

Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 09.02.2011.

Il giorno 9 febbraio 2011, presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali dell'Università Milano Bicocca, alle ore 12 si riunisce il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (CTC) della Società Chimica Italiana, regolarmente convocato dal Presidente, Prof. Gianfranco Pacchioni.

Sono presenti i consiglieri eletti: il Prof. Orlando Crescenzi, il Prof. Dario Duca, la Dott. Luciana Marinelli, il Prof. Antonino Polimeno, il Dott. Fabrizio Santoro e il Prof. Mauro Stener. Sono stati invitati a partecipare alla riunione dal Presidente anche il Prof. Maurizio Casarin che non e' presente per motivi di salute e il Prof. Antonio Laganà.

L'ordine del giorno risulta il seguente:

- 1) Nomina del vice-presidente
- 2) Nomina del Segretario - Tesoriere
- 3) Indicazione dei membri cooptati del Consiglio Direttivo
- 4) Sito web della divisione
- 5) Istituzione di Premi per giovani ricercatori
- 6) Azioni volte a raccogliere un numero crescente di adesioni
- 7) Organizzazione di meeting/congressi
- 8) Rapporti con altre divisioni
- 9) Varie ed eventuali

Si passa quindi a trattare i punti all'ordine del giorno.

1) Nomina del vice-presidente

Il Presidente propone, anche per un equilibrio tra i settori chimica inorganica e chimica fisica, il Prof. Polimeno come vice-presidente. Il Prof. Polimeno si rende disponibile e il CD approva all'unanimità.

2) Nomina del Segretario - Tesoriere

Il Prof. Stener si rende disponibile a fungere da Segretario - Tesoriere, il CD approva all'unanimità. Il Presidente informa il CD che al momento non sono previsti fondi nella cassa della Divisione.

3) Indicazione dei membri cooptati del Consiglio Direttivo

In base al Regolamento della Divisione, il CD puo' cooptare fino a due membri. Il Presidente propone il Prof. Maurizio Casarin, in quanto e' stato l'ultimo Presidente del Gruppo Interdivisionale di Chimica Computazionale (GICC) la cui evoluzione si e' tradotta nella nascita della Divisione di CTC. Il CD approva all'unanimità. Per quanto riguarda il secondo membro da cooptare, il CD dopo ampia discussione, ritiene opportuno esplorare la possibilità di cooptare un collega proveniente dall'area di Chimica Organica, in quanto non rappresentata in seno al CD. Pertanto si ritiene di non individuare subito il secondo membro cooptato e di incaricare il Presidente di effettuare le opportune esplorazioni come discusso.

4) Sito web della divisione

Il Presidente propone che il Segretario - Tesoriere provveda ad allestire il sito web della Divisione e comunica di avere già richiesto al CASPUR (Dott. Morelli) i codici di accesso per entrare nel sito della SCI. Dopo ampia discussione si stabilisce di allestire il sito web della divisione all'interno del sito della SCI. In prima istanza si decide di trasferire i contenuti del vecchio sito web del GICC nel sito della nuova divisione, che saranno trasmessi dal Prof. Polimeno al Prof. Stener. Durante la discussione emerge anche l'interesse per creare all'interno del sito della Divisione un'area dedicata ai codici di calcolo opensource sviluppati dai vari gruppi, per condividerne sorgenti,

documentazione, recensioni. In particolare si propone anche la creazione di database di software e materiale didattico. Alcuni consiglieri reputano poco opportuno prevedere un database all'interno del sito web della SCI, pertanto si dovrà considerare anche l'eventualità di collocare il database altrove con un link dal sito web della divisione.

