

## RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ

MONARIS – De la molécule aux nano-objets :  
réactivité, interactions et spectroscopies

### 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 02/04/2024



Au nom du comité d'experts :

Mona Treguer-Delapierre, 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 Mona Treguer-Delapierre, Université de Bordeaux

**Experts :**

Mme Catherine Amiens, Université Toulouse 3 - Paul Sabatier - UPS

M. Thierry Chiavassa, Aix-Marseille université – AMU

M. Jean-François Dufrière, Université de Montpellier (représentant du CNU)

Mme Sophie Sobanska, CNRS Talence

M. David Talaga, CNRS Talence (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

Mme Élisabeth Angel-Perez, Sorbonne Université

M. Marc Baaden, CNRS

M. Mehran Mostafavi, CNRS

M. Alain Walcarius, CNRS

## CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : De la molécule aux nano-objets : réactivité, interactions et spectroscopies
- Acronyme : MONARIS
- Label et numéro : UMR 8233
- Nombre d'équipes : trois équipes
- Composition de l'équipe de direction : M. Christophe Petit

## PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies  
ST4 Chimie

## THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

L'unité de recherche MONARIS développe ses activités à l'interface de la chimie et de la physique et vise la synthèse et les caractérisations expérimentale et théorique d'édifices moléculaires et de systèmes métalliques nanophasés. MONARIS s'intéresse plus particulièrement à la caractérisation de la liaison chimique pour comprendre la réactivité de la matière, à différentes échelles, afin de répondre à des enjeux sociétaux concernant l'environnement atmosphérique et interstellaire, les nanotechnologies et la conservation du patrimoine culturel. Dans ce contexte, son originalité tient à la maîtrise de savoir-faire uniques en spectroscopie et à l'affichage d'une thématique « modélisation et chimie théorique ».

## HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

L'unité MONARIS a été créée en 2014. Elle est née de la fusion de deux laboratoires : le Laboratoire de dynamique, interactions et réactivité (LADIR) et le Laboratoire des matériaux mésoscopiques et nanométriques (LM2N). Au 31/12/2022, elle compte 34 permanents, dont seize enseignants-chercheurs (EC) employés par Sorbonne université (SU), six chercheurs CNRS et douze personnels d'appui à la recherche (PAR).

L'unité est pilotée par l'équipe de direction actuelle depuis 2014 et est structurée en trois équipes de recherche qui s'appuient techniquement sur six plateformes et trois services communs (administration et gestion, atelier mécanique, atelier électronique). Elle est hébergée par SU sur trois sites du campus de Jussieu ; trois barres réhabilitées en 2016 où sont hébergées les équipes de recherche, des locaux en sous-sol du campus abritant des équipements spécifiques et des locaux au rez-de-chaussée du campus abritant la plateforme de spectroscopie Raman et l'atelier de mécanique.

## ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

MONARIS est l'un des quatorze laboratoires intégrés dans l'Unité de formation et de recherche (UFR) de chimie de Sorbonne université (SU) qui, avec les UFR de physique, des sciences du vivant, de mathématiques, d'ingénierie, des sciences de la vie et l'UFR Terre environnement biodiversité, constituent la faculté des sciences et ingénierie. Le périmètre académique parisien en chimie est cependant plus large, avec les unités qui dépendent de l'École normale supérieure (ENS), de l'École supérieure de physique et de chimie industrielles de la ville de Paris (ESPCI), des universités Paris Saclay, Paris Cité, université Paris-Est Créteil et Gustave Eiffel.

Depuis 2018 et la création de SU, tous les laboratoires de l'UFR de chimie sont rassemblés dans quatre fédérations de recherche. L'unité MONARIS est fortement impliquée dans l'Institut Parisien de chimie physique et théorique (IP2CT). Par ailleurs, elle participe activement à quatre des onze instituts/initiatives interdisciplinaires au sein de l'Alliance Sorbonne université (ASU) : Initiative sciences et ingénierie moléculaires (ISIM), Institut des sciences des matériaux (IMAT), Observatoire des patrimoines (OPUS) et Initiative physique des infinis (IPI). L'unité MONARIS émerge uniquement à l'école doctorale Chimie-physique et chimie analytique (ED 388) de Paris Centre.

L'unité est rattachée à l'institut CNRS-Chimie (INC) et le personnel chercheur dépend essentiellement des sections 13 et 14 du Comité national de la recherche scientifique (CoNRS).

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	5
Maîtres de conférences et assimilés	11
Directeurs de recherche et assimilés	4
Chargés de recherche et assimilés	2

Personnels d'appui à la recherche	12
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>34</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	3
Doctorants	17
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>21</b>
<b>Total personnels</b>	<b>55</b>

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	16	0	7
CNRS	0	6	5
<b>Total personnels</b>	<b>16</b>	<b>6</b>	<b>12</b>

## AVIS GLOBAL

Les thématiques scientifiques de MONARIS se déclinent autour des trois équipes, « Caractérisations, interactions et réactivités : Spectroscopie moléculaire » (CIRS), « Nanomatériaux et matériaux nano structurés : Réactivité, caractérisation et spectroscopies » (NARCOS) et « Modélisation et chimie théorique » (E=MCT). L'unité MONARIS s'intéresse à la caractérisation de la liaison chimique pour comprendre la réactivité de la matière afin de répondre à des questions scientifiques concernant l'environnement atmosphérique et interstellaire, les nanotechnologies, l'énergie et la conversion du CO<sub>2</sub> ainsi que la préservation des matériaux du patrimoine.

Plusieurs réussites scientifiques sont à souligner. L'équipe CIRS développe des montages expérimentaux originaux, en particulier sur la ligne de lumière AILES du synchrotron SOLEIL (Journal of Physical Chemistry A, 2017), permettant l'étude d'édifices moléculaires sous conditions extrêmes, telles que celles rencontrées dans des milieux atmosphériques et astrophysiques. L'équipe participe activement à la mise à jour des bases de données spectroscopiques internationales (Journal of quantitative spectroscopy and radiative transfer 2022, article cité abondamment dans la littérature). D'autres réussites émanent de l'équipe NARCOS avec notamment les synthèses de nanomatériaux de morphologie et de taille contrôlées (ACS Nano 2020) ou de nanocristaux plasmoniques chiraux (énantiomorphes plasmoniques, coordination du projet CHIRNATIO financé par l'ANR). La synergie au sein de NARCOS entre les spécialistes de la synthèse contrôlée de nano-objets et les spécialistes de la spectroscopie optique est fructueuse. Elle l'est non seulement pour la caractérisation des nano-objets, mais aussi pour le développement de substrats plasmoniques permettant d'intensifier considérablement les émissions lumineuses Raman.

