

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

12 mars 2019, 10 h – 21 h

Campus Pierre et Marie Curie, Paris

*Présent-e-s* : Sophie Sacquin-Mora, David Lauvergnat, Peter Reinhardt, Céline Houriez, Éric Brémond

*Visio ou tél* : Philippe Carbonnière, Karine Costuas, Adèle Laurent, Franck Jolibois, Rémi Maurice, Arnaud Fihey

*Excusé-e-s* : Vincent Robert, Aurélie Perrier, Mario Barbatti, Marc Baaden, Didier Bégué

## 1) Bilan financier 2018 (en fin de document)

Il a été brièvement discuté et n'a pas fait l'objet de remarque.

## 2) Appel d'offre en cours :

La deadline prévue pour le 31 mars 2019, il y a déjà 5 demandes de subvention de congrès (6 demandes en 2018), mais aucune demande de financement pour collaboration entre labos → relancer l'appel d'offre sur la mailing-list et Twitter.

## 3) Retour d'information des pôles :

- Karine : les informations concernant le listing de labos impliqués dans la future FR (et notamment les laboratoires de « coeur ») sont difficiles à obtenir. Seul le sud-est a renvoyé une liste complète des équipes et du nombre de permanents impliqués dans chacune.

Le pôle Nord - Ile de France pensait l'avoir envoyé. Peter a renvoyé le document dans la foulée

- Franck : concernant les questionnaires concernant la formation envoyés à chaque pôle, les réponses parvenues viennent du pôle est et ouest. Afin de concevoir une cartographie des cours dispensés dans les différents pôles, il est important que les responsables des pôles transmettent leurs informations.

Pôle Nord - Ile de France : Peter et David ont commencé à rédiger. Par ailleurs, Peter nous a informé qu'il y a un document en ligne sur tous les Masters scientifiques du bassin parisien (<http://aps-paris5.fr/pedagogie/orientation>)

## 4) Futur site web : [rfct.cnrs.fr](http://rfct.cnrs.fr) (il faudra aussi déposer [themosia.cnrs.fr](http://themosia.cnrs.fr) pour préparer la transition vers la FR)

Présentation du nouveau site créé par Éric et Aurélie, via le kit wordpress du CNRS

On repart de la structure et du contenu du site actuel (<http://www.chimie-theorique.cnrs.fr>).

- Ajout d'une page répertoire listant les logiciels recensés via le questionnaire à l'automne dernier (environ une vingtaine de réponses).
- Annuaire des laboratoires impliqués dans le réseau avec le mail d'un contact par labo. Une fois la FR lancée, préciser le statut des laboratoires ou organismes participants (porteur ou associé).

- Gestions des pôles régionaux : Ceux-ci peuvent au choix avoir un site propre (listé sur le site national) ou une page dédiée sur le site national  $\Rightarrow$  création de comptes utilisateurs pour les responsables des pôles régionaux.
- Partie formation : Consacrée au label, mais aussi à la formation d'utilisateurs par les développeurs, en lien avec la logithèque. Une fois la FR lancée, il faudra intégrer ou donner le lien vers les ressources de formation en ligne.
- Partie emploi : Intégration des stages de M2 et possibilité de filtrer les annonces (stage/these/postdoc...) pour faire des recherches ciblées.
- Faire un appel à images pour illustrer le site ! (photothèque du CNRS peu fournie dans notre domaine) + Réfléchir à un logo pour la FR.
- Question du libre accès aux ressources (notamment les cours du label de chimie théorique) : Peut-on créer une section avec accès restreint (création d'un compte) ?

A Toulouse il y a une chaîne Youtube privée, les choses varient beaucoup entre les différents pôles, pour le moment il n'y a pas de position consensuelle au niveau national. Par contre, il est clair dans les discussions du groupe de travail formation du projet de FR que l'accès aux ressources de formation en ligne doit être contingenté à une inscription, ne serait-ce que pour avoir un retour sur les personnes intéressées par ces ressources, leurs motivations initiales, et leurs retours d'expérience sur les supports.

$\Rightarrow$  On pourrait par exemple envisager la création d'un moodle qui rassemblerait les ressources (cours, TD, vidéos...), associé au label de chimie théorique ou en complément de celui-ci via un label spécifique des formations en ligne.

