lourds ou mi-lourds est difficile à obtenir et l'absence de mutualisation des moyens financiers à CMC ne facilite pas de telles opérations. Bien que les financements soient suffisants dans toutes les équipes pour travailler dans de très bonnes conditions, certaines d'entre elles ont un accès limité aux fonds européens et/ou aux soutiens industriels.

### *2/ L'unité s'est assigné des objectifs scientifiques, y compris dans la dimension prospective de sa politique.*

#### Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité CMC réunit sept équipes très indépendantes qui définissent elles-mêmes leurs objectifs scientifiques fondamentaux en chimie moléculaire et supramoléculaire, en chimie physique et théorique et dans le développement d'outils analytiques théoriques et expérimentaux.

L'unité, en lançant la tectonique moléculaire en France, jouit historiquement d'un prestige important. Les thématiques de l'unité (de ses équipes) sont aujourd'hui bien diversifiées et se situent au meilleur niveau international. L'unité est fortement impliquée dans de nombreux réseaux académiques (par exemple 5 Groupements De Recherche [GDR]) et des sociétés savantes.

Les recherches de l'unité s'inscrivent également dans plusieurs défis sociétaux avec les thématiques transverses concernant l'environnement et la santé. Dans le domaine de l'environnement, il s'agit, par exemple, de l'élaboration de nouveaux matériaux pour le stockage de l'énergie, le piégeage du CO<sub>2</sub>, les solvants « verts » ou encore l'extraction du lithium. Dans celui de la santé, on peut citer l'élaboration de médicaments anticancéreux à base de titane, des outils de diagnostic par spectroscopies infrarouge et Raman en collaboration avec le Centre Hospitalier Universitaire (CHU) de Strasbourg, le pompage du sang à faible cisaillement pour remplacer les pompes de l'oxygénation extracorporelle actuelles, la conception assistée par ordinateur et la caractérisation de composés impliqués dans plusieurs nouvelles thérapies anti-cancéreuses et antivirales.

Ces thématiques s'inscrivent dans les priorités des collectivités locales, de l'université de Strasbourg et du CNRS et, plus largement, dans celles du conseil européen de la recherche et de l'OMS.



## Points faibles et risques liés au contexte

La petite taille de certaines équipes pourrait mettre en danger certains projets de recherche et il faudrait peut-être faire un choix entre les sujets et les aspects personnels.

*3/ Le fonctionnement de l'unité est conforme aux réglementations en matière de gestion des ressources humaines, de sécurité, d'environnement et de protection du patrimoine scientifique.*

## Points forts et possibilités liées au contexte

La parité est très bien respectée à CMC avec environ 40 % de femmes parmi l'ensemble des personnels (50 % parmi les personnels permanents) et une majorité de femmes assume des responsabilités au sein de l'unité.

L'unité dispose d'un règlement intérieur et se conforme aux réglementations en vigueur concernant les conditions de travail, les principes de non-discrimination ainsi que les conditions d'hygiène et de sécurité avec deux assistants de prévention et quatre Sauveteurs Secouristes du Travail (SST) pour 35 personnels permanents. La gestion de l'unité pendant les crises du Covid-19 a été efficace et a privilégié les meilleures conditions de travail possibles pour les étudiants.

En ce qui concerne la protection des données, des pôles informatiques de proximité appelés « infoprox » ont été mis en place par les tutelles permettant d'appliquer les bonnes pratiques recommandées par la politique de sécurité des systèmes d'information.

Des entretiens professionnels avec les PAR ont lieu une fois par an ; à cette occasion, les perspectives de carrière et de promotion y sont discutées.

Finalement, l'engagement de CMC dans la préservation de l'environnement est remarquable avec la mise en place d'un groupe de discussion impliquant les doctorants et les post-doctorants. L'unité est en particulier attentive à la gestion des déchets (tri sélectif centralisé), à la réduction de l'utilisation des solvants organiques, à la réduction de la consommation énergétique (télétravail, visio-conférences, interrupteurs automatiques dans les espaces communs, diagnostics de performance environnementale du CNRS, etc.) et à la réduction de la quantité de documents imprimés.

## Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'a pas identifié de risques ni de points faibles pour ce critère.

## DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

### Appréciation sur l'attractivité

L'unité a une réputation scientifique élevée et contribue à la construction de l'espace européen de la recherche. L'équipe CI assume la direction d'un laboratoire international à Hokkaido (Japon), ce qui accroît la visibilité internationale de l'unité.

De nombreux congrès et ateliers (>35) ont été organisés par les membres de l'unité qui sont par ailleurs impliqués dans des comités éditoriaux de revues spécialisées et participent à de multiples commissions et comités scientifiques.

*1/ L'unité est attractive par son rayonnement scientifique et contribue à la construction de l'espace européen de la recherche.*

## Points forts et possibilités liées au contexte

Comme déjà mentionné plus haut dans ce rapport, l'unité bénéficie d'une grande réputation scientifique nationale et internationale la rendant particulièrement attractive. Le rayonnement se traduit bien entendu par un nombre très élevé de conférences et séminaires invités (196), d'invitations dans des universités étrangères, la participation dans des comités éditoriaux de revues scientifiques reconnues (*CrystEngComm*, *New Journal of*

*Chemistry, Spectrochimica Acta, Molecular Informatics*) et la direction d'un laboratoire international avec le Japon.

L'unité a été lauréate de plusieurs projets européens (5 ITN H2020) et du label *Erasmus Mundus* pour le master transnational sur la chimoinformatique (équipe CI).

