

SECTION 14

CHIMIE DE COORDINATION, CATALYSE, INTERFACES ET PROCÉDÉS

Composition de la section

François OZANAM (président de section), Simon TRICARD (secrétaire scientifique), Fannie ALLOIN, Dominique ARMSPACH, Christine CANAFF, Yann CHEVOLOT, Samuel DAGORNE, Louise DUHAMEL, Florence EPRON, Christophe GEANTET, Hazar GUESMI, Jean-François GUILLEMOLES, Jean-Cyrille HIERSO, Abdellaziz JOUAITI, Myrtil KAHN, Jean-François LAMONIER, Dominique LORCY, Paola NAVA, Elsie Alessandra QUADRELLI, Antoine SEYEUX, Arnaud TRAVERT.

Résumé

Les disciplines représentées en Section 14 s'articulent autour de la chimie de coordination, de la chimie organométallique, de la catalyse homogène ou hétérogène, de la chimie et physico-chimie des surfaces et des interfaces et de leur réactivité, de l'électrochimie, ainsi que des procédés de transformation de la matière. Ce rapport de conjoncture dresse un état des lieux de l'activité scientifique des laboratoires et des chercheurs qui la constituent, de leur répartition géographique, de la structuration des équipes et des moyens, et de leur évolution. Le positionnement des activités de la section dans le contexte international met en évidence une dynamique autour de certains champs thématiques couverts par la section, ainsi que des disciplines en difficulté, plus éloi-

gnées des grands défis sociétaux. Cette analyse se conclut par quelques recommandations notamment pour soutenir et favoriser les approches originales et les socles fondamentaux sur le long terme.

Introduction

Les chercheurs et chercheuses, enseignantes-chercheuses et enseignants-chercheurs rattachés à la section 14 explorent différents champs de recherche sur la base d'une expertise principalement située dans de grands domaines disciplinaires de la chimie : la chimie de coordination,

la chimie organométallique, la catalyse (homogène ou hétérogène) et les procédés de transformation de la matière, la chimie et physico-chimie des surfaces et des interfaces, et l'électrochimie. À partir de ces compétences de base se développent recherches fondamentales ou appliquées. Ainsi, la section porte une vision large, conceptuelle et généraliste qui a permis de développer une relation étroite avec les entreprises, particulièrement dans les domaines de la catalyse, des générateurs électrochimiques et de la corrosion.

Les recherches et les champs disciplinaires explorés par les équipes de la section 14 ne sont pas strictement confinés au périmètre de la section. Des thématiques sont partagées avec l'ensemble des autres sections de l'institut de chimie, et plus marginalement avec des sections d'autres instituts, par exemple en ce qui concerne les grands instruments. Ainsi, lors des derniers concours, la moitié des candidates et candidats à un poste CR postulaient dans au moins une autre section (ou commission interdisciplinaire), comme environ un sixième des candidates et candidats à un poste DR.⁽¹⁾ Les frontières communes les plus notables sont celles avec la section 12 (chimie organométallique, catalyse homogène), la section 13 (chimie théorique, physico-chimie des surfaces et électrochimie interfaciale) et la section 15 (électrocatalyse et matériaux pour la conversion et le stockage de l'énergie, matériaux moléculaires). Des thématiques sont aussi partagées avec la section 11 (assemblages supramoléculaires, activation des réactions de polymérisation), et avec la section 16 (sondes multimodales pour l'imagerie et la théranostique, complexes organométalliques dans le traitement de différentes pathologies, étude de la réactivité des métalloprotéines).

Les nombreuses interfaces que la section entretient avec les autres champs thématiques traduisent les besoins de plus en plus exigeants que rencontrent les équipes pour comprendre et exploiter la réactivité des interfaces et des métaux, en particulier les métaux de transition, et leurs oxydes. Il se crée ainsi des axes d'expertise largement transverses à la section, qui dépassent même ses contours : tirer parti

ou exalter les réactivités, comprendre les systèmes au sein de leur environnement, construire des agencements de plus en plus précis et à plus grande échelle (ligands, assemblages supramoléculaires, matériaux multifonctionnels, nanoparticules, métaux ultra-dispersés, oxydes de porosités hiérarchisées) et étudier leurs propriétés. Ces objectifs nécessitent de relever des défis scientifiques difficiles : modélisation théorique et numérique à toutes les échelles de la matière (moléculaire, nanométrique, supramoléculaire et solide) et dans différents environnements (gaz, liquides, interfaces et systèmes multiphasiques), optimisation et contrôle des sites réactionnels, caractérisation en conditions opérationnelles. Ils tiennent compte d'enjeux contemporains essentiels : l'exploration et l'optimisation de la réactivité d'éléments abondants et peu exploités, de composés bio-sourcés, l'utilisation de nouvelles sources pour la transformation de la matière ou de l'énergie, le développement de procédés respectueux de l'environnement, l'élaboration d'outils de diagnostic et de thérapie médicale, précis, efficaces et ciblés. Ces exigences conduisent à des pratiques communes qui dépassent là encore le strict cadre de la section. Il peut s'agir de combiner des approches expérimentales avec des approches computationnelles et théoriques, d'avoir recours de plus en plus fréquemment aux grands instruments pour les études en environnements complexes ou exigeants, de rechercher des architectures multifonctionnelles, etc. L'ouverture à des approches interdisciplinaires est donc un élément fédérateur tout en permettant des approches diversifiées et fructueuses d'enjeux communs.

Le contour actuel de la section 14 permet de construire la vision large qui vient d'être évoquée autour de la chimie de coordination, de la chimie des surfaces et de la réactivité des interfaces et des métaux de transition. La section souhaite donc le maintien de son périmètre actuel : dans l'évaluation comme dans les pratiques quotidiennes des équipes, cette vision permet en effet d'élargir les perspectives disciplinaires et de rendre les approches plus fructueuses.

I. Évolutions depuis le précédent rapport, thèmes émergents

L'évolution des thèmes et des objets d'étude abordés par la section 14 est largement stimulée par la recherche de solutions aux grands défis énergétiques, environnementaux et de santé auxquels nos sociétés sont confrontées. Aussi, la période écoulée depuis le dernier rapport de conjoncture a vu s'amplifier les recherches liées à ces questions, à tous les niveaux. Ces évolutions et les thèmes de recherche émergents sont particulièrement mis en avant dans les projets présentés par les candidates et candidats aux concours CR et DR relevant de la section.

Ces recherches visent notamment à développer de nouvelles méthodes de synthèse, tant pour des objets d'étude spécifiques à la section (catalyseurs, édifices et matériaux moléculaires, matériaux fonctionnels, etc.) que pour les produits d'usage visés (vecteurs énergétiques, commodités, principes actifs, etc.), en utilisant une chimie plus verte, biosourcée et parfois bio-inspirée. L'utilisation d'éléments moins toxiques et/ou plus abondants, notamment en remplaçant les métaux nobles par des éléments de transition de la première rangée, des métaux du groupe principal, voire des oxydes, est largement menée. La mise en œuvre de réactions dans des milieux non usuels peu toxiques (milieu aqueux, CO₂ supercritique, liquides ioniques) ou à l'état solide (mécanochimie), susceptibles aussi de faciliter le recyclage de catalyseurs ou d'éléments critiques, est devenue une contrainte largement intégrée par la communauté.

Il importe également que ces objets opèrent dans des conditions plus douces, à des températures plus basses par exemple, tout en présentant des performances améliorées, par exemple pour l'activation de liaisons peu réactives. Ces exigences conduisent à développer de nouvelles stratégies pour organiser les objets à toutes les échelles : atomique (ultra

dispersion des métaux, catalyseurs à site unique), moléculaire (utilisation de ligands non innocents, formation de paires de Lewis frustrées, contrôle de la sphère de coordination des métaux par confinement dans des cages moléculaires, édifices moléculaires ou supramoléculaires complexes), nanométriques (encapsulation, matériaux architecturés, hiérarchisation de la porosité, nano-confinement, assemblages supramoléculaires, nano-réacteurs, enzymes ou modèles d'enzymes, nanoparticules bi- et multi-métalliques ou coeurs-coquilles), micro/millimétrique (micro fabrication, composites, réacteurs structurés) et *in fine* permettre le développement de procédés innovants. Par ailleurs, les méthodes non-thermiques d'activation de réactions sont des sujets d'études en forte progression, aussi bien pour la synthèse de composés que pour leur réactivité : réaction sous ultra-sons, sous irradiation lumineuse (activation plasmonique, excitonique), sous champs magnétiques (hyperthermie), etc.

