

RAPPORT D'ÉVALUATION DE L'UNITÉ
ICP - Institut de Chimie Physique

SOUS TUTELLE DES ÉTABLISSEMENTS ET
ORGANISMES :

Université Paris Saclay

Centre national de la recherche scientifique -
CNRS

CAMPAGNE D'ÉVALUATION 2024-2025
VAGUE E

Rapport publié le 13/03/2025



Au nom du comité d'experts :

Dario Bassani, président 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

Président :	M. Dario Bassani, CNRS Talence (représentant du CoNRS)
	Mme Julia Contreras-Garcia, Sorbonne université
	M. Christophe Den Auwer, université Côte d'Azur
Experts :	Mme Eléna Ishow, Nantes université
	M. Jérôme Lemoine, université de Lyon (représentant du CNU)
	M. Thierry Sauvage, CNRS Orléans (personnel d'appui à la recherche)

REPRÉSENTANT DU HCÉRES

M. Jean-Luc Blin

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

M. Marc Baaden, CNRS
M. Rachid Bennacer, Université Paris Saclay
M. Philippe Lecoeur, Université Paris Saclay
Mme Catherine Pinel, CNRS
M. Alain Walcarius, CNRS

CARACTÉRISATION DE L'UNITÉ

- Nom : Institut de Chimie Physique
- Acronyme : ICP
- Label et numéro : UMR 8000
- Nombre d'équipes : 4 équipes
- Composition de l'équipe de direction : M. Guillaume Van Der Rest (directeur) / M. Israël Mbomekallé (directeur adjoint) / Mme Marie Erard (directrice adjointe) / Mme Wafa Zaid (responsable administrative)

PANELS SCIENTIFIQUES DE L'UNITÉ

ST Sciences et technologies

ST4 Chimie

ST2 Physique

SVE3 Molécules du vivant, biologie intégrative (des gènes et génomes aux systèmes), biologie cellulaire et du développement pour la science animale

THÉMATIQUES DE L'UNITÉ

L'activité de l'ICP se divise en six thématiques : la biologie (processus redox, analyse biologique), l'étude de nano-objets (synthèse, caractérisation), le développement de méthodes spectroscopiques, analytiques, théoriques, et la chimie sous rayonnement. Ces thématiques sont réparties entre quatre équipes : Chimie Analytique, Physico-Chimie et Réactivité des Ions (CAPRI), Chimie physique des Systèmes Biologiques (CPSysBio), Transfert d'électron en Milieu Condensé (TEMiC), et Théorie et Simulation (TheoSim). L'unité est rattachée à CNRS Chimie et est fondamentalement pluridisciplinaire.

HISTORIQUE ET LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE DE L'UNITÉ

L'Institut de Chimie Physique a été créé en 2020 et résulte de l'intégration du Laboratoire d'Etudes des Techniques et Instruments d'Analyse Moléculaire (LETIAM, IUT d'Orsay) au Laboratoire de Chimie Physique (LCP). La plateforme CLIO, abritant un laser à électrons libres, a été intégrée au LCP en 2006 et est localisée dans le bâtiment 201, soit à environ 1 km des locaux principaux de l'ICP, à savoir les bâtiments 349 et 350 dont certains ont été récemment rénovés. Ces derniers regroupent la majorité des effectifs, les services administratifs et de gestion, ainsi que la plateforme de radiolyse pulsée ELYSE. L'équipe de chimie analytique issue du LETIAM continue d'exercer ses activités à l'IUT dans le bâtiment 602, à environ 2 km de l'ICP. Un bus relie ces deux sites.

ENVIRONNEMENT DE RECHERCHE DE L'UNITÉ

L'ICP jouit d'un environnement scientifique extrêmement dynamique et fertile. Localisé dans la vallée d'Orsay, à proximité de l'Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay et de l'ensemble des laboratoires du plateau de Saclay, il profite d'interactions porteuses d'un large éventail de compétences issues du monde académique et privé. L'ICP contribue à cet environnement riche et diversifié grâce à ses propres connaissances et une offre instrumentale exceptionnelle. L'ICP fait partie de la Fédération de Chimie Physique de Paris-Saclay (CNRS FR 3510), créée en 2012 pour rassembler l'ensemble des laboratoires de chimie-physique de Paris-Saclay autour d'axes scientifiques transverses entre la chimie, la physique, et les sciences de la vie à travers des conférences et workshops en commun. Bien que ses effectifs relèvent majoritairement des sections de chimie physiques des universités (section 31 du CNU) et de la section 13 du CoNRS, l'ICP regroupe d'autres communautés telles la physique et les sciences biologiques. Cette pluridisciplinarité lui permet de contribuer à l'offre de formation de l'université Paris-Saclay à travers plusieurs Graduate Schools (Chimie, Physique, Life Sciences and Health) et de participer à plusieurs projets nationaux de France 2030 tels que les programmes et équipements prioritaires de recherche (PEPR) LUMA et ORIGINS, et à l'Institut Hospitalo-Universitaire (IHU) Prometheus.

EFFECTIFS DE L'UNITÉ : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	14
Maitres de conférences et assimilés	17
Directeurs de recherche et assimilés	13
Chargés de recherche et assimilés	7
Personnels d'appui à la recherche	22

Sous-total personnels permanents en activité	73
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	11
Personnels d'appui non permanents	7
Post-doctorants	6
Doctorants	31
Sous-total personnels non permanents en activité	55
Total personnels	128

RÉPARTITION DES PERMANENTS DE L'UNITÉ PAR EMPLOYEUR : en personnes physiques au 31/12/2023. Les employeurs non tutelles sont regroupés sous l'intitulé « autres ».

Nom de l'employeur	EC	C	PAR
U Paris Saclay	30	0	8
CNRS	0	20	14
Autres	1	0	0
Total personnels	31	20	22

AVIS GLOBAL

L'ICP est l'un des laboratoires les plus emblématiques de la chimie-physique française. Il regroupe un ensemble instrumental inégalé en Europe et dans le monde qui permet à son personnel d'entreprendre des travaux sur des objectifs scientifiques ambitieux et originaux tels que le suivi des modifications post-translotionnelles par ionisation multi-photons, la caractérisation d'échantillons extraterrestres, ou la détection d'intermédiaires réactionnels sur des surfaces lors de la réduction du dioxyde de carbone. À travers ses publications scientifiques, il mène avec succès sa mission de développer une recherche fondamentale attractive et d'excellence. Ceci s'est traduit, au cours de la période contractuelle, par la publication d'un ensemble d'articles (698, soit 3,16 publications/ETPR/an) impressionnant tant par l'ampleur et la diversité des sujets traités que par leur qualité scientifique. La majorité de ces publications sont parues dans des revues spécialistes des domaines d'expertise de l'ICP y compris dans les revues les plus lues telles PCCP et J. Chem. Phys. (82 articles). Une trentaine d'articles sont parus dans les revues généralistes à très large audience (Nature, Science, Nat. etc., PNAS, J. Am. Chem. Soc., Angew. Chem., Chem. Sci., ...), et d'autres dans des revues très sélectives dans les domaines de l'énergie, la biologie, l'environnement, ou la chimie computationnelle (Green Chem., Energ. Env. Sci., JAMA, J. Chem. Theory. Comput.).

Une analyse des citations par région géographique confirme que les travaux issus de l'ICP sont largement cités par des chercheurs de nombreux pays (Amérique du nord, Asie, Europe), témoignant ainsi de leur portée. Cette reconnaissance contribue au rayonnement international de l'unité avec près de la moitié (47 %) des publications de l'ICP possédant en coauteur un collaborateur extérieur. Les membres de l'ICP ont participé à l'organisation de 23 manifestations scientifiques au cours de la période et leur participation en tant que conférenciers invités est très bonne avec un total de 117 conférences invitées, réparties de manière inhomogène entre et dans les équipes.

Si la répartition des effectifs dans les quatre équipes de l'ICP se justifie par une cohérence des techniques instrumentales utilisées au niveau de ces équipes et de leur historique, une analyse thématique fait émerger l'existence de nombreux intérêts scientifiques communs. Cette complémentarité pourrait représenter une force de cohésion importante et une opportunité pour consolider les interactions inter-équipes pouvant se traduire par une augmentation des projets et publications en commun.

Dans son ensemble, l'ICP a très bien intégré la nécessité d'augmenter la part de financement de la recherche sur des ressources propres et affiche un excellent taux de succès aux appels à projets nationaux (30 projets ANR acceptés, dont 13 en tant que porteur). Ceci a contribué à augmenter le nombre de thèses financées avec, en moyenne, dix thèses démarrées par an. La part des contrats avec les entités du PIA est également très impressionnante (69 contrats) et comparable (en montant : \approx 1100 k€) aux financements issus du monde socio-économique. La contribution des contrats internationaux est moins importante et ne représente en moyenne qu'environ 2 % du budget total réparti sur quatre contrats européens.

Suite au départ à la retraite de certains de ses membres, l'ICP verra une diminution du nombre de ses permanents au cours des années à venir. En concertation avec ses tutelles, il devra veiller à maintenir le haut niveau scientifique de ses plateformes instrumentales dont l'excellence et l'unicité sont essentielles à la communauté scientifique nationale et internationale. En parallèle, les collaborations internationales de l'ICP peuvent être un levier important pour identifier des candidats excellents pouvant consolider les thématiques en cours ou en démarrer des nouvelles.

ÉVALUATION DÉTAILLÉE DE L'UNITÉ

A - PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le précédent comité avait émis les recommandations de : (1) profiter des avancées interdisciplinaires pour accéder plus régulièrement à des journaux à très fort impact, (2) augmenter la part de ressources propres afin de recruter plus de doctorants, (3) améliorer la communication entre les personnels et clarifier les responsabilités de chacun afin de faciliter l'organisation du travail, (4) revoir l'organisation du personnel d'appui à la recherche, (5) promouvoir l'intégration des plateformes ELYSE et CLIO au sein des grandes infrastructures de recherche et réseaux européens.

La direction et l'ensemble du personnel de l'ICP ont mis en œuvre les recommandations du précédent rapport en fournissant un effort important. Ainsi, la production scientifique s'est améliorée en visant avec succès des revues de renom à audience large, tout en augmentant le taux de publication dans les revues spécialisées.

Le précédent rapport avait également recommandé d'augmenter le nombre de doctorants grâce à une plus forte contribution des financements sur projets. Ceux-ci ont progressé de manière significative et ont permis d'augmenter le nombre de thèses dirigées par les membres de l'ICP d'environ 30 %.

