



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

Section des Unités de recherche

Évaluation de l'AERES sur l'unité :  
Structure Propriétés Modélisation des Solides  
SPMS

sous tutelle des  
établissements et organismes :

École Centrale Paris

Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS



Janvier 2014



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

Section des Unités de recherche

*Pour l'AERES, en vertu du décret du 3  
novembre 2006<sup>1</sup>,*

- M. Didier HOUSSIN, président
- M. Pierre GLAUDES, directeur de la section  
des unités de recherche

*Au nom du comité d'experts,*

- M. Mario MAGLIONE, président du  
comité

---

<sup>1</sup> Le président de l'AERES « signe [...], les rapports d'évaluation, [...] contresignés pour chaque section par le directeur concerné » (Article 9, alinea 3 du décret n°2006-1334 du 3 novembre 2006, modifié).



# Rapport d'évaluation

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.

Nom de l'unité :	Structure Propriétés Modélisation des Solides
Acronyme de l'unité :	SPMS
Label demandé :	UMR CNRS 8580
N° actuel :	UMR CNRS 8580
Nom du directeur (2013-2014) :	M. Jean Michel KIAT
Nom du porteur de projet (2015-2019) :	M. Guilhem DEZANNEAU

## Membres du comité d'experts

Président : M. Mario MAGLIONE, Université de Bordeaux

Experts :

- M. Hervé CAILLEAU, Université de Rennes (représentant du CNU)
- M. Carlo GATTI, CNR-ISTM, Milan, Italie
- M. Jean-Claude GRENIER, Université de Bordeaux
- M. Christian MASQUELIER, Université de Picardie Jules Verne
- M. Philippe THOMAS, Université de Limoges (représentant du CoNRS)

Délégué scientifique représentant de l'AERES :

M. Marc DRILLON

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

M. Philippe CAVELIER, CNRS

M<sup>me</sup> Estelle IACONA, ECP

M. Jean-François TASSIN, Institut de Chimie, CNRS



## 1 • Introduction

### Historique et localisation géographique de l'unité

Le SPMS a été fondé en 1999 par la fusion de deux unités de recherche associées au CNRS (URA), le «Laboratoire de chimie-physique du solide» et le «Laboratoire de physico-chimie moléculaire», et une équipe de recherche ECP, «Structures électroniques et modélisation des milieux denses». Il est dirigé depuis 2002 par M. Jean-Michel KIAT, directeur de recherches au CNRS. Il est localisé au sein de l'École Centrale de Paris à Châtenay Malabry.

### Équipe de direction

M. Jean-Michel KIAT, directeur ; M. Guilhem DEZANNEAU, directeur-adjoint

### Effectifs de l'unité

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	12	12
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés		
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)	13	13
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)		
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>25</b>	<b>25</b>

Effectifs de l'unité	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	16	
Thèses soutenues	12	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	4	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	10	



## 2 • Appréciation sur l'unité

### Avis global sur l'unité

Le laboratoire SPMS, créé il y a une quinzaine d'années, est reconnu internationalement pour ses compétences en résolution structurale et en modélisation des solides au service d'une meilleure compréhension des propriétés physiques. Le comité d'experts juge de manière très positive le bilan du laboratoire. Après trois mandats, la direction de l'unité change pour le prochain contrat et la structure des équipes se transforme passant de 4 opérations scientifiques à trois axes. Le comité d'experts émet un avis favorable sur ces évolutions et considère que le laboratoire est bien placé pour affirmer ses spécificités au sein d'un contexte local lui aussi en pleine évolution.

### Points forts et possibilités liées au contexte

La productivité scientifique globale du SPMS est de tout premier plan, tant du point de vue quantitatif que qualitatif surtout si on la rapporte au nombre de chercheurs et d'enseignants-chercheurs. Au-delà des conférences invitées dans les congrès, la reconnaissance internationale du laboratoire se traduit par de nombreuses collaborations bi-latérales, donnant lieu à un nombre élevé de publications en commun (80 % des publications avec des co-auteurs extérieurs au laboratoire). L'implication des enseignants-chercheurs à tous les niveaux (formation initiale des ingénieurs, masters, école doctorale) se traduit par un fort dynamisme en termes de formation par la recherche. Reconnaisant à la fois l'impact international des recherches et cette dynamique de formation, la direction de l'École Centrale apporte un soutien appuyé au laboratoire par le financement de thèses et des crédits mi-lourds récurrents. Ceci permet simultanément de soutenir des sujets de rupture et de contribuer de manière déterminante aux infrastructures de recherche. De même, l'Institut de Chimie du CNRS a fait récemment des efforts significatifs en termes de ressources humaines. Lors de l'évaluation, le comité d'experts a été très impressionné par l'implication très positive des ITA dans la vie collective du laboratoire au service des activités de recherche et de formation. Ce potentiel est un élément déterminant pour le laboratoire surtout si on considère que le nombre d'ITA est équivalent au nombre de chercheurs et d'enseignants-chercheurs.

Ouvert sur son environnement, le SPMS formalise des interactions pérennes avec différents partenaires : laboratoire commun CARMEN avec le CEA, plateforme de caractérisation avec Schlumberger, essaimage de start-ups (NANO, ...). Dans le contexte évolutif de restructuration de la recherche au sud de Paris, certains membres du SPMS sont à l'initiative de projets structurants de grande ampleur : IDEX Matériaux innovants et MABIO, projet Oxytronique. Ces projets permettront d'affirmer la spécificité de SPMS et d'aborder sereinement deux échéances importantes : la création de l'École commune Centrale Supélec en 2015 et le déménagement sur le plateau de Saclay à compter de 2017.

### Points faibles et risques liés au contexte

Si la production scientifique est indubitablement de tout premier plan, on peut noter que la majorité des publications collaboratives implique un seul membre du SPMS avec un ou plusieurs partenaires extérieurs. Ceci traduit l'excellence scientifique et le dynamisme des chercheurs mais aussi un manque relatif de coopération scientifique en interne. Par ailleurs, les collaborations scientifiques internationales s'inscrivent en général dans un cadre bi-latéral non formalisé par un accord pérenne et elles sont ainsi peu financées. Il faudra certainement aller au-delà.

Les évolutions en cours sur le plateau de Saclay sont porteuses de synergie scientifique entre partenaires de tout premier plan mondial. Dans ce contexte, il est nécessaire que le SPMS se positionne en élaborant une stratégie scientifique claire. Pour conserver ses spécificités et sa cohérence scientifique, principalement basées sur l'analyse structurale et la modélisation des matériaux, il doit exploiter au maximum ses atouts avec plus d'interactions entre les axes et d'ouvertures au-delà des zones de confort. Ceci nécessitera certainement de s'attaquer à certaines rigidités internes. C'est la condition pour que les projets structurants dans lesquels le laboratoire s'engage se traduisent par des coopérations équilibrées. Ce commentaire vaut pour les équipes de recherche communes que le SPMS a mises en place depuis de nombreuses années.



