

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

04 février 2021 – en visio – 14 heures

Présent·e·s : Sophie Sacquin-Mora, David Lauvergnat, Céline Houriez, Aurélie Perrier, Vincent Robert, Karine Costuas, Mariachiara Pastore, Adèle Laurent, Peter Reinhardt, Maylis Orio, Rémi Maurice, Christophe Raynaud, Éric Brémond, Arnaud Fihey

Excusé·e·s : Marc Baaden, Didier Bégué, Élise Dumont, Philippe Carbonnière

1) Label de Chimie Théorique, retour des pôles

- **IDF-Nord** : Deux semaines en janvier intégralement en distanciel (ce qui pose des difficultés pour la mise en place des TP). 45 inscriptions également réparties sur les deux parcours. À l'issue du label une attestation de suivi est délivrée, et les masters associés se chargent d'organiser les examens au niveau local. L'affluence supérieure aux années précédentes (il a fallu refuser des inscriptions aux TP) peut s'expliquer (entre autres) par la diminution des offres de formations (formations qui sont demandées par les écoles doctorales).
- **Est** : Deux semaines (2*30h) qui sont alternativement à Strasbourg et Nancy mais tout à été fait en distanciel cette année. 10 inscriptions (avec une répartition d'environ 50/50 Strasbourg /Nancy), 3 étudiant·e·s ont présenté l'examen, 2 l'ont validé. Le passage au distanciel permet de s'interroger sur la possibilité d'un étalement des cours sur une période plus longue afin d'alléger un planning très dense.
- **Ouest** : Le label se tiendra début mars (au début des stages de M2) et comprend 2 semaines de cours/TP, le tout en distanciel. Pour le moment il y a 45 inscriptions au lieu de 30 les années précédentes (peu de M2 et surtout des doctorant·e·s locaux). Il n'y a pas d'examen associé.
- **Sud-Est** : Deux semaines en janvier, en distanciel avec des enseignants de Lyon et Marseille. Pas de TP (mise ne place trop compliquée). 20 inscriptions (10 l'an dernier), doctorant·e·s et M2. Les M2 passent un examen à l'issue de la formation
- **Sud-Ouest** : Ce pôle avec déjà une expérience du distanciel, avec des cours distribués sur l'ensemble du 1er semestre. Le TP en présentiel de janvier a été basculé sur un TP en distanciel. 10 inscriptions, uniquement de M2 (6 de Toulouse et 4 de Montpellier), le master associé se charge de l'organisation de l'examen.

2) Animation scientifique 2020-2021

- Le pôle Ouest a organisé sa journée scientifique en distanciel le 1er décembre, avec 2 conférences invitées et des présentations des doctorant·e·s (40 participant·e·s connectés). Le pôle Est a prévu une journée scientifique pour le 1er semestre 2021, la date reste à fixer.
- La journée dédiée à l'industrie initialement prévue fin 2019, a déjà dû être reportée deux fois (pour cause de grève et de CoVid), Céline Houriez va l'organiser en distanciel complet.
- Xiaojing Wu, lauréate du prix de thèse Gaston Berthier 2020, a présenté ses travaux lors des JTMS (Journées « Théorie, Modélisation et Simulations ») organisées par la sous-division Mod-Sim de la DCP, qui se sont tenues en ligne du 2 au 6 novembre 2020.
- Le réseau va mettre en place un webinaire mensuel pour permettre aux jeunes chercheur·se·s (doctorant·e·s en fin de thèse et post-doctorant·e·s) de présenter leurs travaux. les dates seront

fixées de manière à alterner avec les ModSim Conference Series (tous les 2 mois, le dernier jeudi du mois). Le premier webinaire est fixé au 18 février 14h.