L'organisation de l'institut, déjà accompagnée en 2017 par un audit extérieur, a continué d'évoluer pour prendre en compte les recommandations du précédent comité. Les responsabilités collectives ont ainsi été revues afin de les rendre plus homogènes et résilientes à la diminution du nombre des personnes d'appui à la recherche (PAR).

La communication entre les personnels de l'institut demeure un point de vigilance avec l'extension de l'unité sur trois sites distants. Bien que des efforts continuent d'être faits dans ce sens (notamment au travers d'un fil d'actualité et des journées d'échanges scientifiques), la mise en place de temps de rencontres scientifiques au niveau de l'unité, force de cohésion et de synergie, requiert encore un effort constant et volontariste de l'ensemble de son personnel.

L'intégration des plateformes ELYSE et CLIO dans des grandes infrastructures est en cours.

B - DOMAINES D'ÉVALUATION

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

Appréciation sur les objectifs scientifiques de l'unité

Les objectifs scientifiques de l'ICP se situent globalement à l'intersection de la chimie, de la physique et des sciences de la vie. Les développements en physique sont ici utilisés pour sonder les états et la réactivité de la matière avec, comme objectif global, la production d'une recherche fondamentale d'excellence et attractive. L'ICP laisse une totale liberté aux équipes dans la poursuite de cet objectif qui est décliné en partie dans des domaines prioritaires tels l'environnement, la santé et l'énergie. L'actualité de ces objectifs est incontestable et a permis à l'ICP d'acquérir, depuis de longues années, une excellente reconnaissance au niveau national et une excellente visibilité internationale dans le domaine de l'interaction radiation – matière.

Appréciation sur les ressources de l'unité

L'ICP dispose d'un grand éventail de ressources matérielles et immatérielles issus d'un historique riche en avancées instrumentales et scientifiques. L'unité est reconnue pour sa gestion de grands instruments tels CLIO (Centre laser infrarouge d'Orsay) et ELYSE qui est l'une des quatre installations de radiolyse picoseconde en exploitation au monde, mais aussi pour le développement de nouveaux instruments d'analyses et de caractérisations. L'ensemble du parc instrumental constitue ainsi une ressource propre à l'unité. La participation de l'ICP au plan d'investissement France 2030 à travers deux PEPR est un élément positif pour le maintien de ce parc qui demande un effort financier considérable.

Au-delà des financements récurrents, l'ICP s'est donc montré globalement compétitif dans l'obtention de contrats publics. Si cette part du budget annuel est variable, elle est en net progrès par rapport à celle du contrat précédent en raison d'un fort effort collectif. La contribution des financements privés et internationaux reste cependant modeste alors qu'elle représente un potentiel important qui va bien au-delà des retombées purement financières. Le savoir-faire dans la gestion des grands et moyens instruments constitue une ressource humaine importante pour l'unité, mais qui est aussi la plus fragile en raison de la pyramide des âges et de l'érosion du nombre des PAR.

Appréciation sur le fonctionnement de l'unité

Le fonctionnement de l'ICP a été revu lors du précédent contrat et a pour socle un Conseil de Laboratoire, constitué d'une vingtaine de membres, dont quatorze élus, et qui se réunit sept à huit fois par an pour établir les priorités des demandes de ressources et l'organisation de la vie commune. La direction assure la gestion courante avec un directoire élargi aux responsables d'équipes, tout en s'appuyant sur les conseils des chargés de mission et assistants de prévention. L'animation scientifique est principalement déléguée aux équipes, avec une part des financements reversée sur la base de projets scientifiques évalués par un Conseil Scientifique composé de la direction et des responsables d'équipe. Ce fonctionnement a permis à l'ICP de trouver une certaine stabilité et harmonie, mais peine à impulser un saut de qualité de l'unité dans son ensemble en raison de son rayon d'action limité. Au niveau des équipes, l'organisation est variable selon l'existence et l'interdépendance de plusieurs thématiques. Dans l'ensemble, bien que la communication se soit améliorée, l'animation scientifique au niveau de l'ICP reste modeste au vu de la qualité de ses activités.

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

Points forts et possibilités liées au contexte

Tout en étant ancrés dans la recherche fondamentale, les objectifs scientifiques que se sont assignés les membres de l'ICP (élucidation des procédés redox et sous rayonnement, développements méthodologiques en chimie analytique et spectro-imagerie) sont très bien représentés dans les défis sociétaux tels que l'énergie et la santé, mais également ceux récemment mis en avant par le CNRS (Vie dans l'Univers, Matériaux du Futur, Instrumentation sans Limites).

Le développement de nouveaux instruments et méthodologies constitue un objectif transversal important, permettant de viser des sources de financement diversifiées (e.g. plan d'investissements d'avenir, collectivités territoriales) impliquant, notamment, les plateformes instrumentales.

La spécificité actuelle du mode de fonctionnement de l'unité adosse l'animation des plateformes à des équipes reconnues internationalement pour leurs expertises. Ceci est très positif pour l'élaboration de projets scientifiques ambitieux.

Points faibles et risques liés au contexte

L'identification de grands objectifs ambitieux et la pérennisation des équipements (CLIO, ELYSE) nécessitent une approche transverse entre les thématiques des équipes qui est actuellement limitée par les opportunités d'échanges scientifiques au niveau de l'ICP.

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

L'ICP dispose d'un environnement privilégié situé au cœur de la vallée d'Orsay, dans des locaux en partie rénovés en adéquation avec leur affectation. La mise à disposition de locaux supplémentaires au niveau du bâtiment 350 permettra à l'ICP d'envisager des actions spécifiques dans le futur (e.g. accueil de nouvelles équipes, regroupement géographique ou élargissement du périmètre des équipes existantes).

Les plateformes instrumentales de l'ICP constituent une ressource unique dont les capacités sont entrelacées avec les objectifs scientifiques des équipes et permettent d'entreprendre des projets ambitieux (e.g.

caractérisation des processus bio-redox, développements méthodologiques pour la chimie analytique, études des processus photoinduits et sous rayonnement,...) et d'accéder à des financements (e.g. programme d'investissements d'avenir, contrats nationaux) et à des collaborations extérieures (e.g. industrielles – Bruker, Safran, académiques – Université de Liège, Ghana, Etats-Unis). Au cours du dernier contrat, les ressources propres de l'ICP ont augmenté de 60 % à 71 % des moyens financiers globaux grâce à une part de financements sur projet qui ont représenté, en moyenne, 57 % des crédits.

Les objectifs scientifiques de l'ICP ont conduit à des contributions scientifiques majeures, telles les études de la réactivité des radicaux produits sous irradiation à la surface de nanoparticules métalliques (RSC Adv. 2023). Couplées à des simulations DFT, d'autres études ont permis l'identification des intermédiaires de la réduction catalytique du CO₂ adsorbés à la surface de nano-catalyseurs métalliques Cu, Au et Ni (Nature Com. 2023). L'AFM-IR offre des approches analytiques extrêmement performantes pour réaliser les études, entre autres, de matériaux complexes comme les astromatériaux (e.g. micrométéorites d'Antarctique, Astron. Astrophys. 2019, 2023), les matériaux biologiques complexes (e.g. protéines Anal. Chem. 2023), ou les matériaux anciens.

Points faibles et risques liés au contexte

Le maintien des capacités instrumentales de l'ICP représente un défi scientifique, technique et financier considérable. Sans politique d'investissement sur le long terme, il sera difficile d'échapper à l'obsolescence de certains équipements qui nécessitent de rester à la pointe de la technologie pour conserver leur compétitivité. Le contexte actuel privilégie l'ouverture des plateformes sur un modèle contributif dont le périmètre reste à définir en concertation avec les tutelles de l'unité. Il doit également tenir compte de la nécessité de maintenir les ressources humaines nécessaires au bon fonctionnement des instruments.

L'arrêt d'un des grands instruments, comme ELYSE et CLIO, impacterait négativement les projets scientifiques d'une ou plusieurs équipes de l'ICP mais aussi ceux des équipes extérieures (nationales et internationales) qui s'appuient sur ces instruments.

Le bon fonctionnement de l'ICP se heurte également aux limites et contraintes de son environnement local (gestion financière complexe, entretien insuffisant des infrastructures).

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

La direction de l'ICP s'est dotée d'un ensemble d'assistants et de conseillers de prévention (10) et de chargés de mission (12) pour répondre aux directives des tutelles aux plans de la sécurité et de la protection du parc instrumental et des données scientifiques. Celles-ci sont particulièrement complexes en raison des nombreux risques liés aux sources laser et de rayonnement ionisant et l'organisation actuelle est en adéquation avec les besoins.

L'ouverture des plateformes représente une opportunité importante d'amplification de leur action, ce qui justifierait le recrutement de personnel sur contrat.

L'unité affiche un très bon taux de parité H / F de son personnel permanent EC / C (taux de 48 %) ainsi que des personnels d'appui à la recherche (taux de 50 %).

Points faibles et risques liés au contexte

Le suivi continu des nombreuses réglementations en sécurité nécessite un investissement important qui peut nuire aux activités scientifiques du personnel. Certaines responsabilités (e.g. infrastructures, recrutement, plateformes) sont partagées entre l'unité, les équipes et les plateformes, ce qui peut conduire à une dilution des responsabilités.

Le nombre réduit de personnels sur des instrumentations complexes (ELYSE, CLIO) peut être source de graves ruptures de continuité de service en cas d'avaries importantes des instruments et d'impératifs personnels des agents (congé maladie, congé maternité...). Cette insuffisance de personnel est encore plus critique au niveau du personnel technique, par exemple une seule personne doit gérer tout le parc d'ordinateurs dévolus

à l'acquisition, le traitement et le stockage des données, en plus de toutes les mises à jour des systèmes de sécurité continuellement requises.

DOMAINE 2 : ATTRACTIVITÉ

Appréciation sur l'attractivité de l'unité

L'attractivité de l'ICP est globalement excellente dans ses domaines de compétence tels le développement d'instruments et de nouvelles méthodologies ou les études transverses sur les phénomènes (bio)physico-chimiques aux interfaces. Son succès dans les appels à projets nationaux a contribué au financement de 58 thèses au cours de la période. L'unité entretient de nombreuses collaborations internationales qui ont conduit à la publication de 328 articles (47 %) dans cette même période. Ses capacités expérimentales sont régulièrement sollicitées pour répondre à des problématiques fondamentales à fort impact scientifique. Ceci permet au personnel de l'ICP, dont plusieurs membres ont été récompensés par des prix scientifiques au cours de la période, de maintenir une recherche dont la qualité contribue au rayonnement de ses tutelles. Cette reconnaissance a permis à l'unité d'accueillir des chercheurs internationaux et de participer à l'organisation d'une vingtaine de manifestations scientifiques, dont une majeure dans le domaine de la chimie sous radiation. Deux enseignants-chercheurs et un chercheur CNRS ont rejoint l'unité.