## Recommandations

Sans l'ombre d'un doute, le comité d'experts encourage les chercheurs du SPMS à poursuivre leurs collaborations externes qui sont porteuses d'innovations scientifiques et qui font la reconnaissance du laboratoire au plan international. Parallèlement, il s'agit de renforcer les interactions scientifiques au sein du laboratoire, au-delà du partage nécessaire mais non suffisant de dispositifs expérimentaux. Si on prend par exemple le cas de l'analyse structurale fine des matériaux, on constate que cette thématique traverse l'ensemble des axes de recherche du laboratoire mais qu'elle donne lieu à peu de projets communs et de publications co-signées. Il en est de même pour la modélisation multi-échelle des matériaux. Il y a encore beaucoup de marges de progression et il y a nécessité d'un renforcement des projets collaboratifs internes, comme ceux en cours d'évaluation entre l'axe 1 et l'axe 2 d'une part et entre l'axe 1 et l'axe 3 d'autre part. Pour permettre l'émergence de tels projets, il faut à l'évidence renforcer les échanges scientifiques dans le laboratoire. De ce point de vue, la mise en place d'un conseil scientifique se réunissant très régulièrement permettra à la fois de susciter les échanges scientifiques fréquents et d'aider à la mise en place de projets communs.

La restructuration interne du laboratoire passant de quatre opérations scientifiques à trois axes de recherche répond à une logique scientifique (regroupement thématique), à une nécessité organisationnelle et à la demande de la précédente évaluation AERES il y a cinq ans. Il convient que ce regroupement ne reste pas formel et qu'il se traduise par une véritable synergie dans le partage de compétences et dans les échanges scientifiques.

D'autre part, pour pérenniser les multiples collaborations internationales qui sont très majoritairement bilatérales, il est fondamental que le SPMS s'engage dans la construction de réseaux internationaux en particulier européens. Si les contributions dans le cadre de la formation sont très notables (ERASMUS MUNDUS, Centrale Pékin,...), il faut que le laboratoire s'implique davantage dans des projets de recherche à l'échelle européenne. Il s'agit non seulement de confirmer sa visibilité internationale mais aussi de diversifier les sources de financement à un moment où de nouvelles contraintes budgétaires voient le jour.



### 3 • Appréciations détaillées

Les appréciations détaillées ci-dessous ne sont ni exhaustives ni la somme ou la moyenne des appréciations présentées plus loin équipe par équipe. Elles résultent de la lecture globale du rapport par l'ensemble des membres du comité d'experts ainsi que des présentations et discussions à l'occasion de la visite. L'analyse quantitative équipe par équipe est détaillée dans la partie 4 ci-dessous.

#### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Avec certaines disparités entre opérations scientifiques, la production scientifique du SPMS est globalement excellente. Elle traduit des avancées scientifiques dans les domaines d'expertises du laboratoire : analyse structurale avancée, modélisation multi-échelle des matériaux, mesure de propriétés, développements théoriques. Quantitativement, le nombre de publications est d'environ 3 par chercheur et par an, même si le calcul est rendu difficile par la prise en compte des collaborateurs externes. Qualitativement, les articles sont publiés à la fois dans les journaux du domaine et dans des revues généralistes à très haut facteur d'impact (Nature, Science, Nature Materials, Nature Physics, Physical Review Letters). Ce point est notable car les thématiques développées au SPMS ne se prêtent pas spontanément à des articles dans de telles revues. Même si certains de ces articles résultent de collaborations, une proportion non-négligeable des publications est portée par un membre du SPMS en tant qu'auteur correspondant.

Par leur invitation à des congrès internationaux et en organisant des sessions lors de congrès majeurs, les chercheurs du SPMS participent concrètement aux débats internationaux les plus actuels. Cette activité intense permet d'initier et de développer les nombreuses collaborations bi-latérales déjà mentionnées.

#### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Au niveau international, le SPMS formalise ses collaborations scientifiques sous forme de réseaux bi-latéraux qui permettent de financer des déplacements et des séjours (Japon, USA, Inde, Chine,...). Au plan national, le SPMS est porteur de nombreux projets ANR avec un ratio projets/chercheurs nettement plus élevé que pour la moyenne des laboratoires du domaine. Au plan local, certains chercheurs du SPMS font preuve d'un réel dynamisme pour porter des projets de grande ampleur (en particulier IDEX) permettant d'anticiper la restructuration en cours de la recherche à Paris Sud. Ce dynamisme s'inscrit dans la poursuite d'une politique de long terme s'appuyant sur des équipes de recherche communes (CEA, faculté de Pharmacie) et sur l'implication de collaborateurs extérieurs.

Le laboratoire est bien représenté dans les instances internationales chargées de l'organisation de congrès majeurs et dans les réseaux nationaux tels que les GDR CNRS. Les invitations de professeurs et chercheurs au SPMS sont exceptionnelles à la fois en termes d'excellence scientifique des invités et de durée des séjours (jusqu'à 6 mois en continu). Il faut souligner le soutien très positif de la direction de l'École Centrale dans ce domaine.

#### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

De par sa localisation au sein d'une Grande École d'Ingénieur renommée, le SPMS est en contact avec des ingénieurs de haut niveau qui sont au cœur de la création d'activités économiques. Il a cependant fallu une action volontariste pour établir des liens forts et pérennes avec des entreprises. C'est le cas de la start-up NANOIE lancée lors du mandat précédent et qui semble avoir atteint son régime de croisière. De même, les relations avec le grand groupe industriel Schlumberger dépassent le niveau de projets de recherches communs pour aller vers un partage de moyens en particulier avec la mise en place d'une plateforme de projets au laboratoire ouverte aux ingénieurs de l'entreprise.

La relation de longue date avec le CEA n'est pas à proprement parlé de l'ordre du transfert mais elle a des conséquences importantes dans le domaine de la compréhension des mécanismes au sein des combustibles nucléaires et aussi dans le développement méthodologique en diffraction des rayons X (notamment sur couches minces) qui peuvent être étendus à de nombreux matériaux.

Sur toutes ces actions de transfert, l'implication des personnels ITA du SPMS est fondamentale en particulier dans la mise en forme des nanomatériaux, dans les études de propriétés et dans les caractérisations structurales innovantes.



### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'unité

Le laboratoire est actuellement organisé en quatre Opérations Scientifiques, mais deux d'entre elles ne sont constituées qu'autour d'un seul chercheur permanent, avec cependant un ou des collaborateurs extérieurs. L'équipe de direction a fait des efforts constants pour renforcer les interactions entre ces OS. Rejoignant les préconisations du précédent comité d'évaluation AERES, le nouveau projet ne comprend maintenant que 3 axes suite à la fusion des OS1 et OS4 dans un axe unique. Si cette fusion est tout à fait justifiée, il faudra qu'une véritable dynamique de rapprochement se mette en place et que la nouvelle direction mette tout en œuvre pour qu'elle se traduise dans les faits.

La mutualisation des équipements expérimentaux sous la responsabilité des IT est un point fort du SPMS et le comité d'experts encourage la nouvelle direction à généraliser ce mode de fonctionnement à tous les dispositifs.

L'organisation du laboratoire, à taille humaine, permet une mobilité entre équipes. C'est ce qui s'est produit au cours du mandat précédent pendant lequel un chercheur a changé d'OS avec succès.

