

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

28 novembre 2019 - IBPC, Paris 5 - 14 H

Présent·e·s : Sophie Sacquin-Mora, David Lauvergnat, Céline Houriez, Éric Brémond, Aurélie Perrier, Élise Dumont, Vincent Robert

Visio ou tél : Philippe Carbonnière, Karine Costuas, Arnaud Fihey, Franck Jolibois, Rémi Maurice, Arnaud Fihey, Christophe Raynaud, Mario Barbatti, Mariachiara Pastore

Excusé·e·s : Peter Reinhardt, Adèle Laurent, Marc Baaden

1) Lettre aux tutelles pour le projet de FR

La lettre à destination des DU, chefs d'équipe et tutelles pour les informer du projet de FR et obtenir les accords de principe est prête à être diffusée. On se basera sur le listing des unités signataires lors du dernier renouvellement du GDR (en 2017), mais celui-ci doit être mis à jour/élargi. Les responsables de pôles peuvent faire des retours au CoPil à ce sujet.

2) Document à destination du Comité National

Un draft est en cours de correction par le CoPil, qui doit y intégrer les parties produites par les groupes de travail concernant le projet scientifique (autour du multi-échelle) et le volet formation du projet. Le texte circulera ensuite au sein du bureau avant transmission à l'INC courant janvier.

Sections concernées :

- Section principale, 13 (INC)
- Sections secondaires, 4 (INP), 12, 14 (INC) et la CID 51

Le projet pourra ensuite être présenté par S. Sacquin-Mora devant la section 13 lors de la session de printemps en mai 2020

3) RCTF 2020

Les prochaines RCTF se tiendront à Bordeaux du 6 au 10 juillet 2020. L'équipe organisatrice a transmis un pré-programme. Le bureau a apprécié l'effort fourni en termes de renouvellement des intervenant·e·s pressenti·e·s, de diversité thématique et géographique, de mise en avant des personnes récemment recrutées et de parité.

Quelques idées de noms additionnels ont été transmises à l'équipe organisatrice. Afin d'aboutir à un programme paritaire, il est souvent nécessaire de contacter un plus grand nombre de chercheuses que de chercheurs.

Un appel pour le prix Gaston Berthier (qui récompense une thèse défendue entre le 1er janvier 2018 et le 31 décembre 2019) sera lancé début janvier avec une date limite de soumission des candidatures vers le 15 février. Le résultat sera annoncé vers mi-mars, ce qui laissera le temps à la personne lauréate de s'organiser pour être présente à Bordeaux en juillet.

4) Bilan des rencontres prospectives

Les Rencontres Prospectives qui se sont tenues à Nantes en juin 2019 ont été très appréciées par la communauté. Les tables rondes dynamiques ont notamment permis de bien avancer sur le projet de FR qui va être proposé à l'INC.

Les candidatures sont désormais ouvertes pour l'édition 2021, idéalement l'équipe organisatrice sera annoncée à Bordeaux, durant les RCTF 2020.

Plusieurs pistes sont possibles pour cette édition 2021 :

- Des rencontres sur des sujets précis et qui pourraient déboucher sur la création de nouveaux GDR
- Des rencontres transnationales avec une société savante étrangère
- Des rencontres autour d'une thématique porteuse. Les thèmes du calcul quantique et de l'intelligence artificielle ont été proposés. C. Raynaud (Montpellier) et F. Jolibois (Toulouse) seraient éventuellement candidats pour organiser des rencontres autour de cette dernière thématique (IA).

Les rencontres prospectives peuvent être partiellement financées par le GDR (autour de 2500 €), mais il sera nécessaire de trouver un financement complémentaire pour conserver un format d'évènement sans frais d'inscription.

5) Bilan financier 2019 :

La délégation Paris B connaît beaucoup de problèmes qui ont grandement compliqué le versement des subventions attribuées par le GDR au cours de l'année. Il est possible que certaines subventions (notamment pour le pôle ouest) soient arrivées trop tard et soient donc perdues pour 2019.

Pour 2020, les processus de transferts seront mis en place dès que possible, dès que le budget annuel du GDR sera connu et crédité. Les pôles régionaux peuvent donc d'ores et déjà faire remonter leurs besoins pour l'année 2020 à la direction. Les appels d'offre pour subvention de manifestations scientifiques et collaborations scientifiques seront lancés dès janvier avec versement des fonds dès mars pour anticiper d'éventuelles difficultés administratives.

