

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ

Phenix - Physicochimie des électrolytes et
nanosystèmes interfaciaux

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET ORGANISMES :

Sorbonne Université – SU

Centre national de la recherche scientifique -
CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2023-2024
VAGUE D



Au nom du comité d'experts :

Fannie Alloin, 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 Fannie Alloin, Grenoble INP

Experts :

- M. Laurent Galmiche, École normale supérieure Paris-Saclay (personnel d'appui à la recherche)
- Mme Corinne Lagrost, Université de Rennes 1
- Mme Nadine Millot, Université de Bourgogne
- M. Denis Morineau, CNRS Rennes
- M. Jean Pierre Pereira-Ramos, CNRS Thiais (représentant du CoNRS)
- M. Jean-Marc Simon, Université de Bourgogne (représentant du CNU)
- M. Jean-François Tassin, Le Mans Université

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
- M. Alain Walcarius, CNRS

CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Physicochimie des électrolytes et nanosystèmes interfaciaux
- Acronyme : Phenix
- Label et numéro : UMR 8234
- Nombre d'équipes : 3 équipes et 2 axes
- Composition de l'équipe de direction : M. Laurent Michot, Mme Marie Jardat, directrice adjointe

PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies
ST4 Chimie

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

Les activités scientifiques de l'unité Phenix concernent la physico-chimie des électrolytes et des matériaux à interfaces multiéchelles, comme les systèmes colloïdaux et les matériaux poreux. Ces activités de recherche s'inscrivent dans des thématiques à forts enjeux sociétaux que sont l'énergie, la santé et l'environnement.

Phenix a une expertise reconnue en synthèse de nanomatériaux et de matériaux nanostructurés hybrides, à propriétés essentiellement magnétiques et dans le développement de nouveaux matériaux pour le stockage électrochimique. Phenix conduit également des études de propriétés structurales et dynamiques de systèmes physico-chimiques comme les électrolytes, les liquides ioniques et les interfaces multiéchelles rencontrées dans les suspensions colloïdales et les milieux poreux. Des simulations numériques à différentes échelles spatio-temporelles s'appuyant sur des modèles théoriques adaptés sont exploitées pour comprendre les phénomènes de transport et de transfert de matière dans ces milieux. Des activités scientifiques sont également menées, en exploitant les liquides ioniques, sur le recyclage de déchets nucléaires et d'éléments critiques entrant dans la composition des aimants ou des batteries Li-ion.

L'unité est structurée en trois équipes ; colloïdes inorganiques (CIN) ; électrochimie et liquides ioniques (ELI) ; modélisation et expériences multiéchelles (MEM) et deux axes transversaux (étude de la dynamique multiéchelle par RMN bas champ ; imagerie 3D des matériaux d'intérêt environnemental et des systèmes colloïdaux).

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

Phenix, unité mixte de recherche (UMR) associant le CNRS et Sorbonne Université (SU), a été créée le 1^{er} janvier 2014. L'unité est localisée à Paris et occupe quatre « barres » distinctes du complexe universitaire de Jussieu. Pour le CNRS, l'UMR dépend de l'institut CNRS Chimie comme rattachement principal et de l'institut CNRS Physique (INP section 5) comme rattachement secondaire. Côté université, elle est rattachée à l'unité de formation et de recherche (UFR) chimie de la faculté des sciences et ingénierie de SU.

ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

L'unité Phenix fait partie de la fédération de recherche chimie et matériaux de Paris Centre regroupant six unités de chimie du campus de Jussieu. Au cours de la période évaluée, l'unité Phenix était associée à deux labex ; matériaux, interfaces, surface et environnement (MATISSE) et multi-scale integrative chemistry (MICHEM). Elle participait aux comités de pilotage et à l'animation de leurs axes thématiques. L'unité est aujourd'hui associée à quatre instituts ou initiatives de SU, l'institut des matériaux, l'initiative en sciences moléculaires, l'institut de la transition environnementale et l'institut des sciences du calcul et des données.

Les personnels de Phenix sont très impliqués dans le dispositif « FabLab » de SU. Fablab est un espace participatif de création et d'innovation interdisciplinaire destiné aux étudiants, chercheurs, entreprises et grand public. De plus, Phenix est associé à deux domaines de recherche et d'innovation majeurs (DIM) de la région Île-de-France, matériaux avancés éco-responsables (MaTerRe) et patrimoines matériels – innovation, expérimentation, résilience (PAMIR). Le DIM MaTerRe a pour objectif principal le développement d'outils et de méthodes pour la découverte accélérée de matériaux avancés pour le développement durable et les énergies nouvelles. Le DIM PAMIR est le réseau de recherche francilien consacré à l'étude des sciences du patrimoine. L'unité est très bien intégrée dans son environnement local, avec de nombreuses collaborations avec les laboratoires parisiens.

Phenix est une importante unité de recherche en chimie et physique dans le paysage parisien.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	7
Maitres de conférences et assimilés	20
Directeurs de recherche et assimilés	4
Chargés de recherche et assimilés	8
Personnels d'appui à la recherche	11
Sous-total personnels permanents en activité	50
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	4
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	10
Doctorants	30
Sous-total personnels non permanents en activité	44
Total personnels	94

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	26	0	5
CNRS	0	12	6
Autres	1	0	0
Total personnels	27	12	11

AVIS GLOBAL

Les travaux scientifiques de l'unité cherchent à répondre à des questions fondamentales (mécanismes de transport couplés en milieux hétérogènes, phénomènes et réactivités aux interfaces, synthèses contrôlées de nanomatériaux) dans les domaines de l'environnement, de la santé et de l'énergie. Le couplage modélisations/expériences multiéchelles, associant chimistes et physiciens, permet des développements méthodologiques novateurs tant d'un point de vue expérimental que théorique. Parmi ces travaux novateurs, on peut citer, par exemple, les relations structure-propriétés et hyperthermie de nanofleurs synthétisées par voie microfluidique (ACS nano en 2022), le rôle de l'eau dans les électrolytes pour batteries (Nature catalysis en 2020), la floculation des argiles (Nano Research en 2020). Cette spécificité de l'unité lui confère une forte reconnaissance nationale et internationale, dans des domaines scientifiques hautement compétitifs.

Pour assurer cette activité, l'unité est structurée en trois équipes qui entretiennent des collaborations internes actives et en deux axes transverses mettant en valeur des savoir-faire spécifiques sur lesquels peuvent s'appuyer les équipes. Les personnels développent un fort sentiment d'appartenance à l'unité et travaillent dans une atmosphère collégiale favorisant les interactions même si des améliorations en matière de formalisation de la communication interne pourraient être apportées.

L'unité est un acteur majeur aux niveaux national et international pour ses activités de recherche en synthèse de nanomatériaux à propriétés magnétiques, en caractérisations à différentes échelles spatio-temporelles des propriétés structurales et dynamiques de milieux ioniques, poreux ou colloïdaux (deux ERC Consolidator ont été obtenues sur la période), par des approches expérimentales et de simulation moléculaire. Son rôle est notamment attesté par son insertion dans des réseaux nationaux et internationaux de tout premier plan comme le réseau sur le stockage électrochimique de l'énergie (RS2E), la fédération de recherche Advanced Lithium Energy Storage Systems (Alisrore-ERI) et le réseau coopération européenne en science et technologie (COST) Eurelax.

La production scientifique de Phenix est excellente avec plus de 460 publications au cours de la période dont plus de 40 articles dans des journaux généralistes à très forte audience.

Par l'excellence des activités scientifiques menées, l'unité a une forte attractivité qui se traduit par de nombreux recrutements et mutations pendant la période évaluée. Elle a un taux de succès élevé dans des projets très compétitifs (25 projets financés par l'ANR et 2 subventions ERC « consolidator ») et elle est lauréate de différents prix individuels (par exemple Friedrich-Wilhelm Bessel Research Award) et collectifs (Prix Atos-Joseph Fourier 2021).