L'animation scientifique du SPMS se base sur des échanges informels et sur l'ouverture de certaines réunions des OS aux autres OS. Il est nécessaire de renforcer l'animation scientifique transversale et donc de charger un membre du laboratoire de cette fonction. Ceci est d'autant plus important que l'unité va être confrontée à de nouveaux défis auxquels elle devra répondre de façon cohérente en affirmant bien son positionnement, que ce soit au niveau de la structuration Paris-Saclay ou pour répondre aux nouvelles contraintes budgétaires suite à l'évolution probable des sources de financement.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Les enseignants-chercheurs du SPMS ont des responsabilités très importantes à tous les niveaux de la formation (département Physique, Masters, École Centrale de Pékin, chargé de mission École Doctorale). Dans le contexte d'une école d'ingénieurs telle que l'École Centrale, cette implication permet d'entretenir des liens étroits avec les étudiants-ingénieurs dès le début de leur cursus. Par exemple, l'origine de la start-up NANOE mentionnée plus haut résulte largement de cette proximité.

Un des membres du SPMS porte actuellement un projet de Master ERASMUS Mundus qui, s'il se mettait en place, permettrait de renforcer la visibilité internationale de la formation par la recherche.

L'École Doctorale 237 dont le SPMS dépend regroupe 7 autres laboratoires du site et 2 laboratoires rattachés. Le nombre de doctorants actuels au SPMS est de 19 pour un total de 261 pour toute l'ED. Le nombre moyen de doctorants par HDR pour toute l'ED est de 2,8, ce qui est à peu près le ratio actuel pour le SPMS. Un point très intéressant concerne la sélection des doctorants sur allocation ministérielle par une procédure d'appel d'offres interne à l'ED. Grâce à son dynamisme et à son attractivité, le SPMS obtient chaque année une à deux allocations de recherche par ce biais. Il faut souhaiter que ce système soit préservé lors de la restructuration des écoles doctorales résultant de la création de Centrale Supélec et de l'Université Paris Saclay.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

La nouvelle direction, qui est en place depuis janvier 2014 avec l'approbation des tutelles, se propose de poursuivre sur la voie engagée par la direction précédente tout en apportant quelques modifications dans le fonctionnement du laboratoire. Le projet présenté par le nouveau directeur lors de la visite est ambitieux sur ce dernier point, des objectifs sont fixés et des indicateurs de réussite proposés.

Au titre de la continuité, les thématiques scientifiques sont globalement similaires à celles du mandat précédent, ce qui correspond à la fois à des sujets porteurs au niveau international et aux compétences reconnues du laboratoire. Ce socle de compétences s'appuie en partie sur la mise en commun des dispositifs expérimentaux sous la responsabilité des ITA. Il convient de généraliser ce partage qui peut permettre un renforcement des interactions scientifiques internes. De nouvelles ouvertures intéressantes sont aussi proposées dans le projet scientifique de chaque axe, et il s'agira de ne pas hésiter à prendre quelques risques pour élargir la reconnaissance sur une base plus large afin de répondre aux nouveaux défis sur le plan régional et international.





Concernant les évolutions, la nouvelle direction devra veiller à la cohérence du nouvel axe 1 qui est logique sur le papier mais qui reste à construire. Plus généralement, il est nécessaire de tout mettre en œuvre pour renforcer l'animation scientifique interne et l'émergence de projets communs à plusieurs axes. Le conseil scientifique devra jouer un rôle majeur dans cet objectif. De nombreux facteurs externes vont influencer sur le devenir du laboratoire dans les 5 prochaines années : contraintes budgétaires, tensions sur les postes, déménagement de l'École Centrale, création de l'Université Paris Saclay. Dans ce contexte mouvant, le SPMS a les ressources pour affirmer ses spécificités.



## 4 • Analyse équipe par équipe

### Équipe 1 : OS1

Matériaux fonctionnels pour l'Énergie

Nom du responsable : M. Guido BALDINOZZI

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	1	1
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	3
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	4	4

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	3	
Thèses soutenues	2	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	2	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées		



## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Le groupe CARMEN (Characterization of Materials for Nuclear Energy) est constitué d'un DR CNRS et de 3 chercheurs associés CEA. On note immédiatement le très petit nombre de personnes impliquées dans cette thématique.

Les matériaux étudiés sont  $ZrO_2$ , SiC,  $UO_{2+x}$ , des pyrochlores, des spinelles, et plus récemment des oxydes mésoporeux (en collaboration avec le groupe de C. Sanchez à Paris).

Il faut souligner la qualité des résultats obtenus tant dans l'analyse fine de la structure des matériaux céramiques sous irradiation que dans le développement de l'instrumentation et des données au service de la communauté (notamment en ce qui concerne l'affinement par méthode Rietveld des couches minces).

Les techniques d'expertise développées, en collaboration avec plusieurs laboratoires « grands instruments » (ILL, CIMAP de Caen, SOLEIL, LLB, ...) concernent la mise au point des techniques d'affinements structuraux des données de diffraction en incidence rasante, la réflectométrie des Rayons X, les mesures de transport. Elles témoignent d'une bonne ouverture nationale et internationale (Oak Ridge, ...).

Dans l'ensemble, la production scientifique est bonne : 35 publications pour un groupe de 4 chercheurs avec cependant peu de publications dans des journaux à fort impact (bien que reconnus dans le domaine des matériaux pour le nucléaire), et très peu d'articles en auteur principal. On note tout de même 2 PRL et 1 Appl. Cryst.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Le groupe CARMEN a accueilli un chercheur post-doc (12 mois) en 5 ans et un contrat post-doc est en cours. Un chercheur étranger (Los Alamos, USA) est invité régulièrement (trois séjours de 1 mois).

On note peu de participations à des projets ANR et peu de ressources financières apportées au laboratoire via cette thématique. Le groupe participe à un LabEx (Palm), à un GNR et un GDR mais n'est pas leader ou porteur dans des réseaux. On note l'organisation régulière d'un symposium au Fall Meeting MRS de Boston.

Ainsi, il n'est pas surprenant de constater un nombre très faible de conférences/séminaires invités et l'absence de prix ou distinctions.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

L'OS1 concerne une activité d'enjeu certain pour le CEA qui consacre 3 personnes à ces recherches. Le responsable de l'équipe est très fortement impliqué au CEA. Cette interaction formalisée et pérenne sera certainement renforcée par la mise en place du campus Paris Saclay. En outre, les thématiques abordées concernent la compréhension des mécanismes de diffusion et de stabilité au sein du combustible nucléaire, une problématique d'une grande actualité au CEA et dans toute la filière.

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

L'organisation et la vie de l'équipe ne sont pas mentionnées dans le rapport, cette équipe n'étant constituée que d'un DR CNRS et de trois chercheurs associés en poste au CEA. Les 4 membres de cette équipe ne semblent pas être impliqués dans la vie et les responsabilités collectives de l'unité de recherche. Un des membres du laboratoire commun CARMEN est responsable de l'OS1 du laboratoire.



### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Il s'agit là du point faible de cette équipe qui affiche 2 thèses soutenues en 5 ans et 3 en cours. Cette faiblesse était encore plus notoire lors de la dernière évaluation puisqu'à cette époque aucune thèse n'était mentionnée pour cette OS. On note donc un réel progrès dans ce domaine.

Il apparaît également que les doctorants sont financés à 100 % par le CEA ce qui paraît peu logique et peu valorisant pour l'unité de recherche, d'autant plus qu'aucune publication ne mentionne les noms des doctorants/docteurs en premier auteur; ceci devrait être corrigé.