Enfin, les dernières années ont vu l'accroissement des efforts concernant l'exploitation des matériaux bidimensionnels, tridimensionnels, lamellaires ou à base de couches minces ou de dispersions, pour leur fonctionnalisation et leur utilisation au sein d'applications variées : matériaux composites, détecteurs et capteurs, laboratoires sur puces, technologies environnementales, technologies biomédicales, stockage et conversion de l'énergie. Il s'agit le plus souvent de tirer parti des propriétés spécifiques d'éléments de basse dimensionnalité, et de les combiner à d'autres éléments pour conférer aux objets ainsi construits sélectivité, efficacité et durabilité, optimiser la performance en minimisant le volume de matière active, multiplier les fonctions disponibles au sein d'un même dispositif.

Toutes ces avancées sont possibles grâce au développement d'outils expérimentaux et théoriques performants et à leur utilisation pour l'étude des mécanismes réactionnels et des propriétés physico-chimiques des objets d'intérêt, dans des conditions réalistes. Ainsi, la période qui vient de s'écouler s'est caractérisée par un développement significatif des

techniques *in-situ*, au voisinage de la pression ambiante ou en conditions opérationnelles (*operando*) et une convergence croissante des défis théoriques liés à la description des systèmes complexes et à la rationalisation de leurs propriétés. Les développements de la spectroscopie et de la microscopie environnementale et/ou en milieux liquides permettent d'accéder à des résolutions spatiales ou temporelles élevées. Les approches théoriques se développent dans la même direction, tant en termes de méthodes que de puissance de calcul, permettant de fournir une précision proche de l'expérience, les rendant quantitativement prédictives pour des systèmes de plus en plus complexes. Fréquemment combinées avec l'expérience, les études théoriques s'efforcent d'utiliser des modèles de plus en plus élaborés, d'inclure l'environnement immédiat (interfaces gaz/liquides, solvants) et de relier les échelles de temps et d'espace caractéristiques des objets étudiés. Dans ce cadre, les études multi-échelles ou d'apprentissage automatique connaissent un grand engouement.

Les applications visées concernent d'une part les enjeux liés au développement durable : combustion des COV et dépollution, production d'hydrogène, activation et conversion de petites molécules (CO₂ en produits d'intérêts, photosynthèse artificielle), remplacement d'éléments critiques ou toxiques, valorisation de la biomasse (en produits à haute valeur ajoutée, biocarburants, gaz de synthèse), piles à combustible, batteries ou électrolyseurs pour la conversion et le stockage d'énergie à basse et haute température, conversion photovoltaïque, etc. D'autre part, de nombreuses applications nécessitent des matériaux aux propriétés (optiques, magnétiques, électriques) nouvelles ou émergentes, voire multiples, liées à des effets de commutation ou modulables, notamment par des stimuli externes, en vue d'applications de haute technologie (informatique moléculaire ou quantique, capteurs, imagerie médicale, etc.).

De façon plus prospective, on peut enfin mentionner que quelques projets portent une ambition qui nécessitera l'ouverture à de nouvelles communautés. C'est le cas de projets

envisageant l'exploitation de bases de données massives, par exemple pour une meilleure prédiction de la réactivité en catalyse. Indépendamment des défis scientifiques qu'il faudra surmonter pour l'exploitation intelligente de telles bases, un premier défi consistera à construire les bases elles-mêmes, à partir de descripteurs appropriés et suivant des modalités exploitables.

II. Les grands domaines thématiques de la section

Une vision synthétique sommaire de la façon dont les membres de la section 14 présentent leurs activités a été obtenue en analysant les comptes rendus annuels d'activité (CRAC) des membres de la section 14 sur les cinq dernières années. Elle est illustrée par la Figure 1 qui présente les termes les plus utilisés par ces chercheurs et chercheuses pour présenter les points forts de leur recherche.⁽²⁾ Au-delà de cette première approche, une analyse plus précise des activités de la section s'impose.



Figure 1 : Nuage de mots issu de l'analyse statistique des CRAC des chercheuses et chercheurs rattachés à la section 14. La taille des mots est proportionnelle au nombre d'occurrences.

Les *complexes et matériaux moléculaires* sont issus de l'association d'une ou plusieurs briques moléculaires aux propriétés bien définies. Les domaines d'applications de ces objets sont nombreux et aspirent à répondre aux besoins croissants pour le stockage et la transmission de l'information, l'énergie, l'environnement et la médecine (traitements thérapeutiques et outils de diagnostic). Le choix des molécules associées repose sur les propriétés des précurseurs utilisés qui peuvent ou non interagir au sein des édifices *via* des interactions supramoléculaires (liaison hydrogène, liaison halogène, interactions pi-pi, etc.). La grande variété des objets moléculaires utilisés, la diversité et le contrôle des interactions permettent de développer des complexes et des matériaux fonctionnels pour l'électronique (transport de charges, de photons, conversion photovoltaïque, transistors, capteurs, mémoires...), l'optique (détection, affichage et stockage de l'information...), le magnétisme (détecteurs de pression avec des matériaux à transition de spin...). L'ingénierie moléculaire, supra-moléculaire et cristalline, la compréhension des relations structure / propriétés, à l'échelle moléculaire et à celle des matériaux macroscopiques, impliquent une interaction forte avec la physique de la matière condensée pour les mesures des propriétés, ou avec la chimie théorique pour des modélisations (*ab-initio*, DFT, dynamique moléculaire, etc.), parfois prédictives. L'auto-organisation contrôlée de précurseurs selon une approche d'ingénierie moléculaire permet d'élaborer des matériaux avec une nanostructuration mono-, bi- ou tri-dimensionnelle comme par exemple les HOF (Hydrogen-bonded Organic Frameworks) et les MOF (Metal Organic Frameworks) ou PCP (Porous Coordination Polymers), qui présentent un intérêt majeur en catalyse et en adsorption. Par ailleurs, les parallèles avec des systèmes issus du vivant permettent de mettre au point des complexes ou assemblages supramoléculaires fonctionnels, des matériaux hybrides bio-inspirés ou de comprendre des mécanismes biologiques. Une évolution forte vers des objets multifonctionnels mettant en œuvre au moins deux propriétés telles qu'optique-magnétique, optique-mécanique, électrique-magnétique, optique-optique

(luminescence / optique non-linéaire) ouvre un large spectre d'applications. On peut citer des applications en biologie ou en imagerie ou encore des exemples de modulation de propriétés électriques, magnétiques, optiques, grâce à la présence d'entités activables par des photons ou des électrons, par exemple des électro- et photocatalyseurs ou des interrupteurs moléculaires photo- ou électroactivables. Les modélisations appuient les avancées expérimentales, en s'intéressant aux propriétés des états électroniques excités et, plus généralement, à l'interaction de la matière avec des stimuli extérieurs (lumière, température, potentiel) et/ou à des propriétés dynamiques (exemple : transport électronique dans les matériaux). Le développement futur de la plupart des matériaux moléculaires avec des visées applicatives nécessite leur mise en forme pour élaborer des dispositifs utilisables. Le contrôle de la croissance de ces matériaux permet une mise en forme par voie chimique, par exemple sous forme de nanoparticules ou de couches minces. La fonctionnalisation de surface par différentes techniques, greffage covalent, CVD, ALD est aussi une évolution majeure du domaine.