La mutualisation des ressources permet une gestion optimale de celles-ci, en matière d'investissement, d'accueil des nouveaux entrants et de participation du plus grand nombre à l'activité scientifique. Les Personnels d'Appui à la Recherche (PAR) ont une implication forte dans la vie de l'unité en étant acteurs dans la formation des non-permanents et dans la gestion des équipements. Ils participent également aux projets de recherche et à la production scientifique associée.

L'unité entretient des collaborations pérennes avec le monde économique et avec des industriels (laboratoire commun, actions de valorisation, acquisition d'équipements). Toutefois, au regard des enjeux sociétaux visés par l'unité, les contrats industriels pourraient être plus nombreux et ainsi contribuer à des ressources et collaborations diversifiées.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Pour répondre aux recommandations du précédent rapport, de nombreuses actions ont été mises en place pour permettre la transmission des savoir-faire et des concepts au cœur des activités de recherche de l'unité. Des formations destinées aux personnels (permanents et non-permanents) des différentes équipes de recherche ont ainsi été mises en place. Un séminaire de laboratoire est organisé mensuellement avec une instruction aux orateurs de consacrer les quinze premières minutes de leur exposé à des considérations accessibles à tous les membres de l'unité. Enfin, une assemblée générale au cours de laquelle les nouveaux projets et les nouveaux arrivants sont présentés à l'ensemble des personnels est organisée annuellement.

La mutualisation des moyens provenant de ressources non assignées (overheads, contrats industriels, dotations) est un outil puissant pour accroître les synergies et les collaborations internes, permettant en particulier l'acquisition de plusieurs montages expérimentaux.

Un bon équilibre a été trouvé par la concertation entre nouveaux projets et compétences historiques. Ce dialogue permet de limiter la dispersion des objets et thématiques d'étude de l'unité. En phase avec les recommandations de la précédente évaluation, les membres de l'unité et sa direction ont été vigilants sur la préservation de l'équilibre entre approches expérimentales et théoriques. Les derniers recrutements ayant renforcé majoritairement les approches théoriques et numériques, les objectifs de l'unité sont de favoriser dans le futur les approches expérimentales.

B - DOMAINES D'ÉVALUATION

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

Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

L'unité s'est clairement fixée des objectifs scientifiques de recherches ambitieux et très en amont sur des sujets à retombées sociétales, touchant l'énergie, l'environnement et la santé. Elle capitalise sur ses compétences historiques, développe de nouvelles approches différenciantes et réalise un très bel équilibre entre méthodologies expérimentales et modélisations théoriques.

Appréciation sur les ressources de l'unité

Les ressources financières de l'unité sont en adéquation avec ses ambitions scientifiques. En effet, l'unité est très performante pour répondre à des appels à projet très compétitifs (ERC, ANR). La mutualisation des moyens de l'unité et des équipes permet d'accompagner l'activité de l'ensemble des personnels. L'unité possède un potentiel humain scientifique important de maitres de conférences (MCF) et de chargés de recherche CNRS (CR) qui devraient, à terme, être promus. L'unité a cependant des difficultés à obtenir et pérenniser des PAR pour accompagner sa dynamique.

Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

Le fonctionnement mutualisé de l'unité est fortement plébiscité par ses personnels. La gouvernance (direction et comité de direction) est bien structurée. Les efforts réalisés pour travailler collectivement, la bonne communication et l'accueil de qualité des nouveaux entrants induisent un sentiment d'appartenance forte de tous les personnels à Phenix.

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

Points forts et possibilités liées au contexte

Les objectifs scientifiques de l'unité sont d'aborder des enjeux sociétaux majeurs comme la santé, l'énergie et le recyclage de terres rares et de métaux précieux.

Le positionnement des activités scientifiques de Phenix sur la physico-chimie des électrolytes, des systèmes colloïdaux et des matériaux poreux, en couplant expériences, théories et simulations est très pertinent, original et reconnu nationalement et internationalement. Les interactions très fortes entre expérimentateurs et modélisateurs sont fructueuses et sont l'une des forces de l'unité. Les développements méthodologiques multiéchelles sont remarquables.

La pertinence des objectifs scientifiques se perçoit par l'implication de Phenix dans de nombreuses instances et réseaux nationaux ou internationaux. Les activités scientifiques sont en adéquation avec les politiques scientifiques des instances locales et régionales, telles que les labex Matisse et Michem, quatre instituts de SU et deux DIM de la région Île-de-France. À l'échelle nationale, l'unité est présente dans différents réseaux de recherche comme les groupements de recherche (GDR) Name et Prométhée, le groupement d'intérêt scientifique (GIS) Fluor, le réseau RS2E et le programme national nucléaire, énergie, environnement, déchets, société (Needs).

Les collaborations internationales de l'unité sont d'un excellent niveau, avec, par exemple, des collaborations avec les universités de Berkeley, le Massachusetts institute of technology, Argonne National Laboratory, l'université de Brasilia, Nanyang technological university de Singapour, l'université de Tokyo, l'université d'Adeläide, l'école polytechnique fédérale de Lausanne et l'université de Cambridge.

Points faibles et risques liés au contexte

Une certaine dispersion des objets et finalités des études est observée ; énergie, environnement, santé, matériaux pour la construction (ciments), production artistique, etc. Cette dispersion pourrait nuire à la lisibilité des activités de l'unité. Le développement de modélisations et d'expériences abordant des objets d'étude et des problématiques divergents peut aussi constituer un risque pour l'originalité scientifique de l'unité qui s'affiche par des approches combinant expériences et théories et également pour son équilibre interne.

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

Les différents financements aux échelles locales, régionales, nationales et européennes sont bien répartis entre les trois équipes de l'unité. Cela conduit à un budget global de très bon niveau avec en moyenne 1,6 M€ de ressources propres par an. Les dotations récurrentes se situent entre 10 et 20 % de ces ressources (environ 200 k€ par an). Les recherches de l'unité ont été largement soutenues par l'ANR, avec 25 projets financés pendant la période.

Les deux subventions ERC « Consolidator » ont largement contribué à ce bilan financier très favorable puisqu'elles représentent 30 % des ressources de l'unité.

La politique de mutualisation des moyens a permis de réaliser des investissements importants.

L'unité a su recruter des chercheurs et des enseignants-chercheurs dans ses différentes thématiques de recherche, avec un bilan positif entre les recrutements et les départs. La pyramide des âges est de ce fait équilibrée entre ses différentes tranches avec une proportion très raisonnable de personnels permanents ayant moins de 40 ans.

Points faibles et risques liés au contexte

La part des ressources issues de partenariats industriels est faible et représente moins de 5 % du budget global.

Les financements de la région sont également peu nombreux pendant la période évaluée.

Le ratio IT/EC est faible, il est de 0,2 (tout IT confondu) et de 0,1 si on se réfère au soutien technique.

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

Un chercheur de l'unité est le correspondant sécurité des systèmes informatiques pour l'unité.

L'unité a recruté sur fonds propres, avec la participation de deux autres unités de SU et le soutien du CNRS, un ingénieur de recherche (IR) sous contrat à durée déterminée. Son rôle est de développer des codes informatiques, de réaliser les interfaçages entre langages de programmation et d'offrir une aide informatique pour la gestion des différentes machines de calculs.

L'unité s'est dotée, sur fonds propres, de serveurs permettant la sauvegarde des données.

L'unité a doté l'ensemble de son personnel de moyens informatiques pour télétravailler dans de bonnes conditions.

En raison de l'excellence scientifique et technique de Phenix, quatre personnels chercheurs et enseignants-chercheurs ainsi que trois PAR ont été promus au cours de la période.

Une politique d'aide à la constitution des dossiers de carrière est menée par l'unité.

Points faibles et risques liés au contexte

L'absence de personnel PAR disposant d'un poste permanent pour gérer les serveurs de calculs de l'unité et réaliser le développement de codes fait courir un risque important en matière de sécurité informatique, de gestion des données et de développement d'outils de modélisation performants.