- 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

Une analyse géographique des citations des articles scientifiques de l'ICP montre une bonne répartition mondiale, en particulier en provenance de l'Amérique du Nord (20 %) et de l'Asie (40 %), ce qui confirme un fort rayonnement scientifique international. Ceci est également vrai au niveau européen, où la majorité des citations (70 %) proviennent hors de France. Cette reconnaissance permet au personnel de l'ICP de maintenir une visibilité nationale et internationale forte.

L'ICP a mis en place un circuit d'intégration des nouveaux entrants (permanents et non-permanents) pour leur permettre d'assimiler rapidement le fonctionnement de l'unité.

Le suivi des carrières des PAR a été revu pour désigner des responsables des entretiens annuels communs pour chaque équipe.

L'unité a accueilli en mutation deux enseignants-chercheurs et un DR CNRS qui ont rejoint les équipes CAPRI, CPSysBio, et TEMiC. Un CR CNRS a été récemment recruté en section 13 du CoNRS et affecté à l'équipe TEMiC.

Quatre HDR ont été soutenues au cours de la période, en partie grâce aux encouragements de la direction envers le vivier potentiel.

En suivant les recommandations du précédent rapport, l'ICP a significativement augmenté sa part du financement sur projet pour atteindre, en moyenne annuelle, 57 % de son budget. Ceci résulte principalement d'un meilleur taux de réussite aux appels à projets nationaux (66 % des projets ANR soumis en 2023 contre 8 % en 2018), ce qui est très positif.

L'excellence et l'unicité des instruments de l'ICP constituent un véritable atout pour répondre à des problématiques fondamentales dans les domaines prioritaires tels la santé, l'énergie, la vie dans l'univers, et l'environnement.

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

L'attractivité de l'ICP repose en partie sur ses plateformes instrumentales dont la capacité de maintien au meilleur niveau est à risque en raison de la limitation des ressources humaines et financières. Le large spectre de compétences recherchées pour certains postes techniques (électronique, mécanique, chimie) peut être un frein dans l'identification de candidats potentiels.

La responsabilité technique de certains instruments repose sur un nombre limité, voire unitaire de PAR qui sollicitent parfois de l'aide auprès de laboratoires externes pour maintenir leur outil. Cette fragilité dans le fonctionnement peut aussi être un frein au recrutement de personnels techniques.

L'ICP mène avec succès des sujets scientifiques ambitieux mais leur rayonnement scientifique est hétérogène. Il a la possibilité d'être davantage moteur dans ses collaborations internationales, ce qui amènerait une plus-value importante à ses travaux collaboratifs.

En dehors du périmètre des plateformes, certains composants essentiels du parc instrumental sont vieillissants et il reste des locaux en attente de rénovation.

La pyramide des âges du personnel de l'unité (22 EC et C ainsi que 6 PAR, de 55 ans et plus) peut conduire à une perte des compétences sur le court-moyen terme.

Le faible nombre de post-doctorants (6 en cours à la fin de la période de référence) limite leur contribution à l'organisation participative de la vie du laboratoire.

DOMAINE 3 : PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Appréciation sur la production scientifique de l'unité

Avec une moyenne de 3,6 publications / ETPR / an, l'ICP affiche globalement une excellente production de publications dans les revues internationales à comité de lecture, en net progrès par rapport à celle du contrat précédent (2,5 ACL / ETP / an). Sa production est en majorité valorisée dans les meilleures revues spécifiques aux domaines de la chimie-physique, des nanomatériaux, de la biologie, etc. pour celle émanant directement des travaux des membres de l'unité. Concernant les publications issues d'études collaboratives (près de la moitié), celles-ci bénéficient d'une portée plus large en raison de leur caractère pluridisciplinaire ; certaines d'entre elles sont parues dans les revues généralistes les plus suivies (Nature, Science, Nat. Chem,...). Ceci est également le cas pour des travaux collaboratifs inter-équipes de l'unité, bien qu'ils ne représentent que 4 % de la production totale. La production est globalement homogène entre les équipes en tenant compte de leur composition et d'événements extérieurs (i.e. arrêt de la plateforme CLIO). La production scientifique de l'ICP a permis la soutenance de 45 thèses de doctorat et quatre habilitations à diriger des recherches. Elle a également contribué à la publication de deux ouvrages et 23 chapitres d'ouvrage, ainsi qu'au développement de codes de programmation en chimie quantique (VB, dynamique, DFT, etc.). La participation des membres de l'ICP aux manifestations scientifiques est très bonne, avec une soixantaine de conférences invitées dans des congrès internationaux majeurs, mais inégalement réparties entre les équipes.

- 1/ La production scientifique de l'unité satisfait à des critères de qualité.*
- 2/ La production scientifique de l'unité est proportionnée à son potentiel de recherche et correctement répartie entre ses personnels.*
- 3/ La production scientifique de l'unité respecte les principes de l'intégrité scientifique, de l'éthique et de la science ouverte. Elle est conforme aux directives applicables dans ce domaine.*

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

La production scientifique de l'ICP est pour la majorité très bonne et excellente pour certaines thématiques (e.g. biophysique, astrochimie, réduction du CO₂, ...) issues de projets collaboratifs. Globalement, elle est principalement orientée vers la diffusion des connaissances fondamentales par rapport à la valorisation ou à la diffusion par d'autres canaux telles les communications dans les congrès.

L'ensemble des publications semble conforme aux principes d'intégrité scientifique, sans rétractations ou activité anormale. Certains des travaux font intervenir des échantillons humains et ceux-ci sont systématiquement traités dans le cadre d'une convention régissant leur utilisation. La mise à disposition de la production sur HAL assure un accès ouvert à l'ensemble de la collection.

Le rayonnement scientifique de la production de l'ICP est excellent et internationalement reconnu au vu de l'étendue géographique des citations.

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

Les publications issues de collaborations entre les équipes de l'ICP sont limitées en nombre, avec seulement 29 articles (soit 4 % du total) issus de plus de deux équipes hors plateformes. Parmi celles-ci, le comité note que les deux tiers font intervenir l'équipe THEOSIM qui joue ainsi un rôle central dans les collaborations inter-équipes.

La participation des doctorants dans les publications est faible par rapport à la productivité globale de l'ICP (187 articles, soit 27 % des ACL).

L'activité de production de codes pour la modélisation en chimie théorique ne fait pas l'objet d'un suivi de leur adoption par la communauté scientifique, ce qui risque de nuire à l'identification de sujets porteurs.

DOMAINE 4 : INSCRIPTION DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE DANS LA SOCIÉTÉ

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

Une grande partie des thématiques qui définissent l'unité est centrée sur la recherche fondamentale et le développement d'outils scientifiques et technologiques de pointe dans des domaines prioritaires que sont l'environnement, la santé et l'énergie. Cette spécificité représente un sérieux atout pour, d'une part, répondre à des questionnements d'entreprises, des transferts technologiques et des projets de maturation, comme le montrent des partenariats de longue date (p. ex. Orano et Bruker) et, d'autre part, communiquer vers le grand public sur des sujets et équipements phares. Compte tenu des activités instrumentales de l'unité, l'interaction avec le monde socio-économique est très bonne, avec globalement six brevets et l'accueil de deux startups (Teratronics et COCAPEC) issues de travaux précédant la période de référence. Ces activités sont principalement concentrées sur les équipes TEMiC et CPSysBio. L'équipe TheoSim étant focalisée sur les développements théoriques, apporte principalement sa contribution aux codes scientifiques (deMon2k, XACS, etc.).

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

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

L'unité s'efforce d'établir des collaborations et des interactions avec le monde non académique. Cette dynamique s'illustre par la valorisation de travaux à travers le dépôt de six brevets ou extensions de brevet (dont 5 brevets par le groupe TEMiC) et de deux projets de valorisation dont l'un est soutenu par la SATT Paris-Saclay.

L'ICP se distingue par de réels transferts technologiques grâce au co-développement d'instrumentations avec des industriels (Bruker sur l'axe AFMIR). Ces efforts, étayés par l'expérience acquise dans le domaine du transfert technologique, devraient porter leurs fruits dans la prochaine mandature via la prise de licences.

L'unité a gardé des liens étroits avec deux sociétés (Alyxan créée en 2005 et Teratronics créée en 2017) émanant d'expertises de l'ICP et dispose de brevets sous licence d'exploitation. Elle participe à l'animation de journées et d'événements à destination des industriels.

L'unité initie et réalise aussi des actions de communication pour faire connaître et reconnaître ses plateformes envers le monde socio-économique (Annuaire de l'université, Plug in Labs., ...), ainsi que des actions de formation régulières depuis 2018 dans le cadre de l'offre CNRS Formation Entreprise ou plus ponctuelles à la demande d'industriels (trois sur la période).

Le partage des connaissances avec le grand public est réalisé à travers la production d'articles de vulgarisation, de communiqués de presse et de vidéos en relation directe avec les activités de recherche de l'unité. Il s'étend à d'autres manifestations comme la fête de la science, des conférences ou des ateliers auprès de collégiens ou de lycéens. Par exemple, la contribution de l'équipe TEMiC à l'œuvre artistique (Volvox) dans le cadre d'un projet « Art et science » débuté en 2015, présentée à différentes expositions ou sous forme de vidéos, ainsi que celle de l'équipe CAPRI (Analyse de composés à l'origine de la coloration de parchemins précolombiens) grâce à des médias divers (exposition, entretien radiophonique) touchant un large public, sont à souligner.

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

La valorisation des activités de recherche de l'unité est portée de manière inégale par les quatre équipes.

Bien que le nombre des contrats industriels signés soit globalement en hausse par rapport au contrat précédent (21 vs 16 contrats signés), l'activité contractuelle en fin de la période de référence est en retrait par rapport aux capacités de l'ICP.

L'aspect valorisation des travaux (brevets) a été très bien représenté dans le passé pour certaines thématiques telle la plateforme AFMIR, mais n'est pas assez étendu à l'ensemble de l'unité.

ANALYSE DE LA TRAJECTOIRE DE L'UNITÉ

L'organisation de l'ICP en équipes autonomes conduit à ce que la trajectoire de l'unité soit, en grande partie, régie par ces équipes. Bien que la conservation de la structure actuelle soit mise en avant, la réorganisation prévue par l'équipe CPSysBio va nécessairement modifier l'organisation de l'unité et l'intégration du LETIAM accentuera la nécessité de mettre en place des canaux de communication efficaces.

