

Présents : Céline, Carlo, Sophie, Peter

Visioconférence : Karine, Xavier, Elise, Christophe, Philippe, Didier, Gérald

Non : Isabelle, Vincent (Japon), Anne, Nicolas, Denis (qui n'a pas pu se connecter)

1. RCTF 2016 :

a. prix GB : Etienne Thibaud. Nous avons eu 12 très bons candidats.

b. Inscriptions : CL a demandé une réduction des frais d'inscription pour les membres du bureau qui ont manifesté leur venue en cours. Le montant n'est pas encore connu. Il faut maintenant se préinscrire. Les organisateurs ont vérifié qu'il n'y avait pas de match de l'EURO durant la semaine du 27 juin au 1 juillet. Il faut faire attention cependant à ne pas tarder à réserver les hôtels (cf liste sur le site web des RCTF 2016 qui indique des hôtels dont les tarifs ont été négociés pour l'événement).

c. Préparation du débat

Débat : mardi soir (il faudra aussi penser à une intervention au sujet du devenir des étudiants).

Le débat doit tourner entre autre autour de la question de mettre en place un master national dans la suite de l'ancien DEA de Chimie Informatique et Théorique. Avec l'autonomie des universités, cela semble assez difficile. De plus, la mention Chimie Théorique n'existe pas. Par contre, le pôle Sud-Ouest a déjà monté un partenariat entre les universités de Montpellier, Toulouse, Pau et Bordeaux au niveau des masters (M1, M2). Les UE de Chimie Théoriques sont mises en commun. Les cours sont faits à distance en visio-conférence et les étudiants ont une semaine de TP en présentiel. Ce fonctionnement simplifie les emplois du temps. Les étudiants ont un référent Chimie Théorique en local qu'ils voient une fois par semaine. Dans ce pôle, le label du pôle Sud-Ouest est adossé sur cette organisation. Le partenariat repose sur le partage des coûts de fonctionnement par rapport au nombre d'étudiants. Il compte 30 HETD/Et.

Philippe soulève le problème de la reconnaissance de la chimie théorique dans un tel master commun. Faut-il mettre en place un nouveau label ?

Les membres du pôle Est sont en train de réfléchir à ce sujet. L'idée est plutôt de s'adosser au meso-centre de calcul pour profiter des compétences informatiques.

Cette réflexion est à mener pour les autres régions, les autres pôles, en particulier pour le pôle IDF où il n'y a pas de problème de déplacement. Ce type de master sera plus dur à mettre en place au niveau du pôle Ouest qui n'a pas de méso-centre et manque d'universités. Il faut envisager des regroupements avec Nantes, Anger, Rouen, des biologistes ...

Xavier s'occupe de faire une présentation sur ce sujet pour le débat.

AG : jeudi soir

Lors de l'AG, Céline fera un bilan des activités du réseau depuis 2014. Les diplômes du label seront aussi distribués aux présents. Il faudra insister sur l'intérêt de suivre les règles de bonne conduite de l'utilisation des centres de calcul, l'avenir du réseau sera aussi évoqué (cf. ci-dessous).

2. RCTF 2018

Les RCTF 2018 seront organisés par Toulouse et se dérouleront début septembre pour éviter la collision avec la conférence internationale ICQC.

Gérald précise que les cours pourraient déjà avoir débutés dans plusieurs universités et qu'il vaudrait mieux avancer les RCTF 2018 à fin août.

A la suite de la réunion, la question a été posée à T. Leininger, qui a répondu que la fin août est pire encore à Toulouse à cause de la préparation de la rentrée universitaire.

3. Bilan des labels

Inscrits 2015-2016

Pôles	Est	Sud-Est	Sud-Ouest	Ouest	Nord-IDF
M2	6	4	6	5	14
Doctorants	9	11	1	21	10

Résultats 2015-2016

Pôles	Est	Sud-Est	Sud-Ouest	Ouest	Nord-IDF
Label	5	4	4	3	8
Suivi	1		2 ?		6

Chaque pôle doit me faire parvenir son bilan pour éditer les diplômes.

a. Introduction à l'utilisant des centres de calculs :

Chaque pôle a organisé une intervention de ce type.

Pôle Nord-IDF : durant le label, le vice-directeur de l'IDRIS est intervenu, ainsi que les utilisateurs chevronnés. L'intervention s'est avérée utile pour les étudiants de M2.