Les tâches administratives et techniques des chercheurs et enseignants-chercheurs sont très chronophages induisant un manque de temps effectif pour la recherche. Elles pourraient, à terme, conduire à une certaine démotivation de ces personnels.

DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

Appréciation sur l'attractivité de l'unité

L'attractivité de l'unité est excellente pour le recrutement de chercheurs, d'enseignants-chercheurs, de doctorants et de post-doctorants. L'unité a une forte visibilité scientifique aux échelles nationale et internationale. La reconnaissance des chercheurs et des enseignants-chercheurs se traduit par les succès à des appels à projet très concurrentiels, l'obtention de prix et distinctions scientifiques, des invitations à des conférences et leurs implications dans des sociétés savantes et des instances nationales ou internationales. Les doctorants et post-doctorants obtiennent également régulièrement des marques de reconnaissance (prix de thèse, prix dans des congrès, prix L'Oréal-Unesco).

L'unité a également une forte implication dans les instances des grandes infrastructures de recherche (ESRF, Soleil) et elle est proactive dans la participation à des réseaux européens.

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 montre une forte attractivité, ce qui s'est traduit durant la période par le recrutement de cinq chargés de recherche (CR) CNRS, d'un maître de conférences (MCF) et d'une MCF par mutation.

L'unité accompagne l'accueil des jeunes entrants (CR et MCF) pour débiter dans de très bonnes conditions leur projet de recherche. Ceci se traduit par des sujets de thèse prioritaires, des investissements réalisés sur la part mutualisée du budget comme, par exemple, l'équipement d'un laboratoire de culture cellulaire.

Différents indicateurs attestent l'excellence des personnels et des activités menées au sein de l'unité, de plusieurs prix comme le prix Friedrich-Wilhelm Bessel Research Award de la Alexander von Humboldt Foundation, du prix jeune chercheur en Nanosciences de la Division chimie physique (DCP) de la Société chimique de France (SCF), ainsi que de plusieurs prix collectifs comme le prix « les étoiles de l'Europe » du ministère de l'Enseignement supérieur, de la recherche et de l'innovation. Les travaux des doctorants ont été récompensés par différents prix (prix de thèse, bourse L'Oréal-Unesco et prix de présentations ou posters).

Le rayonnement de l'unité est important à travers l'implication de ses membres dans différentes structures locales, nationales et internationales. Les personnels de l'unité participent activement aux instances locales comme les conseils de l'université, les instituts et initiatives de SU, la gouvernance de l'UFR chimie et la direction de l'institut des Sciences du calcul et des données. Phenix est présente dans les instances de gouvernance de très grandes infrastructures de recherche (TGIR) comme l'ESRF, Soleil, Ipanema, l'European Spallation Source en Suède et elle est membre du Haut conseil aux très grandes infrastructures de recherche.

Les membres de l'unité sont impliqués dans de nombreuses sociétés savantes (Société Chimique de France, sociétés française et européenne de neutronique) et participent à des comités de pilotage de réseaux européens (Cost Eurelax, Cost Action Européen Enius).

L'unité a eu des succès importants dans le cadre des appels à projets concurrentiels, avec, pendant la période, 25 projets financés par l'ANR, une implication importante dans le Programme et équipements prioritaires de recherche (PEPR) Batteries (coordination d'un projet sur les batteries à ion fluorure et participation à deux autres projets), différents projets en santé et nanomédecine en interaction forte avec des biologistes. Au niveau européen, des succès remarquables ont été obtenus avec l'obtention de deux subventions ERC Consolidator pendant la période en lien avec les milieux électrolytiques complexes ainsi que de cinq autres projets européens.

L'unité possède tous les équipements nécessaires à ses recherches avec différentes plateformes et ateliers mutualisés. L'unité s'est dotée d'équipements spécifiques, comme une salle blanche, une salle allouée à la culture cellulaire, un banc de diffusion des rayons X aux petits angles, la relaxométrie RMN bas champ et des ordinateurs de calculs.

Différents événements collectifs sont organisés comme des cours, des séminaires invités et des petits déjeuners communs, favorisant le sentiment d'appartenance à un collectif des membres de l'unité.

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

Au vu de l'expertise reconnue de l'unité, il est étonnant que seulement huit chercheurs issus d'autres établissements aient été invités pour de courts séjours.

DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Appréciation sur la production scientifique de l'unité

La production scientifique de l'unité est excellente et homogène entre ses différentes équipes. Certains résultats de recherche, comme, par exemple, les synthèses contrôlées de nanoparticules magnétiques ou encore l'étude des mécanismes de charge des supercondensateurs, ont un impact scientifique fort et font ou feront référence dans différents domaines scientifiques. Les membres de l'unité ont ainsi réalisé des travaux pionniers et sont des acteurs majeurs dans la construction de l'état de l'art.

- 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 est d'excellente qualité avec plus de 460 publications pendant la période dont plus de 40 articles dans des journaux à fort retentissement, comme, par exemple, Accounts of Chemical Research, ACS Nano, Advanced Energy Materials, Advanced Materials, Angewandte Chemie, Chemical Reviews, JACS, Nature Catalysis, Nature Communications, Nature Materials. La majorité de la production scientifique de l'unité est publiée dans des revues de grande qualité, avec environ 40 % de la production dans onze revues comme Chemical Communications, Journal of Chemical Physics, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Journal of Molecular Liquids, Journal of Physical Chemistry B et C, Langmuir, Physical Chemistry and Chemical Physics et Physical Reviews E. Ces publications ont pour objet les thématiques phares de l'unité comme les nanoparticules magnétiques (par exemple, les relations structure-propriétés et hyperthermie de nanofleurs synthétisées par microfluidique, publié dans ACS nano en 2022), les milieux électrolytiques (rôle de l'eau dans les électrolytes pour batteries, publié dans Nature catalysis en 2020), les interfaces, les matériaux poreux (floculation des argiles, publiée dans Nano Research en 2020), la relaxométrie RMN (analyse par simulation numérique, publiée dans Journal of Chemical Theory and Computation en 2021), pour n'en citer que quelques-uns. Une part importante de la production scientifique implique des collaborations internationales.

Le logiciel open source Metalwall, prix Atos-Joseph Fourier en 2021, a été développé pendant la période et est actuellement utilisé par au moins dix équipes internationales. Le nombre de conférences invitées est important, avec 139 conférences invitées durant la période dont 107 à l'international.

Plus de 15 % des publications impliquent des membres d'au moins deux équipes du laboratoire, montrant le caractère collaboratif des travaux effectués.

Les PAR sont également fortement impliqués dans la production de l'unité, avec la signature de 50 publications pendant la période.

Environ la moitié des articles de l'unité est co-signée par des non-permanents et les doctorants ayant soutenu leur thèse ont publié en moyenne deux articles.

Plus de 80 % des articles scientifiques sont répertoriés dans HAL avec les textes intégraux associés. Les codes informatiques développés par l'unité sont déposés dans le domaine public à travers la plateforme Github.

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

La production scientifique des membres de l'unité est hétérogène, avec des dynamiques individuelles très fortes mais quelques membres publient rarement.

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 mène certaines actions notables en lien avec la société, avec un laboratoire commun de recherche (LCR) Carmen, des actions de valorisation comme une start-up issue des travaux de l'unité et des collaborations pérennes avec le monde économique. Cependant, au regard des enjeux sociétaux abordés par l'unité, les contrats industriels ne représentent qu'une faible part de ses ressources propres.

L'unité, au travers de quelques personnes et des doctorants, est bien impliquée dans des actions de communication vers le grand public comme des conférences, des tables rondes et des émissions de radio.

- 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

Le LCR Carmen a démarré en 2019 pour cinq ans, il associe l'Institut français du pétrole énergies nouvelles (IFPEN), l'Institut de physique et de chimie des matériaux de Strasbourg (IPCMS), le centre de RMN à très haut champ de Lyon et l'unité Physicochimie des électrolytes et nanosystèmes interfaciaux (Phenix) de SU. Ce laboratoire commun, fruit d'une collaboration pérenne avec l'Ifpen, a permis à l'unité de maintenir et d'accroître son parc instrumental (SAXS, relaxométrie RMN).

