

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ
LCT - Laboratoire de chimie théorique

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET
ORGANISMES :

Sorbonne Université - SU

Centre national de la recherche scientifique -
CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2023-2024
VAGUE D

Rapport publié le 16/04/2024



Au nom du comité d'experts :

Élise Dumont, présidente du comité

Pour le Hcéres :

Stéphane Le Bouler, président par intérim

En application des articles R. 114-15 et R. 114-10 du code de la recherche, les rapports d'évaluation établis par les comités d'experts sont signés par les présidents de ces comités et contresignés par le président du Hcéres.

Pour faciliter la lecture du document, les noms employés dans ce rapport pour désigner des fonctions, des métiers ou des responsabilités (expert, chercheur, enseignant-chercheur, professeur, maître de conférences, ingénieur, technicien, directeur, doctorant, etc.) le sont au sens générique et ont une valeur neutre.

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 Élise Dumont, UCA - université Côte d'Azur

Experts :

M. Martial Boggio-Pasqua, CNRS Toulouse

M. Stéphane Humbel, Aix-Marseille université

M. Denis Jacquemin, université de Nantes

M. Roberto Marquardt, université de Strasbourg (représentant du CNU)

M. Jean-Luc Parouty, CNRS Saint-Martin-d'Hères (personnel d'appui à la recherche)

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. François Guillaume

REPRÉSENTANTS DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES TUTELLES DE L'UNITÉ DE RECHERCHE

M. Philippe Agard, Sorbonne Université

M. Marc Baaden, CNRS

M. Mehran Mostafavi, CNRS

CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Laboratoire de Chimie Théorique
- Acronyme : LCT
- Label et numéro : UMR 7616
- Nombre d'équipes : 3 pôles
- Composition de l'équipe de direction : M. Jean-Philip Piquemal (directeur) / M. Alexis Markovits (directeur adjoint)

PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies
ST4 Chimie

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

Le LCT mène des recherches en chimie théorique, avec une forte composante thématique de développements méthodologiques pour la chimie quantique (pôle 1), pour les simulations numériques (pôle 2) et un volet couvrant les applications de la chimie théorique (pôle 3). Chaque pôle est structuré en deux ou trois groupes thématiques. L'unité couvre ainsi quasiment l'intégralité des nouvelles approches et des développements de codes de calcul en chimie théorique. De nouvelles méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) à longue portée, de calculs de fonctions d'onde corrélées et de Monte-Carlo quantique (QMC) sont développées au sein du pôle 1 « Développements méthodologiques pour la chimie quantique ». Le second pôle, « Méthodes pour la simulation moléculaire », est également axé sur le développement de méthodes de dynamique moléculaire permettant la prise en compte des effets nucléaires et la mise au point de champs de force polarisables. Le troisième pôle, « Modélisation de systèmes complexes », regroupe les applications de la chimie théorique, souvent couplées à des mesures expérimentales, dans des champs disciplinaires larges couvrant l'astrochimie, les chimies organique, inorganique et organométallique ainsi que les matériaux.

Les activités de recherche en chimie théorique sont menées principalement avec une visée fondamentale intégrant une forte interdisciplinarité, des collaborations sont actives avec des chimistes moléculaires, des exobiologistes, des physiciens et des mathématiciens.

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

Le LCT a été fondé en 1997, après le regroupement du Laboratoire de Dynamique des Interactions Moléculaires et du Laboratoire de Chimie Organique Théorique.

L'unité est entièrement localisée dans différents locaux répartis sur plusieurs étages dans le campus Pierre et Marie Curie. Ils correspondent pour une part aux locaux historiques (avant 2017 et suite à une période de six ans à Ivry durant le désamiantage) et des espaces supplémentaires ont été obtenus en 2017 puis en 2020, mais dans des barres et à des étages différents.

L'unité a connu ces dernières années une augmentation significative de son effectif en personnels permanents et non-permanents.

ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

L'unité est impliquée dans l'institut Parisien de chimie physique et théorique (IP2CT, FR2622) et relève de l'UFR de chimie de Sorbonne université. Elle bénéficie de l'environnement d'un idex et a participé en tant que membre fondateur à plusieurs labex (Casimlab et Michem jusqu'en 2019) particulièrement impactants dans son périmètre thématique. Plusieurs personnels permanents ont été fortement impliqués dans l'administration de ces labex. L'unité est, depuis 2019, membre fondateur impliqué dans l'administration de l'Initiative sciences et ingénierie moléculaires (ISIM) de l'alliance SU.

L'unité a été également partenaire de l'équipex Equip@meso (équipement d'excellence de calcul intensif de mésocentres coordonnés) et de la plateforme de calcul Jarvis de l'IP2CT.

EFFECTIFS DE L'UNITÉ : en personnes physiques au 31/12/2022

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	4
Maîtres de conférences et assimilés	13
Directeurs de recherche et assimilés	3
Chargés de recherche et assimilés	5
Personnels d'appui à la recherche	4
Sous-total personnels permanents en activité	29
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	2
Personnels d'appui non permanents	1
Post-doctorants	5
Doctorants	22
Sous-total personnels non permanents en activité	30
Total personnels	59

RÉPARTITION DES PERMANENTS DE L'UNITÉ PAR EMPLOYEUR : en personnes physiques au 31/12/2022. Les employeurs non tutelles sont regroupés sous l'intitulé « autres ».

Nom de l'employeur	EC	C	PAR
Sorbonne Université	18	0	1
CNRS	1	7	3
Autres	0	1	0
Total personnels	19	8	4

AVIS GLOBAL

L'unité a une orientation scientifique claire, centrée sur la chimie théorique avec de nombreux développements et toute une gamme de sujets d'application. Elle bénéficie ainsi d'une forte identité et d'une reconnaissance au niveau international, avec un réseau étendu de collaborations. Le LCT s'est fortement impliqué durant la période évaluée dans la mise à disposition des codes qu'il développe, ce qui a contribué à son rayonnement même si cette implication n'atteint pas la même intensité selon les pôles. La dynamique d'obtention de financements nationaux et européens dans le cadre d'appels à projets compétitifs (7 ANR et 1 projet Synergy financé par l'ERC) s'est largement consolidée. L'unité, malgré un positionnement scientifique très fondamental, a su également développer des interactions avec des partenaires du monde socio-économique comme TotalEnergies. La qualité de la valorisation des travaux du LCT est également visible à travers la création de la start-up Qubit Pharmaceuticals en 2020.