Des évolutions fortes vers de nouvelles réactions, de nouvelles sélectivités, et de nouveaux modes d'activation sont constatées en *catalyse homogène* sur la base de la nature des métaux, avec une approche conceptuelle à partir de la chimie de coordination et de la réactivité propre des métaux. Comme attendu, la recherche d'une chimie plus propre et durable a conduit au développement de réactions plus économes en atomes. Par exemple, l'activation de liaisons C-H sur des substrats les plus divers s'est popularisée ces trois dernières décennies pour contourner des fonctionnalisations intermédiaires plus polluantes, et éviter le recours à des réactions impliquant des liaisons plus faibles C-E (E = électrophile tel que B, Sn, Zn, etc.). D'autres réactions telles que les hydro-élémentations d'insaturés, également économes en atomes, font aussi l'objet de nombreux travaux. Cette approche d'abord basée sur des métaux relativement rares et coûteux (Ru, Rh, Pd, Ir, Pt, etc.) s'étend aujourd'hui aux métaux de transition 3d de la première ligne (Mn, Fe, Co, Ni, Cu, etc.), plus abondants, ainsi qu'à d'autres

éléments longtemps supposés inertes ou au contraire trop réactifs (Au, Ca, Ba, Ga, etc.). Le développement de ces réactions de catalyse homogène repose sur la conception de ligands hétéroatomiques (N, O, Si, P, S, etc.) ou carbéniques (NHC en particulier) dont les structures toujours plus élaborées (cavitands, polydentés, etc.) autorisent des modes d'activation coopératifs originaux (ligands non-innocents, amphiphiles, paires de Lewis, etc.). Les approches mécanistiques combinant l'expérimentation, la modélisation et le calcul se sont largement généralisées, en particulier pour l'élucidation des mécanismes de cycles cinétiques ou de l'isolement d'intermédiaires réactionnels.

Ces dernières années, en *catalyse hétérogène*, la prise de conscience des enjeux liés au réchauffement climatique et à l'utilisation des ressources fossiles a conduit la communauté à orienter ses recherches vers la valorisation (i) des bio- ou agro-ressources, avec notamment l'exploration de nouvelles filières de molécules plateformes (plateformes furanique ou phénolique, sucres, etc.) issues notamment de lignocellulose, (ii) des sous-produits d'un procédé ou encore (iii) d'autres sources de carbone (CO₂, biogaz, déchets, etc.) *via*, notamment, les gaz de synthèse. Ces recherches visent aussi à substituer un procédé polluant par un procédé catalytique plus respectueux de l'environnement. Les domaines d'application visés concernent la ressource énergétique (biocarburants, filière hydrogène) ou l'industrie chimique. Ces filières posent des défis renouvelés tels que la caractérisation des matrices complexes non conventionnelles, leur activation ou la compréhension des phénomènes de désactivation. Les voies thermochimiques sont les plus explorées mais ces dernières années ont vu émerger l'utilisation de méthodes d'activation non thermiques (sonochimie, plasmas froids, microondes, promotion électrochimique, photo(électro)catalyse, etc.) parfois couplées à l'adsorption ou encore de nouvelles méthodes de conversion (procédés hétérogènes monotopes, catalyse tandem). Par ailleurs, les performances des procédés de dépollution ou de post traitements doivent également être accrues pour convertir en molécules non polluantes (N₂, CO₂, etc.) des mélanges plus com-

plexes ou des mélanges composés de polluants à l'état de traces ou émergents, de sources mobiles ou fixes, dans l'air ou dans l'eau, tout en obéissant aux nouvelles normes. Quelle que soit l'application, ces nouveaux défis nécessitent souvent le développement de nouvelles formulations de catalyseurs dans leurs textures (porosité hiérarchisée, etc.), leurs compositions, leurs propriétés de surface, de multifonctionnalité, de durabilité, en tenant compte des contraintes imposées par la criticité de nombreux éléments. Ces réorientations sont à l'origine de nouvelles thématiques sur des méthodes vertes ou durables de préparation de catalyseurs, ou vers le contrôle à l'échelle atomique de la dispersion, de la composition et de la localisation des sites actifs. Dans une étape ultime, l'impact de la mise en forme des catalyseurs est maintenant considéré. Tous ces défis ont conduit à l'émergence de domaines de recherche tels que l'étude de la réactivité ou de la synthèse de matériaux dans de nouveaux milieux réactionnels (eutectiques profonds, liquides ioniques, solvants supercritiques...). De nouveaux progrès technologiques (NAP-XPS, ETEM, RMN haut champ et hyperpolarisée, etc.) ou de nouveaux couplages de techniques physico-chimiques facilitent l'observation des catalyseurs dans les conditions réactionnelles avec des résolutions spatiales ou temporelles multiéchelles adaptées aux phénomènes à observer (dynamique rapide ou désactivation lente, résolution atomique ou à l'échelle d'un grain). Cet effort concernant les techniques couplées est concomitant avec les efforts de caractérisation des surfaces et interfaces (spectroélectrochimie, spectroscopies non linéaires, spectroscopies à sonde locale, imagerie et tomographie). Là encore, les approches *in situ* et *operando* permettent d'apporter des éclairages originaux et pertinents sur les mécanismes aux interfaces.

Le dialogue entre théoriciens et expérimentateurs est de plus en plus riche et la *chimie théorique* devient un maillon essentiel du développement de futures réactions catalytiques (prédiction et compréhension). La compréhension de la réactivité aux interfaces est cruciale dans tous les domaines de la catalyse, homogène et hétérogène, la maîtrise et le

contrôle des interfaces étant indispensables à l'amélioration des performances des dispositifs aujourd'hui développés à l'échelle industrielle. Qu'elles impliquent des complexes moléculaires en interaction avec un solvant, des matériaux poreux ou des nanoparticules soumis à un gaz, les interfaces catalytiques sont le siège de réactions chimiques. Elles nécessitent une bonne description atomistique de l'interface (géométrie moléculaire, morphologie des particules, surfaces, taille des pores...), de la variété des sites actifs (défauts, sites possédant un caractère acide ou base de Lewis/Brønsted, etc.), des espèces présentes en surface (co-adsorbats, traces d'eau, etc.) et surtout des effets de l'environnement et des stimuli extérieurs (solvant, gaz, température, pression, lumière, champ magnétique, potentiel électrique...) qui peuvent modifier de manière significative les grandeurs thermodynamiques et cinétiques des réactions. Évaluer ces paramètres au niveau atomistique est un prérequis pour aborder de manière statistique les mécanismes réactionnels à plus grande échelle. L'identification des intermédiaires de surface et des mécanismes de réaction et le développement de relations d'échelle à partir de ces intermédiaires doivent permettre de bien décrire le processus catalytique et d'en déduire des tendances « universelles » pour concevoir de nouveaux catalyseurs plus actifs. Des approches apparentées commencent aussi à se mettre en place au niveau des procédés, avec le développement de microréacteurs, la recherche de descripteurs pertinents et des approches combinatoires annonçant un recours ultérieur à l'intelligence artificielle.

L'approche associant synthèse et modélisation est de plus en plus utilisée en catalyse, dans l'étude des clusters, des colloïdes, des nanoparticules et des surfaces réactives. Les disciplines dévolues à l'étude de la matière sous forme nanoscopique (nanocatalyse) font le lien entre état moléculaire et état solide (du concept d'orbitales à la théorie des bandes), permettant de construire des ponts conceptuels de plus en plus nombreux et solides à la frontière entre catalyse homogène et catalyse hétérogène. Il en est de même pour la chimie organométallique de surface pour laquelle les

développements analytiques sont en pleine expansion. On assiste donc à une convergence de tous les domaines de la catalyse, tant au niveau de concepts très fondamentaux (mécanismes des réactions élémentaires de surface, nature des sites actifs à l'échelle atomique, confinement...) que des enjeux de société motivant des relations étroites avec les acteurs industriels nationaux ou internationaux. Cette convergence s'illustre aussi par l'apparition de nouveaux modes de divulgation, qui ont vu naître ou croître en notoriété des journaux spécialisés à forte audience et fort impact, qui incluent de plus en plus l'ensemble des thématiques de la catalyse, homogène et hétérogène.