- Un groupe de travail « Données » a été formé (Rémi Maurice, Romain Berraud-Pache, Jean-Yves Chatelier, François-Xavier Coudert, Gilles Frison, Carine Michel, Gilles Ohanessian, Adiane Sayede, Anthony Scemama) et se penche sur les questions de gestion/hébergement associées, et sur les initiatives européennes prises dans le domaine. Une manifestation scientifique, avec restitution, sur le sujet est prévue pour le second semestre 2021.
- Pour 2021 (second semestre) le RFCT prévoit également l'organisation de rencontres prospectives sur les questions d'IA/Deep Learning. C. Raynaud renouvelle son intérêt pour l'organisation des journées prospectives (co-organisation avec F. Jolibois à confirmer). A priori on prévoit une organisation d'un évènement en présentiel pour fin 2021 avec un passage au distanciel si la situation sanitaire l'exige. Dans le cas d'un évènement en présentiel, on réfléchit néanmoins à la possibilité de diffuser les interventions en ligne.

3) Évaluation du projet de FR ThéMoSiA lors de la session d'automne du Comité National

- La création de la FR ThéMoSiA a été reportée au 1er janvier 2022, afin d'être en phase avec la vague d'évaluation B, qui concerne les laboratoires de la zone ouest.
- Le projet de FR a reçu un avis très favorable de la section 13 (section principale d'évaluation) et des sections 12 et 14 (sections secondaires), ainsi qu'un avis favorable des sections 4 et 51 (sections secondaires). Les sections 5 (INP) et 15 (INC) émettent un avis plus réservé, du fait de l'absence de personnels associés à la section 5 dans l'élaboration du projet d'une part et d'une faible présence des thématiques associées à la 15 dans le projet d'autre part. Une rencontre avec Mehran Mostafavi est prévue au printemps 2021 pour bien clarifier les questions restantes autour du projet, en vue d'une création de la FR au 1er janvier 2022. Il est aussi envisagé de renforcer les interactions avec des chercheurs de ces deux sections.

4) Mise en place d'un site web pour la FR ThéMoSiA :

L'ossature du site en Wordpress est prête mais la charte graphique et le logo restent à définir. Le concours pour le logo de la FR lancé à l'automne a reçu peu de participations et va être relancé

5) Mise en place d'un annuaire de compétences pour la FR ThéMoSiA :

Deux réunions de travail ont déjà eu lieu avec le prestataire, le CoPil et les chargé-e-s de mission communication pour avancer sur le contenu et l'ergonomie de l'annuaire. L'objectif est de faire tester celui-ci par le bureau en mars, après quoi on s'appuiera sur les pôles régionaux pour le remplissage.

6) Bilan financier

Le bilan financier pour 2020 est en annexe du compte rendu.

L'INC nous a informé que la dotation 2021 du GDR ne serait transmise qu'en mars, les appels d'offre du RFCT (soutien à manifestation scientifique, amorçage de collaboration scientifique) seront donc publiés à ce moment là.

Bilan financier 2020

Dotation CNRS : 14 k€

Subventions aux pôles régionaux : 5900 €

- Est : 1500 €
- IdF-Nord : 700 €
- Sud-Est : 1500 €
- Ouest : 1000 €
- Sud-Ouest : 1200 €

Subventions à des manifestations scientifiques : 3000 €

- Régularisation d'une subvention impayée pour le workshop *Excited State Simulations: Bridging Scales* à Marseille en 2016, 700€
- *ICTAC*, congrès reporté à juin 2021, <http://ictac2021.univ-lyon1.fr/fr>, 1000€
- *JUJOLS X*, congrès reporté à juin 2021, <https://jujols-x.sciencesconf.org/>, 500€
- *HPERO summer school*, école reporté à juin-juillet 2021, <https://hpero-school.sciencesconf.org/>, 800€

Les fonds alloués à des événements reportés à 2021 ont néanmoins pu être engagés en 2020 (pré-réservation des salles...)

Amorçage de collaboration scientifiques : 2600 €

4 projets soutenus à hauteur de 800€, 800€, 730€ et 270€

Mise en place d'un annuaire de compétences en ligne associé à la future FR ThéMo-SiA : 2500€