L'unité a obtenu plusieurs résultats marquants pour la communauté des théoriciens avec des développements méthodologiques phares qui ont trouvé un écho international tels que la combinaison de la DFT avec des méthodes basées sur la fonction d'onde (Journal of Chemical Physics, 2018), des outils basés sur la fonction de localisation électronique (ELF) pour prédire la température critique de supraconducteurs (Nature Communications, 2021), des modèles de dynamique pour la réactivité interstellaire (Astrophysical Journal Letters, 2018), des descripteurs pour la toxicité des nanoparticules (Nanomaterials, 2022) et des applications comme les travaux sur le SARS-Cov-2 ayant donné lieu à des tests biochimiques (Chemical Science, 2022).

Les méthodes et outils développés (19) sont en accès libre, comme Quantum Package, sous licence commerciale comme Hyperion, ou intégrés à des logiciels commerciaux comme Molpro et Gaussian. Ces logiciels sont largement utilisés par la communauté scientifique internationale.

La production scientifique de l'unité est d'un excellent niveau, avec environ 400 articles majoritairement publiés dans les meilleurs journaux de la chimie physique théorique (The Journal of Chemical Physics, Journal of Physical

Chemistry, Journal of Chemical Theory and Computation) ainsi que dans des journaux généralistes (Chemical Sciences, Angewandte Chemie International Edition). L'unité se distingue également par un nombre de communications invitées exceptionnel (208), en grande majorité dans des congrès internationaux et par l'organisation de plus de 60 colloques.

Le fonctionnement et l'organisation gagneraient cependant à être formalisés, l'animation scientifique au sein des pôles et des groupes est à renforcer de manière à favoriser les échanges scientifiques et transmettre une culture autour des méthodes et des sujets d'étude actuels en chimie théorique.

L'unité propose une trajectoire qui s'inscrit essentiellement dans la continuité avec, notamment, des priorités placées sur l'interdisciplinarité et des développements méthodologiques prometteurs et originaux.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Suivant les recommandations du précédent rapport d'évaluation, l'unité a élargi son spectre de financements avec l'obtention de plusieurs contrats (1 projet ERC, 2 contrats RIA Horizon 2020, 7 financements de l'ANR), le dépôt de plusieurs brevets et la création de la start-up Qubit Pharmaceuticals. Elle a développé des interactions contractuelles avec des entreprises comme TotalEnergies.

L'unité a su maintenir un vivier d'étudiants formés en chimie théorique, notamment en participant à un master Erasmus Mundus et en mutualisant certains enseignements avec d'autres établissements de la région parisienne comme l'université Paris-Saclay ou encore l'ENS à Saclay.

Elle a également été particulièrement active pour diffuser largement les logiciels développés au LCT au moyen de plateformes accessibles librement comme GitHub ou de pages internet gérées par les services de SU.

Les recommandations du précédent rapport concernant l'animation scientifique et le pilotage organisationnel de l'unité n'ont été que partiellement prises en compte. Le comité propose dans la suite de ce document quelques pistes d'amélioration.

B - DOMAINES D'ÉVALUATION

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

Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

L'unité a un positionnement thématique très clair en chimie théorique ; elle est un acteur de tout premier plan à l'international dans ce domaine. Elle assure les développements méthodologiques et les applications de la chimie théorique pour étudier des systèmes réels. Un des objectifs majeurs de l'unité a été de renforcer son interdisciplinarité dans les domaines des mathématiques, de la physique et de l'astrochimie. Un autre objectif du LCT a été de mettre à la disposition du plus grand nombre les codes et les bases de données développées en son sein.

Appréciation sur les ressources de l'unité

Les membres de l'unité ont réussi à obtenir de nombreux contrats en répondant aux appels à projets nationaux et internationaux (ANR, labex, ERC). L'unité a ainsi consolidé durant la période évaluée son recrutement de doctorants (50 dont 16 étrangers) et de post-doctorants (17). L'unité est attractive et a un bilan très positif de recrutements de chercheurs (4) et d'enseignants-chercheurs (1). Les enseignants-chercheurs sont également impliqués dans la formation d'étudiants au sein de l'UFR de chimie de SU.

Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

Le fonctionnement et le pilotage de l'unité gagneraient à être davantage structurés et formalisés.

1 / L'unité s'est assigné des objectifs scientifiques pertinents.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité met en avant un positionnement généraliste autour de la chimie théorique et souhaite maintenir l'équilibre entre développements méthodologiques de pointe (champs de force polarisables, DFT, QMC) et une large gamme d'applications de ces méthodes (pôle 3) en chimie ou en physique.

L'unité diffuse ses développements méthodologiques avec une série de codes de calculs et d'interprétations topologique et moléculaire, disponibles en source ouverte pour une large communauté de théoriciens et d'expérimentateurs.

On note, par ailleurs, la forte interdisciplinarité de l'unité dont l'activité implique non seulement la chimie théorique, mais également les mathématiques, la chimie moléculaire, l'exobiologie ou la physique, dans le contexte du site particulièrement propice.

L'unité tire profit de ce contexte local favorable en disposant d'un vivier d'étudiants bien formés en chimie théorique, et sa participation à un réseau de formation Erasmus Mundus est stratégique en ce sens.

L'unité est également très bien intégrée dans plusieurs GDR (NBODY, Nino), dans des instituts comme l'IP2CT et des sociétés savantes, dans le nœud Cecam-FR-Moser dont l'un de ses membres assure la direction et dans la fédération de recherche Théories, modélisations, simulations atomistiques (Thémolia).

Points faibles et risques liés au contexte

Le fait de couvrir un ensemble très important de systèmes chimiques au sein d'un même pôle (pôle 3), conduit à une certaine dispersion thématique.