Des membres de l'unité ont lancé et développé le FabLab de SU qu'ils dirigent maintenant.

La création de la start-up Activ-H est en lien direct avec des travaux de l'unité sur la synthèse microfluidique, valorisés sous la forme d'un brevet. Un projet en lien avec les polymères à empreinte moléculaire pour le ciblage cellulaire a le soutien de la cellule innovation du CNRS pour une étape de maturation en accord avec la SATT, un brevet étant dans ce cadre en cours de dépôt.

L'unité est impliquée dans différentes actions de diffusion du savoir dans la société. À titre d'exemple, des membres de l'unité ont été impliqués dans des manifestations telles que « chimie et terroir » et « dialogues entre chercheurs et lycéens » pour les Intéresser à la construction des savoirs « DECLICS », des tables rondes telles que « Débat : Climat, énergie, environnement : où va-t-on ? » ou des émissions radio « Stockage énergétique, comment éviter la panne ? » et « l'Énergie Bleue » sur France culture.

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

L'unité a peu de contrats industriels, au regard de ses activités scientifiques en lien fort avec des enjeux sociétaux d'importance. Par ailleurs, ces contrats sont portés par un nombre limité de personnes.

ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

La trajectoire de l'unité s'appuie largement sur celles des équipes. Au niveau du pilotage, l'ambition est de fournir aux membres de l'unité des conditions optimales de travail en favorisant les collaborations entre équipes, en aidant les jeunes recrutés à développer une recherche indépendante et en permettant l'achat d'équipements scientifiques. La mutualisation des moyens a été plébiscitée par l'ensemble des personnels et sera donc poursuivie. La trajectoire scientifique est dans la continuité des actions actuelles, les recherches seront : i) associées à la synthèse de nanoparticules et nanomatériaux en milieux complexes et sur leurs applications en santé et pour l'environnement, ii) menées dans les domaines des batteries avec le couplage expériences-simulations en intégrant la technologie *machine learning* dans la programmation des codes et du recyclage avec des approches de chimie analytique utilisant des liquides ioniques, iii) associées à l'étude des électrolytes et des polyélectrolytes en milieux confinés et hétérogènes.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

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

Le comité recommande la rédaction, la diffusion et l'archivage de relevés de décisions suite aux réunions du comité de direction.

Le comité recommande à la direction de mieux disséminer l'information sur le budget et l'utilisation des ressources en direction de l'ensemble des membres de l'unité.

Le comité encourage l'unité à poursuivre des animations scientifiques (cours, séminaires, journées scientifiques hors murs) permettant de stimuler une culture scientifique et technique commune.

Le comité recommande à l'unité de ne pas s'interdire de recruter des personnels sous CDD pour des missions ponctuelles, notamment de soutien administratif et technique, pour éviter une surcharge de travail pouvant être insoutenable pour les personnels permanents.

Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité

Le comité recommande la poursuite des actions mises en place (réseaux internationaux et nationaux, recrutement de post-doctorants de longue durée, préparation aux concours de recrutement) pour promouvoir l'attractivité de l'unité. Le comité recommande de mieux mettre en valeur les collaborations internationales de l'unité.

Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique

Le comité recommande de poursuivre la dynamique et la qualité de la production scientifique et de veiller à l'implication de tous les personnels dans cette production. Le comité recommande que les résultats de toutes les thèses soient valorisés avec au moins une publication au plus tard dans l'année de soutenance. L'unité devra veiller à poursuivre les efforts visant à promouvoir les collaborations entre équipes.

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

Le comité recommande à l'unité de conserver les relations pérennes avec le monde socio-économique et de chercher à en étendre le spectre avec de nouvelles entreprises.

Le comité recommande d'impliquer davantage les non-permanents dans les actions de vulgarisation (fêtes de la science par exemple).

ÉVALUATION PAR ÉQUIPE ET PAR AXE THÉMATIQUE

Équipe 1 : Colloïdes inorganiques (CIN)

Nom des responsables : M. Jérôme Fresnais et Mme Christine Ménager

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe CIN développe des thématiques de recherche fondamentale éventuellement dirigées vers des applications dans le domaine des colloïdes inorganiques, notamment magnétiques. L'accent est mis sur la compréhension des mécanismes mis en jeu lors de la synthèse de nanoparticules, en particulier leurs voies de croissance, leur fonctionnalisation mais aussi leur dispersion dans différents milieux et sur la compréhension et le contrôle des propriétés inhérentes de ces nanoparticules. Les techniques de synthèses par voie microfluidique font partie des procédés phares de cette équipe et les caractérisations avancées utilisent largement les grands instruments. Les domaines d'application visés sont la santé (nanomédecine) et l'environnement. La gamme de matériaux développés est vaste : matériaux multifonctionnels, multi-stimulables, hybrides polymères/particules, particules fonctionnelles.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

L'équipe avait reçu cinq recommandations. La première concernait la nécessité d'augmenter le nombre de personnels titulaires de l'habilitation à diriger des recherches (HDR). Cela a été fait puisque 75 % des chercheurs et enseignants-chercheurs sont aujourd'hui titulaires de l'HDR contre 55 % à la fin du précédent mandat. La deuxième recommandation visait à diversifier les modes de financement qui reposaient trop sur le programme d'investissements d'avenir (PIA), à travers les labex Michem et Matisse. Cette recommandation a été très bien prise en compte avec l'obtention de financements nombreux et d'origines variées : trois contrats européens, dix projets financés par l'ANR dont trois projets Jeunes Chercheuses Jeunes Chercheurs (JCJC), un projet financé par l'Institut national du cancer (Inca), plusieurs projets DIM soutenus par la région Île-de-France. Un total de 30 projets ont été financés avec une moyenne annuelle de 350 k€. La troisième recommandation concernait le renforcement des collaborations industrielles directes. Cela n'a pas été réellement effectué (un seul contrat industriel) mais des actions couronnées de succès comme la création de la start-up Activ-H et l'obtention d'un projet de prématuration du CNRS peuvent être mentionnées. La quatrième recommandation visait à accroître le rayonnement de l'équipe, notamment grâce à l'augmentation du nombre d'invitations dans des congrès et la rédaction de revues sur les thématiques en pointe de l'équipe. Cette recommandation a été en partie suivie puisque le congrès international le plus important sur les fluides magnétiques a été organisé par l'équipe (ICMF 2019). Concernant les invitations, elles sont au nombre de 24 (sur 92 participations), alors qu'elles étaient de seize lors du précédent contrat. La cinquième recommandation concernait l'identification de projets collaboratifs internationaux en tant que porteur et non plus comme partenaire. Douze contrats sur vingt sont portés par un membre de l'équipe, ce qui est très positif.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	3
Maitres de conférences et assimilés	6
Directeurs de recherche et assimilés	1
Chargés de recherche et assimilés	2
Personnels d'appui à la recherche	3
Sous-total personnels permanents en activité	15
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	0
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	1
Doctorants	9
Sous-total personnels non permanents en activité	10

Total personnels	25
-------------------------	-----------

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe CIN conduit des recherches de très haut niveau dans le domaine des nanomatériaux magnétiques dont elle maîtrise parfaitement la synthèse. Ces dernières années ont donné lieu à des travaux innovants sur leur utilisation dans les champs de la santé et de l'environnement, particulièrement en les développant sous la forme de matériaux hybrides. Les travaux ont conduit à une forte production scientifique (4,0 articles/ETP/an) dans des journaux à fort impact, production qui s'est accompagnée de succès remarquables aux appels à projets (AAP), en particulier ceux de l'ANR, et plus généralement d'un accroissement de notoriété des personnels impliqués se traduisant par une augmentation des conférences invitées à l'international.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe CIN possède un savoir-faire reconnu à un très bon niveau international dans la synthèse et la dispersion de nanoparticules magnétiques. Elle sait faire évoluer ses méthodologies de synthèse pour atteindre des objets plus complexes et fonctionnalisés à façon. Elle s'appuie sur des caractérisations physiques multiéchelles poussées lui permettant d'être très pertinente sur l'étude des relations structure-propriétés. Elle développe des interactions fortes avec des biologistes qui ouvrent la porte à des travaux novateurs en nanomédecine.