La participation des membres de l'équipe à la formation en Master est marginale.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Le projet consiste tout d'abord à afficher un regroupement des personnels des OS1 et OS4 en un axe unique « Matériaux fonctionnels pour l'énergie », afin d'aboutir à une meilleure lisibilité et d'atteindre une masse critique plus importante. Il s'agit cependant, de nouveau, de seulement 2 chercheurs CNRS affectés en propre à l'unité et de trois chercheurs associés CEA (2 IR, 1 C).

Le projet, très ambitieux est une suite logique des études en cours, avec pas moins de 6 sous-axes de recherche : céramiques denses soumises à l'irradiation, céramiques mésoporeuses, modifications d'interfaces par irradiation, caractérisation aux grands instruments, formulation de nouveaux matériaux pour les technologies de l'hydrogène, modélisation des matériaux pour l'énergie.

Malgré les précédentes recommandations de l'AERES, les deux OS n'ont cosigné aucun article dans la période 2008-2013. Ceci laisse augurer des difficultés sérieuses pour ce regroupement si un gros effort n'est pas fourni pour homogénéiser, voire simplifier les thématiques. Ces remarques concernent évidemment les deux OS1 et OS4.

### Conclusion

#### ▪ *Points forts et possibilités liées au contexte :*

Les recherches menées dans l'OS1 sont de grande importance scientifique et technologique pour le CEA et menées avec grand soin, aboutissant à une bonne visibilité internationale.

#### ▪ *Points faibles et risques liés au contexte :*

Les personnels de l'OS1 (CNRS et CEA) semblent concernés par leur seule activité « CEA » et interagissent très peu avec les autres membres du laboratoire.

#### ▪ *Recommandations :*

Renforcer les interactions au sein du nouvel axe 1 et avec les autres thématiques du laboratoire en particulier dans la mise en œuvre de la diffraction des rayons X, tant en instrumentation que dans le traitement des données.



## Équipe 2 : OS2

## Matériaux diélectriques pour composants électroactifs

Nom du responsable : M. Brahim DKHIL

Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	3	3
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	2	2
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	2	2
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>7</b>	<b>7</b>

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	8	
Thèses soutenues	6	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	3	
Nombre d'HDR soutenues		
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées		



## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

Cette équipe dynamique est formée de 3 enseignants-chercheurs et 2 chercheurs CNRS. Elle bénéficie, depuis de nombreuses années, d'une reconnaissance internationale dans son domaine d'expertise, les matériaux ferroïques. L'étude de ces matériaux est en quelque sorte le cœur de métier historique du laboratoire SPMS et cette équipe est actuellement, au niveau international, l'une des plus performantes dans son domaine de recherche. Elle s'est d'ailleurs bien renouvelée avec des recrutements de qualité assez récents. La démarche scientifique appliquée est rigoureuse et basée sur la compréhension des relations structure à différentes échelles/ microstructure / propriétés. Ceci a permis d'obtenir des résultats marquants notamment sur les ferroélectriques, les relaxeurs, les piézoélectriques, les diélectriques pour condensateurs, les diélectriques à propriétés géantes et les multiferroïques. La force de cette équipe réside également dans la maîtrise de l'élaboration et de la nanostructuration des matériaux, leur caractérisation structurale fine et multi-échelle, et ce à la fois au moyen d'instruments de laboratoire, par l'utilisation indispensable des grands instruments (ESRF, Soleil, LLB, ILL), ainsi que dans la modélisation à l'échelle atomique de leurs propriétés. Sur le plan fondamental, on peut noter aussi le développement d'approches théoriques qui se situent tout à fait sur le front d'idées physiques nouvelles qui émergent dans ce domaine, comme la symétrie de jauge par exemple.

La production scientifique est impressionnante avec un total de 124 articles (2008 : 12; 2009 : 33; 2010 : 22 ; 2011 : 20 ; 2012 : 26 ; 2013 (jusqu'en juin) : 11). La qualité des journaux est excellente (Nature Materials (1), Nature Physics (1), Phys. Rev. Lett., Phys. Rev. B , J. Applied Phys., Appl. Phys. Lett., Angew Chem Inter., avec en plus un Science et un Nature Materials récemment acceptés). Il faut également signaler le nombre conséquent de publications rédigées avec des personnes extérieures au laboratoire ce qui témoigne de collaborations efficaces dans le domaine et in fine de la reconnaissance internationale de l'équipe.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Cette équipe, de par son expertise forte et de longue date des matériaux ferroïques au sens large, bénéficie d'une reconnaissance nationale et internationale comme en témoignent les nombreuses publications en commun avec les laboratoires extérieurs. L'un des membres est chercheur associé au LLB depuis 25 ans et l'équipe obtient régulièrement des temps d'expériences sur grands instruments (ESRF, Soleil, ILL, LLB).

Le rayonnement scientifique se traduit par la présentation de 64 conférences invitées dans des congrès internationaux, dont 43 présentées personnellement par les membres de l'équipe, ainsi que par la qualité des revues dans lesquelles les articles sont publiés (dont 2 Nature Materials, 1 Nature Physics et 1 Science).

L'équipe participe à deux labEx : de manière importante au labEx NanoSaclay et à un degré moindre au labEx Lasips. Elle participe activement au GDR matériaux multiferroïques et au RTRA Triangle de la Physique. Les membres de l'équipe ont participé ou vont participer à l'organisation de plusieurs colloques et workshops dont certains en tant que chairman (Matériaux pour l'énergie optique, Journées de la Neutronique 2014).

Un des membres de l'équipe est expert pour le Department of Energy (USA) et est membre du Steering Comitee de l'European Meeting of Ferroelectricity .

Six thèses ont été soutenues et huit sont actuellement en cours (avec des financements diversifiés tels que Allocation ministérielle, Chinese Science Council, CIFRE avec la start-up NanoE, CIFRE avec la société Schlumberger) ce qui est tout à fait satisfaisant. L'équipe a ainsi prouvé qu'elle pouvait obtenir des financements « hors ministériels » (CIFRE et Chinese Science Council).

L'attractivité de cette équipe a permis l'accueil de 7 professeurs invités depuis 2008 dont certains plusieurs années de suite (équivalent à 25 mois de professeurs invités au total, ce qui est remarquable).



Le rayonnement s'est également traduit par des succès dans des projets nationaux (participation à 3 projets ANR blanc : Novel magnetoelectric interfaces for low power spintronics, Single crystal dielectric thin films for integrated capacitors, Investigation of pressure on perovskites), européens (ERA-NET, PICS avec l'université de Rostov on Don en Russie, et des projets bi-latéraux avec l'Allemagne et la Slovénie) et à l'international (Projet Egide bilatéral avec l'Université de Waseda au Japon).

L'équipe a de plus eu une activité contractuelle conséquente avec la gestion de 11 contrats de recherche dans la période 2008-2013.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

Cette équipe dynamique présente une ouverture importante vers le monde socio-économique. Elle est à l'origine de la création d'une start-up (NANOE) avec laquelle elle collabore toujours activement (projet de création d'une unité mixte). Elle développe des partenariats affirmés et privilégiés avec des grands groupes industriels (Thales, ST Microelectronics, Ferroperm, Schlumberger..) ce qui explique l'importance de son activité contractuelle. Le partenariat avec la société Schlumberger devrait encore s'intensifier dans les prochaines années sachant que des locaux spécifiques vont être dédiés au SPMS à l'accueil de chercheurs de cette société.