On retrouve les mêmes convergences méthodologiques et conceptuelles pour l'élaboration et la synthèse, la caractérisation et la modélisation dans les recherches portant sur *les interfaces et l'électrochimie*. Les approches fondamentales permettent de lier les performances aux propriétés fonctionnelles des matériaux et au contrôle des interfaces. Leurs visées applicatives concernent l'énergie, l'environnement, le développement durable, la santé et la qualité de l'eau et des aliments (générateurs électrochimiques – batteries, piles à combustible, batteries à flux redox –, cellules photovoltaïques, capteurs, production d'hydrogène par électrolyse haute et basse température, dispositifs associés à la biologie – bio-puces, bio-capteurs, bio-piles, laboratoires sur puce, implants –, etc.). Les recherches sont particulièrement actives dans les domaines des nanomatériaux pour la vectorisation et comme agents de contraste, des conducteurs ioniques et électroniques, de l'électrocatalyse et de la photoélectrochimie pour la production d'hydrogène et la valorisation du CO₂. Dans ce cadre, sont synthétisés des matériaux fonctionnels ou architecturés (architecture 3D ou 2D), des couches minces comprenant des surfaces fonctionnelles permettant, entre autres, le greffage de molécules actives. Comme pour les autres champs couverts par la Section 14, les objectifs sont l'amélioration des performances, une moindre dépendance aux matériaux critiques et/ou toxiques (électrocatalyseurs à partir de métaux non nobles, d'atomes isolés, de défauts

contrôlés, de polymères plus respectueux de l'environnement...), une réduction des coûts et une augmentation de la durabilité (réduction de la température de fonctionnement dans les piles à combustible haute température, systèmes réversibles électrolyseur et pile).

La fonctionnalisation des surfaces permet, entre autres, une nano-structuration d'édifices complexes pour la catalyse, la photocatalyse, les réactions redox, la détection d'objets biologiques (capteurs) ainsi qu'un contrôle de la réactivité de surface avec, en particulier, la limitation des phénomènes de corrosion. Ces études sont conduites dans des milieux variés plus ou moins complexes comme les électrolytes liquides (organiques et aqueux), sels fondus, liquides ioniques, polymères, céramiques, gaz ou milieux physiologiques. Le contrôle de la réactivité des surfaces et interfaces est essentiel pour atteindre les performances recherchées. L'utilisation de surfaces modèles permet, parfois, de mieux appréhender ces questions. On retrouve des approches utilisées en catalyse hétérogène pour le contrôle de la réactivité des surfaces réelles, combinant caractérisation *in situ* ou *operando* en vue de la détermination des mécanismes de transport électronique et ionique, des mécanismes réactionnels (transfert de charge, adsorption), des interactions biologiques, et de la modélisation des mécanismes délétères (dégradation des matériaux et des interfaces, adsorption non-spécifique...).

Dans le domaine, plusieurs concepts et systèmes font l'objet de travaux en forte augmentation : l'utilisation des pérovskites hybrides pour la conversion photovoltaïque, les technologies post Li-ion pour les batteries (systèmes « tout solide », électrode négative en lithium métal, utilisation de cations divalents), le développement des systèmes à composés redox organiques pour les batteries à flux redox. La protection contre la corrosion des métaux et alliages *via* des solutions respectueuses de l'environnement est également un enjeu fort. Ainsi, le remplacement du Cr(VI) est l'un des défis auxquels est confrontée la communauté. En bio-ingénierie des interfaces, la maîtrise de l'adsorption non-spécifique en milieu complexe

reste un enjeu à maîtriser. L'introduction des nanotechnologies ouvre de nouveaux chantiers pour l'élaboration et la caractérisation d'interfaces sur des substrats multi-matériaux et multi-échelles structurés à deux ou trois dimensions.

III. Répartition géographique et structuration des équipes et des moyens

A. Photographie des chercheurs, unités et équipes de la section 14⁽³⁾

La section 14 évalue 85 unités mixtes de recherche (UMR), 7 unités propres de recherche (UPR), 5 unités mixtes de services (UMS), 3 unités mixtes internationales (UMI) et 17 fédérations de recherche (FR). Pour les 85 UMR, 44 sont rattachées à la section 14, et parmi celles-ci 18 ont la section 14 comme section principale. Pour les UPR, 4 sont rattachées à la section 14, et une UPR a pour section principale la section 14. Enfin pour les fédérations, 4 sur les 17 sont rattachées principalement à la section 14. Les sections 13, 12 et 15 sont les plus souvent rencontrées comme sections secondaires de rattachement (Figure 2). Ces tendances corroborent l'analyse faite en introduction sur la base des candidatures multiples aux concours.

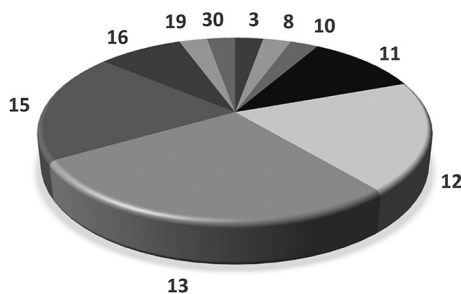


Figure 2 : Répartition des sections secondaires des UMR rattachées à la section 14 en section principale.

Outre leurs rôles de structuration des moyens (*cf.* partie III.C), les fédérations sont aussi un outil pour une thématique de recherche, pour lui conférer davantage de visibilité sur le plan national ou développer un réseau collaboratif public-privé dédié à certains domaines comme par exemple, l'écoconception et les ressources renouvelables. Pour les fédérations, le nombre de sections de rattachement varie de 2 à 9 avec une moyenne de 5. Douze d'entre elles sont rattachées principalement à l'Institut de Chimie, les cinq autres sont rattachées aux instituts INEE, INSIS ou INP.

La distribution des chercheuses et chercheurs de la section 14 au sein des unités est très disparate. 27 unités ont un seul membre de la section 14 et 24 en comptent entre 2 et 4. À l'opposé 22 unités comptent entre 5 et 11 membres de la section 14 et 4 unités en ont plus de 24. Les chercheurs et chercheuses de la section 14 (environ 300), sont répartis sur l'ensemble du territoire métropolitain (Figure 3). Aucun n'est présent en territoire ultramarin, ni en Corse. L'effectif moyen (non permanents inclus) par unité comprenant des membres de la section 14 est de 155 personnes, le minimum étant de 17 et le maximum de 664 personnes ; pour les unités rattachées à la section 14, les personnels permanents représentent en moyenne 55 % de l'effectif global et se répartissent comme indiqué sur la Figure 4.

Concernant les FR, les effectifs propres varient de 1 personne (Institut Lavoisier-Franklin) à 22 personnes (Institut de chimie de Toulouse). Ces personnels sont directement rattachés aux fédérations et comprennent la direction, les gestionnaires et pour certaines, les personnels d'appui à la recherche en charge des équipements mutualisés des plateformes.

L'organisation des UMR est pyramidale ou matricielle avec un nombre de niveaux de structuration variant de 2 à 4 (6% 4 niveaux, 39% 3 niveaux, 55% 2 niveaux). Les premiers niveaux (groupes, axes, thèmes, équipes) sont généralement constitués de 3 à 10 C et EC. Globalement, 16% des unités sont dirigées par des femmes et 44% possèdent au moins une directrice ou directrice adjointe. Pour les 85 UMR de la section, ces pourcentages sont du même

ordre (18%, 41%), alors qu'ils sont supérieurs pour les 7 UPR (29%, 57%). La part de femmes à la direction des FR est seulement de 3 sur 17, et pour un tiers des FR seulement, des femmes participent à la direction comme adjointe.

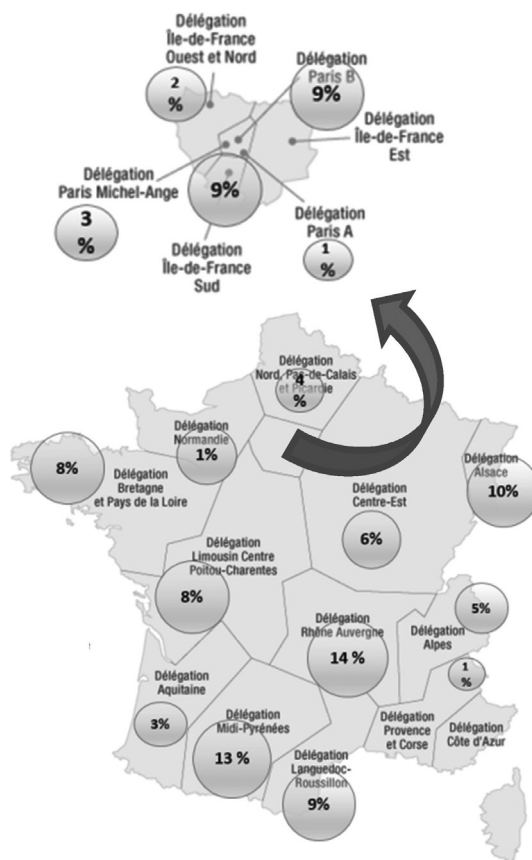


Figure 3 : Répartition géographique des chercheurs rattachés à la section 14.