L'unité est membre ou partenaire de plusieurs projets structurants sur le campus Pierre et Marie Curie et contribue à leur animation. Cette excellente intégration dans l'écosystème local lui permet de disposer de moyens financiers (400 k€/an) et humains conséquents puisque plus d'une vingtaine de projets ont été financés par l'Idex Super porté par l'alliance Sorbonne université. La formation par la recherche est une autre force de l'unité avec un grand nombre de doctorants (40) et de stagiaires accueillis ainsi qu'une forte implication des enseignants-chercheurs dans les parcours de formation de l'établissement.

Concernant les succès à des appels à projets compétitifs, six projets ont été financés par l'ANR (dont 3 en coordination) sous la maîtrise d'œuvre de l'équipe NARCOS mais peu de projets internationaux d'envergure sont relevés. L'unité participe également à deux International research project (IRP) avec la Chine et la Russie. La publication des travaux est de très bon niveau avec 287 articles parus dans des revues scientifiques de premier plan et 25 chapitres d'ouvrage. Une trentaine de ces articles a été publiée dans des revues de grande audience comme Nature communication, ACS Nano, ACS Photonics ou Angewandte Chemistry International Edition ou Chemical Reviews. L'unité développe de nombreuses relations non-académiques, en particulier dans le domaine des matériaux du patrimoine. L'équipe NARCOS, en lien avec les établissements de tutelle, a ainsi établi plusieurs conventions avec les grands musées (musée du Louvre, musée du Quai Branly, musée national des arts asiatiques Guimet, la Cité de la Céramique, le Palais impérial de Pékin), mais aussi avec des acteurs du marché de l'art ou de l'archéologie. L'unité développe une stratégie efficace de vulgarisation sous la forme de conférences et d'interventions diverses. Elle assure de nombreuses formations consacrées à la diffusion de

la culture scientifique technique et industrielle. Les équipes interagissent peu avec le monde socio-économique (un seul contrat avec l'industrie pendant la période).

Le comité a cependant relevé quelques points de vigilance : (i) la visibilité des activités de modélisation de l'équipe E=MCT restera faible si elle ne parvient pas à augmenter sa taille, (ii) le maintien au meilleur niveau des plateformes expérimentales est questionnable si l'unité ne diversifie pas ses recherches de financement et (iii) le rayonnement international n'est pas à la hauteur de la qualité scientifique écrite pour jouer un rôle actif dans des projets d'envergure.

Le comité d'experts soutient pleinement l'unité dans le projet de restructuration intégrant deux équipes de physique expérimentale du Laboratoire d'études du rayonnement et de la matière en astrophysique et atmosphères (LERMA), même si des efforts restent à faire pour converger scientifiquement en identifiant et formalisant les verrous fondamentaux qu'elle souhaite développer.

# ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

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

Le rapport précédent avait formulé principalement trois recommandations.

La première était de prioriser les thématiques afin d'améliorer la lisibilité et la visibilité de MONARIS à l'international. La lisibilité des thèmes s'est améliorée grâce à l'abandon des activités concernant la biologie et en limitant le nombre de thèmes de recherche par équipe (2 thèmes pour les équipes CIRS et E=MCT, 3 pour l'équipe NARCOS). Ceci a contribué à accroître la visibilité aux échelles nationale et internationale comme attestent l'accueil de doctorants en co-tutelles, la sollicitation des membres de l'unité pour faire partie de comités d'organisation et/ou scientifiques de congrès ou encore le nombre de communications invitées dans des congrès internationaux.

La seconde recommandation était de diversifier les sources de financement. Même si des actions ont été engagées telle la mise en place d'activités partenariales avec de nouveaux acteurs académiques aux échelles locale et nationale et l'ouverture des plateformes instrumentales à des partenaires extérieurs, cette recommandation reste d'actualité pour le prochain contrat, notamment en ce qui concerne le développement de partenariats industriels.

La troisième recommandation était de mieux intégrer les personnels d'appui à la recherche (PAR) dans l'organisation de l'unité. Ceci a été suivi de faits avec la participation d'un PAR aux réunions de direction de l'unité et la mise en place d'une diffusion régulière des procès-verbaux du conseil de laboratoire à l'ensemble des membres de l'unité.

## B - DOMAINES D'ÉVALUATION

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

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

MONARIS intègre dans sa stratégie scientifique la volonté de mener des travaux de recherche fondamentale pluridisciplinaire à des niveaux de maturité technologique (TRL) bas. Cela conduit à des réalisations très originales tant sur le plan de la démarche scientifique que sur les aspects méthodologiques, qu'elle valorise au travers de nombreux partenariats qui contribuent à son rayonnement aux échelles nationale et internationale.

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

La capacité de l'unité à lever des fonds propres académiques est remarquable. L'unité est néanmoins consciente qu'elle doit diversifier l'origine de ses ressources, notamment en développant davantage d'interactions avec l'industrie, dans un contexte futur.

#### Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

L'unité fonctionne de manière collégiale avec une forte implication des membres permanents dans son organisation et son animation. Le comité d'experts souligne la qualité du travail effectué par l'actuel directeur pour favoriser les interactions entre les chercheurs, les enseignants-chercheurs et les PAR.

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

#### Points forts et possibilités liées au contexte

L'unité couvre un large domaine pluridisciplinaire d'activités autour de la réactivité chimique avec de fortes compétences en synthèse, en caractérisation et en modélisation. Le programme scientifique fait ressortir des lignes de force bien identifiées et met en avant quelques actions originales telles que la spectroscopie sous

conditions extrêmes, l'évolution de la réactivité sous contrainte ou encore la synthèse d'énantiomorphes plasmoniques. L'unité est très active et bien implantée dans le tissu fédératif parisien. Elle est membre ou partenaire de plusieurs projets structurants sur le campus de Jussieu et contribue à leur animation (labex MiChem jusqu'en 2021, ISiM, IP2CT). Ce dynamisme lui permet de développer ses projets de recherche fondamentale et d'initier quelques projets à risque.