5) Istituzione di Premi per giovani ricercatori

Il Presidente manifesta la forte convinzione che i nostri giovani ricercatori siano molto svantaggiati, in confronto con i colleghi all'estero, per la mancanza di premi che valorizzino il loro lavoro. Pertanto propone l'istituzione di un premio per ricercatori under 40, da attribuire al Congresso SCI previsto a Lecce nel settembre 2011, consistente in una medaglia e ad un invito a tenere un talk. Il Presidente ritiene di fondamentale importanza, affinché il premio acquisti prestigio durevole nel tempo, che venga attribuito a ricercatori che abbiano dato un contributo di alta qualificazione ed originalità nel campo della Chimica Teorica e Computazionale. Il CD approva l'iniziativa, e dopo ampia discussione, ritiene opportuno intitolare il premio a un collega recentemente scomparso di grande statura scientifica nel campo della chimica computazionale. Si suggeriscono i nomi di Salvetti, Del Re e Roetti, ma si ritiene di organizzare un giro di e-mail per sentire eventuali altri nominativi proposti dai colleghi per poi sottoporli ad un sondaggio. Si esprime unanime preoccupazione per reperire le risorse per la costituzione del premio, pertanto si ritiene di contattare possibili sponsor quali IBM e HP.

6) Azioni volte a raccogliere un numero crescente di adesioni.

Si conviene, affinché la Divisione possa svilupparsi adeguatamente, che le varie aree chimiche ne siano opportunamente rappresentate pertanto ci si raccomanda di contattare personalmente i colleghi potenzialmente interessati per invitarli all'adesione. In particolare si fa presente la possibilità di aderire come seconda divisione, il che permette, da regolamento, comunque di partecipare alle assemblee con diritto di voto.

7) Organizzazione di meeting/congressi

A questo proposito viene ricordato l'alto livello dei congressi organizzati dal GICC, auspicando che la tradizione venga continuata e migliorata dalla divisione di CTC. Per il 2011 è già in programma il Congresso generale (di tutte le divisioni) della SCI a Lecce dal 11 al 16 settembre 2011, che sarà preceduto da una riunione organizzativa a Roma il 10 marzo prossimo. Si ritiene che il Presidente vada alla riunione del 10/3 con una proposta della divisione. In base alla bozza di programma, si conviene di chiedere alla SCI uno spazio per la divisione pari a una mezza giornata (4 ore in tutto) da utilizzare per organizzare due talk ad invito da mezz'ora ciascuna e 9 contributi orali da 20 minuti ciascuno. Inoltre si ritiene di chiedere alla SCI che una conferenza plenaria sia tenuta su un argomento computazionale. Inoltre si incarica il Prof. Polimeno di sentire il Prof. Scrimin per individuare eventualmente delle sessioni teoriche/computazionali all'interno delle attività della divisione di chimica organica e la Dott. Marinelli di fare un'esplorazione analoga per la Chimica Farmaceutica.

Oltre al congresso di Lecce, si ritiene opportuno anche esplorare la possibilità di un'iniziativa congiunta con il meeting Winter Modeling 2012.

8) Rapporti con altre divisioni

La partenza della divisione ha causato un 'drenaggio' di soci, soprattutto dalle divisioni di chimica fisica e chimica inorganica. Il CD da mandato al Presidente di contattare i Presidenti di queste due divisioni per esprimere la volontà di collaborare in modo costruttivo e positivo.

9) varie ed eventuali

Il Presidente informa sul congresso TACC previsto a Pavia dal 2 al 7 settembre 2012, a cui si potrebbe essere presenti in qualche forma.

Il Prof. Lagana' ricorda le iniziative europee Euchems (Praga 2012) e la possibilita' di fare proposte in termini di sessioni trasversali e plenarie, nonche' di una presenza di rappresentanza.

Il Presidente ricorda l'importanza del CINECA e del CASPUR per l'allocazione delle risorse di calcolo, ed auspica una interazione, in forme da individuare, tra i centri di calcolo e la divisione.

Il Prof. Polimeno ricorda il congresso INSTM previsto in giugno 2011 a Catania e la possibilita' di suggerire speakers computazionali.

Si conviene, per facilitare l'interazione, di utilizzare, se opportuno, in futuro strumenti informatici per tenere le riunioni del CD in forma telematica.

In vista dell'organizzazione del congresso di Lecce e il conferimento del premio per un giovane ricercatore, si ritiene opportuno riunire il CD nel giugno 2011, probabilmente nella sede di ROMA della SCI.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta e' tolta alle ore 16.

Milano, 9 febbraio 2011

Il Segretario
Prof. Mauro Stener

Il Presidente
Prof. Gianfranco Pacchioni