Cette visibilité et ce rayonnement ont permis d'intégrer une nouvelle équipe (SCHE), bénéficiaire d'une subvention « *starting grant* » de l'ERC, précédemment localisée à l'Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires (ISIS).

Finalement, un membre de CMC a été récipiendaire du grand prix Achille Le Bel de la Société Chimique de France (SCF).

#### Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'a pas identifié de risques ni de points faibles pour ce critère.

*2/ L'unité est attractive par la qualité de sa politique d'accueil des personnels.*

#### Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité a accueilli un grand nombre de stagiaires M2 (142 pendant la période considérée), de doctorants (64) et de post-doctorants (23).

La durée moyenne d'une thèse de doctorat est de 39 mois et les docteurs trouvent rapidement un emploi. Les doctorants et les post-doctorants sont très satisfaits de leur environnement de travail, de la qualité des interactions avec les personnels permanents de l'unité, de la disponibilité de la direction et des encadrants.

#### Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'a pas identifié de risques ni de points faibles pour ce critère.

*3/ L'unité est attractive par la reconnaissance que lui confèrent ses succès à des appels à projets compétitifs.*

#### Points forts et possibilités liées au contexte

L'attractivité se traduit par le taux de réussite remarquable aux appels à projets compétitifs de l'ANR (10) et aux financements européens (ERC, ITN etc.). La très grande majorité de ces projets sont coordonnés par des membres de l'unité.

#### Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'a pas identifié de risques ni de points faibles pour ce critère, le taux de succès aux appels à projets de l'ANR est bien réparti entre les équipes.

*4/ L'unité est attractive par la qualité de ses équipements et de ses compétences technologiques.*

#### Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité dispose en propre de nombreux équipements de haut niveau comme la diffraction des Rayons X, la spectrométrie de masse, la diffusion Raman, la spectroscopie IR et aussi les clusters informatiques. D'autres équipements comme la résonance magnétique nucléaire (RMN) ou la résonance paramagnétique électronique (EPR), mutualisés au sein de la fédération de chimie Le Bel, sont également disponibles.

Les équipes sont reconnues pour leur expertise dans ces techniques. Les PAR répartis dans les différentes équipes de CMC assurent la maintenance de ce parc instrumental, proposent des solutions méthodologiques, participent à la conduite des projets de recherche et à l'encadrement des étudiants en master et des doctorants.

## Points faibles et risques liés au contexte

Le remplacement ou l'acquisition des équipements lourds ou mi-lourds reste difficile et pourrait poser des difficultés à l'avenir.

## DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

### Appréciation sur la production scientifique de l'unité

La production scientifique de l'unité est de haut niveau avec 369 publications dans des revues internationales de premier plan. Toutes les équipes ont été très actives dans leur contribution à cette production.

*1/ La production scientifique de l'unité satisfait à des critères de qualité.*

## Points forts et possibilités liées au contexte

La production scientifique est excellente avec 369 ACL (4 ACL/an/ETP) et se reflète notamment par le haut niveau des publications, y compris dans des revues de tout premier rang international (*Science, Nature Commun, PNAS, J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem.* etc.). Les indices de reconnaissance aux échelles nationale et surtout internationale sont nombreux, avec, par exemple, le nombre élevé de séminaires et conférences invités (environ 200). Tout ceci est révélateur du choix pertinent des thèmes de recherche des différentes équipes qui sont à la fois d'actualité et innovants et qui seront explicités plus loin dans ce rapport.

## Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'a pas identifié de risques ni de points faibles pour ce critère.

*2/ La production scientifique est proportionnée au potentiel de recherche de l'unité et répartie entre ses personnels.*

## Points forts et possibilités liées au contexte

La production scientifique de l'unité est à la mesure des différents usages disciplinaires des différentes thématiques abordées. Toutes les équipes ont une très bonne production scientifique, laquelle est particulièrement élevée (entre 6 et 9 ACL/an/ETP) pour les équipes BES, CI et TM. L'ensemble des personnels, permanents ou non, est engagé dans les travaux de recherche.

## Points faibles et risques liés au contexte

Certaines équipes, en particulier SMIS avec 2 ACL/ETP/an environ, ont une production scientifique quantitative légèrement plus faible que d'autres.

*3/ La production scientifique de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte.*

## Points forts et possibilités liées au contexte

Les aspects de la science ouverte sous la forme de publications, codes et données en libre accès sont respectés. Cette production est accessible librement à travers la plateforme d'archives institutionnelles des établissements alsaciens d'enseignement supérieur et de recherche « univOAK ». Le transfert des données de univOAK vers HAL est réalisé par les services de la bibliothèque de l'université.

## Points faibles et risques liés au contexte

Le comité n'émet aucune remarque particulière.

## DOMAINE 4 : INSCRIPTION DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE DANS LA SOCIÉTÉ

### Appréciation sur l'inscription des activités de recherche de l'unité dans la société

Toutes les équipes ne s'investissent pas dans des activités de recherche en lien avec des organismes non-académiques ou en direction du grand public. Les équipes SCHE, SMIS et CI ont des collaborations importantes avec le monde socio-économique. Les actions tournées vers le grand public sont peu nombreuses, seules les équipes SCHE et CI affichent une réelle stratégie dans ce sens.