L'équipe fait preuve d'une très bonne attractivité, illustrée par le recrutement de deux CR CNRS et de doctorants en dehors du périmètre des masters de SU (recrutement à l'international et insertion dans un master Erasmus Mundus). La production scientifique est importante (4 articles/ETP/an qui est une augmentation sensible par rapport au contrat précédent) et de grande qualité (Nature Communications, Angewandte Chemie, Nano Research, Advanced Functional Materials, Langmuir), s'appuyant sur des travaux innovants de synthèse, de caractérisations poussées et d'applications, notamment en santé. Elle trouve des collaborations fructueuses au sein de l'unité puisque 20 % de ses publications sont cosignées avec les autres équipes. Tous les personnels de CIN publient et certains, y compris des jeunes, sont particulièrement actifs. Les PAR sont associés aux publications.

CIN a su accroître sa visibilité au travers d'un nombre croissant de conférences invitées impliquant des chercheurs seniors et des plus jeunes. Plusieurs membres de CIN ont obtenu des distinctions et des prix scientifiques (y compris des prix de thèse pour quelques doctorants) attestant leur notoriété et la qualité des travaux. La visibilité internationale de l'équipe s'est traduite par l'organisation, à Sorbonne université, du congrès le plus important de la communauté des ferrofluides, l'International congress of magnetic fluids (ICMF) en 2019.

CIN a obtenu de nombreux financements compétitifs (12 de l'ANR notamment) et a pu bénéficier de l'apport de contrats européens qui se sont achevés pendant la période de référence.

Le recrutement récent d'une jeune chercheuse CNRS devrait permettre à CIN d'aborder des modélisations théoriques des systèmes étudiés.

En complément de collaborations pérennes avec l'Ifpen, les actions de valorisation se sont développées avec la création d'une start-up (Activ-H) et l'obtention d'un programme de prématuration du CNRS.

Le fonctionnement global de l'équipe laisse une large part aux échanges scientifiques entre les permanents et les non permanents, gages de sa bonne cohésion. Vingt-six doctorants et dix-sept post-doctorants ont été encadrés pendant la période (en moyenne 3 doctorants par titulaire de l'HDR). Les doctorants publient au moins un article dans leur large majorité et trouvent un emploi dans différents secteurs (public ou privé).

Les membres permanents de l'équipe assument des responsabilités ou participent à des structures nationales (comité scientifique de l'INC, CNU section 32, CoNRS section 13, comité des Collaborating research group (CRG) françaises à l'ESRF, direction du comité d'orientation du laboratoire souterrain de l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra) et sont fortement investis dans le bon fonctionnement de leur UFR et de SU.

Points faibles et risques liés au contexte

Malgré les efforts poursuivis, l'insertion de CIN dans les réseaux européens et internationaux reste en deçà des possibilités que sa notoriété devrait ouvrir. Les collaborations industrielles demeurent très limitées, ce qui prive CIN de ressources supplémentaires (thèses, post-doctorants) et d'ouverture vers des questions industrielles. Malgré l'augmentation des personnels de rang A déjà observée pendant la précédente période, certains jeunes chercheurs très actifs titulaires de l'HDR seraient légitimes à être promus professeur ou directeur de recherche. Trop de retard dans les promotions pourrait provoquer un découragement et une perte de motivation. Il en est de même des PAR qui apportent un soutien précieux à l'équipe.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

La direction de l'équipe pour le prochain contrat sera en partie modifiée mais ce changement ne devrait pas induire de discontinuité. L'équipe n'envisage pas réellement de rupture ou de prise de risque majeure et continuera de mettre à profit ses compétences avérées en synthèse à façon de colloïdes fonctionnels.

De nouvelles synthèses de particules multiéléments ou de particules à anisotropie de forme sont envisagées pour des applications en santé ainsi que la synthèse de nanoparticules de grenat pour des applications pour la mise au point de nouveaux guides d'ondes. La compétence concernant la dispersion colloïdale dans des milieux complexes évoluera avec d'autres milieux tels que les solvants eutectiques profonds, utilisés comme solvants verts.

Les études orientées vers la santé, menées lors du précédent contrat, seront poursuivies dans le but d'envisager des études cliniques. Des travaux nouveaux sont prévus dans le champ des colloïdes actifs déplaçables par la lumière ou un champ magnétique ainsi que l'utilisation de puces microfluidiques. Concernant l'axe environnement, les activités en cours seront aussi poursuivies, avec, là encore, la volonté de capitaliser sur l'expérience acquise. De nouveaux matériaux seront évalués, comme les polymères à empreinte moléculaire (déjà développés par l'équipe dans le domaine de la santé) pour la dépollution sélective ou la floculation assistée magnétiquement. Les interactions entre particules magnétiques et microplastiques seront étudiées, ainsi que la diffusion de colloïdes actifs dans les sols pour mimer des bactéries, qui sera l'occasion d'une collaboration forte avec l'axe imagerie de l'unité.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Le comité recommande à l'équipe de veiller aux risques de dispersion des projets d'étude et de ne pas délaisser des approches fondamentales pour répondre à des collaborations à visées très applicatives, notamment dans le secteur de la santé. Toutefois, le comité préconise de chercher à développer des interactions avec le monde industriel, dans le secteur de la santé ou de l'environnement.

Le comité recommande aux membres de CIN de poursuivre leurs investissements dans l'organisation de congrès et de manifestations scientifiques, pour l'accroissement de visibilité qu'ils apportent.

CIN devra également veiller à bien intégrer en son sein une jeune chercheuse théoricienne récemment recrutée, en l'associant à l'encadrement de thèses au sein de l'équipe ou en collaboration avec une autre équipe, tout en lui permettant de trouver sa propre voie.

Équipe 2 : Electrochimie et liquides ioniques (ELI)

Nom des responsables : M. Damien Dambournet et Mme Anne-Laure Rollet

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les activités de l'équipe ELI s'articulent selon deux axes : stockage de l'énergie et recyclage. L'axe stockage concerne le développement de nouveaux matériaux (électrolytes, matériaux d'électrodes), leurs propriétés (transport/conductivité, propriétés de structures multiéchelle, mécanismes d'intercalation, etc.) et la compréhension des phénomènes mis en jeu au sein des dispositifs par simulation moléculaire. L'axe recyclage s'intéresse au traitement des déchets issus de l'industrie nucléaire et au recyclage des éléments critiques présents dans les aimants ou les batteries Li-ion. Un élément commun à ces deux axes est l'utilisation de liquides ioniques. Une compréhension fondamentale fine des phénomènes est au cœur des travaux menés en s'appuyant sur un couplage simulation/expérience.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Les quatre remarques du rapport précédent ont trouvé des réponses concrètes et pertinentes au cours du mandat examiné.

Concernant la baisse d'activité sur la thématique des sels fondus à haute température, le présent mandat a permis de développer et amplifier cette activité notamment pour l'application traitements des déchets liés à la production d'énergie (financement Orano, ANR recyclage batteries) avec une composante importante des simulations de dynamique moléculaire (Orano, Framatome, BPI France).

Le second point soulignait le besoin de logiciels de simulation open source, ce but a été atteint avec le logiciel MetalWalls (récompensé par le prix spécial Joseph Fourier 2021 ATOS et GENCI), maintenant en code source ouvert, et utilisé par une dizaine d'équipes dans le monde.

La réflexion sur le troisième point recommandant la nécessité de renforcer la protection et l'exploitation de la propriété industrielle n'est pas encore aboutie. Cependant, certaines recherches sur le recyclage sont en voie de valorisation.

