

# Compte-rendu de la Réunion du bureau du Réseau Français de Chimie Théorique

02 octobre 2014 – UPMC – 10 heures

Présents : C. Léonard, E. Dumont, A. Boutin, S. Sacquin-Mora, Ph. Carbonnière, P. Reinhardt, I. Demachy, V. Robert

Visioconférence : D. Bégué, K. Costuas, N. Ferré

Excusés : C. Adamo, D. Hagebaum-Reignier, Ch. Raynaud

## 1- Fonctionnement du bureau :

Le bureau actuel doit fonctionner pendant 4 ans de juillet 2014 à juillet 2018. Le nouveau bureau sera élu lors des RCTF de 2018 (à Toulouse ?). Les RCTF de 2016 auront lieu à Lyon.

Prochaine réunion du bureau prévue en février ou mars 2015 après les cours du label.

## 2- Fonctionnement des pôles :

Chaque pôle organise deux semaines de cours du label entre septembre et mars. Chaque pôle a une spécificité géographique.

IdF/Nord : 1 semaine globale, 2ème semaine deux possibilités différenciées en janvier pour élargir le pool des enseignants.

Ouest : essayer de faire tourner, mise en place d'une petite formation en informatique pour les doctorants de Rennes au début de la thèse. Doctorant de Nantes, et d'Anger.

Sud-Ouest : les cours tournent sur 2 ans. Pour 2013-2014, les 10 étudiants se sont déplacés sur Toulouse pour suivre le master européen, grâce à une aide financière des labos. Ce qui aide l'organisation des cours du label, c'est que les responsables de pôles sont aussi les responsables de master.

Sud-Est : pas d'enseignement avant la fin décembre. Le pôle regroupe Lyon, Grenoble, Marseille, Nice et Clermont-Ferrand. Les cours auront lieu à Lyon. A priori 5 M2, 10 doctorants, 6H Hartree-Fock (3H et 3h30 TP sur machines) les lundi et mardi de mi-nov à mi-dec, avec la volonté de d'essayer d'avoir une suite logique.

Nord-Est : les cours sont organisés sur 2 sites (généralement Nancy et Strasbourg), 1 semaine en Novembre puis 1 semaine en Janvier. Les cours dispensés évoluent au mieux pour éviter les redondances.

Des journées RCTGE sont organisées pour rassembler la communauté. Elles auront lieu à Strasbourg Vendredi 22 et Samedi 23 mai 2015.

## 3- Bilan financier :

A l'heure actuelle, le Réseau est financé par le CNRS via le GDR 3333. Ce GDR est prévu pour fonctionner de janvier 2014 à décembre 2017. Pour 2014, la subvention a été de 16000 euros qui a été répartie de la façon suivante : 2000 euros pour chaque pôle sauf IdF/Nord et ensuite des subventions à des manifestations (liste sur le site web). Il reste un reliquat d'environ 2600 euros, pour lequel un deuxième appel à subvention de manifestation a été lancé.

Grâce aux bénéficiaires inattendus du RCTF 2014, le comité d'organisation a contribué à financer les « journées de modélisation et simulation » organisées en septembre 2014 à Paris. Le réseau recevra 8000 Euro du reliquat RCTF2014.

Le prix Gaston Berthier 2014 a été financé par la nouvelle sous-division « modélisation et simulation » (SDMS) de la division chimie physique commune à la SCF et à la SFP, présidée par A. Boutin.

L'avenir financier du réseau est un point d'interrogation et il faut réfléchir à un fonctionnement futur qui pourrait être attaché à cette nouvelle subdivision. Anne Boutin en est la présidente, et Céline Léonard la trésorière.

#### **4- Mise à jour du site web :**

Chaque responsable de pôle doit mettre à jour le plus vite possible le contenu des semaines de formation de 2014-2015. Toute annonce de stage de M2 doit être déposée sur le site. S. Sacquin-Mora assure la mise à jour du site pour les annonces de thèse, de post-doc et de postes, de même que la liste des manifestations soutenues par le réseau. D. Hagebaum-Reignier assure la maintenance technique. Toute annonce de plus de deux ans doit être supprimée – D. Hagebaum-Reignier a donné les droit nécessaires aux responsables des pôles.

#### **5-Relations avec l'industrie :**

L'un des rôles du réseau est aussi de se préoccuper du devenir des docteurs formés en chimie théorique en France. Le nombre de postes académiques étant assez faible, il est raisonnable de favoriser l'ouverture des doctorants vers le monde de l'industrie. En particulier, les doctorants ayant un parcours 100% académique devraient, durant leur thèse, s'inscrire à des formations tournées vers l'entreprise. Un carnet d'adresse d'industriels ou de sociétés privées qui ont embauchés des doctorants du réseau pourrait être mise en place, A. Boutin se propose de s'en occuper. Comme début, chaque membre du bureau peut donner deux entrées à ce carnet d'adresses qui sera ensuite être mis en ligne sur le site web.