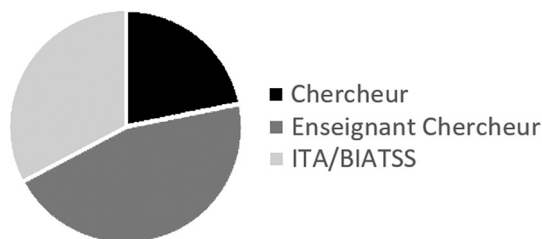


Figure 4 : Répartition des personnels permanents au sein des unités rattachées à la section 14.

B. Évolutions

La structuration de la communauté en unités de recherche a peu évolué au cours des cinq dernières années. Les grands regroupements d'unités opérés par l'institut de chimie les années précédentes ne sont plus observés. Les restructurations actuelles se jouent principalement à un autre niveau (Idex, I-sites, regroupements régionaux d'universités). Les opérations au niveau des unités semblent plus sélectives et destinées à créer de nouvelles structures permettant une coordination plus étroite entre différents acteurs de la recherche fondamentale et appliquée dans certains secteurs stratégiques. Pour la section 14, la mise en place des structures de recherche originales que sont la FR INCREASE (International Center on Eco-conception and Renewable Resources) et l'UMR IPVF (Institut Photovoltaïque d'Île-de-France) sont ainsi des exemples frappants et réussis opérés au cours des cinq dernières années dans deux domaines d'intérêt majeur que sont la valorisation de la biomasse et la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire.

Depuis 2012, les recrutements de chercheurs ont été relativement bien répartis sur le territoire national. Les recrutements les plus nombreux concernent l'Île de France (14 chargés de recherche et un directeur de recherche), la région toulousaine (6 chargés de recherche), la région lyonnaise (4 chargés de recherche) et la Bretagne (5 chargés de recherche), pour un total de 46 recrutements (45 chargés de recherche et un directeur de recherche).

Au niveau thématique, on constate un certain déséquilibre dans les recrutements de chercheurs. En effet, si les candidates et candidats au concours DR se répartissent en trois ensembles *Chimie moléculaire* (chimie organométallique et de coordination, catalyse homogène), *Catalyse hétérogène* (matériaux, méthodes, procédés) et *Interfaces* (électrochimie, surfaces et interfaces) de taille à peu près équivalente, tel n'est pas le cas pour les lauréates et lauréats des concours entrant au CNRS. Depuis 2016, 24 CR et 1 DR ont été recrutés en section 14. Ces personnels nouvel-

lement recrutés se répartissent en 4 blocs de taille équivalente : chimie organométallique et de coordination, catalyse homogène, catalyse hétérogène et interfaces. En d'autres termes, la moitié des recrutements se fait actuellement dans des thématiques de chimie moléculaire (13 sur 25 exactement). Cette situation induira, si elle se prolonge, un changement dans l'équilibre des thématiques au sein de la section. Il ne s'agit pas d'une volonté de la section, ni de la direction qui, au travers des coloriages et fléchages, a plutôt tenté de compenser cette tendance.⁽⁴⁾ Il s'agit simplement d'un reflet des profils des candidates et candidats aux postes CR, issus majoritairement des thématiques de la chimie moléculaire. Une analyse rapide montre que cet état de fait ne provient pas d'un effort de formation par la recherche plus faible des équipes travaillant dans les thématiques de catalyse hétérogène ou d'interfaces, mais d'une moindre orientation des titulaires d'un doctorat formés dans ces thématiques vers la recherche académique, du fait des fortes opportunités d'emploi dans le secteur privé dans les champs thématiques les mieux couplés aux entreprises. Par conséquent, malgré un rééquilibrage apporté par une proportion plus élevée de candidates et de candidats (et de personnes recrutées) de nationalité étrangère, ces thématiques voient leur vivier de candidatures au recrutement réduit.

C. Structuration des moyens⁽⁵⁾

Les chercheurs et les chercheuses de la section 14 développent de plus en plus des approches communes consistant à multiplier les caractérisations physiques et chimiques des systèmes étudiés pour mieux aborder leur complexité. Dans ce contexte, les laboratoires doivent pouvoir donner accès à leurs équipes à des palettes étendues d'instruments mi-lourds afin de leur permettre d'obtenir rapidement et efficacement des informations sur les objets étudiés avant, éventuellement, de poursuivre les investigations de façon plus détaillée ou

dans des environnements plus exigeants sur les grands instruments. Dans ces conditions, l'organisation des plateformes instrumentales, et leur jouvence, devient de plus en plus cruciale pour la communauté.

Plusieurs UMR et UPR affichent des plateaux techniques ou plateformes particulièrement bien équipés avec un ensemble d'équipements mi-lourds ouverts à la communauté académique et industrielle aussi bien pour l'analyse de molécules organiques et biologiques que la caractérisation des matériaux. Plus de la moitié des unités ont structuré des plateformes en leur sein. Certaines compétences techniques et scientifiques s'affichent aussi par une concentration de petits équipements dédiés à une technique de caractérisation spécifique.

L'origine des fonds permettant l'acquisition d'équipements mi-lourds est diverse mais se répartit globalement en trois catégories. Certaines unités ont bénéficié de crédits CPER / FEDER importants pour équiper leurs plateformes. Des laboratoires lauréats d'appels à projet LABEX et / ou EQUIPEX ont bénéficié de subventions notables pour l'acquisition d'équipements mi-lourds. Enfin, quelques unités parviennent à financer les équipements des plateformes grâce à leurs activités contractuelles (contrats industriels). Les dépenses de maintenance et la jouvence des instruments de pointe restent une préoccupation pour la plupart des unités, et la mutualisation des moyens financiers et humains permet d'aider à la gestion des budgets de fonctionnements des gros équipements.

Les fédérations jouent un rôle structurant dans la mutualisation des équipements et le développement de plateformes analytiques ou technologiques de très haut niveau. Certaines affichent une plateforme mutualisée dédiée à la fédération : c'est le cas de 7 des 17 FR intéressant la section. La plupart des autres fédérations affichent des regroupements de laboratoires sans création de plateforme commune. Quant au mode de fonctionnement des FR affichant une plateforme commune, il diffère d'une entité à l'autre. Certaines choisissent de mettre à disposition une partie seulement des équipements mi-lourds figurant dans

les unités (Institut des Matériaux de Paris-Centre ou Chimie moléculaire de Paris-Centre : organique, inorganique et biologique, par exemple) ; d'autres affichent surtout un matériel de pointe et de haute technicité (Institut Michel-Eugène Chevreul).

Plusieurs plateformes offrent la possibilité de réservation en ligne, avec une tarification des prestations ou demande de devis sur mesure. Certains équipements de pointe sont ouverts à l'ensemble de la communauté scientifique notamment la spectrométrie de masse FT-ICR, l'analyse de surface et la Résonance Paramagnétique Électronique (Institut Michel-Eugène Chevreul). Les équipements RMN sont accessibles sur appel à projet à travers l'infrastructure de recherche des RMN à très hauts champs, répartie sur 7 sites français.

Compte tenu des nouvelles possibilités, la communauté est aussi très active dans les caractérisations utilisant des sources de rayonnement synchrotron notamment l'ESRF et SOLEIL et plus particulièrement dans les domaines de l'absorption X (par exemple l'EQUIPEX ROCK à SOLEIL) et des spectroscopies et imageries *operando*.