#### *1/ L'unité se distingue par la qualité de ses interactions non-académiques.*

##### Points forts et possibilités liées au contexte

La très grande majorité des activités de recherche qui définissent l'unité sont de nature fondamentale. Il convient cependant de préciser que plusieurs équipes ont des interactions non-académiques importantes notamment les équipes SCHE, SMIS et CI. L'équipe SCHE a fondé en 2019 la start-up Qfluidics qui compte aujourd'hui cinq employés, SMIS a des partenariats forts avec des fabricants de spectromètres et des entreprises pharmaceutiques, l'équipe CI, à travers son expertise reconnue dans le domaine de la chemo-informatique, a de nombreuses collaborations avec le secteur industriel (10 contrats représentant 900 k€).

##### Points faibles et risques liés au contexte

Certaines équipes n'ont pas d'interaction non-académique alors que leurs travaux d'intérêt sociétal pourraient s'y prêter.

#### *2/ L'unité développe des produits à destination du monde socio-économique.*

##### Points forts et possibilités liées au contexte

Quelques brevets valorisent des innovations majeures, parmi lesquelles un dispositif de microfluidique développé par l'équipe SCHE et exploité par la start-up Qfluidics. L'équipe MSM collabore avec la société Adionics pour l'extraction liquide-liquide sélective du lithium. L'équipe SMIS, reconnue pour ses développements d'interfaces électrophorèse capillaire/spectrométrie de masse (CE-MS), est référente pour la société Sciex et l'équipe CI développe des logiciels informatiques (par exemple de conception assistée par ordinateur de composés anti-SRAS-CoV-2) pour plusieurs grandes entreprises internationales.

##### Points faibles et risques liés au contexte

Certaines équipes restent concentrées sur les aspects fondamentaux avec un moindre degré d'activités de recherche directement liées à la société. Les équipes en sont conscientes et semblent réfléchir à des stratégies pour surmonter cette limitation.

#### *3/ L'unité partage ses connaissances avec le grand public et intervient dans des débats de société.*

##### Points forts et possibilités liées au contexte

Seules quelques équipes (SCHE et SMIS) partagent des connaissances avec le grand public. On peut ainsi mentionner plusieurs émissions de radio « Eureka » par SMIS, des annonces sur les recherches de SCHE et des émissions didactiques de SMIS sur le réseau social « YouTube », l'animation de débats au forum économique mondial par SCHE.

##### Points faibles et risques liés au contexte

Peu d'actions sont faites pour partager les connaissances avec le grand public, bien que de nombreux thèmes développés dans l'unité sont d'un grand intérêt sociétal et se prêteraient très bien à des débats grand public.

## C - RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

### *Recommandations concernant le domaine 1 : Profil, ressources et organisation de l'unité*

L'unité doit être vigilante sur la charge de travail des deux personnels administratifs, d'autant plus si le projet d'une huitième équipe « robotique Organique » sur une chaire professeur junior (CPJ) voit le jour.

La réorganisation de l'unité est récente, la constitution de thématiques transverses doit être poursuivie et les interactions entre équipes doivent toujours être encouragées.

### *Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité*

L'unité a une réputation scientifique d'excellence établie, elle est donc encouragée à poursuivre dans cette voie.

### *Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique*

Pris dans son ensemble, le niveau de publications est élevé et de grand standing. La production scientifique n'est cependant pas homogène, certaines équipes sont moins visibles et devraient réfléchir à leur stratégie de publication.

### *Recommandations concernant le domaine 4 : Inscription des activités de recherche dans la société*

Globalement, l'unité a des interactions avec des partenaires industriels mais une majorité d'équipes n'en ont pas. Ces équipes devraient engager des démarches vers le secteur économique d'autant plus que certaines thématiques, en particulier les axes santé et environnement, pourraient répondre à des attentes industrielles.

La qualité et le niveau des interactions avec le grand public devraient être accrus. Certaines plateformes, par exemple le fournisseur de conférences en ligne HSTalks, pourraient être exploitées.

Ces aspects de collaboration industrielle et d'interactions avec le grand public devraient être pris en compte, si possible, dans la stratégie de l'unité.

# ÉVALUATION PAR ÉQUIPE

**Équipe 1 :** Laboratoire de Synthèse et Fonction des Architectures Moléculaires (SFAM)

Nom de la responsable : Mme Sylvie Ferlay

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'activité de l'équipe SFAM est centrée sur la chimie moléculaire et l'étude des composés moléculaires à l'état solide. L'équipe s'intéresse en particulier à l'étude des réseaux métallo-organiques (MOF) ou des cages de coordination comme capteurs ou catalyseurs, à l'étude des propriétés électroniques et optiques des MOF et aux nouveaux solvants (solvants eutectiques profonds) pour la synthèse des composés de coordination.

L'équipe développe aussi des thématiques telles que les matériaux pour le stockage de l'énergie et la chimie pour la santé (anti-cancéreux). Cette dernière partie s'inscrit pleinement dans le thème transverse « santé » de l'unité.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'équipe SFAM a été créée récemment en 2020 lors de la restructuration de l'unité qui a concerné deux anciennes équipes de chimie moléculaire, chimie moléculaire du solide (CMS) et tectonique moléculaire (LTM), qui sont devenues les équipes SFAM et TM.

Il était recommandé à l'équipe CMS d'augmenter la quantité et la qualité de la production scientifique. Il est difficile d'évaluer si cette recommandation a été prise en compte tenu de la restructuration de l'unité.

