

Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 08.11.2012.

Il giorno 8 novembre 2012, a Pisa presso l'aula riunioni del Palazzo d'Ancona (Scuola Normale Superiore), alle ore 14:15 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. Antonino Polimeno, dott. Fabrizio Santoro, il prof. Mauro Stener e il consigliere Prof. Maurizio Casarin, risultano assenti giustificati i consiglieri eletti Prof. Dario Duca e la Dott. Luciana Marinelli.

L'ordine del giorno è il seguente:

1. Comunicazioni
2. Azioni in vista dell'organizzazione del prossimo congresso divisionale
3. Individuazione di invited speakers per il convegno
4. Discussione preliminare su organizzazione Avogadro Colloquia 2013
5. Calcolo ad alte prestazioni CINECA e impatto sulla nostra comunità
6. Varie ed eventuali

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

1) Comunicazioni

Il Presidente informa che il collega Prof. Dario Duca ha dato la sua disponibilità a far parte del consiglio direttivo del gruppo interdivisionale di chimica per energia.

E' stato costituito un nuovo nodo CECAM in Italia, presso l'Università la Sapienza a Roma.

2) Azioni in vista dell'organizzazione del prossimo congresso divisionale

Si apre un'ampia discussione sull'organizzazione del prossimo congresso divisionale DCTC2013 che si terrà a Padova dal 20 al 22 febbraio 2013. Il Prof. Polimeno informa che il sito web del congresso è quasi pronto e che sarà disponibile entro pochi giorni, le registrazioni saranno effettuate esclusivamente on-line sul sito del congresso. Per quanto riguarda il programma, si conviene di iniziare il giorno 20 alle 14 e di terminare il giorno 22 pomeriggio. Durante il congresso sarà convocata l'assemblea di divisione il giorno 21 alle 18, mentre il giorno 22 pomeriggio sarà dedicato alle conferenze su invito riservate ai vincitori della medaglia Roetti e del premio Scrocco. Per quanto riguarda i pagamenti delle quote di iscrizione al congresso si mantengono le quote del congresso precedente: 100 Euro per soci SCI e non-strutturati e 150 Euro per non soci SCI strutturati. Essendo attivo il conto corrente della divisione, i pagamenti dovranno essere effettuati esclusivamente tramite bonifico bancario, pertanto si provvederà a indicare nel sito le coordinate bancarie. Una bozza del programma sarà comunque presente nel sito appena possibile. Gli organizzatori comunicano che saranno allestiti pannelli per l'esposizione dei poster, ci sarà spazio in tutto per 64 poster. In occasione del congresso sarà premiato il miglior poster.

3) Individuazione di invited speakers per il convegno.

Il CD, dopo ampia discussione, individua gli invited speakers per DCTC2013, in modo da coprire le varie tematiche culturali di interesse della divisione, anche tenendo conto degli argomenti che non sono stati trattati adeguatamente nell'edizione precedente.

La lista degli invited speakers, in ordine alfabetico, risulta la seguente:

- Vincenzo Barone (ERC Advanced Grant)
- Anna Bernardi, Dip. di Chimica Organica ed Industriale, Univ. Milano
- Chiara Cappelli (Medaglia Roetti), Scuola Normale Superiore, Pisa
- Sonia Coriani, Dip. Scienze Chimiche, Univ. Trieste
- Alessandro Fortunelli, CNR Pisa
- Benedetta Mennucci, Dip. di Chimica e Chimica Industriale, Univ. Pisa
- Alfonso Pedone (Targa Scrocco), Dip. di Scienze Chimiche e Geologiche, Univ. Modena e Reggio Emilia
- Maurizio Recanatini Dip. di Farmacia e Biotecnologie, Univ. Bologna
- Prof. Nino Russo, Dip. di Chimica, Univ. della Calabria (Cosenza)
- Gianfranco Tantardini, Dip. di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Univ. Milano
- Francesco Tarantelli, Dip. di Chimica, Univ. Perugia
- Andrea Vittadini, CNR Padova

4) Discussione preliminare su organizzazione Avogadro Colloquia 2013

Il Presidente informa che il CD sarà coinvolto nell'organizzazione degli Avogadro Colloquia 2013, con modalità ancora da definire, quindi si rinvia il punto all'ordine del giorno ad una successiva riunione del CD.

5) Calcolo ad alte prestazioni CINECA e impatto sulla nostra comunità

Il Presidente informa il CD sul fatto che si è compiuto l'accorpamento del CASPUR e del CILEA con il CINECA. Il CD prende atto ed esprime preoccupazione, in quanto la politica del CINECA nei confronti del calcolo scientifico, focalizzata su macchine tipo BGQ e GPU, non sembra tener conto delle esigenze della comunità della chimica teorica e computazionale.

6) Varie ed eventuali

Nulla.

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

Pisa, 08 novembre 2012

Il Segretario
Prof. Mauro Stener

Il Presidente
Prof. Gianfranco Pacchioni