Enfin, quant à l'attractivité de l'équipe, celle-ci a sans ambiguïté été améliorée avec un positionnement scientifique original renforcé, ce qui n'est pas aisé dans un paysage national et international fortement concurrentiel. Cela s'illustre notamment par la publication d'articles dans les meilleurs journaux des disciplines concernées mais aussi dans des revues pluridisciplinaires de grande audience.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maitres de conférences et assimilés	8
Directeurs de recherche et assimilés	0
Chargés de recherche et assimilés	2
Personnels d'appui à la recherche	3
Sous-total personnels permanents en activité	14
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	1
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	5
Doctorants	9
Sous-total personnels non permanents en activité	15
Total personnels	29

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe ELI est une équipe performante qui développe une recherche originale tournée vers de nouvelles générations de batteries post Li-ion et de supercondensateurs mais aussi vers le recyclage des déchets technologiques. Sa culture en chimie du fluor, en chimie des sels fondus et des électrolytes en général et en simulation moléculaire lui confère une grande efficacité et une importante visibilité internationale. Les méthodes spectroscopiques développées contribuent grandement à l'essor de son activité.

Points forts et possibilités liées au contexte

Sur des sujets hautement compétitifs à l'échelle internationale, l'équipe ELI a su se positionner de manière intelligente en tirant parti des compétences historiques du laboratoire et en privilégiant les développements méthodologiques, tant expérimental que par simulation. En particulier le couplage expérience-théorie, sur les activités recyclage et stockage de l'énergie, est un marqueur fort des compétences de l'équipe.

L'équipe ELI dispose de compétences très variées qui lui permettent un positionnement original dans le monde des batteries et des supercondensateurs, ce qui n'est pas aisé dans un paysage national et international très concurrentiel. Son orientation vers les batteries à ions multivalents comme Al et Mg est risquée mais porteuse d'acquisition de nouvelles connaissances en chimie du solide et en électrochimie. Ses travaux en simulation moléculaire sur l'étude des mécanismes de charge des supercondensateurs sont leaders dans le domaine et trouvent un prolongement dans des développements méthodologiques importants et en code source ouvert. L'axe recyclage s'appuie sur un savoir-faire historique (sels fondus, liquides ioniques), il prend de l'ampleur et bénéficie du développement de spectroscopies avancées (absorption X, relaxométrie RMN) pour l'étude des mécanismes.

La production scientifique est remarquable en volume (3,8 ACL/ETP/an, 103 communications orales) et en qualité avec des articles dans les meilleurs journaux des disciplines concernées (Journal of Molecular Liquids, J. Chem. Phys., Chem. Mater., J. Power Sources) mais aussi dans des revues pluridisciplinaires de grande audience (Angewandte Chemie, Nat. Catal., Nat. Mater.), ce qui lui vaut une grande visibilité internationale. Outre les aspects fondamentaux, l'équipe a su produire un logiciel de dynamique moléculaire (MetalWalls, prix Joseph Fourier) en code source ouvert et utilisé par une dizaine d'équipes dans le monde ainsi qu'un dispositif d'absorption X pour sels fondus à haute température. Une proportion importante des travaux de l'équipe est publiée avec l'équipe MEM (69 articles), dans une moindre mesure avec l'équipe CIN (15 articles). Ces interactions illustrent les compétences variées de l'équipe.

L'attractivité est forte et a nettement progressé pendant la période évaluée, comme en témoignent le recrutement de deux CR CNRS (profil simulation), l'accueil de 23 doctorants financés pour la plupart hors ED (75 %) et autant de contrats post doctoraux. Il faut souligner les efforts considérables pour répondre à de nombreux AAP avec, à la clé, de nombreux financements (ERC, PHC, 10 ANR, 3 projets du RS2E, 8 projets labex et DIM, 6 contrats industriels).

L'implication des membres de ELI est importante dans la gouvernance de l'UFR de Chimie à divers niveaux, dans la responsabilité d'unités d'enseignement, dans le Comité d'hygiène, de santé et des conditions de travail (CHSCT), dans l'organisation du labex Matisse et dans le projet Erasmus EUP 4EU+ de SU.

On notera aussi une implication forte des membres de l'équipe dans des actions de diffusion de la culture scientifique. Notamment, un membre de l'équipe ELI (avec un membre de l'équipe CIN) a créé et dirige le FabLab de SU.

Points faibles et risques liés au contexte

Le rapport écrit met assez peu en valeur les conférences invitées et les communications orales en France et à l'international, ce qui est dommage car elles permettent d'apprécier objectivement le rayonnement des membres de l'équipe.

Les collaborations, certainement nombreuses, auraient demandé à être détaillées ou commentées.

Dans un avenir proche, la charge de travail de la majorité des membres de l'équipe constituée de MCF deviendra peu compatible avec la poursuite d'une recherche efficace sur des sujets compétitifs, d'autant que

ces derniers assument de nombreuses responsabilités pédagogiques et dans la gouvernance de l'UFR. Une forte hétérogénéité dans la production scientifique et l'encadrement des thèses est à noter au niveau des différents membres de l'équipe.

Il existe un déficit de personnel de rang A dans cette équipe (un seul enseignant-chercheur de rang A).

Analyse de la trajectoire de l'équipe

Pour la prochaine contractualisation, un binôme « expérimental-simulation » sera en charge d'animer l'équipe. La trajectoire présentée cherche à capitaliser sur les efforts de recherche engagés dans le domaine du stockage électrochimique en renforçant encore les apports des études combinant expériences et simulations. Il s'agira en particulier de mieux appréhender les systèmes complexes mis en œuvre dans des batteries de nouvelle génération développées dans l'équipe, thématique à haut risque scientifique. Un effort particulier visera la compréhension des interactions au niveau moléculaire : de nouveaux développements méthodologiques computationnels sont en cours et des algorithmes de type machine learning (apprentissage automatique) sont également envisagés pour l'optimisation des matériaux. Un objectif fort est de faire converger les approches expérimentales et les simulations explorées dans l'équipe. Ainsi, ces développements méthodologiques seront élargis à l'activité recyclage, notamment pour le recyclage des constituants des batteries lithium-ion et des terres rares. L'activité recyclage sera donc poursuivie et renforcée, bénéficiant, d'une part du redéploiement et de l'élargissement du parc expérimental consacré à la pyrochimie amorcée lors du précédent mandat et, d'autre part, de l'utilisation des liquides ioniques dans les procédés de recyclage. Dans l'activité recyclage, une large part de la recherche sera consacrée à la compréhension fondamentale des processus impliqués, principalement les effets spécifiques de solvatation dans ces milieux non conventionnels, en toute cohérence avec l'expertise de l'équipe. Pour mener à bien ces projets, un effort sera engagé afin de nouer des partenariats variés (académiques, industriels, collectivités). En résumé, l'ambition est de répondre aux enjeux de la transition énergétique de manière réaliste et cohérente, au moyen des compétences et de l'expertise de l'équipe.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Le comité recommande l'établissement d'un compte-rendu ou d'un relevé de conclusions écrit des réunions d'équipe afin d'améliorer la diffusion de l'information auprès des personnels.

Il est souhaitable que certains membres de ELI s'investissent davantage dans l'activité de recherche de l'équipe. L'équipe devra veiller à l'équilibre de son potentiel « chercheur » entre théoriciens et expérimentateurs.

Le comité recommande de bien veiller au développement de l'axe recyclage des batteries et terres rares sans pour autant affaiblir les efforts portés sur l'activité stockage de l'énergie.

Équipe 3 : Modélisation et expériences multiéchelles (MEM)

Nom des responsables : M. Guillaume Mériquet et M. Benjamin Rotenberg

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les activités de l'équipe MEM s'appuient sur le développement de méthodologies à la fois expérimentales et numériques, permettant l'étude des propriétés physico-chimiques de milieux complexes selon une approche multiéchelle allant des échelles moléculaires aux échelles macroscopiques. Les systèmes étudiés sont variés, incluant les électrolytes et polyélectrolytes, les suspensions colloïdales et les milieux poreux. Les thématiques scientifiques de l'équipe s'organisent selon trois axes : les phénomènes aux interfaces, les (poly)-électrolytes et les phénomènes de transport couplé.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Les recommandations du rapport précédent portaient sur quatre sujets différents.

