

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



Pr. Serge Antonczak
Institut de Chimie de Nice
UMR-CNS 7272

Théories
Modélisations
Simulations Atomistiques

Equipes niçoise impliquées dans des recherches en Modélisation Moléculaire

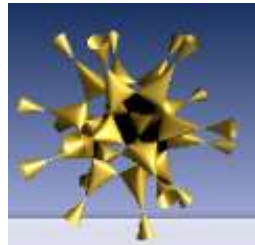
Groupe ChemoSim
Institut de Chimie de Nice

Pr. S. Antonczak



Interfaces des Mathématiques
et Systèmes Complexes
LJAD

Dr. P. Cassam-Chenaï



- Mécanobiologie moléculaire
et intégrative

Dr. D. Douguet

- Dynamique des membranes et
manteaux protéiques

Dr. R. Gautier



Algorithms
Biology Structure
Dr. F. Cazals



Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



ThéMoSia est l'évolution du GdR3333 : Réseau Français de Chimie théorique
(création en 2010)

Public : Chercheurs et Enseignants-Chercheurs en Chimie théorique et informatique
(Chimie quantique, Modélisation Moléculaire...)

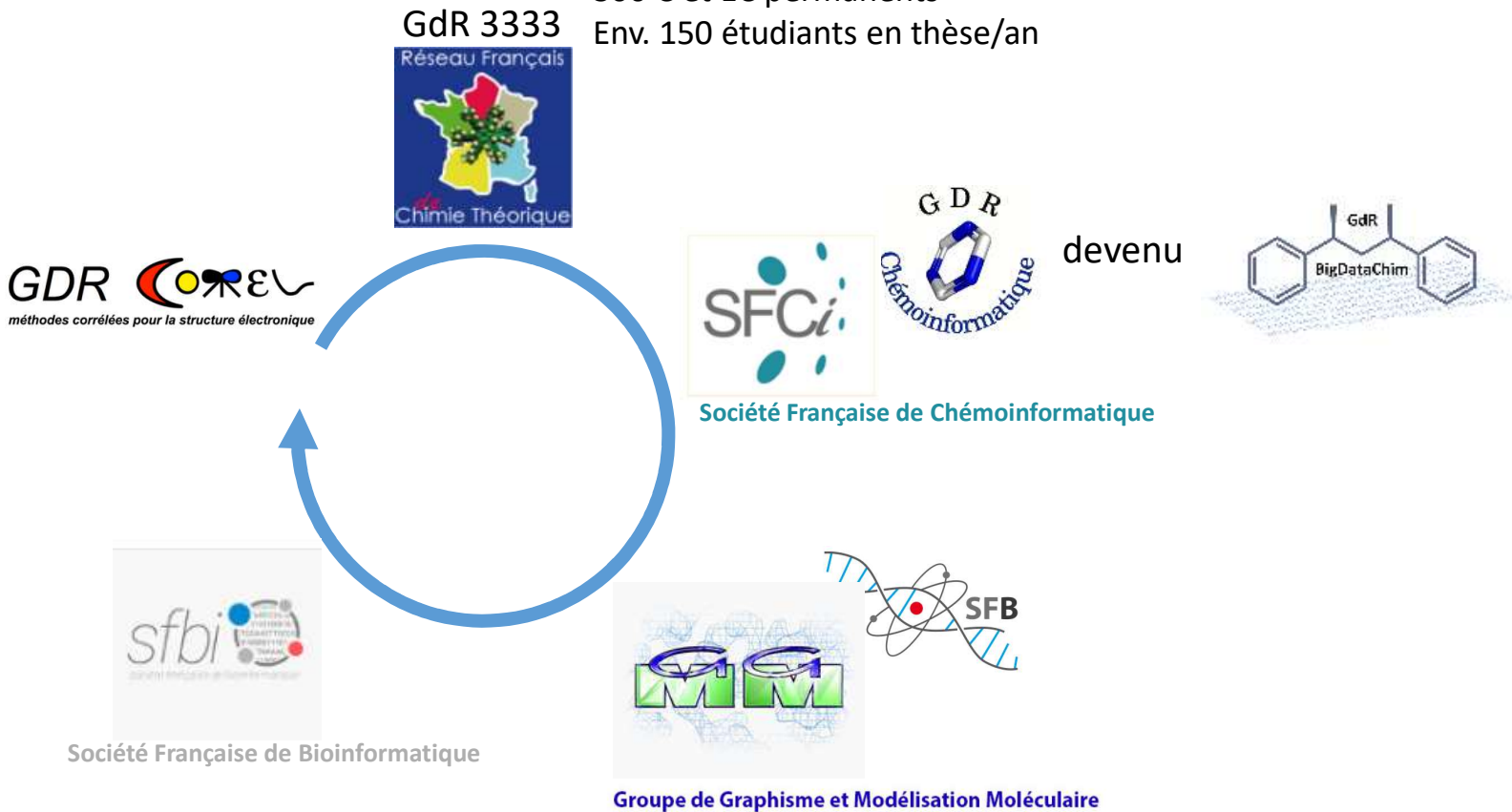
Motivation de la demande : préserver et développer la visibilité, les interactions , la formation de ce réseau
en intégrant activement les acteurs français affiliés à ces thématiques