6) Label de Chimie Théorique

Les enseignements du label pour l'année 2019-2020 sont en court de préparation dans les 5 pôles régionaux :

- **Est**, 2 semaines d'enseignement (une à Strasbourg et une à Nancy) sont prévues en décembre puis janvier. Il y a déjà une dizaine d'inscrits.
- **Sud-Est**, 8 jours (3 lundi en novembre-décembre + 5 jours en janvier) sont prévus à Lyon. Environ 10 inscrits (des M2 de Lyon et quelques doctorants de Grenoble et Marseille). É. Dumont signale que Maylis Orio (Marseille) la rejoint comme co-responsable du pôle sud-est.
- **IdF-Nord**, 2 semaines prévues à Paris en janvier, 10 personnes sont déjà inscrites mais les inscriptions viennent d'ouvrir (il y a eu 40 inscrits l'an dernier). Suite aux discussions lors des rencontres prospectives, des cours de programmation/algorithmique vont être introduits dans le programme. Le pôle IdF-nord prévoit aussi d'organiser une journée thématique en février, après le label.
- **Ouest**, 2 semaines prévues à Rennes en février, il y a eu 40 inscrits l'an dernier (surtout des étudiants rennais), mais tout le monde n'assiste pas à tous les cours. Le label accueille majoritairement des doctorants, et pas uniquement des théoriciens.

- **Sud-Ouest**, Les cours sont disponibles en vidéo sur un moodle dédié (environ 20h) et sont associés à ses séances de questions/réponses en direct (présentiel et en ligne) d'environ 1h30. Après quoi il y aura 4 jours de TP à Toulouse. 8 étudiants inscrits (M2 de Montpellier et Toulouse). ⇒ Pour les enseignants qui auront donné leur accord, les vidéos de cours pourraient être mises en ligne sur le site web du GDR.

Bilan financier 2019

Dotations CNRS : 14 k€

Subventions aux pôles régionaux : 4900 €

- Est : 1500 €
- IdF-Nord : 200 €
- Sud-Est : 1000 €
- Ouest : 1000 €
- Sud-Ouest : 1200 €

Subventions à des manifestations scientifiques : 7500 €

- VASP & ICAMM 2019, 26 au 29 juin 2019 à Rennes pour VASP et 1er au 3 juillet 2019 à Rennes pour ICAMM, <https://icamm2019.sciencesconf.org>, 800 €
- 19th deMon developers workshop, 26-30 mai 2019, Fréjus, <http://www.19thdemon-developerswk.u-psud.fr>, 1000 €
- Quantum BioInorganic Chemistry Conference - V (QBIC-V), 8 au 10 juillet 2019, Marseille, <http://www.qbicv.cnrs.fr>, 1000 €
- Computation and Understanding in Quantum Molecular Science: a scientific conference in honor of Jean-Paul Malrieu - A life in the CNRS, 2 au 6 septembre 2019, Toulouse, 600 €
- Les Toulousaines du Calcul Atomique et Moléculaire - TouCAM 2019, 7 et 8 novembre 2019, Toulouse, <https://toucam.sciencesconf.org/>, 500 €
- Fifty Years of Quantum Chemistry in Strasbourg, 22-23 novembre 2019, Collège Doctoral Européen, Strasbourg, 1000 €
- 9e journées de la Société Française de Chémoinformatique, novembre 2019, Paris, <https://sfci2019.sciencesconf.org/>, 600 €
- RCTF 2020, juillet 2020, Bordeaux, 2000 € (acompte déjà versé pour la réservation de salle)

Amorçage de collaborations scientifiques : 1600 €

2 projets soutenus à hauteur de 800 € chacun

Dotations additionnelles :

- Financement exceptionnel de l'INC pour l'organisation des Rencontres Prospectives de Nantes (manifestation sans frais d'inscriptions): 3k€
- Financement ANCRE-Appel suite à un appel à projets exploratoires (<https://www.celleenergie.cnrs.fr/L-Alliance-Nationale-de-Coordination-de-la>): 10 k€, ces fonds ont servi à financer plusieurs rencontres et déplacements à l'échelle régionale (en plus des Rencontres Prospectives de Nantes) afin de présenter le projet de Fédération aux personnels concernés sur l'ensemble du territoire.