L'ICP ne présente pas de réflexion prospective sur l'utilisation des locaux suite à l'évolution future des thématiques et du personnel. Ceci requerra la mise en place d'actions d'échanges scientifiques (séminaires en commun, projets collaboratifs) entre les équipes afin de construire une plus grande cohésion entre les différentes thématiques. À terme, cela sera bénéfique pour l'éclosion de projets mettant en valeur la synergie entre les diverses compétences présentes au sein de l'ICP et permettra de mieux cibler les actions structurantes.

Le maintien de la production scientifique reste un objectif important pour l'ICP qu'il serait bien d'étendre au-delà des articles scientifiques. Ainsi, une participation aux manifestations scientifiques accrue et des échanges avec l'industrie plus nombreux offrirait une meilleure valorisation des travaux et contribueraient à accroître le vivier potentiel des futurs permanents de l'institut.

Le départ proche d'un nombre important de permanents expérimentés entraînera nécessairement un recentrage du périmètre scientifique et l'abandon de certaines thématiques. Ceci est inhérent à toute structure et contribue au renouvellement et à l'éclosion de nouveaux projets.

Une réflexion concernant le mode de fonctionnement des plateformes est menée au sein de l'unité et son issue représentera un événement important du prochain contrat. Celle-ci va nécessiter des échanges entre la direction, les chercheurs concernés et les tutelles afin de mettre en place un mode de gestion facturable et auditable, tout en maintenant un lien fort avec les équipes concernées. Toutefois, cette réflexion semble encore peu aboutie par rapport au défi du maintien de l'excellence des plateformes concernées.

La programmation d'un plan de gestion des données coordonné au sein de l'ICP est une excellente initiative qui va dans le sens des principes FAIR qui correspondent à des lignes directrices dont l'objectif est de rendre les ressources numériques Faciles à trouver, Accessibles, Interopérables et Réutilisables.

RECOMMANDATIONS À L'UNITÉ

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

Le comité incite fortement l'unité à accroître les interactions entre les équipes et favoriser l'échange d'informations entre les personnels des sites distants. Il lui est recommandé de poursuivre la réflexion en cours sur l'identification de thématiques transverses pouvant servir de liant à travers la mise en place de séminaires réguliers impliquant la majorité des équipes et faisant intervenir les étudiants et les chercheurs non-permanents. À terme, cela consolidera le sentiment d'appartenance et pourrait permettre l'éclosion de projets mettant en valeur la complémentarité entre les équipes. Ces projets pourraient être soutenus prioritairement lors des actions scientifiques de l'unité.

Le comité encourage l'unité à mener une réflexion pour une politique commune entre les plateformes et les utilisateurs internes ou externes (charte d'utilisation, politique de publication et de cout, bilan d'activités annuel, publicité active à l'échelle locale/nationale/internationale des possibilités expérimentales offertes, politique de jouvence, de renouvellement...) avec pour objectif de créer un collectif de plateformes. Il est aussi essentiel de mener des réflexions au sein de l'unité et en concertation avec les tutelles pour préciser le fonctionnement futur des plateformes, tant sur le plan financier que sur celui des ressources humaines.

Il est recommandé que l'unité désigne une référente ou un référent à l'égalité femme-homme, en accord avec la demande des différentes tutelles.

Une clarification de l'organisation hiérarchique (dévolution des tâches à la direction et à la direction adjointe) et des différents conseils (identité, rôle) est également préconisée.

Recommandations concernant le domaine 2 : Attractivité

Le comité conseille à l'ICP de mettre en place une stratégie de recrutement de futurs permanents qui s'appuie sur les compétences scientifiques d'une majorité de son personnel pour identifier des projets novateurs et préparer les candidats les plus prometteurs.

La reconnaissance internationale de l'ICP pourrait être davantage exploitée pour conduire à une plus grande participation du personnel de l'ICP dans des projets européens et en tant que conférenciers invités dans les manifestations scientifiques. Une meilleure présence internationale permettra également d'élargir le vivier de jeunes chercheurs et chercheuses qui pourraient rejoindre l'ICP dans le futur, limitant ainsi l'effet d'un resserrement éventuel de la filière chimie physique en France. À terme, ceci conduira à un cercle vertueux permettant une meilleure valorisation de l'ICP en tant qu'unité de recherche avancée.

Le comité suggère à l'unité de discuter avec ses tutelles afin que les travaux de rénovation des bâtiments soient étendus à l'ensemble des locaux pour être à la hauteur de l'excellence de l'ICP qui est, en raison de l'accueil d'un grand nombre d'équipes internationales, une vitrine de la recherche française.

Le comité incite l'unité à allouer une part plus importante du financement au recrutement de chercheurs post-doctoraux pouvant contribuer à l'animation scientifique et composant un vivier de jeunes chercheurs et chercheuses susceptibles d'intégrer l'ICP en tant que personnel permanent.

Recommandations concernant le domaine 3 : Production scientifique

Dans la mesure du possible, le comité recommande d'associer davantage les jeunes chercheurs dans les collaborations internationales afin qu'ils profitent de l'ouverture à l'international du laboratoire tout en consolidant leur production scientifique.

Le comité suggère d'instaurer une vraie dynamique d'animation et de programmation scientifiques (par exemple, séminaires donnés par des personnalités extérieures invitées et accessibles à toute l'unité ; participation des doctorants aux soutenances de thèse ; courts séminaires hebdomadaires donnés par les doctorants sur leurs travaux une fois par an ; animations thématiques selon les axes transverses définis...).

L'offre instrumentale importante de l'unité et son ouverture vers les collaborations extérieures requièrent la mise en place d'une harmonisation des règles de participation des PAR dans les actes de valorisation (publications, brevets).

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

Les interactions avec le monde socio-économique et éducatif mériteraient d'être amplifiées. Une plus forte activité de valorisation constituerait un apport financier supplémentaire pour l'unité pour entretenir les équipements et promouvoir leur développement au sein des plateformes.

L'unité pourrait réfléchir à l'instauration d'un groupe de travail, incluant les responsables de plateformes et les chercheurs confirmés afin d'échanger sur les bonnes pratiques de valorisation ou de diffusion. Cette démarche doit être entreprise à l'échelle de l'unité pour une offre technologique plus globale et une implication mieux répartie entre les différents groupes de recherche.

L'unité gagnerait à s'adosser à l'environnement local de l'université Paris-Saclay, bénéficiant d'ingénieurs de valorisation, pour consolider la stratégie de valorisation et adhérer au lancement de nouvelles initiatives.

ÉVALUATION PAR ÉQUIPE

Équipe 1 : Chimie Analytique, Physico-Chimie et Réactivité des Ions (CAPRI)

Nom du responsable : M. Roland Thissen

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe présente quatre thématiques scientifiques, interaction avec les photons, réactivité des ions, physicochimie analytique et bio-analyse, qui ont pour point commun d'utiliser différentes combinaisons d'analyseurs en spectrométrie de masse (piège de Paul, résonance cyclotronique, temps de vol, quadropole) autour de plateformes ou plateaux techniques (CLIO/SMAS, CERISES, microfluidique ...). Les instruments et montages expérimentaux, originaux voire uniques, sont conçus en interne et utilisés comme outils analytiques (analyse structurale, détection, quantification) ou comme dispositifs d'activation contrôlée sous vide d'espèces ionisées. Les systèmes étudiés sont très variés à la fois en taille et en nature, allant de l'ion atomique isolé aux molécules biologiques complexes. En visant la déconvolution de matrices biologiques complexes et l'analyse structurale de macromolécules biologiques, l'équipe développe en amont du spectromètre de masse des méthodes séparatives, classiques comme la chromatographie, ou originales telles que la microfluidique et la mobilité ionique.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le précédent rapport reconnaissait la qualité de la production scientifique, publiée dans de très bons journaux de physico-chimie et de science analytique résultant notamment d'un accès privilégié à des plateformes uniques de spectroscopie. Cette qualité a été maintenue, toutefois l'équipe CAPRI apparaît par comparaison avec les trois autres équipes en léger retrait du point de vue de la production scientifique. Ce retrait peut s'expliquer à la fois par l'arrêt de CLIO depuis 2019 et une rationalisation inachevée des choix des thématiques.

Il avait été suggéré de produire également des travaux dans des journaux plus généralistes de plus large audience, en tant qu'investigateurs principaux. Cet objectif a été partiellement rempli au travers de publications dans Science, Nat. Comm., Nat. Astronomy dans le cadre de contributions à des projets internationaux. Un article de revue à forte visibilité émane directement de l'équipe (Chemical Reviews).

L'objectif d'augmenter les relations avec les acteurs socio-économiques semble encore en retrait.

Il avait été recommandé d'être vigilant quant aux risques de dispersion des ressources humaines et financières au sein de l'équipe dans un contexte où les besoins pour maintenir et acquérir des instruments onéreux indispensables aux projets de recherche sont conséquents. Ces risques accrus par l'intégration de LETIAM ont été pris en compte par le biais d'un renforcement des moments d'échanges scientifiques (réunion d'équipe mensuelle et séminaires thématiques).

Le précédent comité avait émis deux points de vigilance. Le risque de dispersion thématique et l'aspect vital que revêtent l'accès à des instruments de spectrométrie de masse renouvelés ainsi que le maintien opérationnel de la plateforme CLIO. Plusieurs spectromètres de masse ont été intégrés grâce à l'arrivée de l'équipe LETIAM au cours de la période (LTQ Orbitrap, plusieurs triples quadropôles).

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

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

Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	5
Sous-total personnels non permanents en activité	8
Total personnels	28

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe CAPRI est une référence nationale et internationale dans le domaine de l'étude de la physicochimie des ions isolés, des méthodes analytiques et de la spectrométrie de masse. Elle a de nombreuses collaborations nationales et internationales et réalise des actions d'accueil via l'infrastructure 'Infranalytics', le PEPR LUMA et la ligne 'DESIRS' du synchrotron 'SOLEIL' qui alimentent aussi son réseau de collaborations. Sa visibilité à l'international émane d'une expertise scientifique et technologique remarquable, liée à ses développements instrumentaux, parfois uniques pour les plateformes 'CLIO SMAS' et 'CERISES' et son attractivité se développe via les récents investissements réalisés (HRMS (High Resolution Mass Spectrometry), lasers de pompe, LC-MS/MS (Liquid Chromatography coupled to tandem Mass Spectrometry...)).

Les thématiques de l'équipe s'inscrivent dans cinq des six axes de recherche transversaux de l'unité, participant ainsi grandement à son animation scientifique. La valorisation scientifique est réalisée en grande partie dans des revues de la chimie physique, de la spectrométrie de masse et des sciences analytiques. Une partie de l'équipe est particulièrement investie dans le développement et le maintien de montages et dispositifs instrumentaux originaux. La disponibilité du personnel d'appui à la recherche participe grandement à cet effort vers l'excellence scientifique de l'équipe.

