

Note descriptive :

XIII^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones Marseille, 1-5 juillet 2012

<http://rctf2012.wordpress.com/>

Ce colloque regroupera plus de 150 participants représentatifs des équipes de chimie théorique françaises, suisses, algériennes, belges, ... et venus échanger sur les derniers développements méthodologiques et applicatifs d'une science pluridisciplinaire en plein essor.

Droits d'inscription

Les frais d'inscription, comptant pour environ 50 % des recettes du colloque, s'élèvent à :

- 150 € pour des étudiants, doctorants et post-doctorants,
- 300 € pour les personnels chercheurs et enseignants-chercheurs ou autres.

L'inscription donne droit :

- aux actes du congrès
- à la participation aux ateliers du dimanche après-midi
- aux sorties prévues durant l'après-midi social
- aux pauses café
- aux déjeuners du lundi 2 au jeudi 5 juillet inclus
- à l'apéro-poster
- au repas de gala
- à une carte de métro pour effectuer jusqu'à 10 trajets sur le réseau bus/métro de la ville de Marseille.

Pour des raisons administratives liées à la nouvelle organisation financière de l'université d'Aix-Marseille, nous n'acceptons que les moyens de paiement suivants :

- chèque à l'ordre de l'Agent Comptable de l'Université d'Aix-Marseille,
- virement bancaire correctement référencé.

L'encaissement de ces paiements, et en particulier les chèques, ont amené l'Agence Comptable à demander au comité d'organisation de faire valider les droits d'inscription par le Conseil d'Administration de l'université d'Aix-Marseille.

Établissements et laboratoires organisateurs

- Université d'Aix-Marseille
 - Institut de Chimie Radicalaire
 - Institut des Sciences Moléculaires de Marseille
 - École Centrale Marseille
 - Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille
 - Madirel
 - Fédération des Sciences Chimiques de Marseille
- Université de Nice-Sophia Antipolis
 - Laboratoire de Chimie des Molécules Bioactives et des Arômes

Éléments descriptifs

Ce *congrès bisannuel* a pour but de promouvoir et de renforcer les échanges scientifiques au sein d'une communauté qui a pour objectif principal de toujours mettre en œuvre une vision pluridisciplinaire de la recherche scientifique. La *chimie théorique* se situe idéalement aux interfaces entre chimie, physique, biologie et fait appel à des compétences en mathématiques et informatique. Par essence, les développements sur la base de nouvelles approches théoriques ainsi que leurs champs d'applications sont associés à une transversalité thématique permettant d'aborder des objets chimiques aussi différents qu'une molécule isolée au sein d'un nuage interstellaire, qu'un solide dont les défauts sont essentiels à son rôle catalytique, ou encore qu'une protéine en interaction avec l'ADN. Se nourrissant des derniers développements méthodologiques mais aussi des récentes avancées expérimentales, la chimie théorique et la modélisation moléculaire qui en découle, sont aujourd'hui incontournables dans le cadre d'une recherche intégrée.

Au sein de la région Provence-Alpes-Côte-d'Azur, la chimie théorique se concentre autour de deux pôles universitaires, Aix-Marseille Université et l'Université de Nice-Sophia Antipolis. La reconnaissance de leurs importances s'est récemment traduite par de nombreux recrutements, participations à des initiatives de recherche (projets ANR, collaborations internationales) ou organisations de congrès. *L'organisation de la prochaine Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF)* est un gage supplémentaire de l'appréciation positive que peut porter notre communauté sur la chimie théorique en PACA. Parmi les champs de recherche menées par nos différentes équipes, on peut citer :

- la modélisation des interactions plasma-paroi d'un tokamak (projet ITER)
- la compréhension à l'échelle moléculaire des mécanismes de l'olfaction (soutenu par le pôle de compétitivité PASS = Arômes-Senteurs-Saveurs)
- la détermination des procédés de dégradation de polymères, essentielle pour un meilleur développement durable

La chimie théorique et la modélisation moléculaire sont des domaines de recherche particulièrement *actifs au sein de l'université d'Aix-Marseille*, pour preuve de nombreuses unités de recherche intègrent une équipe de chimie théorique. De cette façon, l'activité en chimie théorique est tout à fait représentative de l'ensemble des thèmes forts de la chimie marseillaise : systèmes radicalaires, énergies, synthèse organique, chiralité, etc... Ces quelques exemples démontrent l'implication sociétale d'une recherche qu'on a parfois tendance à cantonner à un rôle uniquement fondamental, ce dernier aspect faisant au demeurant partie intégrante de nos activités (traitement de la corrélation, échantillonnages statistiques, ...)