Cette équipe a également le souci de fédérer les acteurs scientifiques autour de grandes thématiques scientifiques. Un de ses membres est co-porteur avec un collègue de l'Université de Versailles Saint Quentin (UVSQ) d'un projet ambitieux d'IDEX « Institut des Matériaux Innovants », qui à terme pourrait rassembler près de 700 personnes sur le plateau de Saclay, et d'un projet dédié à la Nano-Oxytronique au sein du LabEx NanoSaclay qui concernera une centaine de personnes.

En matière d'environnement culturel, on peut souligner qu'un des membres de l'équipe est organisateur des « Cafés Sciences » de l'École Centrale Paris.

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Même s'il est difficile d'évaluer l'organisation et la vie scientifique d'une équipe de taille modeste, on peut cependant noter de façon très positive l'existence d'un point hebdomadaire et d'un « FerroMeeting » bi-hebdomadaire (mini-cours, articles partagés, retour de conférences, ...). Ceci participe certainement au dynamisme de l'équipe et au rapprochement de ses membres vers des objectifs scientifiques communs.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

La formation par la recherche est remarquable. Cette équipe est fortement impliquée dans l'enseignement à l'ECP et l'établissement n'hésite pas à faire appel à ses membres pour leurs compétences dans le domaine. Un des membres de l'équipe est responsable de l'option physique et applications à l'École Centrale Paris. Un autre est impliqué dans un Erasmus Mundus (E-beam).

En matière de formation doctorale, l'équipe participe activement à la vie de l'école doctorale, un de ses membres étant chargé de mission pour la formation des doctorants. Six thèses ont été soutenues dans la période et sept sont actuellement en cours ce qui est important vu le potentiel humain en encadrement (3,5 ETP chercheurs).



## Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Dans le cadre de la réorganisation du SPMS, l'OS2 devient l'axe 'Ferroïques Avancés' et son périmètre reste inchangé. Mis en place depuis 2 ans, 3 thèmes sont développés : (i) design de ferroïques, (ii) multiferroïques et (iii) ferroEnergie. Les activités sont clairement dans la continuité des études engagées ces dernières années et qui ont fait l'excellence de l'équipe dans le domaine. L'ambition est toujours de découvrir de nouvelles fonctionnalités afin de trouver de nouvelles applications dans les domaines sociétaux comme l'électronique et l'énergie. Le fil conducteur est le même que celui appliqué avec succès par le passé à savoir comprendre l'origine microscopique (ordre et désordre chimique, effets de taille, défauts...) des phénomènes mis en jeu afin de pouvoir améliorer les performances des matériaux élaborés. Cependant, on peut remarquer qu'en plus de ces développements sur les aspects les plus prometteurs des travaux précédents on voit émerger des ouvertures nouvelles qui pourraient encore élargir la reconnaissance de l'équipe. Par exemple, un vrai défi serait de pouvoir concrétiser sur le plan expérimental l'arrivée de nouvelles approches théoriques. Un autre défi pourrait être le rapprochement avec la communauté des effets photo-induits coopératifs. Tout ceci donne une assise solide et devrait renforcer une démarche dynamique pour se positionner au sein du périmètre Paris-Saclay.

## Conclusion

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

Cette équipe possède une expertise forte dans le domaine des matériaux ferroïques avec une démarche rigoureuse de compréhension des relations structure à différentes échelles / microstructure / propriétés dans le but d'améliorer et/ou de modifier, moduler, ces propriétés.

Elle bénéficie d'un rayonnement scientifique à l'international qui résulte de la qualité des recherches développées, et se traduisant par de nombreuses conférences invitées et une production scientifique conséquente et de haut niveau, avec la plupart des articles publiés, et continuant d'être publiés, dans des revues à haut facteur d'impact.

Les activités de recherche sont bien équilibrées entre recherche fondamentale et activités contractuelles avec des partenaires privilégiés (par exemple Thales, Schlumberger) et il faudra veiller à bien préserver cet équilibre.

Le projet de recherche se situe dans la continuité des thèmes développés depuis plusieurs années, mais aussi avec des ambitions nouvelles. Tout ceci semble réaliste vu l'expertise et les moyens disponibles (tant en élaboration, caractérisations et modélisation) et devrait lui assurer un positionnement de premier choix dans le périmètre Paris-Saclay.

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

L'équipe n'a probablement pas suffisamment exploité des interactions au-delà de sa communauté des ferroïques. Son excellence et sa dynamique devraient lui permettre d'affirmer plus d'ambitions sur une base plus large.

### ▪ *Recommandations*

L'unité et les tutelles doivent rester très attentives à cette équipe d'excellence, en pleine évolution, et appuyer sa démarche dynamique vers Paris-Saclay et l'international.





### Équipe 3 : OS3

### Matériaux Modèles d'Intérêt Pharmaceutique

Nom du responsable : M. Nour Eddine GHERMANI puis M. Pietro CORTONA

### Effectifs

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés	5	5
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés		
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	3	3
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>8</b>	<b>8</b>

Effectifs de l'équipe	Nombre au 30/06/2013	Nombre au 01/01/2015
Doctorants	5	
Thèses soutenues	-	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	5	
Nombre d'HDR soutenues	-	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées		



## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

La production scientifique de l'OS3 reflète la focalisation thématique de cette équipe sur les développements méthodologiques. Ceux-ci sont basés sur une analyse détaillée de faits physiques nécessitant de tels développements. La production est globalement de très bonne qualité et d'une grande originalité.

Les applications ont souvent été sélectionnées pour tester les méthodes développées plutôt qu'en fonction de questions spécifiques à des systèmes ou des matériaux. Les méthodes proposées sont d'une grande importance dans chacun de leur domaine et elles représentent des avancées significatives du point de vue fondamental et du point de vue pratique. Les outils de modélisation sont dans certains cas déjà disponibles pour la communauté scientifique.

D'après les citations recueillies, les publications de cette équipe sont bien accueillies par la communauté. Les travaux sont, en général, publiés dans des revues à très bon, voire excellent facteur d'impact (un article dans Science). Les journaux ont été sélectionnés de manière à assurer une dissémination vers les communautés scientifiques concernées. Le nombre d'articles publiés par l'OS3 (39) est relativement limité, probablement en raison du caractère fondamental et méthodologique des recherches. Une appréciation spécifique des thématiques scientifiques de l'OS3 est donnée ci-dessous.

Nouvelles fonctionnelles pour la DFT : c'est un résultat particulièrement positif qui a atteint une maturité réelle au cours des cinq dernières années. La collaboration avec les chercheurs de l'ENSCP est particulièrement productive. Des nouveaux potentiels d'échange-corrélation à haute performance et faible temps de calcul ont été conçus et testés avec succès pour différentes classes de fonctionnelles DFT. L'insertion de ces fonctionnelles dans la librairie LIBXC est décisive pour être testées par différentes plateformes ab initio et appliquées à différents matériaux et à différents niveaux d'agrégation. Les articles publiés, à faible nombre d'auteurs, démontrent le rôle moteur du SPMS et ont un impact réel sur la communauté. Un résultat marquant pour le développement de nouvelles fonctionnelles hybrides a été publié récemment dans J. Chem. Phys.. En résumé, cette thématique est développée de manière raisonnée en se basant sur une approche physique pertinente.