Concernant la diffusion de la culture scientifique auprès du grand public, l'équipe MEM a augmenté de façon appropriée sa contribution à la diffusion des savoirs auprès du milieu scolaire et du grand public, au travers d'événements nationaux, d'animations de tables rondes, d'interventions dans des médias radiophoniques ou de la rédaction d'articles destinés à un large lectorat.

En accord avec les recommandations du précédent comité, l'équipe MEM a mené un suivi systématique du devenir des doctorants ayant soutenu leur thèse au cours de la période de référence.

L'équipe MEM a renforcé sa collaboration avec l'équipe ELI sur les développements théoriques et méthodologiques pour la simulation moléculaire grâce au recrutement de deux CR.

Seule la dernière recommandation du comité, qui portait sur la gestion du parc informatique, ne semble pas avoir trouvé de réponse totalement satisfaisante. Cette charge, à laquelle s'est ajoutée la refonte du site Web, a encore mobilisé des personnels chercheurs et enseignants-chercheurs. La perspective d'une amélioration pourrait venir de la pérennisation d'un poste d'appui à la recherche, actuellement pourvu par un personnel en CDD et dont les missions sont partagées entre trois unités de SU.

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

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	3
Maitres de conférences et assimilés	6
Directeurs de recherche et assimilés	3
Chargés de recherche et assimilés	4
Personnels d'appui à la recherche	1
Sous-total personnels permanents en activité	17
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	3
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	4
Doctorants	13
Sous-total personnels non permanents en activité	20
Total personnels	37

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe MEM est extrêmement dynamique. Elle mène des activités de recherche d'un niveau remarquable, qui s'appuient sur un ensemble d'interactions très fortes et fructueuses entre expérimentateurs et numériciens, autant au sein de l'équipe ou de l'unité qu'au travers de nombreuses collaborations internationales de premier plan.

Ses travaux et ses membres bénéficient d'une très grande reconnaissance pour le développement de méthodologies multiéchelles appliquées à des systèmes variés d'un intérêt fondamental majeur autant qu'appliqué.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'équipe MEM tire les meilleurs bénéfices d'une utilisation concertée de méthodes expérimentales, présentes localement ou au sein de très grandes infrastructures de recherche (sources de rayonnement neutronique et synchrotron) couplées au développement de méthodes de simulation et de modélisation multiéchelle.

Elle dispose d'une proportion importante de personnels CNRS (40 % du personnel permanent), d'un très bon niveau de financements grâce aux succès à des AAP variés (ERC, H2020, ANR). Elle démontre une très bonne attractivité qui s'illustre par le recrutement de trois personnels (2 MCF et 1 CR) et l'accueil de nombreux doctorants (37) et post-doctorants (18).

La production scientifique de l'équipe, autant en nombre (196 articles dans la période considérée, soit 3.1 ACL/ETP/an) qu'en qualité (Nature Commun., PNAS, Angew. Chem. Int. Ed), est du meilleur niveau international. 60 % des articles signés par les membres de l'équipe MEM sont issus de collaborations internationales et une part importante d'entre-eux est issue de collaborations avec les équipes CIN (21 %) et ELI (16 %).

L'impact des travaux menés par l'équipe MEM et la reconnaissance internationale de plusieurs de ses membres se mesurent par l'obtention de nombreux prix accordés à des membres seniors (Friedrich-Wilhelm Bessel Research Award) autant qu'à des jeunes chercheurs (prix Jeunes Talents France L'Oréal-Unesco pour les Femmes et la Science en 2021, prix de thèse de la DCP et de la SFN accordés à des doctorants). Le rayonnement des activités de l'équipe MEM s'illustre aussi par un nombre remarquable de communications orales dans des congrès ou des workshops (247) dont 79 communications internationales sur invitation et par le succès à des appels à projet très concurrentiels comme l'ERC.

Les membres de l'équipe sont très investis dans l'animation et le soutien à la communauté aux niveaux local et national (coordination de programmes et prise de responsabilités dans plusieurs instances relevant du CNRS, des TGIR, sociétés savantes et structures d'évaluation comme le CNU et le CoNRS). L'équipe est bien insérée dans l'espace européen de la recherche avec la participation à de nombreux réseaux (1 Innovative training networks [ITN], 2 Future and emerging technologies [FET]) et des collaborations bilatérales sur le long terme (Europe, USA, Brésil, Mexique).

Les activités de l'équipe MEM répondent à des questions de recherche fondamentale (développements méthodologiques d'approches multiéchelles, physicochimie des solutions d'électrolytes et de polyélectrolytes, phénomènes de transport couplé et propriétés spécifiques induites par les interfaces et milieux confinés) et intéressent aussi des thématiques relevant d'enjeux technologiques actuels (récupération et stockage de l'énergie, environnement). À ce titre, elle entretient des collaborations pérennes et formalisées avec plusieurs Établissements publics à caractère industriel et commercial (EPIC) et partenaires industriels (Andra, Ifpen, Bureau de recherches géologiques et minières [BRGM], TotalEnergies).

L'équipe a une dynamique très active de communication en interne avec des réunions toutes les trois semaines, ce qui favorise les échanges entre les approches expérimentales et de simulations de l'équipe. Ces réunions sont aussi l'occasion d'échanges nourris avec les jeunes chercheurs, doctorants et postdoctorants.

De façon générale, les activités de l'équipe MEM trouvent un très bon équilibre entre thématiques de recherche fondamentale et à visée applicative.

Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe MEM manque de PAR, ce qui implique que certaines tâches techniques, comme la gestion du parc informatique, doivent être prises en charge par des personnels chercheurs et enseignants-chercheurs.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

La trajectoire de l'équipe s'inscrit dans la continuité de ce qui existe actuellement tant d'un point de vue de l'organisation que des activités scientifiques.

L'équipe prévoit en effet de poursuivre ses activités de développements méthodologiques expérimental et théorique pour l'étude multiéchelle, en particulier dynamique, des systèmes complexes autour de ses trois axes fédérateurs et structurants : « spécificité aux interfaces », « électrolytes et polyélectrolytes, dans le bulk, aux interfaces et confinés » et « transports couplés dans les milieux hétérogènes ».

Les collaborations directes simulations / expériences seront renforcées de même que les collaborations avec les équipes ELI et CIN.

Pour la partie modélisation, on peut noter des développements méthodologiques théoriques (mécanique statistique des liquides chargés, la description des transitions de phases hors de l'équilibre) et des développements des méthodes de modélisation et de simulation (machine learning pour les champs de force, passage de l'atomique au continu). Ces aspects méthodologiques à l'interface entre chimie et physique sont une des spécificités les plus originales de l'équipe qui font sa réputation.

Pour la partie expérimentale, l'équipe MEM souhaite prolonger des axes de recherche pour lesquels des défis scientifiques et méthodologiques significatifs ont été identifiés. Cela concerne notamment les études de courants ioniques dans les nanopores et la possibilité qu'elles peuvent offrir pour le développement de méthodes de détection de traces. Les travaux sur la thermoélectricité de solutions colloïdales seront étendus de façon systématique à d'autres systèmes, ceci grâce notamment à l'adjonction de méthodes complémentaires applicables aux milieux opaques qui seront développées dans le cadre de l'axe transversal Imagerie.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Le comité recommande d'être vigilant afin de conserver l'équilibre entre modélisation et expérimentation. Le comité invite l'équipe à mener autant que possible des études expérimentales et de modélisation sur les mêmes objets afin d'accroître les synergies. Le comité encourage l'équipe MEM à maintenir des échanges fréquents et une communication active entre l'ensemble de ses membres, à travers, par exemple, les réunions d'équipe déjà en place, et de maintenir ainsi la culture scientifique commune à toute l'équipe et la cohérence d'ensemble des projets qu'elle porte, qui sont des atouts importants.