Enfin, avec les besoins croissants des moyens de calculs, les membres de la communauté s'organisent pour avoir à leur disposition des moyens de calcul locaux et/ou des ressources offertes par le Grand Équipement National de Calcul Intensif (GENCI) et des mésocentres régionaux de calcul.

IV. Contexte international

A. Compétition internationale

La part française de la recherche dans les champs scientifiques couverts par la section 14 peut être estimée en s'appuyant sur la contribution des laboratoires français dans la pro-

duction scientifique du domaine. Cette part doit être mise en perspective par rapport aux moyens budgétaires dont disposent les équipes, et des moyens humains et modes d'organisation correspondants.

Une étude récente portant sur le domaine général de la catalyse montre que ce domaine, au cœur des activités de la section 14, « se porte bien ». ⁽⁶⁾ Selon cette étude, le taux d'accroissement du nombre d'articles publiés est de l'ordre de 30 % en cinq ans, supérieur à celui de l'ensemble des disciplines scientifiques. La qualité de cette recherche est aussi en augmentation. Si la productivité française s'améliore comme dans beaucoup de pays, la qualité de sa recherche est dans la moyenne et reste donc inférieure à celle des États-Unis, de la Suisse et des grands pays européens.

En élargissant l'étude de la production scientifique à l'ensemble des mots clés de la section 14, on constate une croissance encore plus soutenue de la production scientifique mondiale dans de nombreux domaines du périmètre de la section. ⁽⁷⁾ Une telle mesure de la croissance est en partie artificielle ; elle traduit surtout l'affichage que les chercheurs donnent à leur activité. Ainsi, certains champs thématiques dont l'affichage n'est pas considéré suffisamment attractif ne sont pas mis en avant et ne connaissent qu'une progression apparente limitée, comme la chimie de coordination par exemple. L'invocation d'une utilité socio-économique dans l'affichage d'une activité scientifique est devenue semble-t-il incontournable : ainsi « catalyse homogène » et « catalyse hétérogène » affichent des progrès honorables voire soutenues, mais bien en retrait de l'affichage de l'activité « catalyseurs pour l'énergie » qui, bien que déjà conséquent sur la période 2010-2014, fait plus que doubler sur la période 2015-2019. De même, l'affichage de l'activité « stockage de l'énergie » (qui ne se limite pas au champ thématique de la section 14), déjà très important, connaît également une progression spectaculaire. Au crible – imparfait – de cette analyse, les autres activités correspondant à des mots clés de la section et qui connaissent une progression internationale très forte sont les procédés pour l'énergie,

l'électrocatalyse, la modélisation cinétique pour la catalyse et la valorisation de la biomasse (dans ces deux derniers cas, le périmètre de l'activité reste relativement modeste en dépit de sa progression). Si on tente des regroupements de mots-clés sur des thématiques plus larges, on constate, toujours en accord avec ce qui précède, une progression spectaculaire des activités s'inscrivant dans les champs énergie / environnement / santé, mais aussi de la nanochimie (non pas revendiquée en tant que telle, mais dans les déclinaisons de l'utilisation des nanoparticules en réponse à des défis sociétaux), de la biomasse (traitement et valorisation) et de la catalyse non conventionnelle (essentiellement la photocatalyse).

La même analyse a été menée de façon comparative avec un grand compétiteur européen, l'Allemagne, un pays traditionnellement considéré comme chef de file de la compétition scientifique internationale, les États-Unis, et un compétiteur émergent qui est en passe maintenant de prendre la tête de cette compétition, la Chine. Le fait le plus marquant de cette étude de la production scientifique nette est le maintien d'un niveau de croissance époustoufflant des contributions chinoises dans les champs thématiques de la section. Dans la plupart des travaux se rapportant aux mots clés analysés, la croissance de la contribution chinoise sur les années 2015-2019 comparée aux années 2010-2014 est supérieure à deux fois celle des autres compétiteurs considérés. La Chine se positionne maintenant en contributeur principal du domaine, avec une part de la production scientifique de l'ordre de 27 % (+8 % en cinq ans, ce qui est considérable), celle des États-Unis reculant à environ 21 % (en recul de plus de 3 %), l'Allemagne se maintenant à environ 8 % (recul de l'ordre de 0,5 %) et celle de la France représentant à présent environ 5 % (recul d'un peu plus de 1 %). Les domaines dans lesquels la croissance chinoise est la plus spectaculaire (de l'ordre du quadruplement de la production ou plus !) sont le stockage de l'énergie, les procédés pour l'énergie, la valorisation de la biomasse et la modélisation cinétique. Sur des thématiques élargies, la croissance de la production chinoise est particulièrement notable dans les domaines de la

chimie théorique et modélisation, de la nanochimie, de la biomasse et dans les champs énergie / environnement / santé. La Chine se positionne maintenant nettement en tête de la compétition mondiale dans les domaines de la conversion et du stockage de l'énergie, de la corrosion et des traitements de surface. En revanche, elle n'a pas encore complètement rattrapé son retard dans le domaine de la chimie théorique et modélisation, pour lequel les États-Unis demeurent clairement en tête.

En ce qui concerne la France, la progression constatée de la production scientifique demeure inférieure à la progression mondiale. Même dans un domaine comme celui de la valorisation de la biomasse où les équipes françaises avaient su se positionner très tôt, et malgré une croissance très soutenue de la production nationale dans le domaine en 2015-2019 par rapport à 2010-2014, la part française dans la production internationale recule nettement du fait de l'explosion des contributions des autres pays. De façon générale, le recul de la part française est en partie lié à la croissance inflationniste des contributions chinoises. Mais, dans pratiquement tous les domaines du champ thématique de la section, la progression de l'Allemagne est plus importante que celle de la France : même avec un compétiteur européen, le différentiel tend donc à s'amplifier.

Ce constat d'une bonne santé somme toute relative de la recherche française dans le champ thématique couvert par la section 14 (une progression certes notable, mais qui semble décrocher par rapport aux compétiteurs qui font la course en tête) mériterait d'être analysé plus en détail en tentant d'apprécier l'importance qualitative des différentes contributions. L'augmentation sensible de la production et la dilution des acteurs de la recherche rend plus difficile l'identification des nouveaux acteurs, en particulier à l'international. Au vu des moyens consacrés par les différents acteurs internationaux à la recherche scientifique, cet état de fait devrait se poursuivre et on doit s'attendre à une érosion de la part française à la recherche scientifique.⁽⁸⁾ Une analyse d'indices de reconnaissance (à définir) fournirait certainement une autre image que la

simple quantification de la production scientifique mais présenterait également des biais, quoique différents. Jean-Pierre Sauvage s'est certes vu distinguer par le prix Nobel en 2016 pour ses travaux en chimie de coordination, mais il serait vain de s'en tenir à ce seul constat. Plutôt que de tenter cet exercice, périlleux et nécessairement en partie subjectif, la section veut souligner que quelle que soit l'approche adoptée, l'évolution de la forme de la compétition scientifique mondiale dans son domaine entraîne nécessairement une dilution accrue de la contribution française. Dans les domaines hautement concurrentiels, les effets de taille sont tels que ce constat vaut même lorsque l'effort national est structuré autour d'acteurs de qualité, comme pour le stockage électrochimique de l'énergie. Il convient donc de s'interroger sur les modes d'organisation de la recherche permettant de conserver une contribution nationale identifiable et pertinente dans le concert international.

B. Effort de recherche

De ce point de vue, les évolutions mises en place depuis une quinzaine d'années montrent de claires insuffisances. Comme le montre l'analyse de la production scientifique, l'effort de recherche affiché par les acteurs internationaux tend à focaliser les travaux sur les mêmes thèmes, pilotés par des enjeux de société globaux. La France n'échappe pas à ces tendances, clairement induites par la généralisation du financement de la recherche sur projets. Celle-ci contribue à assécher la créativité, qui ne peut pas s'épanouir en dehors des sentiers balisés, et pénalise la recherche à long terme et les innovations de rupture qui, par principe, se planifient mal. Une plus grande diversité des modes de financement est donc indispensable. Jean-Pierre Sauvage aurait certainement eu plus de difficultés à mener les travaux qui lui ont permis d'être distingué s'il avait dû justifier à l'aune d'enjeux sociétaux les considérations topologiques qui l'ont guidé au début de son travail.