En ce qui concerne l'équipe LTM, il lui était recommandé d'améliorer la visibilité et l'autonomie scientifique de ses membres (en dehors du responsable de l'époque). La création de SFAM a permis d'accroître la visibilité de certains membres de l'ancienne équipe LTM et la prise d'un nouvel élan scientifique, conformément aux recommandations du précédent rapport.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	2
Maîtres de conférences et assimilés	2
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	2
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	1
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>8</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	3
Doctorants	3
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>7</b>
<b>Total personnels</b>	<b>15</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe SFAM est une jeune équipe, fondée en 2020 seulement, qui doit continuer de concrétiser les nouvelles directions scientifiques engagées ces deux dernières années. L'équipe est la plus grande de l'unité, elle bénéficie d'un bon potentiel humain avec quatre EC, un EC émérite, trois chercheurs (soit 5,5 ETP en tout) et un PAR partagé avec l'équipe TM.

### Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe SFAM est composée de quatre EC, trois chercheurs et un PAR ; elle possède donc un potentiel humain à même de mener à bien ses projets. L'équipe a construit un bon tissu collaboratif à l'international (une dizaine de laboratoires en Europe, aux États-Unis, en Russie et au Japon). La dynamique de l'équipe se traduit par un très bon taux de publications scientifiques (3 ACL/an/ETP) dans des revues généralistes ou spécialisées de qualité (*Coord. Chem. Rev.*, *CrystEngComm*, *Inorg. Chem.*, etc.). Elle se caractérise également par une forte implication dans la dissémination de la recherche et de la didactique pour le volet enseignement. Les EC sont très fortement impliqués dans les structures d'enseignement (responsables de master/licence/licence pro) et profitent de cette très bonne visibilité pour attirer des étudiants.

### Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe actuelle est issue de la fusion de deux anciennes équipes (Laboratoire de Chimie Moléculaire de l'État Solide [LCMES] et une partie des personnels de LTM). Le point faible ou le risque principal de l'équipe est lié à sa restructuration récente ; l'équipe n'est pas encore stabilisée dans ses orientations scientifiques. De ce fait, le nombre de financements issus des AAP compétitifs est encore limité et le nombre de doctorants ou de post-doctorants reste un peu faible par rapport au nombre de C et EC titulaires de l'Habilitation à Diriger des Recherches (HDR).

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Il faut veiller à ce que des interactions scientifiques fortes se nouent entre les différents membres de l'équipe pour assurer sa cohésion et développer des sujets communs avec les autres équipes de l'UMR.

Il est important de concentrer les efforts de recherche sur quelques axes thématiques forts qui permettent à l'équipe de s'affirmer scientifiquement et ainsi d'accroître sa visibilité.

**Équipe 2 :** Laboratoire de tectonique moléculaire (TM)

Nom du responsable : M. Mir Wais Hosseini

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'ancienne équipe LTM s'est restructurée et compte actuellement deux EC titulaires et un PAR (à 50 % avec l'équipe SFAM).

Les recherches de l'équipe sont fondamentales et s'articulent autour de deux thèmes, la synthèse cristalline, domaine à l'intersection de la chimie supramoléculaire et de la chimie du solide, et les mouvements intramoléculaires dans les systèmes dynamiques.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Comme précisé pour l'équipe SFAM, l'équipe TM a été créée récemment en 2020 lors de la restructuration de l'unité, consécutivement à la recommandation d'améliorer la visibilité et l'autonomie scientifique des membres de l'ancienne équipe LTM (en dehors du responsable de l'époque).

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	2
Maîtres de conférences et assimilés	0
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	1
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>3</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	3
Doctorants	3
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>7</b>
<b>Total personnels</b>	<b>10</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe est à l'origine du concept de tectonique moléculaire en France, un sujet qui a suscité un intérêt considérable dans le monde entier au cours des deux dernières décennies. Elle comble le fossé entre la chimie supramoléculaire, la chimie structurale et la chimie des matériaux. La nature fondamentale de la recherche est largement dominante avec, cependant, une ouverture potentielle, dans le domaine de l'ingénierie cristalline, au monde non académique qui est à exploiter.



## Points forts et possibilités liées au contexte

Les points forts de l'équipe sont les sujets de recherche originaux, plutôt uniques, qui ont conduit à la publication d'un très grand nombre d'articles (57 ACL) dans des revues à fort impact. L'équipe bénéficie d'une excellente visibilité internationale, elle a été récipiendaire de plusieurs prix et distinctions (grand prix Achille Le Bel de la SCF, prix senior du groupe de chimie supramoléculaire de la SCF), un EC est membre d'une société savante internationale (*European Academy of Science*). Cette reconnaissance est attestée également par la co-organisation de sept colloques/congrès internationaux et huit invitations comme professeur à l'étranger (Belgique, Japon, Chine, USA). Les travaux de l'équipe sont attractifs, ils ont impliqué neuf doctorants, neuf post-doctorants, 26 étudiants en master et dix professeurs invités.

Les EC de l'équipe ont aussi une forte implication dans les filières d'enseignement de l'université et dans des prises de responsabilités pédagogiques.

## Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe a une taille sous-critique (2 EC dont 1 qui demandera son éméritat) et la pérennité de la thématique est affaiblie depuis la réorganisation de 2018-2020. L'essentiel de son rayonnement repose sur une seule personne, c'est une source de fragilité.

Mise à part une activité de consultance pour Total Énergies, les travaux de l'équipe ne sont pas valorisés, ni auprès des acteurs socio-économiques ni auprès du grand public.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe doit poursuivre ses recherches fondamentales de haut niveau national et international. La recherche applicative ne doit cependant pas être négligée, les travaux sur des sujets liés à l'ingénierie cristalline mériteraient en particulier d'être considérés.