Points forts et possibilités liées au contexte

La pluridisciplinarité des thématiques abordées est un atout de l'équipe avec une réelle et enrichissante ouverture scientifique. Le large éventail d'expertises scientifiques et techniques des membres de l'équipe, inhérent à cette pluridisciplinarité, lui permet de réaliser un travail original de développement d'instruments (IRMPD "Infrared Multiple Photon Dissociation", par exemple) et de méthodes. Tout le personnel dévolu à la recherche mène une politique de coévolution entre recherche et instrumentation autour de plateformes et plateaux techniques, avec le souci constant d'une offre technologique cohérente et ouverte sur l'extérieur (à travers l'infrastructure nationale 'Infranalytics' ou le PEPR LUMA pour CLIO SMAS).

La production scientifique est de très bonne qualité (142 ACL) dans des journaux internationalement reconnus et faisant référence dans les domaines de la spécialité de l'équipe, e.g. physico-chimie, chimie analytique et bio-analyse (Chemistry, Chemical Physics Letters, ChemPhysChem, Journal of Physical Chemistry A,B, Analytical Chemistry, Journal of the American Society for Mass Spectrometry, Journal of Chromatography A...) ou dans des journaux plus généralistes ou de domaines transversaux (Scientific Reports). La production scientifique (2,0 articles / ETPR / an) a été maintenue à un très bon niveau malgré des contraintes techniques importantes (difficultés du développement instrumental et méthodologique sur des instruments complexes, complexité des matrices biologiques, ...), l'arrêt de CLIO entre 2019 et 2024 et une forte mobilisation des EC avec des charges excédentaires d'enseignement.

L'équipe participe activement à des manifestations scientifiques (36 conférences internationales dont 50 % invitées). La visibilité nationale et internationale de l'équipe est démontrée et indéniable avec un taux élevé (63 %) de publications réalisées en collaboration, dont certaines (Sorbonne université, Stockholm University, Università di Roma "La Sapienza", ... ayant abouti à des articles dans des journaux à fort impact (Nature Astronomy).

L'équipe est active dans la recherche de financements publics avec une bonne réussite aux AAP nationaux (4 projets ANR dans la période, dont 100 % en coordination), locaux (labex PALM, Graduate School, au nombre de 16) et régionaux de type Domaine d'Intérêt Majeur. Elle a bénéficié aussi de deux projets H2020 pour la maintenance et l'accueil de chercheurs sur CLIO et d'un fort soutien pour ses plateformes de l'infrastructure 'Infranalytics', du PEPR LUMA et de Soleil.

L'équipe est fortement impliquée dans des responsabilités de formation académique (BUT, Master, ERASMUS MUNDUS...), ce qui lui permet de recruter les meilleurs stagiaires et doctorants (13 sur la période).

Plusieurs membres de l'équipe sont membres d'instances locales et nationales, ou du bureau de sociétés savantes (U. Paris-Saclay, Chimie Physique SCF/SFP),

Points faibles et risques liés au contexte

Les départs programmés de cinq chercheurs CNRS (dont 3 DR) d'ici 2026 peuvent entraîner un déficit d'animation scientifique, de visibilité, et une perte partielle de compétences au sein de l'équipe (18 C ou EC à la fin de la période évaluée). Ces départs risquent d'impacter le maintien de certains thèmes, voire d'outils de mesure, dans un contexte socio-économique de rationalisation des moyens. Ces risques sont en cours d'évaluation par l'équipe avec comme première décision le regroupement des axes « Interactions avec les photons » et « Réactivité des ions ». Il n'y a pas eu de recrutement CR ou MCF durant la période. Les contraintes de renouvellement du potentiel humain de recherche et les thématiques à conserver à un horizon de cinq ans sont des questions centrales et d'actualité auxquelles l'équipe est confrontée. Celle-ci devra être amenée à faire des choix stratégiques.

L'équipe présente un faible nombre de PAR (3) au regard de la densité et du haut niveau de technicité des équipements lourds et mi-lourds présents (CLIO par exemple) qui demandent un large panel de compétences techniques pour leur maintenance.

Le dynamisme des chercheurs pour soumettre des projets est réel, mais, pour certains projets les montants alloués sont faibles (18 PIA pour 157 k€) au regard du besoin des thématiques reposant sur des instruments coûteux et qui requièrent une jouvence fréquente pour se maintenir dans la compétitivité internationale.

Les liens avec le monde socio-économique (contrats pour un montant total de 34 k€ durant la période et pas de convention Cifre) sont faiblement activés.

L'équipe composée de dix-huit chercheurs et enseignants-chercheurs) a accueilli treize doctorants dans la période avec un taux doctorants/HDR de 1:1, la production scientifique associant des doctorants est modérée (15 % de la production de l'équipe).

Analyse de la trajectoire de l'équipe

Certains indicateurs actuels (collaborations, qualité de la production scientifique...) montrent le grand dynamisme des membres de l'équipe et d'autres indicateurs (pyramide des âges du personnel hormis PREM centrée sur 52 ans, non-recrutement C ou MCF pendant la période, parc instrumental vieillissant...) révèlent que l'équipe doit se réorganiser autour de thématiques et d'outils phares qu'il conviendra d'identifier. L'équipe a entrepris un travail de restructuration (3 groupes au lieu de 4) et a mis en place des canaux de communication inter-groupes, mais le départ de cinq chercheurs CNRS d'ici 2026 (dont 3 DR ayant un rôle moteur et une forte visibilité internationale) est indéniablement un élément impactant dont l'équipe doit prendre toute la mesure.

L'équipe devrait tracer une trajectoire adaptée pour éviter une dispersion des forces humaines, afin de maintenir l'excellence de l'expertise scientifique et technique de ses membres et accroître son ouverture à des partenariats extérieurs, tant académiques qu'industriels. L'environnement local du plateau de Saclay est à ce titre une opportunité majeure. Sans le recrutement de forces vives permanentes et non permanentes, le maintien et la croissance du rayonnement scientifique, ainsi que la pérennisation des outils originaux, pourraient être menacés.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Le travail de réflexion de l'équipe autour de son évolution et de ses contours thématiques a commencé. Le comité recommande à l'équipe de le poursuivre de façon active, collective et stratégique, afin d'identifier à la fois les thématiques phares à pérenniser et des thématiques émergentes à fort potentiel d'attractivité et offrant des opportunités d'ouverture aux niveaux national et international à travers des projets contractualisés. Le comité suggère de mener cette réflexion en prenant en compte les projections futures en matière de potentiel de recrutement, notamment des PAR. Cette restructuration thématique devrait être cohésive en intra et inter équipes (animation scientifique) et en cohérence avec les axes transverses définis par l'unité pour une reconnaissance accrue de celle-ci.

L'équipe a une stratégie d'investissement sur ses outils uniques pour la poursuite de ses activités de recherche inhérentes et la croissance de leur attractivité (par exemple CLIO). L'effort consenti chronophage pour répondre à de nombreux AAP offrant de faibles montants pourrait être contrebalancé par un investissement plus important dans des candidatures aux AAP européens, surtout pour une équipe ayant une identité scientifique reconnue à l'international. Le comité incite cependant l'équipe à anticiper les difficultés de recrutement du personnel PAR (attractivité des métiers techniques, concurrence du privé et manque de postes), d'éventuelles baisses de financements récurrents, voire d'un changement de modèle économique pour aller progressivement vers un autofinancement des plateformes. Une politique renforcée en matière de recherche de financement (Cifre, ANR, Europe...) permettrait, grâce à la reconnaissance de l'équipe, de générer des ressources propres pour le fonctionnement de ses plateformes, mais aussi de recruter un plus grand nombre de doctorants et post-doctorants (surtout dans un bassin de formation universitaire aussi riche et attractif que l'université Paris-Saclay) en vue du renouvellement de son personnel.

Équipe 2 : Chimie physique des Systèmes Biologiques (CPSysBio)

Nom du responsable : M. Oliver Nüsse

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les thématiques de l'équipe s'appuient sur une très forte expertise en physico-chimie, visant à sonder et élucider des processus biologiques et/ou chimiques grâce à des plateaux techniques et plateformes instrumentales performants (de la culture cellulaire au suivi par microscopie de fluorescence confocale, spectro-microscopie AFM-IR) et une approche duale expérience--simulation. Elles sont regroupées autour de quatre axes assez distincts. Deux d'entre eux impliquent, d'une part, la compréhension de mécanismes sous-tendant le stress oxydant et, d'autre part, l'élaboration et l'utilisation de protéines fluorescentes comme sondes d'interactions et d'organisation *in cellulo*. Les deux autres axes s'appliquent à identifier la structure ainsi que l'évolution de la composition chimique de (nano)matériaux, en phase liquide ou à l'état solide, dans un contexte de vieillissement et de dégradation prolongés (radiothérapie, immunotoxicité, roches extra-terrestres, matériaux anciens). Ils s'inscrivent à l'interface de la chimie, de la biologie et de la physique et reposent également sur des développements instrumentaux en nanospectroscopie en champ proche.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Selon les recommandations émises lors de la précédente évaluation aux plans de son attractivité et de sa visibilité, l'équipe a su mener une politique pro-active de formation par la recherche auprès des étudiants de master pour attirer des doctorants et leur offrir un suivi de qualité (un tiers des articles associe les doctorants). Elle s'est efforcée d'orienter sa politique éditoriale vers des journaux généralistes, de large audience, tout en conservant un large spectre d'éditeurs plus spécialisés en accord avec la diversité thématique de ses axes. Elle s'est ouverte à des collaborations industrielles, impliquant notamment des grands groupes (L'Oréal, Michelin, Total, Bruker, IPFEN) qui contribuent de manière substantielle aux finances de l'équipe (~680 k€ sur le contrat). À noter que cette ouverture est principalement portée par un des quatre axes (micro-spectroscopie AFM, ayant déposé deux brevets sur des développements instrumentaux). La participation de l'équipe à des réseaux et projets internationaux demeure encore en retrait. Pour ce qui est de l'organisation et la vie du groupe, l'équipe a continué de promouvoir les échanges scientifiques sur l'ensemble des axes au travers de la programmation de séminaires (quinze par an) et de réunions, abordant les aspects organisationnels et budgétaires, inhérents à la vie du groupe et du laboratoire en général. Enfin, s'agissant de stratégie scientifique et du rééquilibrage des forces humaines mobilisées sur les projets, elle s'est efforcée d'impulser une plus grande transversalité dans la science développée au niveau des quatre axes. Elle fait néanmoins face à des départs de personnel et à des évolutions thématiques qui entérinent les divergences d'orientation scientifique et les déséquilibres préexistants au plan de moyens humains.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	4
Maitres de conférences et assimilés	3
Directeurs de recherche et assimilés	3
Chargés de recherche et assimilés	1
Personnels d'appui à la recherche	6
Sous-total personnels permanents en activité	17
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	3
Personnels d'appui non permanents	0
Post-doctorants	0
Doctorants	4
Sous-total personnels non permanents en activité	7
Total personnels	24

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

Les activités scientifiques de l'équipe CPSysBio sont organisées autour de deux thématiques principales que sont, pour l'une, l'ingénierie et la microscopie de protéines pour des applications dans la compréhension du stress oxydant et la détection de processus d'interaction et, pour l'autre, l'imagerie nanoscopique par sonde locale de type AFM, couplée à la spectroscopie infrarouge, pour des objets relevant de la biologie, des matériaux anciens, et de l'espace.

