

Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 19.06.2012.

Il giorno 19 giugno 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, la Dott. Luciana Marinelli, prof. Antonino Polimeno, dott. Fabrizio Santoro e il prof. Mauro Stener, risultano assenti giustificati il consigliere Prof. Maurizio Casarin, e il consigliere eletto Prof. Dario Duca.

L'ordine del giorno è il seguente:

- 1) Comunicazioni
- 2) Comunicazioni del Tesoriere (bilancio ed iscrizioni)
- 3) Procedure per la selezione del vincitore del Premio Scrocco.
- 4) Procedure per la selezione del vincitore della Medaglia Roetti
- 5) Prossimo Congresso 2013 della Divisione
- 6) Posizione nei confronti dei grandi centri di calcolo
- 7) Varie ed eventuali

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

1) Comunicazioni

Il Presidente non ha comunicazioni specifiche per il CD, ma si compiace che il Primo Congresso Divisionale DCTC 2012 svoltosi a Pisa lo scorso febbraio sia andato molto bene sia in termini di organizzazione che come affluenza (circa 120 partecipanti).

Il Presidente dà la parola al Prof. Polimeno per riferire sulla riunione con il Prof. Ugo Cosentino e il Prof. Antonio Lagana' per il coordinamento di iniziative in ambito *grid* a livello nazionale. Si e' svolto un incontro preliminare telematico in data 24 aprile 2012 e un incontro presso la sede INSTM di Firenze lo scorso 8 giugno, stabilendo una serie di iniziative ed un calendario di massima. Si e' ritenuto opportuno che la DCTC si faccia carico di favorire l'accesso alla *grid* CompChem, ma anche prenda iniziative di sviluppo e accesso su altre iniziative future in campo *grid*. CompChem puo' anche favorire nuove organizzazioni e coinvolgere le persone interessate. Le iniziative e le scadenze proposte consistono in un'indagine coordinata da INSTM e DCTC sulle attivita' computazionali in Italia, tramite un form elettronico in cui verranno posti quesiti su HPC e argomenti affini. L'indagine consistera' in due parti distinte: la raccolta di informazioni e proposte di adesione, una sorta di censimento. Entro settembre dovrebbe essere pronto l'apparato, poi sara' organizzato un incontro verso meta' novembre presso la sede del CNR o del CASPUR a Roma per un'assemblea e la presentazione dei risultati del censimento. Inoltre verso febbraio-marzo 2013 sara' proposta una scuola con esercitazioni in ambito *grid*, possibilmente presso l'Universita' di Milano Bicocca.

2) Comunicazioni del Tesoriere (bilancio ed iscrizioni)

Il Prof. Stener relaziona sullo stato delle iscrizioni alla Divisione.

Da quanto risulta alla Segreteria della Sede Centrale, al momento i soci effettivi iscritti alla DCTC risultano essere 69, quelli aderenti 78. Risultano anche 10 soci inadempienti, cioe' che non hanno ancora versato la quota del 2012. Lo scorso anno gli effettivi erano 34 in primavera e 54 a fine

anno. Quindi considerando anche gli inadempienti in data odierna si arriva in tutto a 157 iscritti, in discreto aumento rispetto l'anno scorso e quindi di buon auspicio per il futuro.

Per quanto riguarda la gestione amministrativa, il prof. Stener informa il CD che e' stato acceso il conto corrente bancario intestato alla Divisione, mentre per quanto riguarda il bilancio, volendo procedere con un assestamento, possiamo stabilire che le entrate definitivamente accertate derivate dal Congresso di Pisa ammontano a 3131,21 Euro, al netto di tutte le spese, mentre invece bisogna considerare che il CC della Sci ha deliberato che le Divisioni dovranno effettuare due versamenti alla Sede Centrale, uno nel 2012 e uno nel 2013. Per la DCTC e' previsto un versamento di 1000 Euro nel 2012 e di 2000 Euro nel 2013. Quindi, considerando anche le voci di spesa di 100 Euro per gestione amministrativa e 400 Euro per la Medaglia Roetti e la targa del Premio Scrocco (gia' approvati nel bilancio preventivo) si prevede un saldo al 31.12.2012 pari a 1631,21 Euro.

Per il 2013 bisognera' considerare il versamento di 2000 Euro.

Segue una discussione, il Presidente propone, per quanto riguarda le iniziative possibili per incrementare il numero dei soci effettivi iscritti alla DCTC, di contattare gli aderenti a CNISM che potrebbero essere interessati.

3) Procedure per la selezione del vincitore del Premio Scrocco.