La demande : soutien de la part des acteurs, des DU et des Universités à ce projet de création de Fédération

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia

Panorama de la recherche en modélisation
et simulation moléculaire
en France

65 laboratoires
300 C et EC permanents
Env. 150 étudiants en thèse/an



Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia

Implication des chercheurs niçois : affiliation aux Sociétés savantes et Groupes et organisation de congrès majeurs :



GdR 3333



Société Française de Chémoinformatique



Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia

Champs thématiques couverts par les acteurs du RFCT :



- | | | |
|--|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • Méthodes de la chimie quantique • Dynamique • Surface - Solide - Nano • Réactivité • Etats excités • Magnétisme - Spin • Etude des systèmes biologiques • Liaison chimique • Thermodynamique - cinétique | <ul style="list-style-type: none"> • Réactivité • Dynamique Réactionnelle • Spectroscopie • Solvatation • Liquides • Relativité • Matière Condensée • Interfaces • Méthodologie en Structure Electronique | <ul style="list-style-type: none"> • Matériaux et Propriétés • Photochimie • Transport • Cinétique • Thermodynamique • ExoChimie • ... |
|--|--|---|

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



Positionnement national
des acteurs du réseau



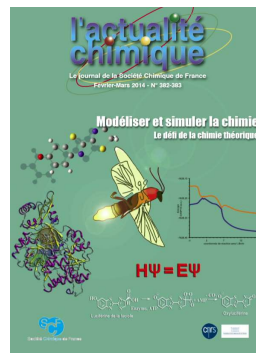
Section 31 : Chimie théorique, physique, analytique
(Section 28 : Milieux denses et matériaux)
(Section 64 : Biochimie, biologie moléculaire)



Section 13 : Chimie physique, théorique et analytique
(sections 4-5-12-14-15-51)



Sous division **Modélisation et simulation**



Numéro spécial 2014

Modéliser et simuler la chimie Le défi de la chimie théorique

7-112

Coordinatrice : Gilberte Chambaud

Couverture : Étude de la bioluminescence des lucioles.
La transformation de la luciférine au sein de l'enzyme conduit à un état singulet excité du composé oxyluciférine. La transition électronique responsable de l'émission lumineuse est déterminée par des calculs hybrides QM/MM prenant en compte l'environnement enzymatique.
Illustrations gracieusement fournies par Isabelle Navizet, Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle, Équipe de Chimie Théorique, Université Paris-Est Marne-la-Vallée.
Conception graphique Mag Design - www.magdesign.info.

Introduction

7

Modéliser et simuler la complexité de la chimie : le défi de la chimie théorique, par **G. Chambaud** et **C. Pouchan** 7
Chimie théorique : les défis d'une filière de formation à faibles effectifs, par **R. Poteau**, **G. Chambaud**
et **S. Antonczak** 8
La chimie théorique, Cendrillon de l'Université française, par **J.-L. Rivail** 9