Les produits de la recherche sont principalement caractérisés par la publication d'articles scientifiques en grand nombre (186 sur la période) dont un quart dans des journaux de forte à très forte audience, des développements instrumentaux remarquables dans le domaine de la microscopie AFM-IR, récompensés à l'échelle nationale, et une forte collaboration avec le monde industriel, essentiellement sous la forme de soutiens financiers plutôt que de conventions Cifre.

L'équipe se distingue par son excellente implantation dans l'environnement local, illustrée par l'obtention de seize contrats de recherche régionaux, et sa participation à la direction adjointe du laboratoire. A contrario, son implication dans des réseaux européens ou internationaux et sa participation à des conférences internationales demeurent en retrait.

Concernant la vie de l'équipe, une communication régulière en son sein est instaurée, notamment grâce à la programmation régulière de séminaires de la part de doctorants, ce qui a participé à l'identification des évolutions thématiques et de souhaits de reconfiguration de l'équipe.

Points forts et possibilités liées au contexte

Une stratégie de croisement d'études physico-chimiques et biologiques a pu être mise en place grâce aux compétences et instrumentations environnantes, relevant de la radiolyse, de la spectroscopie, de la spectrométrie de masse, de la microscopie de fluorescence et de l'ingénierie de protéines fluorescentes. Ce savoir-faire a permis de gagner en finesse dans la compréhension des processus complexes du stress oxydant, ouvrant de plus larges perspectives dans la conception de traitements thérapeutiques et d'agents d'imagerie pour le diagnostic de pathologies ou de réorganisation cellulaire.

Le développement et l'utilisation de microscopes à force atomique innovants dont le couplage à des sources excitatrices dans l'infrarouge (AFM-IR) ouvre la voie vers la cartographie et l'identification de la composition de nano-objets et de films minces via leurs réponses vibrationnelles et photo-acoustiques. Ces thématiques sont développées dans un environnement local favorable, grâce à des équipements répondant à leurs besoins, au travers du plateau technique SplCy.

Grâce à la présence de sept microscopes AFM complémentaires et de pointe, majoritairement regroupés sur un seul site, la plateforme MUSIICS offre un cadre privilégié pour l'accueil de nombreux collaborateurs nationaux et internationaux, académiques comme privés, et voit son fonctionnement très largement abondé par des contrats industriels (140 k€ par an). Elle n'a cessé de se développer et bénéficiera de nouveaux instruments (couplage à un microscope optique pour la biologie, montage sous atmosphère contrôlée, exempte de contamination humaine), pour étudier des échantillons organiques et inorganiques, issus de missions spatiales, dans le cadre du PEPR ORIGINS (1,9 M€).

La production scientifique, de qualité, s'élève à 186 articles (soit 3,73 articles /ETPR / an), dans des journaux aux spécialités très diversifiées et dans d'autres, plus généralistes, d'audience forte (soit 20 % des articles, comme Analyst, Biophysical Journal, ChemBioChem, ChemPhysChem, Free Radical Biology and Medicine, International Journal of Molecular Science, Journal of Physical Chemistry C) à très forte (soit 3 % des articles, comme ACS Nano, Proceedings of the National Academy of Sciences, Scientific Reports, Science). Les doctorants (19 dont 15 ont déjà soutenu) sont associés à un tiers d'entre elles, avec une moyenne de 2,25 articles par doctorant. Une moyenne de sept à dix co-auteurs par article, appartenant à des laboratoires distincts, est usuelle, en accord avec le caractère pluridisciplinaire des études réalisées. La plateforme MUSIICS a donné lieu à 41 publications, illustrant la valeur ajoutée des mesures qui y sont réalisées.

L'équipe est très active dans l'obtention de financements auprès d'appels à projets locaux (Labex Nansoclave (6), Labex Palm (1), Objets interdisciplinaires Bioprobe (8) et INanoTheRad (1), Graduate Schools) GS (2), comme coordinatrice pour un montant total de ~700 k€) ou régionaux dans le cadre de l'étude de matériaux anciens (DIM Matériaux Anciens et Patrimoniaux ~855 k€). L'axe sur le développement instrumental d'AFM entretient des

liens forts avec l'industrie grâce à l'établissement de partenariats avec des multinationales (L'Oréal, Michelin, Total, Bruker, IPFEN) pour un montant de ~680 k€. Le dynamisme de l'équipe dans le développement instrumental d'outils de nanomicroscopie infrarouge s'est vu récompensé par l'octroi du prix Raymond Castaing de la Société Française de Microscopie en 2023.

L'équipe s'efforce d'instaurer une dynamique collective grâce à la programmation de séminaires réguliers (15 par an), offrant aux doctorants la possibilité d'échanger sur leurs travaux.

Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe s'est recomposée depuis le contrat précédent. Force est de constater que les axes forts, l'un orienté sur l'étude d'objets biologiques et l'autre sur la microscopie AFM-IR, ont évolué de manière indépendante. Le sous-axe sur l'immunotoxicité des nano-objets est voué à disparaître, faute d'EC/C présents, fermant ainsi les ouvertures réalisées dans le passé. Le départ de cinq permanents ainsi que les évolutions thématiques fortes, amenant à diminuer les moyens humains et à les concentrer au profit d'une activité donnée, peuvent être source d'un appauvrissement et d'un repli scientifiques, au détriment d'une plus grande ouverture disciplinaire.

La forte augmentation du nombre d'articles publiés ne s'accompagne pas pour autant d'une visibilité accrue dans des journaux de plus large audience (un quart seulement d'articles concernés).

La participation à des conférences sous la forme de communications orales (22) apparaît en retrait au regard de l'expertise des membres de l'équipe et de sa production scientifique, et encore plus si l'on considère des conférences à l'international qui représentent seulement 36 % du nombre total. Cette faible ouverture à l'international se retrouve dans l'absence de projets contractualisés avec des établissements étrangers.

L'origine des financements et la coordination des projets sont très contrastées avec un total de six projets ANR (dont 1 seul en coordination) au regard des nombreux contrats de partenariats industriels (9) et des réponses aux appels à projets locaux (16) largement couronnés de succès et portés par l'équipe.

L'équipe ne mentionne pas d'action particulière de diffusion des connaissances, de médiation scientifique ou de culture scientifique vers la société.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

L'évolution de l'équipe, entre séparation et disparition thématiques, n'est pas clairement définie à ce jour. Par conséquent, l'équipe devra très rapidement mener des réflexions pour aboutir à une stratégie scientifique cohérente, viable et solidaire au niveau des interactions en interne (au sein des groupes et des équipes) et en externe.

Les difficultés à porter de nouveaux objets d'études, en dehors des deux thématiques majeures du stress oxydant et plus récemment de la nanospectroscopie par AFM, conduisent à un resserrement thématique. Ce resserrement se révélera bénéfique s'il amène à largement interagir avec des collègues d'horizons divers et complémentaires, pour lever des verrous scientifiques bien identifiés.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Les interactions, au-delà du territoire francilien et de partenariats académiques, mériteraient d'être pleinement explorées. Ceci vaut également pour l'ouverture à l'international au travers de projets contractualisés et des participations à des conférences.

Le comité incite à exploiter le fort potentiel de développement instrumental pour stimuler l'établissement de conventions Cifre, l'accueil d'étudiants en master en alternance, ou encore le portage de contrats ANR de type PRCE afin de faire profiter le monde industriel et les jeunes générations des avancées scientifiques stimulantes accomplies.

L'équipe ne devrait pas hésiter à profiter de sa participation à des réseaux thématiques ou sociétés savantes (Société Française de Photobiologie, action COST) pour contribuer à une plus grande visibilité de certaines de ses thématiques comme l'ingénierie et la microscopie de protéines fluorescentes ainsi que la microscopie AFM-IR, et ainsi favoriser le dépôt de projets conjoints aidant au renouvellement ou à l'achat de nouveaux équipements, notamment au sein du plateau technique SpICy.

La production scientifique de l'équipe, exclusivement dévolue à la publication d'articles à destination du monde académique et au transfert technologique de développements instrumentaux vers l'industrie, mériterait de s'étendre à des actions de diffusion de la culture scientifique pour valoriser pleinement des résultats liés au vivant ou à l'espace.

Équipe 3 : Transfert d'électron en Milieu Condensé (TEMiC)

Nom du responsable : M. Christophe Humbert

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

L'équipe TEMiC (Transfert d'Electrons en Milieu Condensé) travaille sur les mécanismes de transfert d'électrons en phase condensée, en solution et aux interfaces. Elle agrège des méthodes de cinétique, électrochimie et spectroscopie autour de deux instruments structurants : l'accélérateur d'électrons ELYSE et la source panoramique gamma. L'équipe est également dotée d'un laboratoire de synthèse et caractérisation de nanomatériaux.

L'équipe est structurée en trois groupes :

ACHILE (Actes CHImiques éLEmentaires en phase condensée) explore la cinétique et dynamique des réactions rapides en solution ou à l'interface mettant en jeu des radicaux transitoires (domaines de l'énergie et de la santé).

EPEC (Electrochimie et PhotoElectroChimie) aborde le comportement RedOx des polyoxométallates et hybrides (domaine de l'énergie).

INPACT (Interfaces et Nanomatériaux Photo et électro-ACTifs) développe de nouveaux matériaux nanostructurés photoactifs (domaines du développement durable et de la santé).

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le précédent rapport suggérait d'améliorer l'homogénéité de l'équipe, à la fois sur le plan des disparités de publication entre C et EC et sur le plan du renforcement des interactions inter-groupes.