2/ L'unité dispose de ressources adaptées à son profil d'activités et à son environnement de recherche et les mobilise.

Points forts et possibilités liées au contexte

La dotation des tutelles depuis 2017 est en augmentation significative, de 36 % en 2022 pour SU et de 16 % pour le CNRS, ce qui correspond également à l'augmentation globale de l'effectif des membres permanents. L'effectif total a également significativement augmenté, avec 21 doctorants en décembre 2022 contre sept en juin 2017. Le nombre de post-doctorants est également en nette augmentation (17 pendant la période du contrat).

L'unité a su consolider le nombre de PAR notamment avec le recrutement d'un IR CNRS.

L'unité profite d'un accès privilégié aux grappes de calcul de la plateforme mutualisée Jarvis à l'IPCT.

Points faibles et risques liés au contexte

Le problème des locaux est un point de vigilance absolu. Les membres de l'unité ne bénéficient pas de locaux contigus, ce qui peut, à terme, nuire aux interactions scientifiques entre les axes et les groupes. Les locaux obtenus dans le cadre de l'ERC sont nécessaires à l'unité, mais la pérennité de leur accès n'est pas complètement assurée.

Le comité souligne qu'une part significative des ressources de calcul et du système d'information est gérée en interne. Si cette approche permet une flexibilité appréciable, cela constitue néanmoins un point de fragilité compte tenu du nombre très limité de PAR. En outre, l'implication importante de deux PAR dans une thématique d'un des pôles peut conduire à un manque d'appui à la recherche pour le reste de l'unité.

3/ Les pratiques de l'unité sont conformes aux règles et aux directives définies par ses tutelles en matière de gestion des ressources humaines, de sécurité, d'environnement, de protocoles éthiques et de protection des données ainsi que du patrimoine scientifique.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité porte une grande attention au respect des principes de gestion des ressources humaines avec, notamment depuis la crise Covid-19, la prise en compte des risques psycho-sociaux (RPS).

L'unité a mis en place une organisation visant à protéger les données scientifiques.

En matière de patrimoine scientifique, l'unité dispose d'une collection remarquable de manuscrits de thèse en chimie théorique dont l'inventaire a été réalisé en début de contrat.

Points faibles et risques liés au contexte

L'unité ne dispose pas d'un règlement intérieur mis à jour récemment. Il n'y a pas de diffusion systématique ni d'archivage de comptes-rendus écrits du conseil d'unité. Les structures décisionnelles ne sont pas toutes entièrement définies.

L'unité n'indique pas disposer d'un ou d'une référente égalité-parité.

Le nombre de promotions des MCF est trop faible malgré un vivier de la plus grande qualité, conduisant à un ratio MCF/PR défavorable de 13/4.

La tension en matière de locaux pénalise d'ores et déjà la dynamique de recrutement de non-permanents. À long terme, cela peut constituer un frein pour le développement du LCT.

DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

Appréciation sur l'attractivité de l'unité

La production scientifique est importante et de très grande qualité, avec un total de 415 publications et de quinze chapitres d'ouvrage pendant la période. Les permanents de l'unité ont été invités à présenter 208 communications orales dans des congrès.

Plusieurs des membres du LCT ont reçu des distinctions scientifiques, dont certaines sont prestigieuses dans le domaine, ou ont répondu avec succès à des AAP très compétitifs (2 IUF au cours de la période, 1 ERC, et 1 prestigieuse médaille de l'académie internationale des sciences moléculaires quantiques [IAQMS]). Le rayonnement de l'unité s'est ainsi consolidé pendant la période et celle-ci s'est tournée vers l'international avec l'obtention de contrats européens, un Erasmus Mundus et des recrutements de non-permanents internationaux.

- 1/ L'unité est attractive par son rayonnement scientifique et s'insère dans l'espace européen de la recherche.*
- 2/ L'unité est attractive par la qualité de sa politique d'accompagnement des personnels.*
- 3/ L'unité est attractive par la reconnaissance de ses succès à des appels à projets compétitifs.*
- 4/ L'unité est attractive par la qualité de ses équipements et de ses compétences techniques.*

Points forts et possibilités liées au contexte pour les quatre références ci-dessus

L'unité bénéficie d'un rayonnement important au niveau européen, avec une visibilité thématique forte et une production scientifique de qualité (environ 415 publications au cours de la période dont 15 chapitres d'ouvrage). Le LCT est connu par la publication de nombreux logiciels et codes de chimie quantique ou de dynamique en partenariat avec des collaborateurs nationaux et internationaux, ce qui a été crucial pour accroître sa visibilité. L'organisation de 60 congrès internationaux et nationaux démontre également le dynamisme de l'unité.

Les membres du LCT sont régulièrement invités dans des conférences reconnues du domaine (208), ce qui reflète également l'excellence des travaux menés au sein de l'unité. Plusieurs de ses membres ont reçu des financements européens et des distinctions scientifiques de premier plan (2 IUF durant la période, 1 ERC, prix Atos – Joseph Fourier) également internationales (High performance computing [HPC] innovation excellence award, Fellow of the Royal Society of Chemistry, médaille de l'IAQMS), ce qui contribue au rayonnement de l'unité.

Points faibles et risques liés au contexte pour les quatre références ci-dessus

L'obtention de prix et distinctions scientifiques est centrée sur quelques permanents et n'est donc pas uniforme selon les pôles. Cette situation est un point de faiblesse, bien qu'elle soit assez commune dans les unités de recherche.

L'unité a amorcé une transition générationnelle en matière de responsabilités qui constituait une menace lors du dernier contrat. La moyenne d'âge reste cependant assez élevée, avec une moyenne de 49 ans et la moitié des effectifs a plus de 50 ans.

DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Appréciation sur la production scientifique de l'unité

Le LCT publie abondamment (environ 400 articles avec comité de lecture [ACL]) dans les meilleurs journaux des domaines de la chimie théorique et de la chimie physique, également dans des journaux généralistes pour les résultats les plus marquants.