Il CD stabilisce, in via preliminare, di individuare una rosa di due candidati, all'interno della quale selezionare il vincitore del Premio Scrocco. In questo modo al non vincitore si potra' dare una menzione speciale e l'opportunita' di fare un talk al congresso DCTC 2013. Dopo un'analisi attenta dei CV dei candidati (sono state presentate 5 domande) si conviene all'unanimita' di considerare nella rosa dei due nomi Alfonso Pedone e Claudio Greco. Da un'ulteriore comparazione dei due CV, il CD stabilisce quindi all'unanimita' di conferire il Premio Scrocco al Dott. Alfonso Pedone e una Menzione Speciale al Dott. Claudio Greco insieme ad uno spazio per un talk al prossimo congresso DCTC 2013. Il CD prende comunque atto dell'ottimo livello di tutti i CV presentati dai candidati.

4) Procedure per la selezione del vincitore della Medaglia Roetti

Da un'analisi attenta dei CV dei candidati (sono state presentate 9 domande) si conviene all'unanimita' di conferire la Medaglia Roetti alla Dott.ssa Chiara Cappelli. Il CD prende comunque atto dell'ottimo livello di tutti i CV presentati dai candidati, ma riconosce alla Dott. Cappelli una posizione superiore alle altre candidature sia in termini generali (produttivita' e originalita' della produzione scientifica) sia in termini di indici bibliometrici.

In seguito alla selezione del vincitore, si apre una discussione sulla forma dei bandi dei premi Roetti e Scrocco, in particolare sulla necessita' di caratterizzarli meglio nelle edizioni future. Si stabilisce pertanto che le prossime edizioni del bando dovranno riportare, per la Medaglia Roetti, una frase del tipo: "... ricercatori al di sotto dei 40 anni che abbiano dimostrato autonomia, creativita' ed indipendenza nello ..." mentre per il Premio Scrocco una frase del tipo "... giovani ricercatori attivi nell'ambito dello sviluppo e applicazioni ..."

5) Prossimo Congresso 2013 della Divisione

Il Prof. Pacchioni invita il CD a proporre candidature per la sede del prossimo Congresso DCTC da tenere nel febbraio 2013. Il Prof. Stener propone la sede di Trieste, ma suggerendo di rinviare il congresso a meta' giugno o primi di luglio. Si apre una discussione da cui emerge che il periodo di giugno non viene considerato favorevole per il sovrapporsi di alcuni congressi internazionali, per cui il Presidente ribadisce l'opportunita' di riproporre il Congresso DCTC nelle date dal 20 al 22 febbraio 2013, quindi su due giornate e mezza. Il Prof. Polimeno si impegna ad esplorare la possibilita' di tenere il Congresso a Padova, riserva che conta di sciogliere nei prossimi giorni.

6) Posizione nei confronti dei grandi centri di calcolo

Risulta che il ministero abbia iniziato un processo di accorpamento tra i consorzi interessati al calcolo, cioè CINECA, CILEA e CASPUR. Sembra che il CINECA si focalizzerebbe esclusivamente su macchine e progetti molto grandi sulla macchina BGQ o su macchine basate su GPU.

Si conviene che il contatto tra comunità chimica computazionale e i vari consorzi sia molto importante, inoltre se CINECA si focalizza su progetti grandi, bisognerebbe che CASPUR e CILEA coprissero i servizi lasciati scoperti dal CINECA. Sarebbe utile capire esattamente in cosa consiste l'accorpamento, ma soprattutto far presente le esigenze della chimica computazionale. Alcuni membri del CD si impegnano a sentire i vari consorzi e ad informare successivamente il CD degli esiti delle conversazioni, in particolare CINECA (Zannoni a cura di Pacchioni) CASPUR (Sanna e Morelli a cura di Crescenzi) e CILEA (a cura di Pacchioni).

7) Varie ed eventuali

Si riprende la discussione sull'identità culturale della DCTC. In una recente riunione del CC della SCI un documento del gruppo Senior ha preso atto di scarsa partecipazione alla SCI di alcune componenti importanti della chimica, quali industria e CNR. Se la SCI tenderà sempre più ad occuparsi di argomenti prevalentemente Accademici sarà inevitabile che tali componenti si sentiranno escluse. Quindi sarebbe opportuno superare questo limite. Il congresso ha lo scopo di tenere unita la divisione e la comunità chimico-computazionale. Bisogna aprire la comunità con cautela e attenzione ad elementi e contributi nuovi senza perdere quelli già consolidati. Sarebbe piuttosto opportuno riallacciare i rapporti con alcune sedi molto importanti ma che al momento sono scarsamente rappresentate, o aprire la divisione ad argomenti specifici da considerare per allargare la comunità: tra le altre la chemiometria, il drug design e i sistemi complessi.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 16:00.

Roma, 19 giugno 2012

Il Segretario
Prof. Mauro Stener

Il Presidente
Prof. Gianfranco Pacchioni