- Page d'accueil : Faire une présentation grand public du GDR / de la FR, afin de montrer quelques exemples marquants de l'utilité de notre discipline.
- Retour de P. Carbonnière suite à une présentation du projet à l'IPREM : Mettre en avant les apports de la chimie théorique. La communauté n'est pas forcément très nombreuse, mais elle est dynamique et bien répartie sur l'ensemble du territoire. On pourrait éventuellement cartographier des groupes de chimie théorique en France
- Présentation de parcours individuels via des portraits d'ancien-ne-s doctorant-e-s en chimie théorique en plus d'information sur le devenir général des doctorants. En demandant un portrait/pôle/an on a de quoi alimenter le site avec un rythme raisonnable. Cela se fait déjà à Rennes au niveau de l'ENSCR (<https://www.ensc-rennes.fr/category/temoignages/>), peut être initié en IdF lors des JTMS.
- Ajouter une section « Entreprise » présentant des projets collaboratifs emblématiques en plus d'une liste plus exhaustive. C'est par des exemples de collaborations fructueuses que nous renforcerons l'image de notre(nos) discipline(s).

#### 4) Projet de Fédération

Renforcer la communication auprès des laboratoires pour rappeler que le montage du projet se nourrit des retours de la communauté scientifique : **Rien n'est encore gravé dans le marbre et rien ne sera transmis au CNRS sans avoir été d'abord communiqué aux DU des laboratoires concernés.**

Pour rappel, plusieurs actions de communication ou construction collective peuvent être mentionnées lorsque les membres du bureau sont interpellés au sujet de ce projet :

1. Trois groupes de travail ont été constitués pour préparer un pré-projet, « recherche », « logithèque » et « formation ». Un appel a été lancé à la communauté pour rejoindre ces groupes de travail, dont la composition n'est pas fermée : **il est encore possible de s'impliquer !**
2. Le projet « recherche » concernera l'ensemble de la chimie théorique et de ses domaines associés. Une coloration sur les modélisations multi-échelle est visée pour créer de nouveaux liens au sein de notre communauté. Ce projet sera enrichi lors des Rencontres Prospectives 2019. Les personnes intéressées pour donner un point de vue sont invitées à assister aux rencontres et notamment aux tables rondes qui s'y dérouleront.
3. En cas de succès du projet ANCRE, un budget sera alloué à chaque membre du copil du GDR pour aller présenter le projet en région auprès des laboratoires.
4. L'envoi d'un courrier auprès des DUs et directeurs de GDR concernés est bien entendu prévu, mais ne pourra être fait qu'une fois les premières pistes initiées par les groupes de travail formulés par ces derniers. Ce courrier sera envoyé en amont des Rencontres Prospectives, afin que nous puissions discuter collectivement des éventuels retours reçus.

Adèle : lors des journées scientifiques de décembre, certains participants ont fait part de leurs inquiétudes sur le choix de la thématique du multi-échelle, qui pourrait peut-être ne pas correspondre à tous, notamment aux développeurs de notre communauté.

Evidemment, nous considérons ce type de réserves de façon constructive afin d'améliorer le projet. Il faut rappeler tout de même qu'on ne peut pas faire de multi-échelle sans la description d'échelles, et que donc de fait les développeurs, y compris ceux qui ne s'intéressent qu'à la description d'une seule échelle, ont toute leur place dans le projet. On peut rappeler ensuite que l'esprit du projet de recherche a évolué suite à ces discussions, désormais il ne s'agit que d'une coloration, c'est à dire que toute autre activité sera de fait incluse dans le cadre de la FR, indépendamment de son caractère multi-échelle, et que cette coloration ne concernera pour l'instant que le premier quinquennat de la FR. En effet, une toute autre coloration pourra être choisie pour le mandat suivant, sachant aussi que des élections seront au niveau des postes à responsabilité de la FR. De plus, la FR sera soumise à des évaluations périodiques de type HCERES, et un Conseil Scientifique se réunira tous les 2 ans et demi. De fait, le projet de recherche sera aussi susceptible d'évoluer en cours de mandat, notamment sur la base d'idées proposées par ses membres. Il ne faut pas perdre de vue l'objectif principal, il s'agit de pérenniser notre réseau sous forme de FR, et aussi de stimuler de nouveaux échanges au sein de notre communauté. Concernant le développement méthodologique, une session dédiée aura lieu lors des Rencontres Prospectives 2019, ce qui montre bien que les développeurs ne sont pas mis de côté dans la construction du projet, et ont même plutôt tendance à s'impliquer.