Certaines spécificités de la catalyse française dans le concert international soulignées par un rapport récent⁽⁶⁾ peuvent certainement se généraliser à l'ensemble des champs thématiques de la section 14. Ainsi, le nombre de chercheurs en France n'est pas sensiblement plus bas que dans les autres pays étudiés.⁽⁹⁾ Sur ces pays, la France est l'un de ceux où le nombre de doctorants et post-doctorants est le plus faible.⁽¹⁰⁾ En revanche, le statut permanent des chercheurs et du personnel technique offre aux équipes françaises de vrais atouts : il permet de transmettre les savoirs et savoir-faire, de constituer des cultures d'institut et de construire sur la durée des pôles d'excellence. Par conséquent, le pragmatisme suggère là encore de diversifier les approches et de s'affranchir des préjugés idéologiques. Il faut créer les conditions adéquates à une augmentation du nombre de doctorants au sein des laboratoires pour le rapprocher des standards internationaux ; il faut aussi donner aux personnels permanents (chercheurs, enseignants-chercheurs et personnels techniques) les moyens minimaux leur permettant de conduire une recherche originale. On augmentera ainsi les forces vives dans les laboratoires et on utilisera plus efficacement les chercheurs permanents recrutés après une compétition sévère (un tiers des chercheurs recrutés en section 14 sur la période 2016-2019 sont étrangers).

Le rapport cité⁽⁶⁾ relève que le classement de la production française en matière de qualité (évaluée sur la base du facteur d'impact des journaux) est bien meilleur que celui obtenu en matière de nombre d'articles produits par le personnel permanent. Là encore, cette conclusion se généralise plausiblement à l'ensemble des domaines de la section. Mais l'équilibre que doivent maintenir les chercheurs et les chercheuses de la section est fragile, et l'explosion de la production internationale dans le domaine ne peut que rendre cet équilibre précaire. L'adaptation des modes d'organisation de la recherche, en permettant notamment d'initier des approches innovantes sans dépendre d'une réussite aléatoire à des appels à propositions nécessairement normalisés, devrait permettre de mieux capitaliser sur les atouts des équipes françaises. Il est ainsi envisageable de maintenir

voire renforcer la position des équipes françaises dans des conditions où, ni la pression démographique, ni l'ampleur des efforts nationaux, ne leur donnent un avantage.

V. Les disciplines en difficulté

Certaines thématiques, présentes dans le rapport de conjoncture précédent, s'avèrent absentes ou moins présentes dans les rapports et projets actuels (ceux des dossiers de candidature CR et DR et les récents rapports HCERES d'auto-évaluation d'unités). Certaines paraissent pourtant stratégiques ou d'intérêt scientifique majeur. Les décrochages thématiques peuvent être la conséquence d'effets de modes au sein des communautés, mais sont aussi une conséquence directe des politiques scientifiques privilégiant les grands défis sociétaux, et délaissant ainsi les sujets qui « n'entrent pas ou plus dans le cadre ». Ainsi par exemple, en catalyse hétérogène, les projets mettent de plus en plus l'accent sur la valorisation de la biomasse. Une des conséquences de cet engouement est le délaissement des études sur les sources fossiles (pétrole et charbon) qui restent cependant incontournables aujourd'hui et dans les années à venir. En effet, l'augmentation de l'efficacité énergétique et la réduction des émissions de gaz à effet de serre, ainsi que l'utilisation optimale et mesurée de ces ressources demeurent stratégiques. Par ailleurs, dans le domaine de l'électrochimie, si les piles à combustibles semblent toujours faire l'objet de nombreuses études, l'accent est plutôt mis sur des dispositifs à basse température plutôt que celles fonctionnant à haute température (SOFC, MCFC). Enfin, depuis 10 ans, l'irruption dans le domaine du photovoltaïque des matériaux pérovskites hybrides à base d'halogénure de plomb a simultanément motivé un important développement du domaine des matériaux pour l'énergie solaire, avec des travaux à fort impact, et conduit à une réduction importante des travaux sur d'autres filières matériaux dont le développement

n'avait pas atteint le niveau de maturité suffisant pour des applications, comme par exemple la filière CZTS ou les cellules à colorants.

Certaines thématiques sont peu abordées en raison de la complexité du défi. Ainsi par exemple, si l'activation des petites molécules reste une priorité tant en catalyse homogène qu'hétérogène (surtout celle du CO₂ et dans une moindre mesure de l'hydrogène et du dioxygène), on constate (malgré quelques résultats remarquables) un nombre restreint de projets sur l'activation du diazote, un défi ancien et ardu mais d'actualité renforcée par les applications envisageables pour le stockage des énergies renouvelables. Un autre objet d'étude qui n'est plus beaucoup abordé en section 14 est celui de la cinétique aux interfaces solide/liquide ou solide/gaz. La compréhension générale de la cinétique et la description théorique correspondante sont très peu explorées dans le domaine. La difficulté se situe au niveau du décalage entre le monde microscopique (processus élémentaires de diffusion, de formation / rupture de liaisons, transfert de charge) et le monde méso- et macroscopique (constante de diffusion, taux de réaction et polarisation). Le développement de modèles hiérarchiques permettant de décrire efficacement des événements à des échelles différentes, et plus encore, de permettre le transfert des informations entre ces échelles, est cependant crucial.

Enfin, d'autres thématiques, en concurrence avec les approches industrielles, sont insuffisamment abordées sur le plan académique compte tenu de leur importance stratégique. C'est par exemple le cas des procédés sur le traitement et la remédiation des milieux : le captage et la concentration des métaux lourds et surtout des radionucléides par des ligands adéquats mériteraient d'être plus abordés avec les approches spécifiques de la section. Malgré l'importance stratégique de cette thématique (démantèlement des centrales, anciens sites industriels pollués, accident nucléaire potentiel, etc.) et des financements industriels disponibles, on relève très peu de projets récents. De même, pour les métaux en biologie ou en chimie bioinorganique, si le développement de sondes multimodales, en particulier les

sondes thérapeutiques, de biopiles et de systèmes biomimétiques et la compréhension du rôle des métaux dans des processus biologiques continuent à faire l'objet de nombreuses études et projets, il n'en va pas de même des complexes métalliques à visée purement thérapeutique comme les anti-cancéreux.

VI. Recommandations

A. Priorités thématiques

La section 14 porte des thématiques d'intérêt primordial qui, au vu des enjeux sociétaux actuels permettent aux équipes qui y sont impliquées d'obtenir des moyens pour développer leurs activités plus facilement que les autres. Elles font néanmoins face à une concurrence intense et très fournie. Dans ces thématiques, il importe donc d'orienter les appels à propositions pour éviter aux projets de se concentrer sur des objectifs à court-terme (souvent peu réalistes ou partagés avec de très nombreux concurrents) et *favoriser des approches originales et à plus long terme, laissant une place notable aux approches fondamentales et de compréhension des mécanismes réactionnels mis en jeu.*

La section 14 porte par ailleurs d'autres thématiques stratégiques permettant de maintenir des expertises disciplinaires essentielles. La tutelle doit veiller à *maintenir ce socle* en permettant aux équipes qui y contribuent de disposer des moyens (financiers et humains) pour rester au meilleur niveau international. Des dispositifs non compétitifs doivent être élaborés ou réinventés, car certaines thématiques peuvent difficilement s'inscrire dans les dispositifs ciblant des enjeux de société, et souffrent par ailleurs de la compétition avec d'autres domaines fondamentaux plus à la mode dans les appels non thématiques. Il s'agit là encore de choix stratégiques à long terme.

Enfin, les équipes de la section travaillant dans des domaines bien couplés aux entreprises attirent plus difficilement des candidats en vue d'un recrutement. La tutelle doit *encourager de telles candidatures*. La section recommande que les coloriations soient réservés à ces situations, la dynamique associée aux thématiques émergentes permettant le plus souvent de susciter des candidatures de qualité.