Pôle Est : 2h sur la semaine à Reims, HPC. Présentation de ce que c'est un centre de calculs et utilisation.

Pôle Ouest : ce sont les permanents qui utilisent les centres de calcul. L'IGR du laboratoire va se former au CINES et relaie l'information en local.

Pôle Sud-est : un post-doc est intervenu pour présenter des aspects très techniques et pratiques, les doctorants sont venus exprès.

Pôle Sud-ouest : pendant la semaine de TP en présentiel pour les étudiants de M2. Le document sur les bonnes pratiques d'utilisation des centres de calcul est présenté.

b. Site web :

Il faut continuer à mettre le maximum d'infos sur le site : détails des cours du label, poly, offres de stages M2, etc...

4. Budget 2016 : dotation CNRS : 13000 euros

Pôle Est : 2000 euros

Pôle Sud-Est : 2000 euros

Pôle Sud-Ouest : 1700 euros

Pôle Ouest : 1700 euros

Pôle Nord-IDF : 400 euros

Prix GB et RCTF 2016 : 500 euros

Subvention de manifestations : 4700 euros

5. Attribution des demandes de subvention : 4700 euros à répartir

Nom du porteur	Titre de la manifestation	Lieu	Date	Montant demandé	Attribution
----------------	---------------------------	------	------	-----------------	-------------

Ph. Carbonnière	Structure prediction of nanoclusters from global optimization techniques: Computational strategies and connection to experiments.	Pau	4-8 juillet 2016	1000	600
P. Cassam-Chenaï	9èmes rencontres internationales d'interaction des mathématiques avec la chimie quantique ab initio : Effets non adiabatiques électrons-noyaux dans les systèmes moléculaires et la matière condensée	Nice	3-4 novembre 2016	2000	600
F. Cazals	Winter school: Algorithms in Structural Bioinformatics	Sophia Antipolis	5 jours, 2eme quinzaine de Novembre 2016	2000	700
N. Ferré	Excited state simulations: bridging scales	Marseilles	7-10 novembre 2016	1000	700
D. Jacquemin	Conférence MRP (Multi-Responsive Photochromes)	Nantes	25-28 avril 2016	2000	700
L. Joubert	1st European Symposium on Chemical Bonding	Rouen	29 août – 2 septembre 2016	1500	700
X. Rocquefelte	ICAMM	Rennes	31 août-7 septembre 2016	1000	700
C. Katan	2èmes Journées Pérovskites Hybrides, JPH2016	ENSC Rennes	17-18 mai 2016	600	
F. Lique	7th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC)	Le Havre	27-30 juin 2016	1000	
J. Contreras	Current Topics in Theoretical Chemistry 2016 (CTTC2016)	Trujillo, Pérou	26-30 septembre 2016	2000	
Total				14100	4700

6. Liens entre SCF et RFCT, avenir du financement du RFCT

- a. Dossier renouvellement GDR en 2017 : il faut mettre en place une équipe de personnes qui portent le projet et qui voudraient participer au prochain bureau. Sophie se propose d'y participer.
- b. Quel avenir pour le réseau dans l'hypothèse que le GDR ne puisse pas être renouvelé une 2^{ème} fois ?

Deux situations sont envisagées basée sur l'idée que les laboratoires du réseau verseraient une cotisation annuelle (dépendant du nombre de théoriciens qu'ils hébergent ?) de façon à financer le label, des manifestations, gérer les RCTF et avoir un fond de roulement leur organisation :

- 1- Rejoindre la sub-division Modélisation et Simulation de la SCF. Avantages : elle existe déjà, elle fonctionne de façon autonome au niveau des décisions politiques et scientifiques, la gestion financière est simple. Inconvénients : il faut adhérer à la SCF. Les cotisations de la SCF ne sont pas redistribuées en partie à la sub-division qui doit être autonome financièrement. Il n'y a pas assez d'adhérents pour qu'elle puisse être représentative du RFCT (à l'heure actuelle).
- 2- Monter une association 1901 reconnue d'utilité publique. Avantages : une liberté de gestion financière et de décision. Les donateurs privés ont des avantages fiscaux, 60% de la cotisation à déduire des impôts sur le revenu. Inconvénients : il faut la monter et trouver un bureau dynamique.
Karine doit préparer une présentation lors de l'AG des RCTF pour présenter cette solution.

La réunion se termine vers 12h30.