#### Points faibles et risques liés au contexte

Les objectifs scientifiques de l'unité à caractère très fondamental ne permettent pas de valoriser son expertise auprès du secteur socio-économique.

### *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

MONARIS a une très bonne capacité à participer et à monter des projets académiques collaboratifs tant aux plans local que national. Cette dynamique lui permet d'acquérir des fonds propres importants, supérieurs à la dotation des tutelles. Ces ressources (ANR, idex, région Île-de-France), en hausse comparée à la période d'évaluation précédente, sont passées de 60 à 73 % du budget global, permettant un plus fort soutien des services communs et le financement de sujets de recherche exploratoires.

#### Points faibles et risques liés au contexte

L'origine des fonds propres, notamment les financements de thèses, est peu variée. Plus de 90 % des thèses sont financées sur des fonds institutionnels (tutelles, idex). Par ailleurs, l'unité est peu impliquée dans des projets internationaux d'envergure.

La part des financements industriels est faible (<5 % du budget), ce qui pourrait impacter, à terme, les activités de l'unité, notamment celles liées à l'acquisition de nouveaux équipements ou à la modernisation de montages expérimentaux plus anciens.

### *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 est organisée, comme la plupart des UMR, autour d'une équipe de direction qui inclut les responsables d'équipes et un représentant PAR et d'un conseil d'unité constitué de neuf membres élus et cinq nommés en plus du directeur. Ces deux instances se réunissent plusieurs fois par an (5 fois en moyenne pour le conseil d'unité). La direction a une réelle politique visant à susciter des échanges avec l'ensemble des membres du laboratoire.

L'animation scientifique se concrétise par plusieurs actions : séminaires scientifiques (en moyenne un par mois), une journée annuelle des doctorants ou des étudiants en master et une assemblée générale annuelle.

La mise à disposition de locaux rénovés en 2016 permet à l'ensemble des membres du laboratoire de travailler dans de très bonnes conditions matérielles. Les aspects relatifs à l'hygiène et à la sécurité sont bien pris en considération avec trois assistants de prévention, une personne compétente en radioprotection (PCR) et un référent risque laser. Un investissement annuel à hauteur de 30 % du budget fonctionnement de l'unité pour la sécurité (installations laser, insonorisation des boucles de refroidissement) est à relever. Cette organisation permet de bien accueillir et d'accompagner dans les meilleures conditions les nouveaux arrivants.

L'unité est soucieuse de son impact environnemental dans le développement de ses activités et porte une attention particulière à la mixité et au respect des individus. La parité est globalement respectée au sein des postes à responsabilités même si le déficit de femmes persiste parmi les personnels permanents (comme dans la plupart des UMR en chimie physique).

#### Points faibles et risques liés au contexte

Les personnels non-permanents sont unanimement satisfaits de la bonne ambiance qui règne au laboratoire mais la fréquence des échanges scientifiques est assez faible.

## DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

### Appréciation sur l'attractivité de l'unité

Le rayonnement de l'unité est très bon. Les travaux scientifiques gagnent en impact dans la communauté internationale et les membres de l'unité, dans certaines thématiques, sont fortement impliqués dans les réseaux nationaux et 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 possède une grande diversité de compétences bien identifiées et reconnues qui lui confèrent une forte attractivité et favorisent les partenariats aux échelles locale, nationale et internationale. Son rayonnement peut être estimé par le nombre de conférences invitées (59 sur 156 communications), les sollicitations pour des expertises, la participation à des comités éditoriaux (>12), des prises de responsabilité dans des sociétés savantes (6), la participation à des projets bilatéraux (2 IRP avec la Russie et la Chine) et l'organisation de congrès internationaux (19). Sur les plans local et national, l'unité participe à plus d'une trentaine de projets, dont six financés par l'ANR et 21 financés par l'idex. Le comité reconnaît aux chercheurs de MONARIS une capacité remarquable à développer des projets structurants. La création du Groupement de recherche (GDR) NINO en est un bel exemple.

Grâce au soutien de ses tutelles, l'unité a su attirer un enseignant-chercheur, un chercheur et des ingénieurs par mutation ou par recrutement (1MCF, 1DR, 2 IE, 1ARTF [50 %]) qui ont compensé numériquement les départs de plusieurs de ses membres.

Les membres de l'unité sont très impliqués dans le fonctionnement des parcours de formation et dans la vie de l'établissement, avec notamment la responsabilité de l'école doctorale Chimie-physique et chimie analytique de Paris-centre. Ainsi 22 thèses ont été soutenues et dix-huit sont en cours, soit une moyenne de trois doctorants accueillis par titulaire de l'HDR au cours de la période de référence (six ans). Le nombre de stagiaires accueillis (plus d'une soixantaine) est également très satisfaisant.

Par ailleurs, le vaste parc d'instruments scientifiques mis à disposition au sein des plateformes fait l'objet d'améliorations constantes et permet de répondre à de nombreuses problématiques dans des domaines très divers (par exemple la transition énergétique, les matériaux du patrimoine, la pollution atmosphérique) et d'organiser des formations ouvertes à des partenaires académiques et non académiques. Les plateformes sont largement ouvertes à la communauté et bénéficient d'un soutien technique important.

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

La visibilité à l'international est inégale selon les thématiques. Elle repose sur quelques chercheurs expérimentés. Peu de chercheurs ou enseignants-chercheurs coordonnent des projets internationaux d'envergure, en particulier européens.

Une bonne partie du parc instrumental est vieillissante et certains instruments devront être remplacés malgré des modernisations fréquentes. Cela risque de limiter une partie des opportunités de recherche et le développement de prestations de services avec des partenaires industriels.

## DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

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

Grâce à une stratégie scientifique résolument tournée vers la génération de résultats originaux, la production scientifique de l'unité est importante (287 ACL), et s'inscrit dans une dynamique de publication dans des journaux à large audience.