#### *Constitution du CS :*

5 membres ont déjà accepté (sur 6 prévu-e-s),

Th. Deutsch (solide), G. Jansen (moléculaire), Lucie Delemotte (bio), F Gatti (dynamique), JF Dufêche (mésoscopique).

Il manque un membre du CS pour la méthodologie. De manière générale, un nombre importants de personnes ont décliné dont une majorité de femmes, étant trop sollicitées par diverses responsabilités. La composition du CS et le programme seront indiqués sur le site du GDR et mis jour. La première réunion du CS aura lieu à l'issue des rencontres prospectives, afin d'avoir un retour de celui-ci concernant le pré-projet et les discussions qui auront pu avoir lieu lors des rencontres.

### *Rencontres Prospectives à Nantes (11-13 juin)*

Programme : 6 plénières sur 7 (membres du CS présents + C. Domain + R. Vuillemier). 12 invité·e·s confirmé·e·s sur 21 (MAJ : 17 confirmés le 21/03).

On peut noter les nombreux retours positifs de la part des membres du CS et des orateurs sollicités. En particulier, le fait d'ouvrir vers d'autres (sous-)communautés est particulièrement apprécié.

Annonce des journées à mettre en ligne sur le site du réseau et à faire diffuser (fait suite à après la réunion). Comme il n'y a pas de frais d'inscription et d'abstract à déposer, l'inscription se fait simplement par mail aux organisateurs ([remi.maurice@subatech.in2p3.fr](mailto:remi.maurice@subatech.in2p3.fr) - lien <http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/spip.php?article612>)

**Pour faciliter l'organisation, merci de vous inscrire même si vous faites partie du bureau.** Il nous semble important que les membres du bureau ainsi que les membres des groupes de travail assistent autant que possible aux rencontres et à ses tables rondes.

Un logo est en préparation. Il sera mis en ligne dès que possible, et la liste des orateurs ainsi que le programme préliminaire mis à jour régulièrement.

Budget : 2200€ du GDR (exercice 2018) + 3000 € de soutien de l'INC + ?

### **5) Questions diverses :**

Reclarifier les liens avec la DCP-ModSim notamment la gestion de la ligne budgétaire dédiée au RFCT (en vue des RCTF de Bordeaux 2020)  $\Rightarrow$  contacter F.-X. Coudert qui est le nouveau trésorier.

**À suivre :** les dossiers seront transmis dès la clôture de l'appel d'offre (congrès et collaboration) pour un arbitrage et une attribution rapide des fonds.

**GDR3333 – Réseau Français de Chimie Théorique**  
**Bilan financier 2018**

**Dotation CNRS 14 000 €**  
**Total des dépenses 13750€**

**Subventions aux pôles régionaux : 5500 €**

- Est : 1500 €
- IdF-Nord : 800 €
- Sud-Est : 1000 €
- Ouest : 1000 €
- Sud-Ouest : 1200 €

**Subventions à des manifestations scientifiques : 7200 €**

- 21eme congrès du GGMM (Groupe de Graphisme et Modelisation Moleculaire), 3 au 5 avril 2019 à Nice : <https://ggmm2019.sciencesconf.org/> : 1000 €
- École thématique DynaMoPPI : Dynamique et Modulation des Interactions Protéine-Protéine. <https://dynamoppi.sciencesconf.org/> : 500 €
- Journées Pérovskites Halogénées 2018. <https://jph2018.sciencesconf.org/> : 500 €
- ValBO 2018 : Understanding Chemistry and Biochemistry with Conceptual Models. <http://www.valbo.org/> : 1000 €
- Workshop « Détection, excitation et réactivité des anions interstellaires », St Florent, 11-14 juin 2018 : 800 €
- Strasbourg satellite meeting to the 16th ICQC : Strong correlation in electronic structure theory. <https://quantique.u-strasbg.fr/icqc> : 1200 €
- Rencontres Prospectives 2019 : « Modélisations multi-échelles », Nantes, 11-13 juin 2019 : 2200 €

**Missions, déplacements réunions : 1050 €**

- Visite de l'IDRIS le 9/11/2018
- Réunion à l'INC le 9/01/2019