Analyse simultanée de différents types de résultats expérimentaux : cette thématique a considérablement progressé depuis la dernière évaluation. Dans le cadre du projet ANR blanc CEDA, coordonné par le SPMS et qui implique une interaction forte avec le CRM2 Nancy et le LLB à Saclay, un progrès décisif a été réalisé vers l'établissement de protocoles réalistes pour l'affinement simultané de données de diffraction des rayons X, de neutrons et de neutrons polarisés. Le code Mollynx développé dans le projet CEDA permet une description détaillée des distributions de charges et de spins dans les composés magnétiques moléculaires. Lorsqu'il sera disponible, cet outil sera très utile à la communauté. Un autre résultat important (31 citations en 2 ans) concerne la modélisation quantique de l'état supraconducteur de cuprates en fonction du taux de dopage. Ce travail publié dans Science est le résultat d'une collaboration internationale pilotée par Spring 8 - Japon et impliquant un chercheur du SPMS. Il faut aussi mentionner la contribution de chercheurs du SPMS à 3 chapitres du récent livre Modern Charge Density Analysis.

Extension de la dynamique moléculaire (MD) à basses températures: la méthode définie pour étendre la gamme d'utilisation de la MD vers le régime des basses températures est nouvelle et efficace. Elle permet d'économiser deux ordres de grandeur en temps de calcul en comparaison des méthodes habituelles et elle introduit un bain thermique quantique (QTB) permettant la mise en œuvre de statistiques quantiques tout en utilisant la MD. Les résultats obtenus dans un cas d'école sont convaincants. Leur publication dans un journal à fort impact (PRL) a déjà été citée 33 fois depuis 2009 et c'est le résultat d'une coopération avec deux équipes EM2C à l'ECP et LSI à l'École Polytechnique. L'extension de la méthode QTB à des systèmes à fort potentiel d'interaction atomique est intéressante pour étudier la diffusion de l'hydrogène dans les matériaux à conduction protonique. C'est un développement potentiellement intéressant pour la thématique « cristallisation et diffraction haute résolution » des équipes OS3 et OS4.



Cristallisation et diffraction à haute résolution : cette thématique est centrée principalement sur les molécules d'intérêt pharmaceutique et biologique et elle est basée sur deux méthodologies. La première, bien établie au SPMS et qui pourrait s'amplifier avec l'arrivée d'un nouveau diffractomètre 4-cercles, concerne l'étude de la densité électronique et les propriétés électrostatiques des composés en comparant les données de diffraction haute résolution et les résultats de calculs ab initio. La seconde, développée avec un autre groupe à l'ECP et avec la faculté de pharmacie, est une technique émergente très intéressante qui utilise un faisceau laser pour induire et amplifier la nucléation non photochimique et contrôler la variété polymorphique des cristaux. Les deux techniques sont très bien adaptées pour l'étude de molécules organiques et des substances médicamenteuses à différentes variétés polymorphiques. Il est clair que ces deux techniques vont être utilisées pour comprendre et contrôler les premières étapes de la nucléation.

Plusieurs bons articles utilisant la première technique ont été publiés dans des journaux à haut facteur d'impact. Bien qu'il soit prématuré d'émettre un jugement définitif, il est important de se poser la question de l'intérêt de la communauté des pharmaciens pour la première méthodologie. Par contre, la seconde méthodologie a, pour le moment, fait l'objet de deux conférences invitées et plusieurs articles sont en préparation mais les résultats ne sont pas encore brevetés.

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Bien qu'elle soit principalement orientée vers le développement méthodologique, cette équipe a coordonné 3 projets ANR ce qui est un très bon résultat, surtout au regard du précédent contrat. Les chercheurs de l'équipe ont été invités en tant que professeur dans des institutions de renom ; un chercheur est membre actif de la commission « Charge Spin and Momentum Density » de l'Union Internationale de Cristallographie et il a organisé un workshop marquant. Des articles ont été publiés avec des instituts français et étrangers reconnus. Le nombre de conférences invitées est impressionnant (50), alors que le nombre de visiteurs étrangers pour ce groupe est limité.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

Concernant les indices de l'utilisation des connaissances et des objets techniques transférés la plus importante production de cette équipe concerne le développement de modèles dont une partie est accessible à la communauté. Un fait notable est aussi le rôle d'un des membres de l'équipe dans les relations scientifiques avec l'Inde.

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Cette équipe est bien structurée d'un point de vue scientifique. L'insertion des activités concernant la dynamique moléculaire avec bain thermique quantique est logique.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

L'implication de cette équipe dans la formation par la recherche est de tout premier ordre. Elle concerne principalement l'ECP avec des membres de l'équipe impliqués dans des responsabilités de haut niveau (directeur du département de Physique, responsable des Masters, organisation du Parcours Recherche, direction des études de l'École Centrale de Pékin,...). Par rapport à la période précédente, l'attractivité de l'équipe s'est nettement améliorée en direction des doctorants et autres stagiaires.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Les développements envisagés pour les cinq prochaines années sont clairement explicités et ils apparaissent comme réalisables. Ils sont dans la continuité des activités actuelles avec un renouvellement correct. Il y a une tendance positive à l'augmentation des collaborations avec des chercheurs prestigieux qui s'inséreront dans le projet d'équipe.



## Conclusion

### ▪ *Points forts et possibilités liées au contexte :*

- recherche de haut niveau ;
- développement de modèles innovants et d'outils de modélisation dans les différents projets mis en œuvre ;
- haut niveau d'implication dans l'enseignement ;
- projets très intéressants : nouvelles fonctionnelles en DFT avec des applications aux solides, dynamique moléculaire à basse température, mise en œuvre de la technique nouvelle de nucléation photochimique assistée par laser ;
- développement d'une plateforme DRX ouverte aux utilisateurs extérieurs qui pourra apporter des ressources et susciter des collaborations ;
- succès aux appels d'offre ANR : trois projets qui sont cependant terminés.

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

Les interactions scientifiques entre les chercheurs de l'OS3 se sont renforcées au cours des cinq dernières années mais les thématiques restent très différentes. C'est potentiellement une richesse mais, en raison du nombre limité de chercheurs, c'est aussi un facteur de risque. Il semble qu'il n'y a pour le moment pas de projet national ou international financé.

Le rôle important du SPMS dans l'affinement simultané de différentes données expérimentales risque de diminuer sans implication forte de personnels sur cette thématique (post-doctorants et doctorants très motivés).

On peut anticiper une diminution de la coopération avec la faculté de pharmacie de Paris Sud ce qui peut créer des problèmes. Ce point n'a pas été résolu durant la visite avec des informations apparemment contradictoires

### ▪ *Recommandations :*

- définir une stratégie pour accroître la cohérence scientifique et profiter de la richesse intrinsèque de l'équipe.
- renforcer les interactions avec l'Axe 1 et l'Axe 2 et transférer les compétences en méthodologie ce qui pourrait aboutir à la participation à des projets internationaux, sur des thématiques à grand potentiel d'application (énergie, matériaux).
- essayer d'augmenter la visibilité des études sur la densité de charge et les propriétés électrostatiques sur les molécules en faisant un effort pour démontrer comment elles peuvent être utiles à la recherche de nouveaux médicaments.