Développements méthodologiques

13

Relever le défi de la résolution de l'équation de Schrödinger, par **T. Leininger** et **J. Toulouse** 13
Décrire la structure électronique avec des fonctionnelles de la densité, par **C. Adamo**, **E. Rebolini** et **A. Savin** 22
Approches pour le traitement des solides et des surfaces, par **A. Markovits** et **M.-B. Lepetit** 29
La surface d'énergie potentielle vue par les champs de forces, par **I. Demachy** et **J.-P. Piquemal** 37
Les méthodes hybrides : comment modéliser les phénomènes électroniques dans les systèmes complexes de grande taille ?, par **N. Ferré** et **X. Assfeld** 43
La modélisation des vibrations des molécules : enjeux et applications, par **C. Léonard**, **P. Carbonnière**, **V. Boudon**, **T. Gabard** et **D. Talbi** 49
Dynamiques moléculaires quantiques et classiques, par **R. Marquardt**, **J. Hénin**, **F. Dehez** et **C. Chipot** 56
La thermodynamique moléculaire : comprendre les interactions et les propriétés des liquides ioniques, par **A.A.H. Pádua** 63
Une solution pour les liquides : la statistique moléculaire, par **D. Borgis**, **A. Boutin** et **R. Vuilleumier** 71

Domaines d'applications

78

La chimie théorique : une méthode clé pour une chimie durable, par **P. Sautet** 78
Entreprendre une étude théorique d'un mécanisme de réaction : pourquoi ? Quoi ? Comment ?, par **H. Gérard** et **O. Eisenstein** 83
Molécules et lumière : une histoire d'électrons, par **D. Jacquemin** et **C. Daniel** 93
Les matériaux pour l'énergie : quels défis pour la chimie théorique ? Le cas des batteries Li-ion, par **A.-L. Dalvernay** et **M.-L. Doublet** 100
Le pneumatique et la chimie théorique, par **M. Couty** 108
Les simulations numériques : ouvrir une fenêtre sur le monde moléculaire pour mieux comprendre et agir sur les systèmes biologiques, par **P. Derreumaux** et **R. Lavery** 109

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



un bref historique des actions du RFCT :

Coordination nationale/Direction du GDR : Sophie Sacquin-Mora –
IBPC, Laboratoire de Biochimie Théorique, Paris

Direction-adjointe : Rémi Maurice - Subatech, Nantes

Trésorerie : Philippe Carbonnière - Université de Pau et des Pays de
L'Adour

Comité de Pilotage : P. Carbonnière et Karine Costuas - Université de
Rennes 1

Mission relations avec les centres de calcul : Marc Baaden -
IBPC, Laboratoire de Biochimie Théorique, Paris

Mission relations internationales : Mario Barbatti - Université
d'Aix-Marseille

Mission relations avec l'industrie : Céline Houriez - Mines
ParisTech

Mission formation : Frank Jolibois - LPCNO, Toulouse

Mission communication : Éric Brémond - ITODYS, Université de
Paris Aurélie Perrier - ChimieParisTech

Organisation en bureau national et en pôles régionaux

Responsable du pôle Est et Nord-Est : Vincent Robert -
Université de Strasbourg

Responsable du pôle Ouest : Arnaud Fihey - Université de
Rennes 1 & Adèle Laurent - CEISAM, Nantes

Responsable du pôle Sud-Ouest : Christophe Raynaud -
Université de Montpellier & Didier Bégué - Université de Pau et
des Pays de L'Adour

Responsable du pôle Sud-Est : Elise Dumont - ENS Lyon

Responsables du pôle Nord et Ile de France : David
Lauvergnat - Université Paris-Sud Orsay & Peter Reinhardt -
Sorbonne Université

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



un bref historique des actions du RFCT : implication dans la **formation**

Chimie théorique : les défis d'une filière de formation à faibles effectifs, par R. Poteau, G. Chambaud et S. Antonczak

l'actualité chimique

Le journal de la Société Chimique de France
Février-Mars 2014 - N° 382-383

Jusqu'en 2004 :

DEA de Chimie Informatique et Théorique

Ce DEA est à " sceaux multiples " ce qui signifie qu'il est délivré conjointement par plusieurs universités :
Nancy 1, Paris 6, Paris 7, Paris 11, Rennes 1, Strasbourg 1.

A partir de 2007 :

Label de Chimie Théorique

Donner une formation au niveau M2/Doctorat abordant les différents domaines de la chimie théorique.
Formation proposée par les 5 poles régionaux. (2 semaines de cours)

Appui/soutien et participation à :



Master Européen



nano-X



...