- 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 d'articles scientifiques avec comité de lecture (ACL) est de très bon niveau, avec 287 ACL, pendant la période, valeur quasiment constante par rapport à la période précédente (241). Ceci est d'autant plus remarquable que la période évaluée a été perturbée par la séquence Covid pénalisant pendant plusieurs semaines certaines équipes dépendant des équipements expérimentaux. À cela, s'ajoute également la publication de 25 chapitres d'ouvrage. L'ensemble des publications est accessible et libre de droits sur HAL. L'analyse des journaux dans lesquels les travaux sont publiés montre que plus du dixième de la production concerne des revues de tout premier plan et de forte audience comme Nature communication, ACS Nano, ACS Photonics, Angewandte Chemistry International Edition, Chemical Reviews. Près de 80 % des articles résultent de travaux collaboratifs, preuve du bon rayonnement de l'unité et de sa capacité à s'intégrer dans des réseaux de collaboration.

Le personnel PAR et les doctorants sont bien impliqués dans les publications.

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

Si la production scientifique globale est très bonne, le rayonnement individuel des personnels est inégal. La disparité du taux de publications entre les différentes équipes varie du simple au double bien que pouvant s'expliquer par la nature même de leurs activités.

Une trop faible part des publications (5 %) est cosignée par plusieurs équipes.

## 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 développe des activités partenariales soutenues avec le monde culturel (nombreuses interactions avec les musées et établissements du ministère de la Culture) et ses membres sont très impliqués dans les actions destinées au grand public. En revanche, la valorisation des recherches auprès des partenaires industriels est insuffisante.

- 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 développe de nombreuses relations non-académiques, en particulier dans le domaine des matériaux du patrimoine. Celle-ci a établi, sous couvert de ses tutelles, plusieurs conventions avec les grands musées (Louvre, Quai Branly, Guimet, Cité de la Céramique, Palais impérial de Pékin, etc.), mais aussi avec des acteurs du marché de l'art ou de l'archéologie. Elle veille à entretenir des interactions fortes avec tous ces partenaires pour pérenniser ses collaborations.

L'unité développe une stratégie efficace de vulgarisation de ses recherches sous la forme de conférences et d'interventions diverses avec des musées et à destination du grand public. Elle assure de nombreuses formations consacrées à la diffusion de la culture scientifique technique et industrielle, même si certaines équipes sont moins actives.

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

Les équipes interagissent peu avec le monde socio-économique (un seul contrat avec l'industrie au cours de la période).

## ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

Le projet de l'unité est construit sur une mutualisation de compétences fortes et variées, autour d'actions dont certaines sont déjà actives et d'autres lui permettront de répondre aux enjeux sociétaux dans les domaines de la transition énergétique, du climat et de la santé. Le comité d'experts encourage l'unité à bien évaluer le positionnement de ces actions dans le contexte national et international, pour la rendre identifiable et en accord avec les grands enjeux de société actuels.

L'organisation de l'unité, proposée pour le prochain contrat, est identique à la précédente. La nouveauté vient de la restructuration des équipes en axes de recherche et l'introduction de sept thématiques transverses (interaction lumière-molécule, réactivité aux interfaces, énergie, transition environnementale, sciences de l'univers, physique atomique et moléculaire, matériaux et objets du patrimoine). Cette démarche permettra à l'unité d'améliorer les synergies entre thématiques et l'émergence de nouveaux projets entre équipes. Deux équipes du LERMA et composées d'un nombre significatif de personnels permanents (1 CR, 2 PR, 6 MC, 2 IR) vont s'associer à l'équipe CIRS. Cette arrivée va permettre à l'équipe CIRS d'élargir son périmètre d'actions et d'accroître considérablement sa visibilité internationale dans les domaines de l'astrochimie et de l'astrophysique.

Plus globalement, cette restructuration est l'opportunité de rendre plus inclusive la politique scientifique tant au sein de chaque équipe qu'à l'échelle de l'unité. Elle lui permettra de renforcer son positionnement disciplinaire au sein des instituts ou des initiatives de SU et aussi de consolider les interactions entre les UFR de chimie et de physique.

L'unité affiche sa volonté de participer aux appels à projets de l'ERC et se prépare à participer à des projets d'envergure du PIA, notamment le projet « Sound ». Elle entend jouer un rôle-clef dans ces projets. La stratégie mise en œuvre lors du précédent contrat pour développer de tels projets en combinant moyens humains et financiers est à poursuivre, mais il faut veiller à la pertinence du projet de l'unité dans son contexte scientifique.

## RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

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

Afin de réduire le risque d'une trop grande dispersion, le comité invite l'unité à formaliser les questions fondamentales auxquelles elle veut s'attaquer, à bien évaluer leur positionnement dans le contexte national et international et, sans doute, à abandonner progressivement quelques activités qui ne s'y inscriraient pas. Il recommande à l'unité de poursuivre la dynamique engagée pour diversifier ses ressources propres (prestations, contrats industriels, projets européens) et à recruter des chercheurs.

La vie de l'unité peut être renforcée par la mise en place de moments d'échanges scientifiques entre permanents et non-permanents (les non-permanents sont notamment demandeurs d'un meilleur partage des connaissances scientifiques et techniques) et d'outils de communication interne (mise à jour régulière du site web ou production d'une gazette électronique hebdomadaire ou mensuelle).

Le comité encourage l'organisation et la tenue de manifestations scientifiques au niveau de l'unité. L'identification d'axes thématiques transverses annoncée dans le projet peut parfaitement l'aider dans cette démarche.

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

Comme pour la période précédente, l'unité a peu d'interactions avec le monde socio-économique, malgré les équipements disponibles au sein des plateformes et le nombre de PAR affecté à leur fonctionnement.

Le comité d'experts recommande à l'unité de développer une recherche fondamentale plus orientée vers des applications. Elle pourrait identifier les verrous fondamentaux concernant en particulier la synthèse, la réactivité chimique, les propriétés et les techniques de caractérisation auxquels MONARIS veut s'attaquer, les formaliser, les présenter aux futurs partenaires avant négociation pour avancer ensemble vers des collaborations où chaque partenaire est gagnant.

Le comité d'experts recommande à l'unité de développer et de se doter de nouveaux équipements, notamment pour étudier des nanosystèmes à l'échelle de l'objet unique, par exemple en couplant la spectroscopie optique et la microscopie AFM.

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

Le comité d'experts encourage tous les chercheurs et enseignants-chercheurs à contribuer à la visibilité et au rayonnement de l'unité en participant à des conférences internationales et à la coordination de programmes internationaux.