Le groupe INPACT est né en 2022 de la fusion entre deux groupes afin de créer plus de liens avec les deux autres groupes actuels. À noter tout de même la forte disparité d'effectifs entre INPACT et les deux autres groupes. Une disparité est également constatée entre chercheurs et enseignants-chercheurs : 1 C + 1 EC pour ACHILE (1 C vient d'être recruté), 1C + 3 EC pour EPEC ; 3C + 5 EC pour INPACT (1EC vient d'être recruté).

Tous les C et EC sont publiants dans la période et participent à l'encadrement des doctorants (28 doctorants sur la période).

Il y a peu de critères pour juger d'une activité scientifique croisée entre les trois groupes mais il est évident que le groupe INPACT, doté du plus gros effectif, a produit le plus de publications (140). Les domaines de recherche abordés par les trois groupes se recoupent deux à deux : Energie pour ACHILE et EPEC, Santé pour ACHILE et INPACT. Ce recoupement pourrait être mieux exploité pour montrer la cohésion intra-équipe. Des plateaux techniques ont été regroupés autour de l'accélérateur ELYSE et deux nouveaux laboratoires de chimie ont été créés. Deux nouveaux projets de spectroscopie vibrationnelle de somme de fréquences (SFG) au sein d'INPACT ont permis de renforcer les échanges inter-groupes. La thématique "nano" devient ainsi transverse à l'ensemble de l'équipe sur l'ensemble des domaines mentionnés dans les thématiques.

Sur le plan de la vie de l'équipe, le rapport mentionne la tenue de réunions inter-groupes pour les questions relatives à la vie et organisation de l'équipe mais pas de temps d'échanges scientifiques spécifiques. La nouvelle structure en trois groupes datant de 2022, il est encore nécessaire de consolider la cohésion de l'ensemble.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	5
Maîtres de conférences et assimilés	4
Directeurs de recherche et assimilés	2
Chargés de recherche et assimilés	3
Personnels d'appui à la recherche	4
Sous-total personnels permanents en activité	18
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	2

Personnels d'appui non permanents	3
Post-doctorants	3
Doctorants	17
Sous-total personnels non permanents en activité	25
Total personnels	43

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

La production scientifique de l'équipe est en tout point excellente, avec 221 publications durant la période dont certaines dans des journaux généralistes de tout premier plan (Nat. Comm., Angew. Chem., Chem. Sci.), 80 conférences invitées, huit communiqués INC et cinq dépôts ou extension de brevet. Avec quatorze permanents et vingt doctorants et post-doctorants durant la période, l'ensemble de ces indicateurs témoigne d'une activité et attractivité scientifiques remarquables.

L'organisation de l'équipe en trois groupes (restructuration en 2022) s'articule autour de deux plateformes de radiolyse (accélérateur ELYSE et source gamma), quatre plateaux techniques et des laboratoires de chimie avec une forte thématique transverse autour des nanomatériaux.

Les trois groupes déploient leur activité autour de trois domaines de recherche : Energie, Santé, Développement durable, avec un certain recouvrement. On peut cependant noter une disparité d'effectifs (rapport C/EC, nombre de doctorants), la nouvelle équipe INPACT étant la plus conséquente.

Points forts et possibilités liées au contexte

Le centrage thématique de l'équipe autour de l'étude des transferts d'électrons en phase condensée et aux interfaces est assez clair et spécifique dans le paysage national, voire international, même si les groupes apparaissent avec des activités relativement indépendantes. L'axe d'étude des nanomatériaux peut apparaître transverse à l'ensemble de l'équipe.

L'activité scientifique de l'équipe est excellente et témoigne d'une reconnaissance nationale et internationale avérée avec une activité de publication très soutenue dans les meilleurs journaux généralistes (e.g. Nat. Comm., Angew. Chem., Chem. Sci., Appl. Mat. Interface), des conférences invitées internationales (e.g. IMRC 2019, Nanomat 2018, Int. Conf. Photochem 2023, IUPAC 2019...), des affichages INC-CNRS, des demandes de brevets (5 brevets ou extension et le développement de 2 start-up (Bichromatics sur les couleurs plasmoniques et COCAPEC sur les encres). L'équipe a publié 221 articles pendant la période avec une moyenne d'environ 4 ACL / ETPR / an. L'organisation de la 'Miller conférence' en 2023 témoigne largement de cette visibilité internationale.

L'équipe est dotée de deux instruments de radiolyse (ELYSE et source gamma) qui accroissent sa visibilité et lui offrent un positionnement thématique relativement clair autour des trois domaines de recherche : santé, énergie, développement durable (sans compter 4 plateaux techniques de caractérisation optique et physico-chimique résolue en temps, un laboratoire de synthèse et caractérisation des nanomatériaux, entre autres). Ces instruments forment un ensemble unique dans le paysage national.

Plusieurs membres de l'équipe sont fortement impliqués dans les instances ou organismes nationaux de la recherche (CNRS, CNAM) ou à l'échelle de l'université Paris-Saclay.

L'encadrement des doctorants (à majorité internationale) de l'équipe est réparti sur les trois groupes et ce nombre a augmenté depuis la dernière évaluation (10 doctorants ont soutenu sur la période 2018-2023, 17 en cours, 4 durant la précédente période mais les périmètres des groupes ont changé). L'encadrement post-doctoral (13) est également conséquent au cours de la période.

Points faibles et risques liés au contexte

Les effectifs de l'équipe sont répartis de façon inhomogène sur l'ensemble des trois groupes avec le risque de fragiliser le fonctionnement des trois axes.

Les plateaux techniques qui comprennent deux instruments lourds de radiolyse (ELYSE et source gamma) nécessitent un soutien technique qui est actuellement fragilisé par le départ d'un ingénieur d'études. La source gamma qui est vieillissante devra être remplacée dans les deux prochaines années.

Alors que l'activité scientifique de l'équipe est exceptionnelle, le nombre de publications impliquant des doctorants dans les projets collaboratifs (35 %) est en retrait.

Le manque d'espace semble impacter la croissance du groupe INPACT et risque de compromettre son attractivité dans le futur, ce qui rejoint la nécessité d'une discussion à l'échelle de l'unité sur la rénovation et l'organisation des locaux disponibles.

La création du groupe INPACT a permis d'afficher une interface autour de la thématique des nanomatériaux, devenant ainsi axe scientifique transverse aux groupes EPEC et ACHILE. Cependant, les disparités de taille entre les groupes peuvent limiter les efforts de structuration et de cohésion de l'équipe dans son ensemble.

L'équipe s'appuie sur des contrats nationaux et internationaux d'envergure (e.g. MSCurie 2018, Labex Nanosclay, ETN Horizon 2020 « LightDynamics », IEA CNRS...) mais le nombre de contrats ANR en coordination reste limité (2 sur 8). Malgré les efforts indéniables de valorisation de l'équipe, le nombre de contrats avec le secteur privé ou semi-privé est encore limité.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

L'équipe possède des compétences dans l'étude des transferts d'électrons dans les phases condensées et à l'interface, qui ont une visibilité avérée, avec notamment une large gamme d'instruments remarquables dont l'accélérateur d'électrons ELYSE. Ce positionnement est valorisé au travers de nombreuses collaborations nationales et internationales. Les trois groupes émergent dans les domaines de l'énergie, de la santé et du développement durable avec un certain recouvrement thématique. L'équipe souhaite renforcer cette structuration autour de deux thématiques : Transition énergétique et développement durable : du fondamental à l'appliqué, et Santé : approche fondamentale (ce qui reprend les domaines précédemment décrits). Cette trajectoire de l'équipe, toujours structurée en trois groupes (ACHILE, EPEC, INPACT) correspond aux enjeux stratégiques de France 2030 et s'aligne parfaitement dans la continuité du bilan depuis 2018. Le renforcement des domaines Energie, Développement durable d'une part et Santé d'autre part, doit permettre d'améliorer la cohésion et la cohérence scientifique ainsi que de mettre en valeur des exemples d'études transverses.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

Le développement d'interconnexions dans l'équipe entre les trois groupes, mais également avec les autres équipes de l'unité doit être encouragé et poursuivi autant que possible.

Le maintien et la jouvence des deux plateformes (ELYSE et source gamma) doivent être une priorité pour l'équipe. Il nécessite des financements importants et le comité recommande à l'équipe de discuter avec la direction afin d'envisager une mobilisation des moyens à l'échelle de l'unité.

Équipe 4 : Théorie et Simulation (TheoSim)

Nom de la responsable : Mme Carine Clavaguera

THÉMATIQUES DE L'ÉQUIPE

Les membres de l'équipe TheoSim possèdent une vaste gamme d'expertises et de compétences en chimie théorique, contribuant toutes à l'axe transversal de l'unité dédié au développement de codes, d'outils et de modèles.

Les activités de recherche sont réparties en trois axes : (1) Photochimie et spectroscopies, (2) Processus élémentaires induits par le rayonnement ionisant et (3) Modélisation des systèmes biologiques. Les systèmes étudiés sont très divers en nature et en taille, allant des molécules isolées aux espèces en solution, ainsi qu'aux nano-objets et molécules biologiques complexes.

PRISE EN COMPTE DES RECOMMANDATIONS DU PRÉCÉDENT RAPPORT

Le précédent rapport avait fait émerger les recommandations suivantes : (1) L'équipe doit être vigilante à réduire les disparités au plan de sa production, en impliquant tous les personnels chercheurs et enseignants-chercheurs dans les projets de recherche. 2) L'équipe doit continuer à œuvrer pour la proactivité des interactions au sein de l'unité, mais aussi à organiser des séminaires mêlant les différentes équipes et les différentes compétences. 3) Le dynamisme très important auprès de différents appels à projets doit se poursuivre afin d'amplifier la visibilité internationale de l'équipe.

Au cours de cette période, l'équipe a su favoriser une dynamique de travail collaborative, promouvant les collaborations avec les autres équipes. L'organisation par axe thématique a joué un rôle clé dans cette mobilisation, facilitant non seulement la codirection de thèses, mais aussi le dépôt de projets communs. Par ailleurs, l'activité inter-équipe a abouti à ce que 10 % de la production scientifique soit issue de collaborations avec d'autres équipes. Quand bien même la production est toujours hétérogène entre les membres de l'équipe, les collaborations ont permis à tous les membres de fournir une production scientifique qui est globalement très bonne voire excellente pour certaines thématiques. Notamment les collaborations avec la biologie et la physique ainsi que les développements Valence Bond ont abouti à des publications dans des revues généralistes très reconnues (e.g. Nature, Nature Chem, JACS).

Le dynamisme de l'équipe dans sa réponse aux AAP a été maintenu avec succès. En témoigne l'obtention de dix projets ANR au cours de la période. Du point de vue international, trois projets ERC ont été déposés, dont un retenu pour la seconde phase.