De nombreuses écoles thématiques

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



un bref historique des actions du RFCT : implication dans le soutien à la recherche

Organisation de Rencontres/Conférences :



Tous les 2 ans, internationale.



Tous les ans, nationale.

- Prix Gaston Berthier de la meilleure thèse en Chimie théorique (décerné tous les 2 ans)
- Subventions pour visites de laboratoires appartenant au réseau (développement de l'aspect collaboratif, au fil de l'eau)
- ...

Subventions aux manifestations suivantes :

2019

- "VASP & ICAMM 2019"
- 19th deMon developers workshop
- Quantum BioInorganic Chemistry Conference – V (QBIC-V)
- Les Toulousaines du Calcul Atomique et Moléculaire
- Fifty Years of Quantum Chemistry in Strasbourg
- 9e journées de la Société Française de Chémoinformatique

2018

- 21eme congrès du GGMM
- École thématique DynaMoPPI
- Journées Pérovskites Halogénées 2018
- ValBO 2018 : Understanding Chemistry and Biochemistry with Conceptual Models
- Détection, excitation et réactivité des anions interstellaires
- ...

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



un bref historique des actions du RFCT : implication dans le soutien à la recherche

Organisation de Rencontres/Conférences :



Tous les 2 ans, internationale.



Tous les ans, nationale.

-
- Prix Gaston Berthier de la meilleure thèse en Chimie théorique (décerné tous les 2 ans)
 - Subventions pour visites de laboratoires appartenant au réseau (développement de l'aspect collaboratif, au fil de l'eau)
 - ...

Création/gestion/animation d'un IRN avec la Chine :

International Research Network (ex GdRi) : IRN 0808



Réunion annuelle avec alternance France/Chine.

Sur le modèle des initiatives Campus France (partenariats Hubert Curien), subventions aux collaborations selon :

- Zhongzi (la graine) : collaboration potentielle.
- Zhiwu (la plante) : collaboration à soutenir.
- Guoshu (l'arbre fruitier) : collaboration établie.

(évaluée au fil de l'eau)

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



ThéMoSia est l'évolution du GdR3333 (Réseau Français de Chimie théorique) : fin en 2021

- **Pourquoi relancer une action ?**
 - éviter l'isolement des C et EC.
 - maintenir une formation accessible à tous (formation initiale et continue)
 - pérenniser les actions sous-tendant la cohésion et l'animation de la communauté
 - développer de nouvelles coopérations dans de nouveaux champs de recherche

- **Pourquoi une fédération ?**
 - 3^{ème} reconnaissance de suite de la pertinence du GdR RCTF
 - demande de la part de l'INC de faire évoluer le cadre (trop contraint pour le projet)
 - volonté d'une ouverture multi-disciplinaire renforcée
 - volonté de la part de ses acteurs/membres (vote électronique courant 2018-19)

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



ThéMoSia est l'évolution du GdR3333 (Réseau Français de Chimie théorique) : fin en 2021

- Quel(s) Projet(s) ?

- créer les passerelles qui permettront un partage de connaissances entre communautés
- initier des interfaces entre méthodes voire l'émergence de nouveaux concepts
- projet fondateur et fédérateur autour de la modélisation multi-échelle

- Quels Moyens ?

- organisation autour de 3 axes majeurs
 - Axe recherche
 - Axe logithèque
 - Axe formation
- création de rencontres prospectives « ouvertes »
- maintien et renforcement des acquis (label, subventions...)
- renforcement de la communication auprès de toutes les communautés

**Rencontres Prospectives 2019 :
"Modélisations multi-échelle",
à Nantes du 11 au 13 juin 2019**



1. Chimie et physique du solide
2. Chimie et physique moléculaires
3. Biochimie, biophysique et biologie structurale
4. Dynamique moléculaire
5. Exploitation industrielle, énergie
6. Développement méthodologique
7. Interfaces, transport et modélisations mésoscopiques

Présentation de la Fédération de Recherche ThéMoSia



ThéMoSia est l'évolution du GdR3333 (Réseau Français de Chimie théorique) : fin en 2021

L'objectif :

Rester une communauté active, soudée, de haute qualité dans la compétition internationale et incontournable au niveau national dans le cadre de collaborations transdisciplinaires.