

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

04 décembre 2017 - UPMC - 14 heures

Présents : Céline, Peter, Anne, Sophie

Visio ou tel : Carlo, Adèle, Xavier, Philippe, Vincent, Denis

Difficultés techniques : Christophe

1. Résultats du renouvellement GDR si connus

Le dossier a été évalué « Très favorable » par la section 13 à la session du mois de novembre. On ne sait pour les autres sections. L'INC doit procéder à l'arbitrage final prochainement et demande d'envoyer les dernières fiches d'accord des laboratoires et des tutelles. Est-ce que la subvention délivrée par l'INC sera est liée aux nombres de laboratoires retenus ? Une soixantaine de laboratoires ont été listés.

Le GDR actuel prendra fin au 31 décembre 2017. Nous espérons avoir des informations sur la dotation allouée par le CNRS fin janvier 2018. Il sera géré à la délégation Paris B.

2. Bilan financier :

La dotation de 2017 par le CNRS a été de 13000 euros. Cette somme a été dépensée selon les postes suivants :

- subventions aux pôles 6200 euros,
- subventions de manifestations 6300 euros,
- les déplacements de M. Pastore pour JTMS2017 et des missions pour le renouvellement du GDR.

Il reste 25 euros.

Céline remercie Philippe pour la gestion, malgré les difficultés pour trouver/dépenser l'argent via la délégation Paris Est. Une subvention de 2016 pour le pôle Ouest n'a pas encore été versée et semble nécessiter le programme des journées organisées par ce pôle en 2016.

A partir de cette année, s'il reste des reliquats sur le compte du CNRS, il faut écrire une lettre à l'INC pour disposer des crédits l'année suivante.

Les reliquats des RCTF 2016 à Lyon ont été divisés en 10000 euros envoyés à Toulouse pour l'organisation des RCTF 2018 et en 3900 euros pour le RFCT qui vont être hébergés par la subdivision ModSim. Ils pourront permettre de payer le prix Gaston Berthier, par exemple. Paul Fleurat-Lessard est remercié pour son aide dans ce transfert des reliquats.

Pour 2018, le nouvel appel d'offre sera lancé à partir du moment où nous connaissons la dotation du CNRS. Il faut prévoir une dotation à la baisse.

3. Mode d'élection du bureau

Le bureau du RFCT doit être renouvelé d'ici la prochaine AG qui aura lieu au cours des prochains RCTF 2018 à Toulouse. Dans le but d'améliorer la transparence de ce renouvellement, un appel à participation sera envoyé en début d'année aux permanents en chimie théorique à l'aide des responsables de pôles selon les mêmes modalités que le dernier sondage. Une liste des responsabilités sera envoyée avec une boîte à idées.

Les fonctions de coordination, secrétaire et trésorier seront proposées à une élection (durant l'AG ou par mail), les autres fonctions seront élues si plusieurs personnes s'y portent candidates. Dans la mesure du possible, des listes seront établies en veillant à équilibrer les personnes par rapport aux origines géographiques et par rapport aux responsabilités du GDR.

Il est également proposé qu'un représentant des non-permanents soit désigné au niveau de chaque pôle avec une représentation d'un non-permanent au bureau. Chaque pôle gèrera l'élection de son ou de ses représentants de façon autonome. Céline proposera un mail à cet effet d'ici peu de temps. Il faut également penser à concerter ces élections avec celles du bureau de ModSim qui doivent également avoir lieu fin 2018.

4. ICQC et RCTF 2018:

3 satellites d'ICQC sont proposés en France.

Strasbourg : Strong Correlation in Electronic Structure Theory 24-27 juin 2018

Marseille : Understanding Chemistry and Biochemistry with Conceptual Models 24-29 juin 2018

Toulouse : Theoretical Studies of Magnetic Systems: Methodological Developments and Applications 13-16 juin 2018

Strasbourg et Marseille vont demander des financements aux RFCT.

RCTF (8-12 octobre 2018) à Toulouse

Il faut prévoir l'appel pour le prix Gaston Berthier début 2018.

On propose aux organisateurs de Toulouse d'avoir 1 comité scientifique local (à afficher bien-sûr sur le site web) qui effectuera un premier tri des demandes de présentations orales selon les critères habituels des RCTF :

- représentation d'un max de thématiques (en tenant compte des remarques et des sélections pour les conférenciers invités)
- représentation d'un max de labo et de zones géographique
- parité
- mise en avant des nouveaux promus et des jeunes (post-doc, doctorants de 3ème année)

Ensuite, le bureau du RFCT pourra donner un arbitrage final.

Ils doivent prévoir une AG suffisamment longue car il faudra parler du renouvellement du bureau, de la fédération de recherche ...

Ensuite, à Lyon et à Paris, il y avait à chaque fois une table ronde d'organisée (H2020 et réseaux européens ; devenir des doctorants en chimie théorique). Selon le planning décidé, les sujets suivants sont suggérés : théorie vs big data (des groupes de réflexion européens existent via le CECAM en particulier) ou un réseau de jeunes pour le RFCT mais rien n'est obligatoire (ni la table ni les sujets).