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

Des efforts sont à fournir pour ouvrir les plateformes techniques aux intervenants extérieurs et favoriser les échanges avec le milieu socio-économique. Les PAR pourraient s'investir dans la recherche de collaborations industrielles.

## ÉVALUATION PAR ÉQUIPE

**Équipe 1 :** Caractérisations, Interactions et Réactivités : Spectroscopie moléculaire (CIRS)

Nom du responsable : M. Lahouari Krim

### THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les recherches menées dans cette équipe d'expérimentateurs sont centrées sur la caractérisation des espèces et des édifices moléculaires d'intérêt atmosphérique et astrophysique ainsi que sur la réactivité sous conditions extrêmes et en environnement contrôlé. Ces recherches reposent sur la mise en œuvre de différents dispositifs instrumentaux (jet supersonique pulsé, cellule multi-passages refroidie, matrice cryogénique) couplées à plusieurs sondes spectroscopiques couvrant notamment les domaines de l'infrarouge, du visible, de l'ultra-violet et faisant aussi appel à de la spectrométrie de masse.

### PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le précédent rapport d'évaluation soulignait, pour toutes les équipes de MONARIS, l'importance de prioriser les thématiques pour tenir compte des moyens à la fois financiers et humains et accroître la visibilité du laboratoire. L'équipe a renforcé ses actions dans le domaine de la chimie atmosphérique et de l'astrochimie en utilisant tous les atouts dont elle dispose, notamment les spectroscopies vibrationnelles à très haute résolution appliquées à la caractérisation et à la réactivité moléculaire.

Un autre risque mentionné dans le précédent rapport concernait les ressources propres limitées. L'équipe a bénéficié de financements pour recruter des doctorants et des post-doctorants. Pour l'achat d'équipements ou pour assurer la jouvence des dispositifs expérimentaux, l'équipe a disposé de moyens trop limités et elle doit continuer à répondre à des appels à projets (AAP) régionaux ou nationaux.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	3
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	2
Personnels d'appui à la recherche	0
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>7</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	4
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>5</b>
<b>Total personnels</b>	<b>12</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe CIRS utilise des équipements expérimentaux en propre et d'autres intégrés à des plateformes expérimentales de pointe pour des problématiques en astrochimie et en chimie atmosphérique. Elle a une expertise scientifique reconnue et une très bonne production scientifique partagée par l'ensemble des personnels permanents. Les publications paraissent dans les meilleurs journaux des communautés de la chimie-physique et de l'astrophysique. Elle va intégrer prochainement plusieurs chercheurs, enseignants-chercheurs et PAR provenant de deux équipes du LERMA, ce qui devrait contribuer à accroître considérablement son rayonnement et son attractivité.

### Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe s'est historiquement construite autour de compétences en spectrométrie infrarouge à très haute résolution des phases gazeuses pour caractériser les spectres de rotation-vibration de systèmes moléculaires. Elle s'est également forgé une solide réputation sur la conception de plusieurs plateformes expérimentales de pointe qui produisent des informations spectrales alimentant les bases de données internationales High-resolution transmission molecular absorption database (HITRAN) et Gestion et étude des informations spectroscopiques atmosphériques (GEISA) pour l'environnement, la planétologie et l'exploration spatiale. Elle s'est investie dans la conception et le développement de jet-Ailes, une expérience montée sur une des 29 lignes de lumière implantées au synchrotron SOLEIL.

L'équipe a pu bénéficier d'un environnement local très favorable avec le labex MiChem ainsi qu'avec les initiatives Sciences et ingénierie moléculaire (SIM) et Physique des infinis (PI) pour financer les équipements sur lesquels elle s'appuie fortement.

L'équipe a une très bonne production scientifique avec la publication dans son profil thématique de 95 ACL dans des journaux reconnus comme The Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry A ou encore Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (30 articles). Les doctorants et les post-doctorants sont généralement cosignataires de ces articles.

L'équipe est active pour la formation par la recherche avec neuf thèses soutenues et elle accueille régulièrement des étudiants de niveau master. Elle participe à plusieurs programmes de coopération et de mobilité Erasmus pour la formation à la recherche d'étudiants étrangers.

Des interactions de l'équipe avec le monde socio-économique ont émergé au cours de la période par le biais d'une collaboration avec l'Institut français du pétrole Énergies nouvelles l'IFPEN.

Les membres de l'équipe sont fortement impliqués dans l'administration et l'animation de la recherche. Ils participent ainsi à un IRN avec la Russie, au comité international de la base de données HITRAN et au comité d'organisation des utilisateurs de SOLEIL.

### Points faibles et risques liés au contexte

Au cours de la période, le départ à la retraite d'un DR n'a pas été compensé par un recrutement. Cette situation ne devrait pas s'améliorer au cours de la prochaine période, ce qui est un facteur de risque pour l'émulation scientifique.

Les études des interactions entre agrégats métalliques et ligands moléculaires sont éloignées des autres thématiques que sont la chimie de l'atmosphère et l'astrochimie.

Les questions sociétales comme la chimie prébiotique, l'astrobiologie ou les origines de la vie restent encore très éloignées des recherches développées dans l'équipe.

Aucune interaction avec l'équipe NARCOS n'est mentionnée et le lien expérience-théorie avec l'équipe E=MCT n'est pas optimal.

Des soutiens locaux notables permettent de recruter des doctorants et des post-doctorants mais pas nécessairement de disposer de ressources propres conséquentes. Les ressources financières de l'équipe restent insuffisantes (aucun financement de l'ANR n'a été obtenu) au regard des recherches menées dans les

domaines de la chimie des atmosphères et des milieux interstellaires qui offrent différentes possibilités de financements.

## Analyse de la trajectoire de l'équipe

L'équipe CIRS va se renforcer considérablement en intégrant les équipes de physique expérimentale SPICES et SMILE du laboratoire LERMA, avec qui des liens de collaboration existent déjà. Il s'agit là d'une opération de regroupement de physiciens et de chimistes du campus Pierre et Marie Curie pour construire un pôle expérimental important pour l'astrophysique, l'astrochimie et les sciences de l'atmosphère. L'équipe SPICES étudie les glaces et les phénomènes d'adsorption et de désorption, thermiques ou photo-induits, pour des applications en astrophysique et est constituée de cinq enseignants-chercheurs (2 PR et 3 MCF). L'équipe SMILE, constituée de trois MCF et d'un CR, s'appuie sur des mesures de télédétection au sol et des mesures spectroscopiques pour détecter des gaz à effet de serre et pour suivre la pollution atmosphérique. Cette intégration s'accompagne également d'un apport conséquent en matière de PAR avec un gestionnaire (AJT) et quatre personnels techniques (3 IR, 1 AI) gérant un parc instrumental à la pointe de la technologie.