Un réel effort de valorisation des codes et des bases de données a été produit, ce qui fait partie intégrante de la production scientifique de l'unité (plus d'une dizaine de logiciels et de codes), et sont regroupés sur sa page web et disponibles en source ouverte sur plusieurs plateformes comme Github.

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

2/ La production scientifique de l'unité est proportionnée à son potentiel de recherche et correctement répartie entre ses personnels.

3/ La production scientifique de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte. Elle est conforme aux directives applicables dans ce domaine.

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

La production scientifique de l'unité est d'excellente qualité. Ses chercheurs publient dans les meilleurs journaux pour les domaines de la chimie théorique et de la chimie physique (Journal of Chemical Theory and Computation, The Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry, Journal of Computational Chemistry), mais également dans des journaux généralistes pour les résultats les plus marquants comme ceux concernant la conception de nouveaux supraconducteurs à base d'hydrogène (Nature Communications 2021), la mise au point de familles d'antiviraux afin de lutter contre le virus SARS-Cov2 (Chemical Sciences 2022) ou encore l'application de modèles de dynamique pour la réactivité interstellaire (Astrophysical Journal Letters, 2018).

La dynamique de publications est en légère progression par rapport au précédent contrat (en moyenne annuelle 66 contre 60) à qualité équivalente. On peut noter également la publication d'articles de revue ou de chapitres d'ouvrage qui reflète une reconnaissance des thèmes développés (e.g. Accounts of Chemical Research 2021).

L'unité accorde une place importante au respect de la déontologie scientifique et engage ses personnels, permanents et non-permanents, à suivre les recommandations des tutelles. Elle a, de plus, nommé un correspondant science ouverte et ses membres sont encouragés à déposer leur production scientifique dans HAL. Une formation à l'éthique scientifique pour les doctorants est assurée par un des membres permanents de l'unité, dans le cadre des formations proposées par l'école doctorale.

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

Une partie des travaux publiés est signée exclusivement par des membres émérites ou bénévoles.

DOMAINE 4 : INSCRIPTION DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE DANS LA SOCIÉTÉ

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

L'unité a développé, au cours du dernier contrat, des interactions avec le monde industriel, à un très bon niveau, qui se concrétisent par la signature de plusieurs contrats (Direction générale de l'armement [DGA], Institut national des sciences et techniques nucléaires [INSTN], TotalEnergies, Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire [IRSN]), la création de la start-up Qubit Pharmaceuticals, le dépôt de plusieurs brevets et de deux licences de logiciels exploitées industriellement.

- 1/ L'unité se distingue par la qualité et la quantité de ses interactions avec le monde non-académique.*
- 2/ L'unité développe des produits à destination du monde culturel, économique et social.*
- 3/ L'unité partage ses connaissances avec le grand public et intervient dans des débats de société.*

Points forts et possibilités liées au contexte pour les trois références ci-dessus

L'unité a réussi à créer un lien tangible avec le monde socio-économique par l'obtention de plusieurs financements industriels avec la DGA, l'INSTN, l'IRSN et TotalEnergies, la création de la start-up Qubit Pharmaceuticals (pôle 2) et la production de deux logiciels sous licence industrielle Tinker et Tinker-HP.

Cet effort s'est accompagné du développement de nouveaux thèmes (pôle 3) à visée sociétale, concernant l'approvisionnement durable d'énergie et à faible coût environnemental ainsi que le pouvoir prédictif sur les biocarburants et la photochimie.

Plusieurs membres de l'unité sont impliqués dans des actions de diffusion du savoir vers le grand public à travers l'organisation de conférences, notamment d'ateliers pour la Fête de la Science, et l'accueil de collégiens ou le partage de savoirs pour des projets d'étudiants en classes préparatoires. L'un des permanents de l'unité a coordonné la rédaction de l'ouvrage Étonnante Chimie (CNRS Éditions) et le LCT participe régulièrement à la rédaction d'ouvrages pédagogiques (la théorie des groupes en chimie par exemple) à destination des étudiants des premières années universitaires.

Points faibles et risques liés au contexte pour les trois références ci-dessus

La stratégie d'interaction avec le monde socio-économique n'est pas appliquée au sein de tous les pôles avec la même efficacité, ce qui n'est cependant pas inhabituel pour une unité de chimie théorique fondamentale.

ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

L'unité vise à conserver son positionnement centré sur la chimie théorique, en conservant la même organisation que par le passé. De nouveaux sujets d'étude ont émergé comme l'informatique quantique. Dans le document d'autoévaluation, la trajectoire globale de l'unité n'est pas abordée, seules celles des pôles sont détaillées.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

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

Il serait bénéfique d'adopter un fonctionnement organisationnel plus formalisé, notamment avec un règlement intérieur mis à jour et des instances décisionnelles parfaitement identifiées, se réunissant régulièrement et dont les prises de décision sont documentées, archivées et communiquées à tous les membres de l'unité.

L'animation scientifique et technique de l'unité devrait être plus régulière et, quand cela est possible, plus inclusive. Ceci pourrait, par exemple, permettre de valoriser les compétences en ingénierie logicielle du pôle 2 de manière plus large et étendue à l'ensemble des membres de l'unité, notamment ceux du pôle 1.

Une gestion plus intégrée des postes de travail permettrait de renforcer la sécurité du système d'information et la protection des données.

Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité

Le comité recommande à l'unité de maintenir son excellent rayonnement international ainsi que sa participation très active dans des sociétés savantes.

Le comité recommande à l'unité de consolider la dynamique positive des recrutements.

Il est important de maintenir le vivier actuel d'étudiants formés au meilleur niveau de la chimie théorique.

En ce qui concerne les locaux, il faudrait organiser au mieux leur utilisation, surtout en cas d'arrivée de nouveaux personnels.

Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique

Le comité recommande de maintenir la dynamique scientifique concernant la production des articles avec, notamment, des contributions dans les meilleurs journaux du domaine, et de maintenir le rayonnement international en matière de communications scientifiques orales et plénières dans les congrès les plus réputés.