**Équipe 4 :** OS4- Matériaux et Technologies de l'hydrogène

**Nom du responsable :** M. Guilhem DEZANNEAU

**Effectifs**

<b>Effectifs de l'équipe</b>	<b>Nombre au 30/06/2013</b>	<b>Nombre au 01/01/2015</b>
<b>N1</b> : Enseignants-chercheurs titulaires et assimilés		
<b>N2</b> : Chercheurs des EPST ou EPIC titulaires et assimilés	1	1
<b>N3</b> : Autres personnels titulaires (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>N4</b> : Autres enseignants-chercheurs (PREM, ECC, etc.)		
<b>N5</b> : Autres chercheurs des EPST ou EPIC (DREM, Post-doctorants, visiteurs etc.)	1+ 1 coll. CEA	
<b>N6</b> : Autres personnels contractuels (n'ayant pas d'obligation de recherche)		
<b>TOTAL N1 à N6</b>	<b>3</b>	<b>1</b>

<b>Effectifs de l'équipe</b>	<b>Nombre au 30/06/2013</b>	<b>Nombre au 01/01/2015</b>
Doctorants	1	
Thèses soutenues	4	
Post-doctorants ayant passé au moins 12 mois dans l'unité	3	
Nombre d'HDR soutenues	1	
Personnes habilitées à diriger des recherches ou assimilées	1	



## • Appréciations détaillées

### Appréciation sur la production et la qualité scientifiques

L'équipe OS4 est la plus petite équipe de l'unité: elle n'est composée que d'un chercheur CNRS (l'animateur) et un collaborateur du CEA à temps partiel.

La thématique scientifique porte sur les Matériaux et Technologies de l'Hydrogène. La spécificité du groupe est une approche multi-disciplinaire et multi-échelle, combinant expérience et théorie, le but étant de trouver des nouveaux matériaux de "rupture" dans ce domaine technologique.

Les activités scientifiques se subdivisent en diverses sous thématiques liées à des problématiques identifiées comme étant des points durs dans le domaine des piles à combustible.

Une première thématique concerne la recherche de matériaux innovants pour piles à combustible, essentiellement de nouveaux conducteurs protoniques et de nouveaux matériaux de cathodes. Concernant les nouveaux matériaux conducteurs protoniques, le choix s'est porté sur trois familles originales de composés : (i) les stannates de baryum substitués, (ii) les composés  $RE_3NbO_7$  ( $RE = La, Gd, Y, Er, \dots$ ), (iii) les molybdates formulés  $RE_6-xMoO_{12-3/2x}$  ( $RE = La, Gd, Y, Er, \dots$ ) de structure fluorine. Dans tous les cas, un effort de synthèse chimique a dû être fait pour l'obtention de ces nouvelles phases; malheureusement, comme le concluent les auteurs, leurs propriétés de conduction ionique restent modestes et insuffisantes pour une application.

Concernant les matériaux d'électrodes, le but était de comprendre les phénomènes de conduction mixte en relation avec les aspects physico-chimiques en utilisant des techniques appropriées. Les travaux ont porté sur des cobaltites, soit des perovskites "doubles", soit des composés de la famille Ruddlesden-Popper. Ces études ont permis incontestablement à l'équipe d'acquérir des compétences dans le domaine des caractérisations électrochimiques à la fois sur le plan technique (construction de 5 bancs de mesures) et sur le plan théorique. Si les propriétés de ces matériaux restent attractives, elles sont cependant en deçà des spécifications à atteindre pour une application. En revanche, un apport significatif a été réalisé sur la compréhension des propriétés.

Un autre aspect important du travail a concerné l'étude de l'influence de la nanostructuration sur les propriétés de conduction ionique. Ceci a pu être obtenu grâce à la combinaison de synthèse de nano-poudres et du frittage par Spark Plasma. De très belles céramiques denses (voire transparentes) nanostructurées ont été obtenues mais le groupe a montré que la conductivité ionique n'était pas améliorée, permettant ainsi de prendre une part active au débat sur l'intérêt ou non de préparer de tels matériaux dans ces conditions.

La dernière thématique est plus récente; elle traduit une nouvelle orientation au regard probablement des résultats un peu décevants des performances des matériaux étudiés. Elle vient en complément des études précédentes et porte sur la modélisation des propriétés de transport des matériaux étudiés, par une simulation par dynamique moléculaire couplée à des mesures de diffraction de neutrons. Ceci a permis de modéliser la diffusion de l'oxygène dans diverses phases, notamment des conducteurs mixtes, par la méthode de l'entropie maximale. Ces simulations par DFT, ou dynamique moléculaire, ont été aussi réalisées pour les conducteurs protoniques (stannates ou zirconate perovskites). Ces recherches sont originales (très peu de groupes s'y intéressent) et permettent d'obtenir des informations précieuses, voire prédictives.

La production scientifique est remarquable, à savoir 24 publications dans des revues à bon facteur d'impact (comme PRB, J. Mat. Chem., Int. J. Hydrogen Energ.).

### Appréciation sur le rayonnement et l'attractivité académiques

Trois post-doctorants ont été accueillis pour de longues périodes (21 mois ou plus).

Les travaux menés ont été reconnus au travers de nombreux soutiens financiers de l'ANR (4 contrats), d'un projet "jeunes chercheurs" (NANOMAT-SOFC, 2005-2008) sur la thématique nano-poudres, d'un contrat PRES UniverSud, d'un projet CNRS interdisciplinaire, et d'un projet Institut Carnot, contribuant significativement aux ressources de l'unité et démontrant la reconnaissance de l'équipe dans le contexte français.



Au niveau européen, un projet ERaNet-Rus "Proton" vient de débiter, un pas supplémentaire dans une reconnaissance plus large et internationale. Le groupe a donné 7 conférences invitées et de 6 communications, très peu au cours des deux dernières années.

L'expertise acquise par cette équipe lui a également permis de participer aux GDRs PACTE & PACS depuis plusieurs années.

### Appréciation sur l'interaction avec l'environnement social, économique et culturel

Les recherches menées au sein de cette équipe n'ont pas conduit à des innovations ou ruptures, ni à dépôt de brevet ou création de start-up; elles ont essentiellement contribué à la connaissance des phénomènes fondamentaux au sein des matériaux pour piles à combustible.

Beaucoup de travaux ont été menés en collaboration avec des partenaires étrangers de renom, Prof. Tarancon (Espagne), Prof. T. Norby (Norvège), Prof. J. Gale (Australie), ou français (CEA, Cirimat (Toulouse), Rennes...).

### Appréciation sur l'organisation et la vie de l'équipe

Cette équipe ayant un seul permanent (1 CR CNRS), ce critère est difficilement appréciable. A noter cependant la forte contribution de l'animateur dans la vie du laboratoire depuis sa nomination comme directeur-adjoint il y a deux ans.

### Appréciation sur l'implication dans la formation par la recherche

Le nombre de thèses (4 thèses soutenues, une en cours), de post-docs ou stagiaires accueillis au cours de la période de référence témoignent d'un souci de formation des jeunes chercheurs. On retrouve aussi leurs noms en tête des publications et des communications.

### Appréciation sur la stratégie et le projet à cinq ans

Comme demandé lors de l'évaluation précédente, cette opération scientifique sera regroupée avec l'OS1 1 sous la dénomination Axe 1, "Matériaux fonctionnels pour l'Energie". Ce regroupement permettra de constituer un groupe cohérent numériquement significatif.