Du fait de la taille sous-critique de l'équipe, le futur de la thématique est compromis. Il faudrait envisager la transmission du savoir-faire et des connaissances au sein de l'unité.

**Équipe 3 :** Laboratoire de Bioélectrochimie et spectroscopies (BES)

Nom de la responsable : Mme Petra Hellwig

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe BES articule ses activités de recherche autour de deux axes principaux. Un premier axe concerne le développement de méthodes expérimentales couplant l'électrochimie (voltampérométrie, senseurs bioélectrochimiques) et la spectroscopie vibrationnelle (infrarouge, Raman et les méthodes associées à la plasmonique telles que l'absorption infrarouge et la diffusion Raman exaltées de surface [SEIRAS et SERS, respectivement]) afin de répondre aux questions fondamentales liées au fonctionnement et aux mécanismes réactionnels de protéines. Le second axe concerne l'étude des processus chimiques responsables de l'approvisionnement énergétique des cellules vivantes et les réactions de petites molécules avec des protéines.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Aucune recommandation n'avait été formulée dans le précédent rapport. Seule l'implication étonnamment modeste de BES avec le monde industriel avait été mentionnée dans l'appréciation. L'équipe n'a toutefois pas développé de manière significative ses relations avec des industriels.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	3
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	1
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>5</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	3
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>3</b>
<b>Total personnels</b>	<b>8</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe est composée de quatre EC et d'un PAR. Huit doctorants et deux post-doctorants ont été encadrés pendant la période. La production scientifique est excellente avec 6,7 ACL/ETP/an et des publications dans des journaux à très fort impact (*Science*, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *Nature communications*). Les recherches menées s'appuient sur de nombreux contrats de recherche et l'équipe interagit de manière notable avec les autres équipes de l'unité (18 % de la production est cosignée avec d'autres équipes de CMC). Toutefois, l'équipe ne réalise pas d'actions notables pour la valorisation vers le monde socio-économique ou le grand public. L'implication forte de ses membres dans les tâches d'enseignement et dans l'administration de la recherche, ainsi que l'absence de personnels CNRS, pourrait impacter le potentiel recherche dans le futur.

### Points forts et possibilités liées au contexte

Les recherches de l'équipe sont à un très haut niveau et elles bénéficient d'une très bonne visibilité à travers un tissu remarquable de collaborations nationales et internationales. Sa production scientifique a presque doublé par rapport à la précédente évaluation. L'équipe bénéficie d'une importante reconnaissance internationale comme en attestent les séjours invités à l'étranger (5) ou encore l'activité éditoriale dans des revues reconnues (*Spectrochimica Acta*, *Molecules*). L'attractivité de l'équipe est très bonne, de par les encadrements de doctorants et post-doctorants, l'implication forte dans l'enseignement ou encore l'arrivée d'un MCF pendant la période (notons qu'un autre MCF et une IR avaient été recrutés en 2016, à la fin de la période d'évaluation précédente). Le nombre de contrats de recherche est élevé conduisant à un budget d'environ 1 M€ au cours de la période. L'équipe est également bien impliquée dans la direction pédagogique de l'université en assurant les coresponsabilités de filières (internationales et professionnalisantes) de master et de licence ainsi que la direction de l'école doctorale des sciences chimiques de l'université. Les interactions avec les autres équipes de CMC sont notables à travers le nombre de projets (7 stages de master inter-équipes) et de publications communes (6).

### Points faibles et risques liés au contexte

Le potentiel recherche est constitué de quatre EC avec l'appui d'une ingénieure de recherche de l'université. Les tâches liées à l'enseignement et à l'administration de la recherche constituent une large part de l'activité des personnels de l'équipe. Le pilotage des projets n'est pas réparti de façon homogène parmi les membres de l'équipe ; il est principalement assuré par la responsable de BES. L'équipe rencontre des difficultés pour trouver des financements permettant d'assurer la jouvence des équipements et l'acquisition de nouveaux montages spectroscopiques (spectrométrie d'absorption infrarouge en champ proche [nano-IR] en particulier).

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe BES est encouragée à poursuivre sa stratégie en matière de recherche fondamentale de très haut niveau autour des mécanismes réactionnels des protéines, de la réactivité chimique des enzymes ou encore de la bioénergie. L'arrivée d'un nouveau MCF en juillet 2021 devrait permettre de renforcer les activités liées à la plasmonique et, de ce fait, aux spectroscopies vibrationnelles exaltées, indispensables pour l'étude des systèmes biomoléculaires. L'ensemble des membres de l'équipe est encouragé à prendre une part active dans le portage de projets et dans l'encadrement de doctorants ou de post-doctorants. La valorisation des travaux de recherche vers le monde socio-économique (les industries pharmaceutiques en particulier) devrait ouvrir de nouvelles pistes de financements, en particulier pour la jouvence et/ou l'acquisition de nouveaux montages.