Selon vos finances, le réseau verrait d'un bon oeil la mise en place de quelques bourses de déplacement pour les jeunes.

5. Site web :

Le pôle Ouest a créé son propre site web (<http://rfct-pole-ouest.cnrs.fr/>) de façon à pouvoir gérer de façon plus efficace les inscriptions au label et aux journées scientifiques. Les chartes graphiques ont été mises à jour et la gestion des pages est simplifiée. Denis doit regarder si on peut simplement actualiser sur ce format le site actuel du réseau. La question concernant l'intérêt pour chaque pôle d'avoir son propre site web est soulevée.

Des liens vers les autres GDR et le site web de ModSim seront rajoutés. Le listing des manifestations en chimie théorique maintenu par Trond Saue sera mis en évidence sur notre page d'accueil.

6. Label

Bilan par pôle :

Est :

Seulement 3 étudiants de M2 sont inscrits cette année. L'EUR devrait aider pour les années futures.

Sud-Est :

Le constat de baisse est identique à celui du pôle Est. Les cours ont été fermés faute d'étudiants. Seuls les premier cours et TP ont été assurés par Yohann Moreau, pour 2 étudiants après 6 désistements.

Une seule chercheuse de Total, Katell Le Mapihan, venant de Bruxelles et qui a des collaborations avec notre laboratoire a validé tous les cours du label, qui ont été réaménagés spécialement pour elle sur un format de projet en laboratoire (elle avait déjà bloqué ses journées de formation et acheté ses vols Lyon-Bruxelles). Cela nous aura permis de tester le nouveau format de formation.

Nous allons voir au niveau du pôle qui serait intéressé et aurait des idées pour s'investir dans un nouveau format, voir mettre en place des cours en ligne pour recentrer pour des TPs, possiblement changer les dates.

Ouest :

La formule a été drastiquement changée par rapport aux autres années. Elle est passée d'1 à 2 semaines en intégrant des TP. Un dialogue fort a été mis en place avec plusieurs masters de chimie et physique de Rennes (actuellement 2 masters chimie et 1 master international de chimie-physique sont concernés). Des collègues physiciens ont aussi été impliqués.

La responsable des masters a banalisé les deux semaines en question pour les masters chimie (chimie moléculaire et chimie du solide).

Il y aura 2 jours dédiés à la programmation, 2 jours aux fondements et calculs moléculaires, 2 jours au solide, 2 jours à la physique (MC, DM) et 2 jours à la bio. Il y aura également l'intervention de deux industriels modélisateurs.

Le label du pôle Ouest a également été reconnu comme une formation du CNRS.

Les cours auront lieu en février et les inscriptions ne sont pas bouclées. Pour l'instant, il y a 30 inscrits (M2 : 10, Doctorants : 15, Post-doctorants : 1, MCF/Pr : 1, CR/DR : 1, IR/IE : 2).

Comme tous les ans, ces personnes sont inscrites aux deux semaines formation ou bien seulement à certains cours. Le détail n'est pas fait ici.

Sud-Ouest :

6 étudiants de M2 suivent cette année les enseignements du pôle SO. Les thématiques abordées cette année sont:

- DFT
- spectroscopie RMN
- Exploration des SEP
- Méthodes Monte Carlo

- Structure électronique des solides et des surfaces/interfaces
- Relativité

Comme les années précédentes, les étudiants ont déjà suivis les cours théoriques en présentiel ou à distance et seront regroupés en février pour une semaine de TP pendant laquelle les différentes thématiques abordées au 1er semestre sont illustrées.

IDF :

Actuellement, il y a 31 inscrits dont 19 M2. Les autres sont en thèse. 1 DR viendra suivre la semaine 1. Il y aura 4 étudiants de Lille. D'autres inscriptions sont attendues.

Il n'y a pas de changement de l'organisation des deux semaines et des contenus pédagogiques par rapport à l'année passée.

En 2019, l'UPMC participera au master ERASMUS européen avec Valence et Toulouse.

7. Liens ModSim

La subdivision ModSim de la DCP (SCF et SFP) a demandé 1 ou 2 personnes du bureau du RFCT pour participer à leur réunion de bureau en tant qu'invités permanents. Sophie a accepté d'y participer.

Peter et Sophie sont les représentants du RFCT pour l'organisation des JTMS 2018.

Le réseau de jeunes de la SCF est très actif et pourrait peut-être nous aider dans nos relations avec les jeunes chimistes théoriciens. On pourrait peut-être leur demander leur aide pour mettre en place l'annuaire des chimistes théoriciens intégrés dans l'industrie (via LinkedIn ?).

Anne doit se renseigner pour savoir qui sont les jeunes de ModSim qui participeraient également au le réseau de jeunes de la SCF.

8. Questions diverses

Sophie propose d'échanger des conférenciers invités et de faire des prix de poster réciproques entre les RCTF et le congrès GGMM (groupe de graphisme et Modélisation moléculaire) qui a lieu les années impaires afin de faire des passerelles entre la chimie quantique et la modélisation des systèmes biologiques. Cette initiative irait dans le sens des rencontres prospectives pour élargir les limites du réseau.