Il est également important de poursuivre l'effort de diffusion des codes de calcul en veillant à valoriser pleinement l'ensemble des acteurs ayant permis leur développement et leur optimisation, ainsi que leur portage. Il faudra veiller à la continuation du fort taux de publications de qualité après le départ des personnels émérites ou bénévoles.

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

La dynamique d'interaction avec les acteurs du monde socio-économique est très positive, il est important de la maintenir.

Il faut poursuivre le développement d'outils pédagogiques comme par exemple la base de données d'orbitales moléculaires (Orbimol).

Il est important de maintenir l'effort de médiation scientifique envers le grand public avec les mardis de la Chimie, la fête de la Science et des ouvrages de vulgarisation.

ÉVALUATION PAR PÔLE

Pôle 1 : Méthodes pour la chimie quantique

Nom des responsables : Mme Julia Contreras-Garcia et M. Julien Toulouse

THÉMATIQUES DU PÔLE

Ce pôle rassemble deux groupes (groupes 1 et 2) travaillant sur les développements méthodologiques en chimie quantique.

Le premier est centré sur le développement de méthodes pour calculer et caractériser la structure électronique contribuant à de nombreux aspects fondamentaux de la DFT (séparation de portée, correction des effets de bases atomiques, effets relativistes), des méthodes de fonction d'onde (valence-bond [VB], interaction de configurations [CI]), et des approches QMC (approches par fragments, réponse linéaire), tout en développant de nouvelles approches pour la spectroscopie comme la génération d'harmoniques d'ordres élevés (HHG) ou la spectroscopie de photo-ionisation.

Le second groupe est focalisé sur la mise en place d'approches originales fournissant des interprétations topologiques et chimiquement « intuitives », notamment de la liaison chimique. Les travaux regroupent des développements fondamentaux, leur intégration dans des codes largement accessibles et leurs applications.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le pôle 1 a pris en compte l'essentiel des recommandations du précédent rapport avec, notamment, un effort notable pour mettre à disposition en libre accès les codes développés (Quantum Package sur GitHub pour le groupe 1, interfaces graphiques et serveurs web pour générer et visualiser les fichiers facilitant l'utilisation des codes pour le groupe 2). Par ailleurs, les deux groupes ont affiné leurs stratégies à long terme et ces efforts portent déjà leurs premiers fruits.

EFFECTIFS DU PÔLE : en personnes physiques au 31/12/2022

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maitres de conférences et assimilés	4
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	2
Personnels d'appui à la recherche	1
Sous-total personnels permanents en activité	9
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	2
Doctorants	5
Sous-total personnels non permanents en activité	7
Total personnels	16

ÉVALUATION

Appréciation générale sur le pôle

Dans son domaine, le pôle 1 jouit d'une excellente reconnaissance internationale (distinctions, codes originaux, très nombreuses invitations dans des congrès), il maintient une productivité excellente (près de 200 articles) ainsi qu'un niveau de communications dans des congrès exceptionnel (157). De grands efforts ont permis de rendre les développements méthodologiques plus facilement accessibles à une large communauté de théoriciens et d'expérimentateurs. La palette des approches développées est également particulièrement notable dans le contexte national et au vu du nombre de membres permanents impliqués.

Points forts et possibilités liées au contexte

Ce pôle est animé par deux personnels permanents dont la reconnaissance internationale ne fait pas le moindre doute (récipiendaire de la médaille IAQMS, nomination IUF junior, ouvrages et logiciels de référence). Le nombre d'aspects fondamentaux de chimie théorique traités au cours de la période est particulièrement impressionnant et est également très diversifié.

Les deux groupes composant le pôle sont particulièrement complémentaires.

La production scientifique est d'excellente qualité, notamment au vu des thématiques du pôle, tant sur les aspects quantitatifs (197 articles sur la période) que qualitatifs dans des journaux de la spécialité, par exemple, *The Journal of Chemical Physics* sur nouvelle stratégie pour corriger les erreurs de base des méthodes de la DFT ou, de grande audience comme *Nature communications* pour la conception de nouveaux supraconducteurs.

Les efforts faits pour rendre disponibles en source ouverte les codes développés portent clairement leurs fruits, amplifiant la reconnaissance des travaux réalisés en particulier à travers le nombre élevé de citations des logiciels, par exemple, NCILOT recueille plus de 2000 citations dans la littérature internationale.

Points faibles et risques liés au contexte

La grande qualité scientifique des personnels de rang B devrait leur permettre de prétendre à des promotions mais les marges de manœuvre sont très limitées au sein du pôle. Le maintien de financements suffisants pour assurer les développements méthodologiques reste un point de vigilance.

Proposer un si large spectre de développements est un vrai défi dans un environnement concurrentiel.

Analyse de la trajectoire du pôle

Les deux groupes constituant le pôle 1 proposent chacun une trajectoire scientifique contenant des éléments clairement identifiés pour leurs développements futurs.

Pour le premier groupe, cette trajectoire s'inscrit dans la continuation des travaux actuels avec des propositions détaillées pour les quatre thématiques que sont la DFT, les méthodes de fonction d'onde, le QMC et la spectroscopie théorique. On remarque ici la volonté d'approfondir les fructueux travaux de la période actuelle, notamment dans le cadre du développement du logiciel Quantum Package.

Pour le second groupe, la trajectoire proposée vise deux objectifs : le couplage de méthodes et l'utilisation des méthodes d'apprentissage automatique pour accélérer l'estimation de l'indice de corrélation. On notera que les travaux récents sur la supraconductivité seront approfondis, notamment par le dépôt d'un projet à l'ERC. Par ailleurs, le groupe cherchera, d'une part, à incorporer de nouveaux termes de déformation et d'échange ou de corrélation intramoléculaires pour décrire plus précisément les réactions complexes impliquant des liaisons fortes et, d'autre part, à introduire la visualisation de forces orbitales dans la base de données OrbiMol accessible à partir du site web du LCT.

RECOMMANDATIONS AU PÔLE

Le comité recommande de maintenir la qualité de la production scientifique ainsi que le niveau des communications, ce dernier étant actuellement exceptionnel.

