

Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 01.02.2012.

Il giorno 1 febbraio 2012, presso la sede di Roma della Società Chimica Italiana (SCI), sita in via Liegi 48/c, alle ore 11:00 si riunisce il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (CTC) della SCI, regolarmente convocato dal presidente, prof. Gianfranco Pacchioni.

Oltre il presidente, sono presenti i consiglieri eletti: prof. Orlando Crescenzi, prof. Dario Duca, prof. Antonino Polimeno, dott. Fabrizio Santoro e prof. Mauro Stener. Il consigliere eletto dott. Luciana Marinelli e il consigliere prof. Maurizio Casarin, assenti all'adunanza, sono giustificati.

L'ordine del giorno è il seguente:

- 1) Comunicazioni
- 2) Programma del Primo Congresso Divisionale (Pisa 22 - 23 febbraio 2012)
 - relazione su iscrizioni e stato finanziario (Santoro, Stener)
 - selezione dei contributi orali
 - programma definitivo del congresso
- 3) Argomenti da portare in discussione alla Assemblea della Divisione
- 4) Procedure e regolamento Medaglia Roetti 2012
- 5) Discussione su istituzione di un premio per giovani ricercatori
- 6) Discussione su linee generali di indirizzo della divisione
- 7) Coordinamento di progetti PRIN e FIRB
- 8) varie ed eventuali

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

1) Comunicazioni

Non essendoci nulla da comunicare, si passa al punto successivo.

2) Programma del Primo Congresso Divisionale (Pisa 22 - 23 febbraio 2012)

Il Dott. Santoro, a nome del comitato organizzatore, relaziona sullo stato delle iscrizioni e dei pagamenti relativi al Primo Congresso Divisionale (Pisa 22 - 23 febbraio 2012).

- Alla scadenza (29 gennaio 2012) risultano iscritte 110 persone, di cui 10 sono gli invited speakers. Il Presidente prende atto di questo ottimo risultato, l'ampia adesione al Congresso da parte della comunità teorico e computazionale rappresenta un segnale incoraggiante per proseguire lungo la strada intrapresa. Per quanto riguarda lo stato finanziario del congresso, questo è riassunto come segue. Le entrate relative ai contributi di iscrizione al congresso ammontano a 8250 Euro, in quanto risultano formalizzati 74 pagamenti. Poiché risultano iscritti 100 paganti e la quota può essere di 100 o 150 Euro, una stima prudente delle entrate è valutata sui 10000 Euro, a cui vanno aggiunti i 1000 Euro del contributo generosamente offerto da E4, arrivando ad un totale minimo per le entrate di 11000 Euro. Le uscite comprendono varie voci, tra cui il noleggio degli spazi e i relativi servizi (circa 2000 Euro) e il catering (2 pranzi e 4 coffee-break) per circa 6000 Euro. A queste voci vanno aggiunte spese varie (locandine, pieghevoli, cancelleria, segreteria) per altri 700 - 800 Euro circa, per un totale massimo di uscite pari a 8000 - 9000 Euro. Quindi si prevede alla fine del congresso di avere un attivo di 2-3000 Euro.

- Selezione dei contributi orali. Oltre all'ampia partecipazione, sono pervenute anche ben 48 richieste per contributi orali: per venire incontro alla grande richiesta il CD stabilisce di ridurre il tempo a disposizione dei talk da 20 a 15 minuti, in questo modo si riuscirà a organizzare una trentina di contributi orali. La selezione dei 30 contributi ammessi come orali viene fatta utilizzando due criteri: il numero di talk concessi alle sedi che hanno proposto un numero elevato di contributi

orali vengono proporzionalmente ridotti, inoltre si darà la precedenza agli oratori che non hanno parlato in occasione del congresso di Lecce di settembre 2011.

- Utilizzando i criteri illustrati nel precedente punto, dopo ampia discussione, viene approvato all'unanimità il programma definitivo del congresso, che viene pubblicato sul sito web del congresso e inviato per e-mail agli iscritti al congresso.