#### **6 -Relations internationales :**

Lors de la table ronde avec des responsables de réseaux de chimie théorique européens et français (G Pacchioni, F Illas, C Adamo, C Pouchan, M Yanez, O Eisenstein) pendant les RCTF 2014, il a été souligné que la mise en disposition de sommes importantes dans le cadre des ERC grants doit être saisie. Cependant la chimie théorique n'a pas ou ne peut pas avoir une entrée privilégiée dans ce système de subventions, les thématiques proposées par la CEE – relativement appliquées – devront être respectées.

N. Ferré est aussi membre du GDRI Franco-Chinois financé par le CNRS, avec R. Marquardt, C. Adamo et I. Navizet. Celui-ci finit aussi en fin 2017. Ce GDRI finance les rencontres de chimie théorique entre chinois en français tous les 18 mois, ce qui existe depuis plusieurs années. Toutes les publications découlant de collaborations issues de ses rencontres vont être listées. L'année prochaine un appel à projets pour financer des déplacements de personnes, doctorants en particulier, entre la France et la Chine sera lancé.

La question est posée si d'autres opportunités de créer d'autres types de GDRI avec d'autres pays sont en vue.

#### **7- Utilisation des grands centres de calcul :**

Un sondage sur l'utilisation des grands centres de calculs par la communauté des chimistes théoriciens français doit être lancé par Carlo Adamo, à titre d'une nouvelle fonction du bureau créé par C Léonard, pour répondre aux questions suivantes : Quelle est la situation actuelle quant aux projets qui sont acceptés par ces centres ? Tous les demandeurs sont-ils servis ? Sinon, pourquoi ? Qu'elle est la projection vers l'avenir ?

A l'issue du sondage, les résultats seront communiqués à Daniel Borgis (nommé récemment chargé de mission sur le calcul scientifique au CNRS).

## **8- Enseignement :**

Devant le nombre de plus en plus faible d'étudiants en chimie théorique, un sondage au sujet de la mise en place d'un MOOC dédié à la chimie théorique en français a été lancé. Les résultats indiquent que ce type de formation est sans doute trop lourd pour notre réseau, mais qu'un ensemble de cours en ligne peut-être envisageable, pour les cours de théorie. Le présentiel reste indispensable, essentiellement au niveau des TP, ces TP étant déjà dispensés lors des cours du label. Dans un premier temps, il a été décidé de mettre en place une banque commune de TP de chimie théorique disponible pour chaque enseignant de label de chaque pôle.

Il a été évoqué la mise en place d'un master national de chimie théorique. Or, il n'existe pas d'intitulé de mention de master lié directement à la chimie théorique dans la liste disponible au ministère. <http://www.legifrance.gouv.fr/affichTexte.do?cidTexte=JORFTEXT000028583174&dateTexte&categorieLien=id>

On ne pourrait donc envisager d'un parcours qui devrait être commun à un ensemble d'universités françaises, qui nécessiterait des conventions entre chaque université participante. C'est une solution difficile à mettre en place au niveau national, cependant elle a été mise en place par les 4 universités du pôle Sud-Ouest (Pau, Bordeaux, Montpellier et Toulouse). L'idée est de déplacer les étudiants que pour quelques cours, et ensuite de profiter d'enseignements en ligne, à distance et de quelques cours locaux pour minimiser les frais. Il est attendu 10 étudiants au total pour ce parcours régional.

Ces questions mettent en avant la nécessité d'avoir un responsable pour l'enseignement dans le bureau. Il a été demandé à Xavier Roquefelte de Nantes de s'en occuper, car il est déjà fortement impliqué dans la création d'un MOOC à Rennes.

Le renouvellement du master européen Erasmus Mundus co-organisé à Toulouse est en fin de vie et une demande de renouvellement est en cours de rédaction.

Au sein de chaque pôle, il faut vérifier si des demandes d'ITN (Initial Training Networks - Marie Curie Actions, [http://ec.europa.eu/research/mariecurieactions/aboutmca/actions/itn/index\\_en.htm](http://ec.europa.eu/research/mariecurieactions/aboutmca/actions/itn/index_en.htm)) ont été déposés autour de la chimie théorique. Si oui, il serait bon de faire passer les informations à tous les membres du réseau pour éviter le dépôt de projets concurrents dans la mesure du possible.

On s'assure que les cours du label soient reconnus dans les écoles doctorales validant des ECTS pour les doctorants.

## **9- Questions diverses :**

**Toute suggestion est bonne à prendre et le bureau reste ouvert à toute proposition.**

Pour les journées de modélisations organisées au sein de chaque pôle, il a été proposé d'étendre la publicité à l'ensemble de la communauté française.

Il a été proposé d'ouvrir les RCTF à d'autres sujets tels que l'enseignement, le retour d'expérience d'anciens doctorants dans l'industrie sur une journée ou demi-journée.

Il a été décidé de se retrouver comme bureau 2 fois par an – une fois après les enseignements et une fois avant la clôture des comptes universitaires.

Réunion levée à 13h.