Cette opération va renforcer les activités de recherche de l'équipe CIRS tout en rééquilibrant les forces en présence sur les deux axes de recherche nouvellement définis, le premier, spectroscopie moléculaire pour les atmosphères et télédétection, et le second, sciences moléculaires aux basses températures pour l'astrophysique et l'astrochimie.

De cette fusion d'équipes constituées de physiciens et de chimistes devrait découler une bien meilleure visibilité de CIRS pouvant potentiellement propulser la discipline sur le devant de la scène internationale au regard des actions menées dans les domaines de l'astrophysique de laboratoire et de la chimie de l'environnement en lien avec des demandes sociétales fortes.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe doit diversifier et intensifier ses recherches de financements sur les deux axes thématiques en répondants aux AAP de l'ANR et de l'ERC tout en continuant à développer des ouvertures vers le monde socio-économique. Elle doit se donner les moyens d'être plus attractive en communiquant vers le grand public sur ses activités de recherche. La recherche fondamentale développée est de qualité mais devrait pour cela être plus en lien notamment avec les observations, les missions spatiales, la production de données pour les modèles ou les questions environnementales.

L'équipe devrait aussi développer des travaux fédérateurs entre les axes, certains thèmes pourraient même s'arrêter comme par exemple les études des interactions entre agrégats métalliques et ligands moléculaires, éloignées de la chimie de l'atmosphère et de l'astrochimie. Elle devrait aussi renforcer ses liens avec l'équipe de théoriciens E=MCT.

Dans ce contexte, l'intégration de plusieurs chercheurs et enseignants-chercheurs du LERMA constitue un formidable atout pour faire émerger des thématiques fédératrices et innovantes et ainsi accroître la visibilité de l'équipe ainsi que son attractivité. Il serait opportun d'envisager le co-encadrement de doctorants entre les membres des équipes issues de MONARIS et du LERMA. Les réunions d'équipe doivent être fréquentes afin de faciliter les échanges et l'intégration des personnels du LERMA dans MONARIS.

**Équipe 2 :** NANomatériaux et matériaux nanostructurés : Réactivité, Caractérisation et spectroscopieS (NARCOS)

Nom des responsables : M. Ludovic Bellot-Gurlet et Mme Alexa Courty

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les thématiques de recherche développées par l'équipe NARCOS concernent la synthèse et la caractérisation structurale et spectroscopique, en conditions *operando* ou non, de nanomatériaux d'intérêt en plasmonique, en magnétisme, ou en (photo)catalyse ainsi que l'analyse non invasive des objets et matériaux du patrimoine. Les recherches s'appuient d'une part sur les compétences en synthèse de nano-objets et de leur assemblage contrôlé en 2D et en 3D, de la synthèse d'énantiomorphes chiraux et, d'autre part, sur les expertises entourant les plateformes instrumentales de spectroscopies optiques, de nanoscopie (AFM, STM) et d'analyse des surfaces (spectroscopie X et XPS). On note la maîtrise récente des techniques de synthèse de nanomatériaux plasmoniques chiraux, sujet actuellement compétitif, ainsi que le développement de la spectroscopie Raman exaltée de surface (SERS) pour la caractérisation des pigments dont ceux des matériaux du patrimoine.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

La redéfinition des axes thématiques a permis un meilleur dialogue entre les différents membres de l'équipe et l'émergence de projets structurants. Les compétences des membres de l'équipe en synthèse et spectroscopie sont mises à profit pour progresser dans la compréhension de la réactivité chimique et pour des applications dans le domaine des (nano)matériaux donnant lieu à un grand nombre de collaborations et de projets. L'implication des personnels non-permanents reste toutefois peu visible. La démarche d'ouverture et de valorisation des plateformes vers le monde socio-économique est une des propositions pour la trajectoire de l'équipe.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	3
Maîtres de conférences et assimilés	6
Directeurs de recherche et assimilés	3
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	la répartition du temps de travail des PAR entre les activités plateformes et les activités de l'équipe n'est pas précisée
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>16</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	3
Doctorants	12
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>15</b>
<b>Total personnels</b>	<b>31</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe mène des recherches académiques reconnues internationalement, ce qui se traduit par une production scientifique soutenue (172 ACL) et de qualité. L'attractivité de l'équipe se manifeste au travers du nombre important de doctorants (25) formés. Son implication et ses succès aux divers AAP lui ont permis d'obtenir les ressources adaptées au maintien et au développement des plateformes instrumentales, et au financement des doctorants et post-doctorants. Les membres de l'équipe sont très impliqués dans des responsabilités d'enseignement, de management, d'animation de la recherche et de sociétés savantes.

### Points forts et possibilités liées au contexte

La production de l'équipe est excellente avec 172 ACL publiés, dont une bonne partie dans des journaux de grande audience tels que Nature communications, ACS Nano, ACS Photonics, Angewandte Chemie International Edition, Chemical Reviews et 34 chapitres de livres. Le dynamisme de l'équipe se traduit par sa bonne capacité à obtenir des financements nationaux avec six projets financés par l'ANR (dont 3 en tant que coordinateurs) et au niveau local avec treize projets financés par SU. On note que globalement les ressources de l'équipe sont en hausse par rapport à la période précédente, ce qui a permis la maintenance des équipements des plateformes. La forte implication des EC dans les formations de SU et le niveau élevé des ressources propres ont permis le recrutement d'un nombre important de doctorants (25 pendant la période, soit trois doctorants par titulaire de l'HDR) et de post-doctorants (10). On constate un effort de l'équipe pour augmenter le rayonnement international de ses recherches avec deux partenariats Hubert Curien (PHC) et quatre thèses en cotutelle avec les universités de Tunis (1), de Groningen (2) et de Téhéran (1). Le savoir-faire de l'équipe est reconnu (synthèses et études spectroscopiques d'interfaces, de nano-objets et de matériaux du patrimoine) qui lui a permis de développer un réseau collaboratif très étendu (localement, nationalement et internationalement). Le recrutement en 2018 d'un MCF et la mutation en 2019 d'un DR (en provenance de l'UMR 8096 ArchAm, Panthéon Sorbonne) sont venus renforcer le potentiel humain et scientifique de l'équipe. En particulier, l'obtention par l'EC recruté du financement par l'ANR d'un projet Jeunes chercheuses et jeunes chercheurs (JCJC) permet le développement d'un axe de recherche original concernant la compréhension de la réactivité des nanomatériaux pour la catalyse plasmonique, dans des conditions operando.