3) Argomenti da portare in discussione alla Assemblea della Divisione

Si stabilisce di convocare l'Assemblea ordinaria in concomitanza con il primo congresso divisionale, il giorno 23 febbraio 2012 alle ore 18:00 presso l'auditorium del CNR di Pisa, con il seguente ordine del giorno:

- Comunicazioni del Presidente
- Bilancio Preventivo 2012
- Relazione sulle attività della Divisione
- varie ed eventuali

Il bilancio preventivo 2012 vedrà come unica voce in entrata il saldo del primo congresso divisionale, che si prevede essere di circa 2-3000 Euro, come illustrato nel punto 1) dell'o.d.g.

4) Procedure e regolamento Medaglia Roetti 2012

Il CD ritiene opportuno rivedere la procedura e il regolamento relativi alla Medaglia Roetti 2012. In particolare si conviene che al premio possano partecipare anche cittadini non italiani e che il vincitore debba avere svolto la sua attività di ricerca prevalentemente in Italia. Il CD conferisce mandato al Presidente di formulare il bando della Medaglia Roetti 2012 secondo le indicazioni così individuate.

5) Discussione su istituzione di un premio per giovani ricercatori

Il Presidente propone l'istituzione di un premio destinato a giovani ricercatori attivi nel campo della chimica teorica e computazionale, il CD accoglie la proposta e segue una discussione per individuare il limite di età da considerare nel bando ed eventualmente gli altri titoli, come ad esempio il Dottorato di Ricerca. Dopo ampia discussione, si conviene di porre come unico limite il non avere compiuto 33 anni di età alla scadenza del bando. La procedura di assegnazione del premio dovrà prevedere una fase di valutazione dei candidati e la responsabilità della scelta finale sarà del CD. Il CD dovrà tenere conto di eventuali conflitti di interesse, in particolare nel caso si presentassero candidati collaboratori di membri del CD. In tal caso il membro del CD in questione è tenuto a non partecipare ai lavori di assegnazione del premio. Il premio consisterà in un riconoscimento formale (targa e diploma), il vincitore terrà una conferenza in occasione del successivo Congresso Divisionale. Il CD per il momento non attribuisce al premio un'intitolazione specifica, ma ritiene di denominarlo semplicemente "Premio Giovani Ricercatori" della Divisione, tuttavia si conviene di portare all'attenzione dell'Assemblea l'opportunità di intitolare il premio ad una figura nel campo della chimica teorica e computazionale italiana e di raccogliere eventuali proposte in merito.

6) Discussione su linee generali di indirizzo della divisione

Il Presidente, prendendo atto della ampia adesione al Primo Congresso Divisionale, ritiene che l'indirizzo attuale della Divisione, improntato sul massimo coinvolgimento delle realtà teorico-computazionali italiane, sia stato premiante e quindi vada perseguito anche in futuro. Il Prof. Polimeno osserva tuttavia che, ad esempio nella scelta degli invited speakers al Congresso Divisionale, alcune tematiche siano state poco valorizzate. Ad esempio si ha l'impressione che spesso si confonde la totalità della chimica teorica con la chimica quantistica, dimenticando altre realtà forse meno numerose ma non per questo meno importanti culturalmente, come ad esempio tutte quelle tematiche che si sviluppano intorno alla termodinamica statistica. Il CD prende atto e il Presidente ribadisce la volontà di includere nelle attività della Divisione tutta la comunità teorico-

computazionale italiana, e che la scelta degli invited speakers sia stata ovviamente condizionata dal numero limitato degli slot disponibili. I successivi congressi saranno sicuramente ulteriori opportunità per allargare le attività divisionali. Il Prof. Polimeno propone anche di organizzare workshop o brevi simposi su argomenti specifici, con lo scopo di ampliare le tematiche della Divisione.

7) Coordinamento di progetti PRIN e FIRB

Coordinamento dei progetti PRIN e FIRB. Il CD rileva alcuni aspetti spiacevoli dei relativi bandi apparsi alla fine del 2011, in particolare viene considerata inopportuna la fase di preselezione locale dei progetti. Pur riconoscendo la non competenza della Divisione in questo ambito, si ritiene che la SCI possa fungere da efficace interfaccia tra la comunità scientifica chimica e il Ministero e quindi possa per i prossimi bandi proporre modifiche migliorative al Ministero.

8) varie ed eventuali

Nulla.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta e' tolta alle ore 16:30.

Roma, 1 febbraio 2012

Il Segretario
Prof. Mauro Stener

Il Presidente
Prof. Gianfranco Pacchioni