La seconde recommandation est de continuer les efforts pour conserver, voire augmenter, le niveau de financements actuels.

Finalement, le comité recommande le renforcement des synergies avec les autres pôles : les outils méthodologiques développés au sein du pôle 1 pourraient bénéficier davantage aux autres pôles, notamment au pôle 3 dédié aux applications.

Pôle 2 : Méthodes pour la Simulation moléculaire

Nom des responsables : M. Ricardo Spezia / M. Jean-Philip Piquemal

THÉMATIQUES DU PÔLE

Ce pôle est constitué de deux groupes (3 et 4) dont les thématiques sont, d'une part, la dynamique réactionnelle et, d'autre part, les simulations multi-échelles et les calculs de très haute performance (HPC). Ces deux groupes proposent à la fois des développements méthodologiques et des applications directes des nouveaux outils développés. On soulignera en particulier la mise en place d'outils pour modéliser la fragmentation induite par les collisions dans des expériences de spectrométrie de masse et pour l'analyse des dynamiques moléculaires, de la prise en compte des effets quantiques nucléaires, du développement d'approches hybrides mécaniques quantique et moléculaire (QM/MM) pour l'étude de la réactivité incluant un champ de force polarisable, du développement de champs de force de plus en plus sophistiqués et exploitant idéalement le HPC ainsi que des avancées notables en informatique quantique.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le pôle 2 a pris en considération les recommandations proposées lors du précédent rapport. On note, notamment, qu'un effort important de mise à disposition des logiciels en accès libre sur GitHub a été fourni avec Tinker, Tinker-HP, OpenVQE. Concernant l'organisation et la vie du pôle, une restructuration en deux groupes distincts mais ayant un fort recouvrement thématique a été réalisée.

EFFECTIFS DU PÔLE : en personnes physiques au 31/12/2022

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	3
Maitres de conférences et assimilés	4
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	2
Sous-total personnels permanents en activité	10
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	1
Post-doctorants	1
Doctorants	7
Sous-total personnels non permanents en activité	10
Total personnels	20

ÉVALUATION

Appréciation générale sur le pôle

Le pôle 2 présente une activité scientifique remarquable tant sur le plan de la qualité de sa production (développement de codes de simulations particulièrement performants) que pour l'aspect quantitatif (plus de 120 ACL durant la période). Il jouit d'une visibilité internationale indéniable, se traduisant, pour plusieurs de ses membres, par environ 80 invitations dans des congrès. La distribution en accès libre des codes de calcul à la communauté scientifique internationale est également un autre atout. Par ailleurs, le pôle s'est doté de moyens conséquents suite à ses succès lors d'appels à projets nationaux (ANR) et internationaux (ERC Synergy). Son lien avec le milieu industriel est également en très forte progression avec la création d'une start-up Qubit Pharmaceuticals qui a connu un développement très rapide (elle compte actuellement 45 personnes), les dépôts d'une licence d'exploitation et d'un brevet, la signature de plusieurs contrats industriels.

Points forts et possibilités liées au contexte

La production scientifique est de très bonne qualité avec, notamment, des articles dédiés aux codes développés qui sont abondamment cités. Le pôle publie la majeure partie de ses articles dans des journaux de son domaine, dont *Journal of Physical Chemistry*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *The Journal of Chemical Physics* et *Journal of Chemical Theory and Computation*, sans négliger des journaux généralistes de la chimie comme *Chemical Reviews* ou encore *Accounts of Chemical Research*.

L'obtention de prix et de distinctions est venue récompenser le pôle dont l'attractivité se manifeste également par l'arrivée de nouveaux personnels statutaires, par de nombreuses invitations dans des congrès internationaux et par ses succès à des appels à projets compétitifs (ANR, DGA et ERC). Ces succès ont notamment permis de largement rénover la plateforme de calcul Jarvis de l'IP2CT qui est indispensable au bon fonctionnement de toute l'unité.

Le pôle 2 a mené une politique de valorisation qui porte ses fruits avec la distribution de codes de simulations parmi les plus performants du moment. Il en résulte de très nombreuses citations dans la littérature internationale faisant référence à ces codes.

Une valorisation industrielle a également été réalisée se traduisant par une licence commerciale pour l'accès hors du monde académique aux codes Tinker et Tinker-HP. Celle-ci fait l'objet d'une protection par la Satt-Lutech.

La stratégie de rapprochement avec le milieu industriel opérée par le pôle est tout à son crédit. Elle s'est notamment concrétisée par le démarrage de la start-up Qubit Pharmaceuticals en 2020. Des contrats industriels conséquents (dispositifs Cifre, contrat DGA, contrat avec TotalEnergies) ont été aussi obtenus.

Points faibles et risques liés au contexte

Un des responsables du pôle 2 a porté un nombre impressionnant de projets (ERC, start-up Qubit Pharmaceuticals, contrats avec la DGA) tout en ayant été impliqué dans différentes instances administratives (direction de l'unité et à ce titre membre du conseil de l'UFR Chimie, comité de pilotage du Partnership for advanced computing in Europe [Prace], du labex CalSimLab et du comité de pilotage de l'institut Carnot Smiles). Il convient toutefois de préciser que ces responsabilités ne se sont pas cumulées sur la durée du contrat, par exemple, le labex CalSimLab s'est arrêté en 2019 et la start-up Qubit Pharmaceuticals a démarré ses activités en 2020.

Un tel déséquilibre dans les prises de responsabilité est certainement un risque pour le fonctionnement harmonieux du pôle.

Le manque d'interaction entre les deux groupes (3 et 4) du pôle 2 est perceptible malgré des recouvrements thématiques non négligeables, deux publications communes (*Chemical Communications* 2020, *ChemPhysChem* en 2022) et une thèse en cotutelle.