Le partage des derniers progrès (méthodologiques, numériques, applicatifs) entre chercheurs confirmés, étudiants et doctorants, mais également chercheurs post-doctorants, constitue une opportunité unique de pérenniser l'activité en chimie théorique. A travers d'initiatives fédératrices telles que le réseau français de chimie théorique ou le label de chimie théorique (<http://www.chimie-theorique.cnrs.fr>), la communauté française des chimistes théoriciens s'est dotée de moyens originaux dans le paysage de la recherche française. *La volonté d'ouverture à l'international* s'est traduite par des actions telles que les RCTF dont les intervenants et le public visé sont issus en partie d'autres pays francophones (Bénélux, Suisse, pays Africains, Canada). De façon similaire à d'autres communautés (par exemple germanophone), les dernières rencontres se sont ouvertes à des orateurs non-francophones, augmentant ainsi la portée internationale de cet événement et la visibilité de la communauté francophone.

Au delà des activités classiques de tout congrès (exposés oraux et par poster), la présente édition des RCTF mettra l'accent sur différents thèmes généraux ayant un fort impact sur l'activité de la communauté :

- les conditions pour l'amélioration de l'enseignement en chimie théorique
- la mise en place de gros équipements (via des financements sur projets ou sur la base des récents « Investissements d'avenir ») et le changement d'échelle qui peut lui être associé
- le renforcement des liens entre théoriciens et applicatifs (diffusion de logiciels vers le milieu

- industriel, formation de non-spécialistes)
- agrandissement de la communauté

Ouverture aux jeunes :

Traditionnellement, les RCTF donnent la parole aux doctorants en dernière année et aux post-doctorants à travers de nombreuses communications orales. De plus, le comité d'organisation a manifesté la volonté de *proposer aux jeunes* la possibilité de *s'initier* à des logiciels usuels de modélisation moléculaire lors de la première demi-journée de ce congrès. Les sociétés Cosmologic et Fujitsu sont animeront ces ateliers.

Programme scientifique :

dimanche 1er juillet 2012	
13h30-14h00	Accueil des participants aux ateliers
14h00-18h00	Ateliers Cosmologic & Fujitsu
18h00-19h00	Accueil des participants à la réunion
lundi 2 juillet 2012	
8h00-12h30	Accueil des participants 1ère session : Spectroscopies et vibration conférencier invité : Dr Thierry Buffeteau (Université de Bordeaux)
14h00-18h00	2ème session : Structure électronique – états excités conférencier invité : Pr. Denis Jacquemin (Université de Nantes)
18h00-19h00	Table ronde
19h00-21h00	Apéro-poster
mardi 3 juillet 2012	
9h00-12h30	3ème session : Théorie de la Fonctionnelle de la Densité conférencier invité : Pr. Clémence Corminboeuf (EPFL, Suisse)
14h00-18h00	4ème session : Interface solide et matériaux conférencier invité : Dr. Marie-Laure Bocquet (ENS Lyon)
18h00-19h00	Assemblée Générale RFTC
mercredi 4 juillet 2012	
9h00-12h30	5ème session : Réactivité conférencier invité : Pr. Inaki Tunon (Université de Valencia, Espagne)
14h00-18h00	Après-midi social (visite des calanques...)
20h00	Dîner officiel
jeudi 5 juillet 2012	
9h00-12h00	6ème session : Systèmes organisés complexes d'intérêt biologique conférencier invité : Pr. Philippe Derreumaux (université Paris VII)
12h00-12h30	Clôture XIII RFCT