THÉMATIQUES DE L'AXE

Cet axe transversal a pour objet la compréhension de la dynamique des espèces aux échelles intermédiaires (ns-ms) dans des milieux complexes (milieux poreux, colloïdaux et liquides complexes) en s'appuyant sur des mesures de relaxométrie par RMN.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le seul risque identifié dans le précédent rapport est l'absence de personnel d'appui à la recherche. Cette problématique reste entière, elle est même accentuée du fait de l'acquisition de nouveaux équipements, aucune ressource humaine n'ayant été allouée par l'unité et ses tutelles.

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'axe

L'axe relaxométrie repose sur un ensemble d'équipements et de compétences original à l'échelle européenne qui est précieux pour les activités de l'unité. Le manque de soutien technique place cet axe dans une situation intenable malgré l'investissement des personnels et limite son activité et sa visibilité. La demande d'évaluation de cet axe n'a pas paru très pertinente au comité en raison d'un fonctionnement qui n'est pas celui d'une équipe.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'activité de l'axe implique plusieurs équipes, avec onze personnels permanents pendant la période et une trentaine de non-permanents. L'axe a ainsi participé à différents projets (financements locaux, nationaux, européens ou industriels).

Le positionnement de l'axe est en adéquation avec la stratégie générale de l'unité, avec un couplage théorie/expérience original. La plateforme de relaxométrie RMN a ainsi un positionnement unique en France. La production scientifique intégrant les thématiques de l'axe RMN correspond à 30 articles, un article de revue et des chapitres de livre et ce en lien fort avec les thématiques de recherche des équipes MEM et CIN. Cette production est notable au regard des spécificités de la technique, des milieux complexes étudiés et des difficultés à maintenir opérationnel un parc instrumental unique.

L'axe a assuré l'organisation d'une école thématique au niveau européen NMR relaxometry for porous and confined systems et appartient à un réseau européen sur la relaxométrie RMN, ce qui démontre une reconnaissance internationale de celui-ci.

Points faibles et risques liés au contexte

Le manque de soutien technique place cet axe dans une situation intenable malgré l'investissement des personnels et limite son activité et sa visibilité.

Les départs en retraite des théoriciens en lien avec l'axe RMN sont un risque notable pour la pérennisation du couplage théorie/expérience.

Analyse de la trajectoire de l'axe

La trajectoire de l'axe est ambitieuse. L'objectif est d'étendre les études de processus dynamiques multiéchelles menées sur des suspensions colloïdales, des liquides complexes ou confinés, aux cas de milieux évoluant dans le temps sous l'effet d'une contrainte (pression, haute température) et qui impliqueront des adaptations instrumentales et méthodologiques.

RECOMMANDATIONS À L'AXE

Le comité recommande à l'unité de veiller à définir une politique de recrutement pour combler le manque de PAR. Le comité recommande d'intégrer l'activité associée à l'axe dans les points forts et différenciants de l'unité.

Axe transversal 2 : Imagerie 3D des matériaux d'intérêt environnemental et des systèmes colloïdaux

THÉMATIQUES DE L'AXE

L'axe transversal imagerie des milieux complexes a pour thématique l'étude des milieux complexes en utilisant les TGI au travers d'études de tomographie et de SAXS. L'axe collabore, en interne, avec les différentes équipes de l'unité mais aussi en soutien pour d'autres laboratoires académiques et industriels.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

En accord avec les recommandations formulées, des collaborations semblent s'être développées mais sont peu explicitées dans le document d'autoévaluation. Le positionnement transversal à l'unité de l'axe s'est concrétisé par huit thèses, impliquant les différentes équipes de Phenix. La valorisation de ces travaux n'est malheureusement pas finalisée, malgré des thèses soutenues depuis quelques années. En phase avec les recommandations sur l'aspect animation scientifique, l'axe a réalisé un séminaire sur les techniques d'imagerie, afin d'explicitier l'apport de celles-ci et participe à une école d'hiver pluriannuelle Multi-scale porous materials.

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'axe

Cet axe traduit un savoir-faire reconnu dans le développement et l'utilisation de traitements d'images et de méthodes de diffusion de rayonnement couvrant une gamme très étendue d'échelles spatiales. Ce savoir-faire est très bénéfique pour les membres de l'unité et le rayonnement de cette dernière, mais la demande d'évaluation de cet axe n'a pas paru très pertinente au comité en raison d'un fonctionnement qui n'est pas celui d'une équipe.

Points forts et possibilités liées au contexte

L'axe est impliqué dans différentes thèses des trois équipes de Phenix. L'axe apporte une aide pour les demandes de temps de faisceaux aux grands instruments, la préparation des expériences et leur analyse, ce qui est une réelle plus-value pour l'unité. L'acquisition d'un banc SAXS, intégré dans les plateformes de SU, est une occasion notable pour l'unité.

L'axe dispose d'un savoir-faire original et reconnu dans l'utilisation concertée d'informations structurales acquises dans les espaces réels et réciproque, en combinant différents types de rayonnements et en couvrant les échelles micro à macroscopiques.

L'axe a participé à la publication d'articles, dans des journaux à fort retentissement, comme Nature communication et JACS, intégrant l'apport de l'imagerie dans la compréhension des milieux complexes.

Points faibles et risques liés au contexte

Le contour de l'axe est peu clair en particulier au sujet des personnels impliqués et de la structuration.

La production de l'axe est faible, en ce qui concerne les publications, les activités de valorisation et de communication. L'axe a peu d'activité d'animation scientifique spécifique au sein de l'unité.

Analyse de la trajectoire de l'axe

Les projets instrumentaux sont très ambitieux (DDM, XPCS), et s'adossent au développement de méthodes originales de suivi temporel de la dynamique de milieux colloïdaux qui permettront de répondre à des défis liés à l'imagerie et à la diffusion de rayonnements dans des milieux opaques et confinés, en lien fort avec les activités croisées des équipes de l'unité.

RECOMMANDATIONS À L'AXE

Le comité recommande à l'unité de renforcer les actions de communication en interne autant qu'en externe afin de valoriser au mieux son savoir-faire.

Le comité recommande d'intégrer l'activité associée à l'axe dans les points forts et différenciants de l'unité.

DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

DATES

Début : 2 octobre 2023 à 8h45

Fin : 3 octobre 2023 à 17h00

Entretiens réalisés en présentiel

PROGRAMME DES ENTRETIENS

Lundi 2 octobre 2023

08h45	Présentation du comité d'experts Hcéres
09h00	Bilan et trajectoire de l'unité
09h20	Discussions
09h50	Bilan et trajectoire de l'équipe CIN
10h10	Discussions
10h40	Pause
10h55	Bilan et trajectoire de l'équipe ELI
11h15	Discussions
11h45	Bilan et trajectoire de l'équipe MEM
12h05	Discussions
12h35	Huis clos du comité et pause méridienne
14h00	Bilan et trajectoire de l'axe transversal 1 (RMN)
14h10	Discussions
14h30	Bilan et trajectoire de l'axe transversal 2 (imagerie)
14h40	Discussions
15h00	Présentation des activités des services communs ou mutualisés (gestion, plateformes, ateliers, etc.)
15h20	Pause à huis clos du comité
15h40	Huis clos du comité avec les C et les EC
16h20	Huis clos du comité avec les doctorants et les post-doctorants
17h00	Huis clos du comité
20h00	Dîner à huis clos du comité

Mardi 3 octobre 2023

08h30	Visite du laboratoire, des équipements et des plateformes
10h00	Pause
10h15	Huis clos du comité avec les PAR
10h55	Huis clos du comité avec les responsables d'équipes
11h35	Huis clos du comité avec les tutelles
12h15	Session « poster » et buffet
14h00	Huis clos du comité avec la direction
14h30	Huis clos du comité
17h00	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 1^{er} février 2024

Objet : Rapport d'évaluation PHENIX – Physico des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux

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 « PHENIX ».

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)