La maîtrise récente de la synthèse d'énantiomorphes plasmoniques et le développement de la technologie SERS pour la caractérisation des pigments ou des colorants d'objets du patrimoine devraient contribuer à une plus forte reconnaissance de l'équipe.

Les travaux de recherche s'appuient sur des plateformes de caractérisation des matériaux dont certains équipements sont à l'état de l'art (spectroscopie Raman à basse fréquence, imagerie de fluorescence). Un effectif important de PAR assure le fonctionnement de ces plateformes et ils participent activement aux activités de recherche de l'équipe.

L'équipe est fortement impliquée dans des réseaux de recherche et d'enseignement comme par exemple le labex MiChem au niveau local, dans plusieurs GDR (coordination du GDR Nino et bureau du GDR Or-nano) au niveau national et dans le réseau européen International Training Network (ITN) Nanoalloys.

### Points faibles et risques liés au contexte

La recherche sur les nanomatériaux étant un domaine compétitif, le positionnement de NARCOS par rapport aux autres équipes travaillant dans ce domaine aux échelles nationale et internationale devrait être plus visible. Comme signalé dans le précédent rapport, et malgré de gros efforts de restructuration, les thématiques restent encore dispersées.

L'implication des PAR dans les travaux de recherche des membres de l'équipe n'est pas clairement explicitée alors que les thématiques développées s'appuient fortement sur leurs compétences.

Une partie de l'instrumentation Raman sur laquelle l'équipe s'appuie est vieillissante et le déficit de contrats industriels peut remettre en question des opérations de jouvence.

L'équipe NARCOS a peu de collaborations avec les autres équipes de l'unité.

L'animation scientifique dans l'équipe, sous sa forme actuelle, ne favorise pas suffisamment les échanges entre les personnels permanents et non-permanents.

### Analyse de la trajectoire de l'équipe

Les travaux de l'équipe seront menés dans la continuité des travaux actuels. Elle sera structurée en deux axes thématiques structurant de façon pertinente les activités, le premier étant Nanomatériaux de la synthèse à

l'application et le second Spectroscopies pour la physico-chimie sous environnement contrôlé. La répartition des personnels C et EC au sein de ces deux axes sera équilibrée.

Une nouvelle collaboration avec l'unité Photophysique et photochimie supramoléculaires et macromoléculaires (PPSM) à l'ENS Paris-Saclay est envisagée pour la synthèse et l'étude des propriétés électro-catalytiques de matériaux hybrides composés de graphènes fonctionnalisés et de nanoparticules.

Deux projets déjà initiés concernant le suivi de réactions catalytiques et l'étude des processus de granulation de bétons recyclés seront approfondis pour l'axe 2.

Le développement de nouveaux systèmes plasmoniques sera mis à profit pour la caractérisation des colorants par spectroscopie SERS. L'application à la détection de traces de polluants est envisagée.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Les deux nouveaux axes thématiques structurent de façon pertinente les activités de l'équipe mais leur ampleur au regard du nombre de personnels affectés à chacun d'eux pose question, d'autant que certains C et EC émargent aux deux axes. Il faudra veiller à limiter l'éclatement thématique des personnels vers une granulométrie plus fine. Dans ce but il est important de continuer à promouvoir les interactions entre les personnels de l'équipe, le montage de projets fédérateurs et à mieux identifier la contribution des PAR aux projets des C et des EC.

Le montage de projets communs avec les deux autres équipes de MONARIS, CIRS et E=MCT, doit également être renforcé.

L'animation scientifique doit être repensée pour une plus grande dynamique d'échanges scientifiques intégrant mieux les différentes catégories de personnels.

Il sera important de maintenir l'effort de développement autour des plateformes techniques, de façon à diversifier les sources de revenus.

L'équipe possède une forte expertise pour la synthèse et l'assemblage de nanoparticules. La construction d'une plateforme technologique de synthèse de nanomatériaux serait une opportunité pour l'ouverture de NARCOS vers le monde socio-économique.

**Équipe 3 :** Modélisation et Chimie Théorique (E=MCT)

Nom du responsable : M. Bruno Madebène

## THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les recherches en modélisation et chimie théorique de l'équipe sont centrées entre deux thématiques principales. La première est l'étude de l'organisation de la matière à différentes échelles, souvent en lien avec les autres équipes de l'unité. Il s'agit d'étudier par exemple l'hydratation de solutés en phase gaz ou d'agrégats formés par l'association métal-ligand. Dans la seconde, plus récente, on étudie l'évolution des liaisons chimiques et de la réactivité sous contraintes comme, par exemple, le champ électrique ou le confinement. Ces recherches sont menées à l'aide des méthodes de la chimie quantique adaptées aux systèmes et du développement de méthodologies originales pour interpréter les résultats. L'approche est globalement multi-échelle tout en restant dans le domaine des descriptions moléculaires.

## PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'importance de prioriser les thématiques abordées par l'équipe avait été soulignée et dans ce contexte elle a pu focaliser une grande partie de ses activités sous la thématique nouvelle de la réactivité sous contraintes. Un autre point concernait l'amélioration de la visibilité de l'équipe aux niveaux national et international. Des collaborations ont ainsi été développées et renforcées et l'équipe a organisé ou co-organisé plusieurs manifestations scientifiques.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maîtres de conférences et assimilés	2
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	0
<b>Sous-total personnels permanents en activité</b>	<b>3</b>
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	1
Doctorants	1
<b>Sous-total personnels non permanents en activité</b>	<b>2</b>
<b>Total personnels</b>	<b>6 (+ 1 prof émérite)</b>

## ÉVALUATION

### Appréciation générale sur l'équipe

Il s'agit d'une très petite équipe encore assez jeune puisqu'elle a été créée il y a sept ans pour fédérer les théoriciens de MONARIS et proposer une thématique de recherche en modélisation dont l'originalité est propre à l'unité. D'une façon générale, elle semble y être parvenue grâce en particulier à ses liens avec les deux autres équipes CIRS et NARCOS. Les méthodologies proposées pour les études de molécules ou de nano-objets sont tout à fait pertinentes et l'équipe est identifiée aux plans national et international avec cependant un rayonnement limité compte tenu de sa très petite taille.

