

Chimie théorique : les défis d'une filière de formation à faibles effectifs

Romuald Poteau, Gilberte Chambaud et Serge Antonczak

A lors que le prix Nobel de chimie 2013 vient de récompenser trois éminents chimistes théoriciens, dont Martin Karplus de l'Université de Strasbourg, ce champ disciplinaire, la chimie théorique, vit un paradoxe. Comme l'illustrent plusieurs articles de ce numéro spécial, elle reste un point central dans le développement de nouvelles connaissances fondamentales et apporte un éclairage précieux sur de nombreux travaux expérimentaux ; elle délivre représentation et interprétation des phénomènes à l'échelle moléculaire ; elle s'adapte à la puissance des outils numériques actuels ; des développements méthodologiques permanents permettent de repousser les limites de son applicabilité, aussi bien en termes de dimension des systèmes étudiés que de leur complexité physico-chimique. Il n'est pratiquement pas de structure de recherche, académique ou industrielle, qui n'ait en son sein une équipe de modélisation-simulation. Les besoins en experts qualifiés en la matière ne cessent de progresser, compte tenu du nombre croissant de sujets de recherche requérant d'une part de savoir utiliser avec recul et esprit critique les nombreux logiciels conviviaux et robustes disponibles, et d'autre part de savoir construire des modèles théoriques capturant l'essence de la complexité expérimentale.

Or, même si dans les premières années de formation universitaire, la compréhension de la structure atomique et moléculaire est centrale, la chimie théorique est de moins en moins présente dans les enseignements de niveau master. Pourtant, sa composante chimie computationnelle, accompagnée de logiciels graphiques toujours plus performants, permet de mettre en place dès la licence des outils pédagogiques innovants pour l'enseignement de la chimie [1]. La prise en main de tels outils facilite l'appropriation par les étudiants de concepts abstraits, voire ardues, et elle abaisse leur seuil d'inquiétude vis-à-vis de ces concepts. Ceci leur permet d'être mieux disposés dans les années suivantes à devenir des utilisateurs avertis de ces outils numériques, à en approfondir les méthodes et modèles sous-jacents, et à parcourir ce champ disciplinaire si fécond. Malheureusement, dans la plupart des universités, seuls des enseignements théoriques d'intérêt général subsistent en master : symétrie et spectroscopie, modélisation moléculaire, chimie organique et inorganique physique... Les modules plus spécialisés, par nature à faibles effectifs, disparaissent de la majorité des établissements d'enseignement supérieur en raison de critères budgétaires.

Une initiative de réalisation d'un enseignement mutualisé de chimie théorique a été lancée en 2006 via le Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT), pour pallier la disparition des DEA multi-sites [2]. Cinq Pôles régionaux ont ainsi été créés – Nord et Île-de-France (Lille et Région parisienne), Ouest (Rennes et Nantes), Est et Nord-Est (Strasbourg et Nancy), Sud-Est (Lyon, Grenoble, Nice et Marseille), Sud-Ouest (Bordeaux, Montpellier, Pau et Toulouse) – qui mutualisent des modules d'enseignements de master 2 et délivrent un « label de chimie théorique ». Les modules d'enseignements sont insérés dans les cursus des masters d'établissement qui conservent par ailleurs leurs spécificités. Ces formations concernent environ une trentaine d'étudiants par an, dont près d'une moitié déjà engagée dans la préparation d'une thèse. La menace d'extinction des filières à faible effectif est similaire dans la plupart des autres pays européens, d'où l'existence d'autres initiatives de mutualisation

d'enseignements de chimie théorique menées au niveau européen, qui, outre Groningen et Leuven, concernent essentiellement l'Europe du sud (Espagne et Italie) associée pour la partie française surtout à Toulouse [3].

Malgré ces efforts de mutualisation, les limites de l'exercice semblent atteintes. Dans les années 1980-90, au plus fort de ses effectifs, le DEA national de chimie informatique et théorique ne rassemblait qu'une trentaine d'étudiants sur le territoire ; ces effectifs étaient complétés, presque à égalité, par l'apport de parcours spécifiques dans quelques DEA régionaux de chimie-physique et de physique moléculaire. À l'heure actuelle, même si des doctorants viennent compléter les effectifs de certains modules de master 2, les formations en physico-chimie théorique et modélisation n'auront jamais qu'une audience réduite. On peut redouter que celles qui subsistent s'étiolent pour la plupart avec la génération des masters annoncés par la nouvelle loi. Avec leur disparition, on peut estimer que c'est le renouvellement générationnel de cette communauté scientifique et certaines capacités d'innovation en chimie qui sont menacés. Ce phénomène touche toutes les disciplines indispensables au développement de la science, mais peu recherchées par les étudiants, parce que non directement associées à un problème sociétal. Ces disciplines sont supportées par des communautés scientifiques de très haut niveau mais à effectif relativement réduit et réparties sur tout le territoire. La mutualisation est donc indispensable et elle pourrait bénéficier en partie des nouvelles techniques d'e-formation. Quels que soient les moyens utilisés pour cette mutualisation, elle devra passer par une aide politique à la reconnaissance de formations de master multi-sites.

[1] Chavent M., Baaden M., Hénon E., Antonczak S., Bientôt dans votre amphithéâtre, la chimie fera son cinéma !, *L'Act. Chim.*, **2012**, 363, p. 42.

[2] www.chimie-theorique.cnrs.fr

[3] www.emtccm.org/tccm-em/



R. Poteau



S. Antonczak



G. Chambaud

Romuald Poteau

est professeur à l'Université Paul Sabatier¹.

Serge Antonczak

est professeur à l'Université de Nice-Sophia Antipolis².

Gilberte Chambaud

est professeur au Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle, Université Paris-Est Marne-la-Vallée³.

¹ Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (LPCNO), Université de Toulouse - Institut National des Sciences Appliquées, 135 avenue de Rangueil, F-31077 Toulouse Cedex 4.
Courriel : romuald.poteau@univ-tlse.fr

² Institut de Chimie de Nice, Équipe « Modélisation et reconnaissance moléculaire », UMR CNRS 7272, Faculté des Sciences, Université de Nice-Sophia Antipolis, F-06108 Nice Cedex 2.
Courriel : Serge.Antonczak@unice.fr

³ Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Échelle, Équipe de Chimie Théorique, 5 boulevard Descartes, F-77454 Marne-la-Vallée Cedex 2.
Courriel : gilberte.chambaud@u-pem.fr