**Équipe 4 :** Laboratoire de Systèmes complexes hors équilibre (SCHE)

Nom du responsable : M. Thomas Hermans

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

La recherche de l'équipe concerne les systèmes complexes hors équilibre abordés selon trois axes principaux, la dynamique d'auto-assemblages supramoléculaires, la séparation chirale et la microfluidique sans paroi avec des applications majeures dans le domaine de la santé.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'équipe a rejoint l'unité en septembre 2019 ; elle était auparavant intégrée à l'Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires (ISIS) à Strasbourg. Les recommandations faites à l'équipe lors de l'évaluation de l'ISIS étaient essentiellement de poursuivre ses efforts de recherche et de gagner son indépendance, objectif largement atteint au regard de la reconnaissance actuelle aux niveaux national et international.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	0
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	0
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>0</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	4
Doctorants	8
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>13</b>
<b>Total personnels</b>	<b>13</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe a rejoint l'unité en 2019 avec un seul permanent qui dirige de main de maître les activités de recherche d'un groupe de sept doctorants et de cinq post-doctorants recrutés dans le cadre de multiples contrats européens. Avec 4,4 ACL/ETR/an dans des journaux de haut standing (*J. Am. Chem. Soc., Nature Comm. Chem. Soc. Rev., etc.*) la production scientifique de l'équipe pendant la période de référence est excellente. Par ailleurs, des brevets valorisent des innovations majeures, parmi lesquelles un dispositif de microfluidique sans paroi basée sur la lévitation magnétique, qui est devenu le produit phare de la start-up Qfluidics créée en 2019.

## Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe bénéficie d'une très forte visibilité/reconnaissance internationale, comme en témoigne son rôle de manager d'un Grand Challenge *Joint European Disruptive Initiative* (JEDI) pour la découverte de molécules actives contre le virus SARS-cov-2 (100 laboratoires au niveau international, 500 chercheurs). Avec un budget de 3,8 M€ obtenu grâce à un succès exceptionnel dans des appels à projets très compétitifs, l'équipe a les moyens de gérer des projets ambitieux et novateurs qui suscitent des collaborations industrielles pérennes. L'équipe assure également la direction pédagogique de l'école internationale *Complex System Chemistry*.

## Points faibles et risques liés au contexte

Pas de véritables points faibles si ce n'est la petite taille de l'équipe.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe SCHE est encouragée à poursuivre sa stratégie qui combine harmonieusement une recherche fondamentale de très haut niveau et l'exploitation des applications qui en découlent.

L'arrivée d'un MCF est prévue en septembre 2022, mais engager des collaborations ciblées avec d'autres équipes de l'unité permettrait de compenser son faible effectif et d'assurer la pérennité de ses axes de recherche.

**Équipe 5 :** Laboratoire de Spectrométrie de masse des interactions et des systèmes (SMIS)

Nom de la responsable : Mme Emmanuelle Leize-Wagner

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe développe de nouvelles méthodologies basées sur la spectrométrie de masse pour étudier la structure et la dynamique de complexes non-covalents (axe 1) et caractériser la structure primaire de biopolymères utilisés à des fins thérapeutiques (axe 2) ou présents dans des archéo-matériaux (axe 3).

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Si l'équipe n'a pas encore eu la possibilité de bénéficier de financements conséquents pour assurer la jouvence et la maintenance de son parc instrumental, elle minimise efficacement ce risque au moyen de deux actions majeures : d'une part, des collaborations avec des constructeurs d'équipement lui assure le prêt de deux instruments *Quadrupole time-of-flight* (QTOF) pour le développement de l'interface électrophorèse capillaire/spectrométrie de masse (CE-MS) et, d'autre part, elle s'est stratégiquement positionnée au sein du consortium porteur du projet région Grand-Est 2017 ResEX lui permettant de bénéficier depuis 2019 d'un accès privilégié à un spectromètre de masse à résonance cyclotronique ionique à transformée de Fourier (FT-ICR) de dernière génération localisé à l'université de Lorraine à Metz.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	0
Maîtres de conférences et assimilés	1
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	2
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	1
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>5</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	2
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>2</b>
<b>Total personnels</b>	<b>7</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

Les recherches de l'équipe sont d'un grand intérêt sociétal en raison des propriétés thérapeutiques des protéines étudiées. Le développement du couplage CE-MS lui vaut une bonne visibilité internationale, de nombreuses collaborations académiques, son appartenance à des réseaux scientifiques internationaux et son rôle de centre référent de la société Sciex (instrumentation spectrométrie de masse) en Europe pour l'analyse de biomolécules. Ce développement technique majeur bénéficie aux trois axes de recherche et participe à la dynamique de l'équipe dont les membres sont actifs dans différentes sociétés savantes.

### Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe bénéficie d'une reconnaissance internationale pour son développement d'interfaces CE-MS et des applications associées. Sa production scientifique est bonne avec une moyenne de 1,6 ACL/ETP/an. Ses activités de recherche, conjuguant aspects fondamentaux et appliqués et menées avec une instrumentation de pointe, lui assurent une très bonne attractivité, avec l'encadrement de huit thèses (dont 5 soutenues pendant la période) et de 30 stagiaires M1/M2. La taille de l'équipe est bien adaptée à son activité et la collaboration avec une vingtaine de partenaires académiques différents témoigne de sa notoriété.

Les membres de l'équipe participent à un grand nombre de comités scientifiques et de sociétés savantes.

### Points faibles et risques liés au contexte

Le principal point faible de l'équipe reste sa difficulté à obtenir des financements pour faire face aux coûts élevés de maintenance et de renouvellement de son parc instrumental.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe doit poursuivre le développement applicatif du couplage CE-MS vers de nouvelles structures biologiques et dans différents domaines, à l'instar de l'archéo-chimie, pour conserver sa position de leader dans le domaine et proposer des projets innovants et ambitieux à même d'assurer son autonomie financière. En particulier, un effort supplémentaire pour obtenir des contrats de recherche financés (industriels ou ANR voire ERC) permettrait en plus de recruter des personnels expérimentés (post-doctorants, ingénieurs) pour accélérer les applications du couplage CE-MS dans un contexte international très compétitif.