B. Structuration et soutien

Comme l'ensemble de la recherche française, l'atout principal des équipes de la section réside dans ses personnels permanents, chercheurs, chercheuses et ITA. Le recrutement de ces permanents à un stade précoce de leur carrière est un atout au plan international. Il est important de le maintenir et de *tirer profit de la pérennité de ces emplois* pour inciter les équipes à entreprendre des projets à long terme, plus originaux, plus risqués et à plus fort impact.

Il est aussi essentiel de permettre aux équipes d'accéder à des équipements de très bon niveau. Le maintien des personnels techniques en support est aussi essentiel : ce sont aussi des « forces vives » des laboratoires. Ils permettent la réalisation d'expérimentations originales, de hauts niveaux tant techniques que scientifiques et sont essentiels au rayonnement de nos laboratoires. La création de fédérations de recherche, ou de tout autre organe structurant peut être une voie efficace pour y parvenir. Il convient toutefois de veiller à ce que les *personnels dédiés aux fédérations restent en lien avec les UMR et UPR*.

C. Face à la compétition internationale

Comme déjà mentionné, il est essentiel de tirer profit des spécificités nationales pour favoriser la recherche à long terme. De ce

point de vue, les chercheurs et chercheuses de la section 14 souffrent de la complexité nouvelle qui bouleverse le fonctionnement et l'organisation de la recherche, comme le souligne le rapport de prospective établi en 2019 par le Conseil Scientifique de l'Institut National de Chimie.⁽¹¹⁾ Sur ce plan, il est aussi nécessaire de *mettre en valeur les modes d'organisation collaboratifs* et de permettre à plusieurs modèles d'émerger. La figure du « Principal Investigator » ne doit pas être la seule voie valorisée, tant dans la gestion des carrières que dans l'obtention des financements. Sur un autre plan, il est important aussi de *valoriser, conserver et développer les liens avec l'industrie et les « start-up »*.

Conclusion

La chimie de coordination, la maîtrise de l'activité catalytique et l'étude de la réactivité des interfaces, des métaux, en particulier les métaux de transition et de leurs oxydes, qui constituent le cœur de compétence des équipes de la section 14, sont des outils cruciaux pour relever un grand nombre de défis actuels. Il s'agit par exemple de l'utilisation d'éléments abondants et peu exploités dans les transformations catalytiques ou la conversion et le stockage de l'énergie, de l'utilisation de nouvelles sources pour la production de grands intermédiaires en chimie, de la mise au point de détecteurs et de dispositifs de dépollution ou de nouvelles sondes pour améliorer les techniques de diagnostic et de thérapie en médecine. Il paraît donc essentiel de poursuivre le développement de connaissances et de savoir-faire dans les disciplines concernées afin de mieux appréhender les défis à surmonter. Ces enjeux motivent aussi une compétition internationale qui s'est considérablement accrue au cours de la période écoulée. De ce point de vue, la chance que représente pour la section 14 le fait de voir ses thématiques au centre de questions d'intérêt crucial constitue aussi une forme de menace associée à l'apparition massive de

concurrents disposant de moyens très substantiels. Ceci doit impérativement conduire les équipes de la section 14 et leurs tutelles à réfléchir à comment mener leurs actions et avoir un impact en dépit d'un nombre d'acteurs restreint et de moyens financiers limités, lorsqu'on les rapporte à l'échelle internationale. Dans cette optique, la section a émis dans ce rapport quelques recommandations visant à privilégier réellement l'action sur le long terme, plutôt que des

projets sur des objectifs à court terme le plus souvent peu réalistes (délais de réalisation trop courts, simplification du système). Ceci nécessite en particulier de repenser les modes de soutien et de financement pour se démarquer de pratiques compétitives mais peu efficaces sur le long terme, et de miser sur le potentiel humain des équipes qui peut encore, si on l'exploite intelligemment et le laisse s'épanouir, faire la différence.

ANNEXE 1

SIGLES

ALD : Atomic-Layer Deposition

C : Chercheuse ou Chercheur

COV : Composés Organiques Volatils

CPER : Contrat de Plan Etat-Région

CR : Chargée de Recherche ou Chargé de Recherche

CRAC : Compte Rendu annuel d'ACTivité des chercheurs

CVD : Chemical Vapor Deposition

CZTS : Copper Zinc Tin Sulfide

DFT : Density Functional Theory

DR : Directrice de Recherche ou Directeur de Recherche

EC : Enseignante-Chercheuse ou Enseignant-Chercheur

EQUIPEX : EQUIPEment d'EXcellence (projet lauréat du programme investissements d'avenir)

ESRF : European Synchrotron Radiation Facility

ETEM : Environnemental Transmission Électron Microscope

FEDER : Fonds Européen de DEveloppement Régional

FR : Fédération de Recherche

FT-ICR : Fourier-Transform Ion Cyclotron Resonance

HCERES : Haut Conseil de l'Évaluation de la Recherche et de l'Enseignement Supérieur

I-SITE : Initiative Science-Innovation-Territoires-Économie (projet lauréat du programme investissements d'avenir)

IDEX : Initiative D'EXcellence (projet lauréat du programme investissements d'avenir)

INC : INstitut de Chimie

INEE : INstitut Écologie et Environnement

INP : INstitut de Physique

INSIS : INstitut des Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes

ITA : Ingénieurs et Ingénieures, Techniciens et Techniciennes et Administratifs et Administratives

LABEX : LABoratoire d'EXcellence (projet lauréat du programme investissements d'avenir)

MCFC : Molten Carbonate Fuel Cell

NAP-XPS : Near Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy

NHC : N-Heterocyclic Carbene

RMN : Résonance Magnétique Nucléaire

ROCK : Rocking Optics for Chemical Kinetics

SOFC : Solid-Oxide Fuel Cell

UMI : Unité Mixte Internationale

UMR : Unité Mixte de Recherche

UMS : Unité Mixte de Services

UPR : Unité Propre de Recherche

Notes

(1) En 2019, environ 8% des candidats et candidates postulaient également en section 11, 14% en section 12, 11% en section 13, 12% en section 15, 6% en section 16 et 5% en CID 54.

(2) Analyse statistique avec IRaMuTeQ (<http://www.iramuteq.org/>) du corpus constitué des sections « Point(s) fort(s) de vos recherches » renseignées par les chercheuses et chercheurs rattachés à la section 14 dans leurs CRAC (2013-2018).

(3) Données issues de l'annuaire du CNRS.

(4) En 2017, un fléchage a permis le recrutement d'un DR dans la thématique Interfaces, en 2018 et 2019, des coloriations ont permis le recrutement d'un CR dans la thématique Interfaces et de deux CR dans la thématique Catalyse hétérogène.

(5) Selon l'analyse des rapports produits par les unités pour leur dernier examen par l'HCERES.

(6) Michel Lacroix, *La recherche et la catalyse dans les principaux pays du monde*, 2019 (<https://hal-udl.archives-ouvertes.fr/hal-02431297>).

(7) Nombre de productions scientifiques référencées par Clarivate Analytics dans Web of Science en réponse aux mots clés considérés.

(8) Selon la Banque Mondiale, en 2016, les États-Unis consacraient environ 420 milliards de dollar aux dépenses R&D, la Chine environ 230, l'Allemagne près de 100 et la France environ 55. En proportion du PIB, depuis 2010, l'effort national en R&D stagne en France et aux États-Unis, il progresse régulièrement en Chine et en Allemagne.

(9) Selon le rapport sur l'état de l'emploi scientifique en France (Ministère de l'Éducation Nationale de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, 2016), le nombre de chercheurs et chercheuses en France (à 61% issus des entreprises) est inférieur à celui observé en Allemagne, aux États-Unis et en Chine. En proportion de la population active, le nombre de C et EC dans les administrations est le même en France et en Allemagne, nettement moindre aux États-Unis et en Chine.

(10) Dans les laboratoires de catalyse, le nombre de doctorantes et doctorants par chercheuse ou chercheur permanent est de l'ordre de 0,8 environ ; il est 10 fois plus grand aux États-Unis, 5 fois plus fort en Allemagne et 4 fois plus grand en Chine.

(11) <http://rapports-du-comite-national.cnrs.fr/publications>