Du point de vue scientifique, les deux sous-thématiques seront poursuivies :

la recherche de nouveaux matériaux pour piles à combustible : matériaux conducteurs protoniques sous haute pression d'eau (10 bars), thème original et porteur notamment pour l'électrolyse de l'eau, et recherche de nouveaux matériaux de cathode. Une nouvelle thématique est même envisagée, la photocatalyse de l'eau.

les aspects modélisation développés au cours de ces dernières années apparaissent les plus pertinents : la collaboration avec G. GENESTE (collaborateur CEA) d'une part et J. GALE (Australie) d'autre part devrait permettre des avancées intéressantes. Cette thématique semble la plus originale et prometteuse.

L'ensemble de ce programme paraît très ambitieux et on peut s'interroger sur sa réalisation : il nécessitera une collaboration interne, notamment avec du personnel technique, et un renfort en personnel pour cette thématique, par exemple un MdC, serait un plus.

### Conclusion

#### ▪ *Points forts et possibilités liées au contexte :*

L'expertise dans le domaine de la synthèse de nano-poudres, de la mise en forme via l'utilisation du SPS et des mesures électrochimiques et de transport à hautes températures et sous diverses atmosphères.

La nouvelle thématique lancée au cours de cette période concernant la modélisation pour la compréhension des propriétés de transport ionique dans des oxydes.



▪ *Points à améliorer et risques liés au contexte :*

Les matériaux étudiés sont assez classiques et n'ont pas conduit à la rupture souhaitée. Une stratégie plus risquée pourrait être menée.

▪ *Recommandations :*

Les études relatives à la modélisation des propriétés de transport sont encouragées à la fois pour leur originalité et le support susceptible d'être trouvé dans d'autres équipes du laboratoire, permettant ainsi un resserrement des liens.

Un effort important devra être fourni pour réellement constituer l'axe 1 résultant de la fusion des opérations scientifiques 1 et 4.





## 5 • Déroulement de la visite

### Dates de la visite

Début : Jeudi 9 janvier 2014 à 9H00

Fin : Vendredi 10 janvier 2014 à 14H00

### Lieu de la visite

Institution : Laboratoire SPMS École Centrale de Paris

Adresse : École Centrale Grande Voie des Vignes F-92 295 Chatenay Malabry

### Locaux spécifiques visités

Laboratoires de synthèse et de caractérisation du SPMS

### Déroulement ou programme de visite

#### Jeudi 9 janvier

9h00-9h30	Comité d'experts restreint
9H30-10h30	Direction SPMS : bilan
10h30-10h50	Pause
10h50-12h20	Présentation 4 faits marquants
12h20-13h20	Buffet avec l'ensemble du personnel (discussions informelles) et éventuellement posters (docs-jeunes C et EC)
13h20-15h20	Visite 4 Equipes
15h20-15h35	Pause
15h35-16h25	Visite des laboratoires
16h25-16h55	Rencontre avec les chercheurs et enseignants-chercheurs
16h55-17h25	Rencontre avec les personnels techniques
17h25-17h55	Rencontre avec les doctorants et post-doctorants
17h55-18h55	Nouvelle direction SPMS : projet
18h55-19h25	Comité d'experts restreint

#### Vendredi 10 Janvier

9h00-10h00	Rencontre avec les tutelles : ECP-CNRS
10h00-13h00	Comité d'experts restreint



## 6 • Observations générales des tutelles

**Observations générales sur le rapport AERES concernant le Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (UMR8580 CNRS/ ECP)**

Suite au rapport émis par l'AERES concernant le Laboratoire Structures, Propriétés et Modélisation des Solides (UMR8580 CNRS/ ECP), le laboratoire souhaite émettre les observations suivantes:

\* Concernant l'Opération Scientifique 1, l'ensemble de ses membres remercie l'AERES pour l'examen détaillé de ses activités, et les commentaires intéressants et constructifs contenus dans le rapport d'évaluation. L'ensemble des membres de l'OS1 apporte ici quelques informations complémentaires.

Actions sur le rayonnement scientifique de l'équipe

L'équipe a développé depuis 2009 une stratégie d'ouverture vers la communauté internationale concernée par les matériaux en conditions extrêmes de température et irradiation. A ce propos, l'équipe a organisé un symposium au MRS en 2009, puis en 2010, 2012, et aussi au JMC en 2012. L'équipe poursuit cet effort en organisant un symposium au MRS 2014 à Boston et au EMRS 2014 de Varsovie. Une proposition est en cours d'évaluation pour le EMRS 2015 à Lille.

Actions sur le plan de l'enseignement.

Bien que l'équipe ne compte pas d'enseignant-chercheurs parmi ses permanents, les membres de l'équipe ont été (et sont) responsables de deux cours (1 ECP, 1 ENSTA) et coresponsables d'un cours à l'ECP. En raison de l'affiliation au CEA Saclay, l'équipe a été récemment sollicitée pour dispenser des enseignements au sein de l'INSTN : cette action vise à consolider son action dans l'enseignement de la physique des matériaux et des systèmes pour la production de l'énergie dans la future université Paris-Saclay.

\* Concernant l'Opération Scientifique 3 (désormais axe 3), les membres de l'équipe souhaitent insister sur le fait que la collaboration avec la faculté de pharmacie de Paris Sud reste un élément fort et moteur de l'axe 3.

Cela s'est traduit dans les cinq dernières années par:

- 8 publications de haut rang autour de la densité électronique (N. Ghermani, J.-M. Gillet, A. Spasojevic),
- 1 publication sur NPLIN avec F. Dumas de la faculté de pharmacie de Paris Sud,

École Centrale des Arts et Manufactures  
Grand Établissement sous tutelle  
du Ministère charge des Enseignements Supérieurs

---

Grand voie des Vignes  
92295 CHATENAY-MALABRY Cedex  
Tel.: +33-1-41 13 10 00 (standard)  
Télécopie: +33-1-41 13 10 10  
Web: <http://www.ecp.fr>  
Minitel: 3616 code A E C P



- la participation de l'institut Gallien à l'achat du diffractomètre D8 et la signature d'une convention de collaboration,
- plusieurs travaux de collaboration faisant appel à l'expertise du centre de diffraction de SPMS (via son responsable N. Guiblin) pour des problématiques de l'institut Gallien,
- la participation à 1 projet ANR.

Cette collaboration forte avec la faculté de pharmacie se traduit également dans les perspectives par:

- le co-encadrement de 2 thèses,
- le dépôt d'un projet CHARMMMAT en 2014,
- le dépôt d'un projet européen H2020 en 2014,
- le dépôt d'un projet ANR commun en 2014.

Pour le reste, le laboratoire adhère pleinement aux remarques et recommandations du comité AERES, qui serviront de guide pour faire progresser le laboratoire tant sur le plan fonctionnel et stratégique que sur le plan scientifique.

Le laboratoire souhaite également souligner ici que les recommandations concernant la diversification des sources de financement, en particulier via une ouverture accrue vers l'Europe, font écho à des propositions d'actions proposées dans les perspectives et sont de fait déjà mises en œuvre.



Hervé Biausser  
Directeur de l'Ecole Centrale Paris

Jean-François TASSIN  
Directeur Adjoint Scientifique à l'INC  
CNRS

Guilhem DEZANNEAU  
Directeur du laboratoire SPMS  
UMR8580 CNRS / Ecole Centrale Paris