Analyse de la trajectoire du pôle

Le pôle 2 propose une stratégie de recherche pertinente car plus collective et unifiée qu'auparavant, elle vise à fonctionner comme un seul groupe travaillant sur plusieurs thèmes. Le volet concernant le développement des codes sera poursuivi avec, notamment, la transition de Tinker-HP vers des calculateurs exaflopiques et l'optimisation de son portage sur GPU, la refonte du code de dynamique moléculaire Venus en un nouveau code Mars, le développement de codes QM/MM en champs de force polarisables et l'utilisation de méthodes d'apprentissage automatique et de l'informatique quantique au travers des logiciels OpenVQE et Hyperion. Les applications exploiteront ces développements méthodologiques et concerneront à la fois des aspects mécanistiques de réaction chimique comme les transferts de protons ou le réarrangement de Cope, et la modélisation des propriétés spectroscopiques incluant la prise en compte des couplages vibrationnels forts.

Les perspectives scientifiques à cinq ans sont très bonnes avec la subvention ERC Synergy qui est assurée jusqu'en 2025 et l'accueil de nouveaux arrivants permettant de maintenir la dynamique actuelle.

RECOMMANDATIONS AU PÔLE

Le pôle doit maintenir l'excellente production scientifique (qualitativement et quantitativement) ainsi que le niveau élevé des financements dont il bénéficie, en particulier en préservant ses interactions privilégiées avec la start-up Qubit Pharmaceuticals.

Il serait souhaitable de distribuer plus équitablement certaines tâches administratives significatives entre les différents membres du pôle ou de l'unité.

Les interactions entre les deux groupes du pôle doivent être renforcées, ce qui semble être envisagé dans la perspective du prochain contrat avec leur fusion.

Pôle 3 : Modélisation des systèmes complexes

Nom des responsables : Mme Hélène Gérard / M. Alexis Markovits

THÉMATIQUES DU PÔLE

Les travaux de recherche de ce pôle se répartissent en dix thématiques et trois groupes (5, 6 et 7). Ces groupes thématiques sont : chimie inorganique, organométallique ; astrochimie ; matériaux pour l'environnement et l'énergie. Les thématiques abordées incluent les études de surfaces (catalyse hétérogène), les interfaces et les nanoparticules, la réactivité en milieu zéolithique, les hautes pressions et la spectroscopie optique théorique. Le pôle s'appuie sur un large panel de méthodes de la chimie quantique souvent développées dans les pôles 1 et 2, impliquant notamment la DFT des molécules et des solides.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le pôle 3 a largement suivi les recommandations émises lors de la précédente évaluation qui étaient d'augmenter le nombre de participations aux congrès internationaux, de thèses en cotutelle, de réunions internes mensuelles et de recentrer les activités de recherche sur des projets porteurs comme ceux concernant les métaux lourds. Le pôle 3 s'est globalement restructuré pour prioriser ses activités les plus porteuses, des réunions de groupe régulières sont organisées et il s'est rapproché des activités du pôle 2 de manière pertinente. Concernant la thématique des zéolithes, le rapport précédent recommandait une évolution méthodologique importante de manière à la rendre plus compétitive. Cette recommandation n'a pas été suivie d'effets puisque les personnels impliqués ont choisi de privilégier l'étude mécanistique des réactions au sein des pores de zéolithes. Le groupe 7 a su maintenir une bonne productivité et un bon rayonnement grâce à sa réussite aux appels à projets (par exemple les programmes H2020 Actions de recherche et d'innovation (RIA) Charisma, RIA nanoinformatix et European joint master Erasmus Mundus [EM+]).

EFFECTIFS DU PÔLE : en personnes physiques au 31/12/2022

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	2
Maitres de conférences et assimilés	5
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	3
Personnels d'appui à la recherche	0
Sous-total personnels permanents en activité	11
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	2
Doctorants	5
Sous-total personnels non permanents en activité	8
Total personnels	19

ÉVALUATION

Appréciation générale sur le pôle

Le pôle 3 se structure autour des thématiques de recherche couvrant une très large gamme de systèmes moléculaires et de matériaux. Il a une très bonne productivité scientifique, avec plus de 100 articles et dix-sept conférences invitées. Les travaux menés ont pour point commun de démontrer la capacité de la théorie à fournir des informations sur des systèmes chimiques variés, au-delà de l'intuition chimique.

Les personnels permanents du pôle sont reconnus pour le très bon niveau de leurs travaux et ils ont renforcé, durant la période évaluée, leur réseau de collaborations nationales et internationales avec, lorsque cela s'avère pertinent, des collaborations avec des industriels. Le travail de recherche du pôle 3 est ainsi cohérent avec ses thématiques affichées, l'utilisation des ressources et l'organisation du travail au sein des équipes du pôle sont en adéquation avec les résultats acquis.

Points forts et possibilités liées au contexte

Le pôle est reconnu pour sa capacité à collaborer avec des groupes d'expérimentateurs, d'astrophysiciens et de théoriciens. Sa compétence dans la construction de modèles de représentation des environnements complexes dans des problématiques nouvelles est également un point fort. Les résultats marquants du groupe 5 sont obtenus dans les domaines de la réactivité (chimie organométallique et inorganique, organocatalyse et réactions de cyclo-additions, la synthèse totale), avec, en particulier, l'étude des mécanismes de réduction pour la synthèse de nanoparticules (ChemPhysChem 2021). Le groupe 6 est bien reconnu pour ses travaux en astrochimie en phase gaz et à l'interface solide-gaz. Il est, en particulier, force de propositions pour des mécanismes réactionnels ou l'identification de molécules organiques potentiellement observables dans des environnements peu propices à la réactivité comme les espaces circumstellaire et interstellaire (Astronomy & Astrophysics 2020). Les travaux du groupe 7 couvrent un large domaine, allant de la réactivité de composés organiques en cavités zéolithiques ou la catalyse hétérogène (évolution d'hydrogène et rationalisation de la toxicité de nanoparticules d'oxyde de titane). Les travaux à caractère plutôt fondamental sur la structure électronique sous pression (Dalton Trans. 2021) et le développement de la DFT des solides (Physical Review B 2022) complètent le spectre très large des travaux du groupe 7.