## Points forts et possibilités liées au contexte

E=MCT est une petite équipe qui peut ainsi être assez réactive et directement au contact avec les autres membres de l'unité. Le projet scientifique est bien défini et réaliste. On pourrait être surpris par sa singularité dans MONARIS, mais son rôle est d'autant plus important qu'elle semble établir le lien entre les autres équipes de l'unité. Ses membres sont ainsi bien introduits et identifiés dans le laboratoire, malgré leur spécificité méthodologique.

L'équipe dispose en local d'une certaine autonomie pour ses moyens de calculs, ce qui lui permet de développer une recherche originale qui ne nécessite pas la complexité liée à l'accès à des centres de calculs partagés.

La production scientifique est très bonne avec 29 ACL pour trois EC. L'équipe parvient, au moins partiellement, à ouvrir ses connaissances et sa science à la société au moyen par exemple des enseignements et des formations. Elle a su développer des thématiques originales en lien avec CIRS et NARCOS puisqu'un quart de sa production scientifique résulte de collaborations internes.

## Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe n'est composée que de trois EC et n'a pas de chercheur CNRS, ce qui limite sa force de frappe. À terme un risque de disparition pourrait se produire si E=MCT n'arrivait pas à atteindre une taille critique suffisante et gagner en visibilité. La communauté très importante et visible en chimie théorique dans l'environnement parisien pourrait motiver des mutations, par exemple comme cela a été fait récemment vers le Laboratoire de chimie théorique (LCT), voisin géographiquement de MONARIS, et mettre ainsi l'existence même de l'équipe en péril.

E=MCT ne dispose pas de PAR en charge de la gestion du parc informatique, cette tâche chronophage est assurée par les EC.

La puissance de calcul utilisée est assez faible et relativement ancienne. Elle devrait être mise à jour. Certains calculs gagneraient à pouvoir être réalisés ailleurs, par exemple sur les calculateurs nationaux dont le groupe ne semble pas aujourd'hui faire usage.

L'équipe n'a pas de contrats d'envergure notable et a recruté peu de doctorants (6) et de post-doctorants (2). Des développements méthodologiques pourraient être faits en collaboration.

## Analyse de la trajectoire de l'équipe

La trajectoire de l'équipe se développe autour d'applications particulières de la modélisation et de la chimie théorique, en lien avec les autres équipes de MONARIS. La thématique historique s'est développée sur l'étude des petits systèmes réactifs ou d'agrégats mettant en œuvre une chimie quantique et une modélisation moléculaire par champs de force. L'équipe est centrée sur les petites échelles. Son cœur de métier méthodologique semble être la mise en œuvre de méthodes adaptées pour interpréter les résultats de la chimie quantique pour la réactivité et l'organisation de nanosystèmes.

## RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'équipe semble tout à fait consciente de ses difficultés et elle a d'ailleurs déjà largement identifié divers moyens à mettre en œuvre pour les surmonter. Il s'agit tout d'abord de développer encore un travail original en liaison avec les autres équipes, en étant possiblement une force de proposition.

La boîte à outils de modélisateur dont dispose l'équipe pourrait être développée ou renouvelée en proposant de nouvelles collaborations internationales. Il s'agit non seulement de développer de nouvelles méthodologies mais aussi d'attirer de jeunes scientifiques brillants, potentiels candidats aux recrutements.

Dans ce contexte, le recours aux mobilités internationales (quand la situation personnelle le permet) pourrait aider à développer la visibilité et la mise en œuvre de nouvelles collaborations.

L'équipe pourrait aussi chercher à obtenir davantage de financements nouveaux en participant à des appels à projets français (type ANR) ou européens (type ERC) en tant que porteur ou collaborateur. Le but est aussi d'accroître sa visibilité par le développement des ressources humaines actuellement très limitées et par la participation active à des congrès internationaux. Certaines thématiques, comme la chimie sous contrainte, s'y prêtent probablement très bien. Cela permettra aussi de développer la puissance de calcul disponible pour éventuellement explorer des systèmes plus complexes, en lien avec les expérimentateurs.

## DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

### DATES

**Début :** 9 octobre 2023 à 8h30

**Fin :** 10 octobre 2023 à 18h00

**Entretiens réalisés en distanciel**

### PROGRAMME DES ENTRETIENS

#### **Lundi 9 octobre 2023**

08h30 Présentation du comité d'experts Hcéres

08h45 Bilan et trajectoire de l'unité

09h15 Discussions

09h55 Pause

10h10 Bilan et trajectoire de l'équipe CIRS

10h40 Discussions

11h20 Bilan et trajectoire de l'équipe E=MCT

11h35 Discussions

11h55 Huis clos du comité et pause méridienne

13h30 Bilan et trajectoire de l'équipe NARCOS

13h50 Discussions

14h30 Présentation des activités des services communs ou mutualisés (gestion, plateformes, ateliers, etc.)

14h45 Discussions

15h15 Pause à huis clos du comité

15h30 Huis clos du comité avec les C et les EC

16h10 Huis clos du comité avec les doctorants et les post-doctorants

16h50 Huis clos du comité

#### **Mardi 10 octobre 2023**

09h00 Huis clos du comité avec les PAR

09h40 Huis clos du comité avec les responsables d'équipes

10h20 Pause à huis clos du comité

10h40 Huis clos du comité avec les tutelles

11h20 Huis clos du comité avec la direction

12h00 Huis clos du comité

18h00 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 28 février 2024

Objet : Rapport d'évaluation MONARIS - De la molécule aux nano-objets : réactivité, interactions et spectroscopies.

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 « MONARIS ».

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](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)