**Équipe 6 :** Laboratoire de Modélisation et Simulations Moléculaires (MSM)

Nom de la responsable : Mme Rachel Schurhammer

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe travaille sur la simulation de phénomènes complexes rencontrés dans des systèmes tels que les assemblages supramoléculaires, les liquides ioniques et les interfaces liquide-liquide. Tous ces systèmes présentent une importante composante dynamique, prise en compte afin de comprendre leurs propriétés statiques (structures) et dynamiques (transport).

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'équipe MSM a été créée en 2019, il n'y a donc pas de recommandations la concernant.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	1
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	1
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>3</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	3
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>3</b>
<b>Total personnels</b>	<b>6</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

Il s'agit d'une petite équipe (1 PR, 1 MCF, 1 IR). En dépit d'avoir été constituée en 2019 et en dépit de sa taille, une thèse a été soutenue et trois autres sont en cours. Aucun post-doctorant n'a été recruté dans la période de référence.

L'équipe bénéficie de financements plutôt réguliers de la part de l'ANR et ceci sur les différentes thématiques. L'équipe participe activement à la vie scientifique à l'échelle nationale (e.g. GDR Solvate).

La participation de l'équipe dans des conférences internationales est modeste.



## Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe a produit 28 ACL (5 ACL/ETP/an) dans des journaux spécialisés ou de chimie générale (*Chem. Eur. J.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, par exemple).

L'intégration dans les activités de l'unité est très bonne. Elle s'articule majoritairement autour d'une collaboration avec l'équipe SFAM et a donné lieu à treize publications communes.

L'organisation d'événements (par exemple l'organisation du congrès *2<sup>nd</sup> International conference on non-covalent interactions*) et la participation à des GDR pertinents (Solvate et RCTF) révèlent un effort pour augmenter la visibilité de cette nouvelle équipe et assurer son positionnement au niveau national.

Dans les équipes de théoriciens, les collaborations avec des industriels sont assez rares. La collaboration que l'équipe entretient avec la start-up Adionics, spécialisée dans la désalinisation de l'eau de mer et l'extraction du lithium, est donc à saluer.

## Points faibles et risques liés au contexte

La taille de l'équipe la rend très vulnérable en cas de départs, d'autant plus que le taux de co-encadrement est modeste.

En dépit des bons résultats scientifiques, la visibilité et la reconnaissance internationale, par exemple, sur le plan de la participation à des conférences et des séjours à l'étranger, restent très faibles. Le risque, à long terme, est de nuire au rayonnement et à l'attractivité de l'équipe.

La collaboration avec la société Adionics est pour l'instant le seul partenariat industriel de l'équipe et la pérennité de cette collaboration n'est pas garantie.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe est encouragée à poursuivre sa stratégie en matière de recherche fondamentale. Un effort, soit par recrutement, soit par fusion, devrait être fait pour renforcer l'équipe.

La collaboration avec l'équipe SFAM, point fort du dernier quinquennat, devrait être poursuivie, voire renforcée et faire notamment l'objet d'une thèse en co-encadrement. Ceci permettrait aussi de promouvoir la soutenance de l'HDR au sein de l'équipe.

Une attention toute particulière devra être aussi portée par le laboratoire sur le départ de l'IR au cours du prochain quinquennat, en matière de recrutement (compte tenu de la taille de l'équipe) et du transfert des connaissances.

Le développement de nouveaux contacts avec le milieu industriel devrait être aussi une priorité du prochain contrat.

**Équipe 7 :** Laboratoire de Chimoinformatique (CI)

Nom du responsable : M. Alexandre Varnek

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe développe des méthodologies en chimoinformatique pour la conception de structures moléculaires originales possédant des propriétés ciblées, notamment dans le domaine pharmaceutique mais aussi dans celui des matériaux pour l'énergie.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Comme recommandé dans le précédent rapport, l'équipe a maintenu sa dynamique et son niveau d'excellence scientifique. Elle a également engagé une collaboration avec l'équipe BES pour le développement d'outils de diagnostic (en spectroscopies IR et Raman) en collaboration avec le CHU de Strasbourg.

Les ressources informatiques ont été augmentées et actualisées, permettant une bonne adéquation aux besoins.

## EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE

<b>Personnels permanents en activité</b>	
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	1
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	0
Chercheurs des EPIC et autres organismes, fondations ou entreprises privées	0
Personnels d'appui à la recherche	2
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>5</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche non permanents	1
Post-doctorants	1
Doctorants	9
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>11</b>
<b>Total personnels</b>	<b>16</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

À travers la prédiction de composés candidats pertinents dans les domaines de la santé et de l'énergie, validée expérimentalement à travers des partenariats académiques internationaux et industriels, les travaux de recherche de l'équipe CI sont indéniablement d'un grand intérêt sociétal. Un exemple particulièrement parlant de cet intérêt est l'implication de CI dans le Grand Challenge JEDI pour la découverte de molécules actives contre le SARS-cov-2. La production scientifique est excellente et paraît dans des journaux de haut rang tandis que les logiciels développés sont mis à la disposition du monde académique.

Une bonne implication dans le développement des activités grand public se rajoute à cette activité partenariale. Tous ces points confèrent à l'équipe une forte visibilité auprès des milieux tant académiques qu'industriels et sociétaux.

### Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe bénéficie d'une excellente notoriété internationale pour son rôle pionnier dans la conception assistée par ordinateur de nouvelles molécules à propriétés ciblées, qui se traduit par plusieurs projets académiques (y compris européens, e.g. 2 ITN), des contrats industriels (10) à haute valeur ajoutée, l'organisation de colloques et un nombre élevé de conférences données à l'international. Rapportée aux effectifs de l'équipe, la production scientifique est importante et s'élève à 7,3 ACL/ETP/an pendant la période de référence, valeur intégrant la contribution effective de six professeurs invités. Le pilotage du master européen de chimoinformatique, la participation à un laboratoire international avec le Japon ainsi que ses activités de recherche assurent à l'équipe CI une très bonne attractivité, avec l'encadrement de dix-neuf thèses (dont 10 soutenues sur la période évaluée), 27 stagiaires de niveau master et six post-doctorants.

Il faut aussi noter que cette attractivité repose sur une visibilité internationale importante, générant un vivier de jeunes formés en chimoinformatique avec de bonnes perspectives d'embauche.

### Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe doit d'ores et déjà anticiper son organisation en vue du départ à la retraite de son responsable actuel.

Très peu d'interactions avec les autres équipes de l'unité sont relevées en matière d'étudiants en master, de doctorants et de publications en commun.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe doit maintenir et pérenniser son niveau d'excellence et faire fructifier son portefeuille collaboratif, notamment dans la perspective du départ en retraite de son responsable actuel.

## DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

### DATES

**Début :** 20 octobre 2022 à 08h45

**Fin :** 21 octobre 2022 à 18h00

**Entretiens réalisés en distanciel**

### PROGRAMME DES ENTRETIENS

#### 20 octobre 2022

Heure		Agenda	Responsable
08:45	09:00	Présentation du comité	S. SZUNERITS
09:00	09:20	Présentation bilan unité	P. HELLWIG
09:20	10.00	<b>Discussions</b>	
10.00	10.15	<b>Pause</b>	
10.15	10.35	Présentation bilan SFAM	S. FERLAY
10.35	11.00	<b>Discussions</b>	
11.00	11.15	Présentation bilan TM	MW HOSSEINI
11.15	11.35	<b>Discussions</b>	
11.35	11.50	Présentation bilan BES	P. HELLWIG
11.50	12.10	<b>Discussions</b>	
12.10	14.00	<b>Huis clos comité</b>	
14.00	14.15	Présentation bilan SCHES	T HERMANS
14.15	14.35	<b>Discussions</b>	
14.35	14.50	Présentation bilan SMIS	E LEIZE
14.50	15.10	<b>Discussions</b>	
15.10	15.25	Présentation bilan MSM	R SCHURHAMMER
15.25	15.45	<b>Discussions</b>	
15.45	16.00	Présentation bilan CI	A VARNEK
16.00	16.20	<b>Discussions</b>	
16.20	17.00	<b>Huis clos comité</b>	
17.00	17.45	<b>Huis clos chercheurs et enseignants-chercheurs</b>	
17.45	18.30	<b>Huis clos comité</b>	

#### 21 octobre 2022

Heure		Agenda	Responsable
08:30	09:15	<b>Huis clos PAR</b>	
09:15	10.00	<b>Huis clos doctorants et post-doctorants</b>	
10.00	10.15	<b>Pause</b>	
10.15	11.00	<b>Huis clos responsables équipes</b>	
11.00	11.45	<b>Huis clos direction unité</b>	
11.45	14.00	<b>Huis clos comité</b>	
14.00	14.45	<b>Huis clos tutelles</b>	
14.45	18.00	<b>Huis clos comité</b>	

## OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

**Université**

**de Strasbourg**

Monsieur Éric Saint-Aman  
Directeur du Département d'évaluation de la recherche  
HCERES - Haut conseil de l'évaluation de la recherche et  
de l'enseignement supérieur  
2 rue Albert Einstein  
75013 PARIS

Strasbourg, le 17 mars 2023

Objet : Rapport d'évaluation DER-PUR230023042 - CMC - Chimie de la matière complexe

Réf. : RB/FF/ 2023-194

**Rémi Barillon**

Vice-Président Recherche,  
formation doctorale et science  
ouverte

Cher Collègue,

**Affaire suivie par :**

Florian Fritsch  
Responsable du département  
Administration de la recherche  
Tél : 03.68.85.15.19  
[florian.fritsch@unistra.fr](mailto:florian.fritsch@unistra.fr)

L'université de Strasbourg vous remercie ainsi que tous les membres du comité HCERES pour le travail d'expertise réalisé sur l'unité de recherche « Chimie de la matière complexe » (CMC – UMR 7140).

Nous n'avons aucune observation de portée générale à formuler sur le rapport d'évaluation transmis.

Je vous prie d'agréer, Cher Collègue, l'expression de mes cordiales salutations.

Rémi Barillon



**Direction de la Recherche**

4 Rue Blaise Pascal  
CS 90032  
F-67081 STRASBOURG CEDEX  
Tél. : +33 (0)3 68 85 15 80  
Fax : +33 (0)3 68 85 12 62  
[www.unistra.fr](http://www.unistra.fr)

Les rapports d'évaluation du Hcéres  
sont consultables en ligne : [www.hceres.fr](http://www.hceres.fr)

Évaluation des universités et des écoles

Évaluation des unités de recherche

Évaluation des formations

Évaluation des organismes nationaux de recherche

Évaluation et accréditation internationales



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

[hceres.fr](http://hceres.fr)

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

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