La production scientifique est très satisfaisante, tant du point de vue quantitatif, avec 105 ACL et chapitres de livres, que qualitatif dans des journaux de grande audience comme Astronomy & Astrophysics, Chemistry of Materials ou ACS Catalysis.

Le pôle 3 a accru son niveau de financement avec l'obtention de contrats locaux (idex, labex), nationaux avec deux projets financés par l'ANR et deux projets européens RIA H2020. Il a également su tisser des collaborations contractuelles avec l'IRSN. Cet effort s'est accompagné du développement de nouveaux thèmes à visée sociétale, concernant l'approvisionnement durable d'énergie et à faible coût environnemental (Applied Catalysis 2020) ainsi que le pouvoir prédictif sur les biocarburants et la photochimie.

Ces travaux s'appuient sur un réseau collaboratif (ICSN, IPCM et Monaris) très bien ancré avec d'autres laboratoires de recherche académiques, notamment avec des groupes de chimie expérimentale, des industriels et une ouverture vers l'international notamment sur la thématique matériaux. Ce réseau illustre la réelle capacité de discussion avec des groupes d'expérimentateurs et la compétence du pôle dans la construction de modèles de représentation des environnements complexes pour des problématiques nouvelles.

Points faibles et risques liés au contexte

Le nombre de doctorants (cinq thèses soutenues et sept en cours, soit 12 en 6 ans) comparé au nombre de permanents titulaires de l'HDR (6) est relativement faible.

Le nombre de conférences invitées, réparties de façon homogène entre les trois groupes, est de dix-sept, ce qui est limité.

Analyse de la trajectoire du pôle

En perspectives d'évolution de la recherche dans le pôle, le groupe 5 vise à coupler les méthodologies de réactivité moléculaire à des approches surfaciques ; un autre projet est la modélisation correcte de l'environnement (solvant) et de la sphère de coordination, en particulier la modélisation du mécanisme de dégradation de la chlordécone et du mirex. Le groupe 6 souhaite compléter les calculs de profils énergétiques de certaines réactions dans l'espace interstellaire ; il vise aussi à utiliser davantage la dynamique moléculaire en collaboration avec le pôle 2, puis explorer la réactivité au sein du solide et dans la glace endommagée par les rayons cosmiques. Finalement, la modélisation et la caractérisation des transformations astrochimiques dans des conditions extrêmes de pression et de température par une approche QM/MM (recrutement récent d'un MCF et obtention d'une ANR JCJC) et l'utilisation accrue de l'analyse topologique (ELF) font partie des projets de ce groupe. Le groupe 7 se focalise sur l'étude des mécanismes de la dissolution de l'hydrogène dans les oxydes, l'étude mécanistique des réactions au sein des pores des cavités zéolithiques et l'étude des surfaces intrinsèquement chirales. L'utilisation des méthodes d'échantillonnage statistique et de dynamique moléculaire fait partie intégrante de son projet de recherche.

Ces projets de recherche sont à la fois ambitieux et cohérents avec les thématiques actuelles. Les groupes ont les moyens en personnels et en infrastructures pour les mener avec succès. Le comité encourage les synergies entre les équipes du pôle 3 et celles des pôles 1 et 2. La cohérence entre les méthodes d'analyse de la DFT et les applications est assez immédiate et elle est déjà en grande partie actée. On peut souhaiter que les projets du groupe 6 avec des outils du pôle 2 pour la dynamique puissent rendre l'équipe plus attractive.

RECOMMANDATIONS AU PÔLE

Il est recommandé de maintenir la qualité des journaux ciblés pour la production scientifique, notamment après le départ des membres émérites ou bénévoles du pôle, de continuer les efforts pour maintenir le niveau actuel de financements par projets et de maintenir le bon niveau de collaborations avec les groupes d'expérimentateurs.

Il faudrait cependant renforcer la visibilité des acteurs du pôle par des communications aux congrès (présentations orales ou par affiche).

Le comité recommande de renforcer davantage les synergies avec les autres pôles, ce qui permettrait de renforcer l'attractivité pour les doctorants notamment.

Le comité encourage les chercheurs et enseignants-chercheurs à mieux diffuser et valoriser leurs résultats.

DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

DATES

Début : 27 novembre 2023 à 9h00

Fin : 28 novembre 2023 à 16h00

Entretiens réalisés en distanciel

PROGRAMME DES ENTRETIENS

Lundi 27 novembre 2023

09h00	Présentation du comité d'experts Hcéres
09h15	Bilan et trajectoire de l'unité
09h35	Discussions
10h15	Pause
10h30	Bilan et trajectoire du pôle 1 : Méthodes et outils pour la chimie quantique
10h45	Discussions
11h15	Bilan et trajectoire du pôle 2 : Méthodes pour la simulation moléculaire
11h30	Discussions
12h00	Huis clos du comité et pause méridienne
14h00	Bilan et trajectoire du pôle 3 : Modélisation des systèmes complexes
14h15	Discussions
14h45	Présentation des services communs et des plateformes
14h55	Discussions
15h15	Huis clos du comité
15h30	Huis clos avec les C/EC
16h10	Huis clos avec les doctorants et les post-doctorants
16h50	Huis clos du comité

Mardi 28 novembre 2023

09h00	Huis clos avec les PAR
09h40	Huis clos avec les responsables d'équipe
10h20	Huis clos du comité
10h40	Huis clos avec les tutelles
11h20	Huis clos avec la direction
12h00	Huis clos du comité
16h00	Fin de la visite

OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

Marie-Aude Vitrani
Vice-Présidente Vie institutionnelle et démarche
participative
Sorbonne Université

à

Monsieur Eric 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

Paris, le 4 avril 2024

Objet : Rapport d'évaluation LCT - Laboratoire de chimie théorique

Cher Collègue,

Sorbonne Université vous remercie ainsi que tous les membres du comité HCERES pour le travail d'expertise réalisé sur l'unité de recherche « LCT ».

Sorbonne Université n'a 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

Marie-Aude Vitrani
Vice-Présidente Vie institutionnelle
et démarche participative



Les rapports d'évaluation du Hcéres
sont consultables en ligne : 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

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

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