L'animation scientifique de l'équipe reste néanmoins en retrait.

EFFECTIFS DE L'ÉQUIPE : en personnes physiques au 31/12/2023

Catégories de personnel	Effectifs
Professeurs et assimilés	1
Maitres de conférences et assimilés	3
Directeurs de recherche et assimilés	4
Chargés de recherche et assimilés	0
Personnels d'appui à la recherche	1
Sous-total personnels permanents en activité	9
Enseignants-chercheurs et chercheurs non permanents et assimilés	3
Personnels d'appui non permanents	1
Post-doctorants	3
Doctorants	5
Sous-total personnels non permanents en activité	12
Total personnels	21

ÉVALUATION

Appréciation générale sur l'équipe

L'équipe Théosim est une équipe offrant une bonne cohésion scientifique et dont les activités de recherche couvrent un large spectre, allant du développement de méthodes théoriques jusqu'à des applications dans le domaine de la biologie. On peut noter le développement des méthodes originales de photodynamique ou la simulation de la transparence des cornées et des plasmas. La production scientifique (4 articles / ETPR / an) et le développement de codes dont certains, tel que deMon2k ou XACS à visibilité internationale, sont remarquables.

L'équipe a trouvé un excellent équilibre entre le développement méthodologique et la collaboration avec des équipes d'expérimentateurs internes ou externes. Les innovations méthodologiques ont été mises en avant avec succès, notamment dans le cadre des axes transversaux de l'ICP, permettant ainsi d'appliquer ces nouveaux outils à des projets interdisciplinaires. D'ailleurs, le nombre d'articles en collaboration inter-équipes alimente grandement les axes fédérateurs de l'unité.

Points forts et possibilités liées au contexte

Grâce à une activité variée en chimie théorique, l'équipe a publié 182 articles dans des journaux de chimie physique, bien reconnus dans leur domaine (PCCP, JPCX, JCP), et de chimie généraliste (Angew, JACS) mais aussi dans des revues généralistes (Nature, Nature Comm). Il faut noter que la plupart de publications généralistes proviennent de collaborations extérieures (ex. avec l'université d'Heidelberg), certaines avec d'autres équipes du laboratoire (e.g. avec TEMiC et GAMMA-X) donnant lieu à une production excellente voire remarquable pour les thématiques photochimie et systèmes biologiques. Cette production est accompagnée par une excellente production de codes.

L'équipe présente une moyenne de quatre articles par ETPR par an. Ces publications sont accompagnées de 103 conférences invitées (e.g. ACS, Pacifichem, RCTF), soulignant une excellente visibilité internationale.

La reconnaissance des activités de l'équipe ainsi que leur dynamisme ont été reflétés par plusieurs promotions pendant la période. Notamment, deux promotions DR et deux soutenances HdR.

Sur le plan des infrastructures, l'ingénieur nouvellement recruté a participé à la conception d'une nouvelle grappe de calculs, composée de plus de 700 cœurs. Cette installation est particulièrement intéressante pour l'optimisation des codes, une activité clé de l'équipe. Il est intéressant de noter que ce projet a également été pensé dans une optique de maîtrise de la consommation électrique.

Au-delà des développements de codes, l'équipe joue un rôle de cohésion important au niveau de l'unité, comme en témoigne les 10 % des publications issues de travaux collaboratifs inter-équipes.

À l'exception de Demon2K qui est sous licence restrictive, les développements effectués sont partagés avec la communauté scientifique au travers des plateformes ouvertes, telles que GitHub, une plateforme open source de gestion de versions et de collaboration destinée aux développeurs de logiciels. Ceci témoigne d'un engagement pour la diffusion du savoir et le partage des outils.

L'équipe est fortement impliquée dans l'enseignement et le transfert de connaissances. L'un de ses membres est coordinateur du Label de Chimie Théorique en Île-de-France. Onze doctorants ont soutenu leur thèse, et cinq thèses sont actuellement en cours.

Les jeunes chercheurs ont trouvé leur place dans l'équipe, comme en témoigne le soutien de leurs thématiques par des projets ANR JCJC et PRC (QDELIGHT, SUPERET). L'équipe a démontré un excellent succès à des AAP, avec dix projets ANR obtenus au cours de la période dont cinq en coordination, ainsi que plusieurs contrats industriels avec l'IFPEN et Safran et un projet ECOS-Nord avec le Mexique.

Enfin, l'équipe est fortement engagée dans les instances locales (e.g. VP chargée de formation Paris-Saclay, VP enseignement UFR de Sciences), nationales (e.g. coCNRS, GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif)), des sociétés savantes (société chimique de France, Société Française de Physique) et les groupements de recherche (e.g. comités de pilotage de Thémolia, GDR SolVATE, GDR EMIE). Cette implication témoigne de la reconnaissance et de l'influence de l'équipe dans la communauté scientifique française.

Points faibles et risques liés au contexte

L'équipe est confrontée à des défis liés à la réduction de ses effectifs qui pourraient affaiblir son potentiel recherche, d'autant plus que l'équipe s'investit largement dans les instances.

Les interactions de l'équipe avec le monde industriel (IFPEN, Safran) risquent de disparaître, et les collaborations inter-équipes se verront aussi affectées, dû à la perte de connaissances sur l'analyse des données.

La production scientifique et la visibilité internationale sont hétérogènes dans l'équipe.

La participation des étudiants aux projets transverses et aux publications associées, qui contribuent à la cohésion du laboratoire, est assez faible (41 publications associant au moins un étudiant /182).

L'animation scientifique de l'équipe demeure limitée.

Analyse de la trajectoire de l'équipe

L'équipe s'inscrit dans une trajectoire clairement axée sur le développement de projets en Deep Learning. Cette orientation stratégique a été bien amorcée, avec l'organisation de deux séminaires dédiés à cette thématique, permettant de rassembler les effectifs concernés. En parallèle, l'équipe a obtenu du temps ingénieur supplémentaire, ce qui constitue un atout essentiel pour soutenir le développement des outils et des projets en lien avec l'IA (Intelligence Artificielle). Bien que l'IA soit devenue un nouvel outil essentiel dans les approches numériques, le comité encourage l'équipe à ne pas négliger ses thématiques phares tels les développements méthodologiques et de codes. L'IA peut néanmoins aider à rétablir les collaborations qui se créaient avec les autres équipes grâce à l'analyse de données, thématique en retrait due au départ d'un de ses membres.

L'équipe envisage de promouvoir l'embauche d'un jeune chercheur spécialisé en chimie sous rayonnement ionisant, ce qui sera intéressant pour enrichir cet axe transversal de l'unité.

Du point de vue de l'implication dans les décisions, l'équipe est en train d'organiser le changement de sa direction, ce qui permettra une transition graduelle.

RECOMMANDATIONS À L'ÉQUIPE

L'une des activités les plus remarquables de l'équipe est sa production méthodologique et de codes. Ainsi, l'équipe est encouragée à mettre l'ensemble de ses codes plus en avant, les rendant plus visibles et capitalisables (comptage de nombre de téléchargements, meilleure mise en avant sur le site web, disponibilité des manuels d'utilisation).

L'équipe est solidement engagée dans une démarche de développement autour du Deep Learning, grâce aux moyens techniques et humains prévus. Il est recommandé qu'elle se positionne dans ces approches d'analyse de données de grande taille afin de soutenir les interactions avec les collègues expérimentateurs.

Le comité incite l'équipe à continuer la promotion de la soutenance de HDR auprès des jeunes chercheurs.

Il serait intéressant d'impliquer les doctorants dans les nouveaux axes transverses, sources potentielles de publications dans des journaux généralistes.

Le comité recommande à l'équipe d'instaurer des séminaires internes ou invités réguliers, mettant en avant les axes transversaux.

Les collaborations avec l'industrie devraient être renforcées afin de mieux valoriser les contacts de l'équipe avec le monde socio-économique.

DÉROULEMENT DES ENTRETIENS

DATES

Début : 27 novembre 2024 à 08h30

Fin : 28 novembre 2024 à 17h00

Entretiens réalisés en présentiel

PROGRAMME DES ENTRETIENS

Mercredi 27 novembre 2024

Horaire	Entretiens	Huis Clos
08h15-08h45	Réunion démarrage du comité	oui
08h45-09h00	Présentation du comité aux membres de l'unité	non
09h00-10h00	Exposé du bilan et de la trajectoire de l'unité par le Directeur (30 minutes présentation + 30 minutes discussion)	non
10h00-10h35	Exposé du bilan et de la trajectoire de l'équipe «Chimie physique des Systèmes Biologiques (CPSysBio)» (20 minutes présentation + 15 minutes discussion)	non
10h35 – 11h00	Pause	
11h00-11h35	Exposé du bilan et de la trajectoire de l'équipe «Théorie et Simulation (TheoSim)» (20 minutes présentation + 15 minutes discussion)	non
11h35-13h55	Session poster + buffet	non
13h55-14h40	Exposé du bilan et de la trajectoire de l'équipe «Chimie Analytique, Physico-Chimie et Réactivité des Ions (CAPRI)» (25 minutes présentation + 20 minutes discussion)	non
14H40-15H15	Exposé du bilan et de la trajectoire de l'équipe «Transfert d'électron en Milieu Condensé (TEMIC)» (20 minutes présentation + 15 minutes discussion)	non
15H15-15H45	Entretien avec les personnels d'appui à la recherche (hors direction et responsables d'équipes)	oui
15H45-16H15	Pause	
16H15-16H45	Entretien avec les doctorants et les post-doctorants	oui
16h45-17h15	Entretien avec les chercheurs et les enseignants-chercheurs (hors direction et responsables d'équipes)	oui
17h15-18h30	Visite des équipes et plateformes	
18h30-19h00	Réunion du comité	oui

Jeudi 28 novembre 2024

Horaire	Entretiens	Huis Clos
08H15-08H30	Réunion du comité	Oui
08h30-09h00	Entretien avec les responsables d'équipes (hors direction)	Oui
09h00-10h00	Visite des équipes et plateformes	Non
10h00-10h30	Pause	
10h30-11h00	Entretien avec les tutelles	oui
11h00-11h30	Entretien avec la direction	oui
11h30-12h00	Entretien avec le directeur	oui
12h00-14h00	Pause déjeuner + réunion du comité	oui
14h00-17h00	Réunion du comité	oui

OBSERVATIONS GÉNÉRALES DES TUTELLES

L'établissement responsable du dépôt, également responsable de la coordination de la réponse pour l'ensemble des tutelles de l'unité de recherche, n'a pas déposé d'observations de portée générale.

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



19 rue Poissonnière
75002 Paris, France
+33 1 89 97 44 00

