

Verbale dell'Assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 15.12.2015.

Il giorno martedì 15 dicembre 2015, alle ore 17:00, presso l'aula convegni della sede centrale del CNR in Piazzale Aldo Moro in Roma, in concomitanza con il III Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, ha inizio l'assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC), regolarmente convocata dal Presidente Prof. Benedetta Mennucci. L'ordine del giorno risulta essere il seguente:

- 1) Comunicazioni del Presidente
- 2) Relazione sulle attività della divisione
- 3) Bilancio consuntivo 2014 e preventivo 2015
- 4) Vincitori edizione 2015 Medaglia Roetti e premio Scrocco
- 5) Intervento del Prof. A. Laganà, chair della Divisione di Chimica Computazionale di Euchems, su azioni europee di interesse per la comunità italiana dei chimici computazionali e nomina del secondo rappresentante della divisione di chimica teorica e computazionale nel consiglio della divisione europea
- 6) Organizzazione del congresso divisionale DCTC 2016
- 7) varie ed eventuali

1) Comunicazioni del Presidente

Nulla.

2) Relazione sulle attività della Divisione

Il Presidente comunica che a decorrere dalla data del 24 novembre 2015 risultano iscritti alla DCTC 91 soci effettivi, di cui 20 prime iscrizioni e 76 soci aderenti. Su 91 soci effettivi il 50% ha meno di 40 anni, inoltre risultano 22 soci junior e 7 iscrizioni di italiani all'estero. Il Presidente sottolinea l'importanza di avere una rappresentanza di soci esteri. Il Presidente suggerisce di mettere sul sito della DCTC una lista dei gruppi attivi nel campo della chimica teorica e computazionale guidati da italiani all'estero. La distribuzione geografica dei soci risulta molto disomogenea: si osserva una grandissima concentrazione in Toscana ed a Pisa in particolare. Le attività principali della divisione risultano essere il congresso divisionale annuale e i premi Roetti e Scrocco. Il Presidente illustra all'Assemblea la proposta del Consiglio Direttivo (assunta a maggioranza) di permettere la partecipazione ai premi anche ai candidati non iscritti alla SCI e auspicando maggiori aperture a candidature provenienti dall'estero, in modo da risolvere il problema del calo nel numero di candidature osservato nelle ultime edizioni dei premi, soprattutto per la medaglia Roetti. Seguono numerosi interventi (Pastore, Guidoni, Russo, Menziani, Pedone e Santoro) e una vivace discussione. Intervengono in particolare Mariachiara Pastore (vincitrice del premio Roetti edizione 2014) che auspica una parziale ma non completa apertura all'estero, in particolare agli italiani che trascorrono periodi di perfezionamento mentre invece non crede che l'iscrizione alla SCI rappresenti un vero problema e quindi propone di mantenerla come requisito. Leonardo Guidoni suggerisce un'apertura graduale, togliendo il requisito di appartenenza alla SCI però evitando eccessive aperture a candidature dall'estero. Nino Russo ribadisce l'importanza dell'appartenenza alla SCI ma suggerisce di trasformare i vincoli anagrafici in limiti temporali dal conseguimento del PhD, in modo da uniformarsi ai criteri europei dei bandi ERC. Cristina Menziani osserva una contraddizione tra il basso numero di candidature e la presenza di tanti soci al di sotto dei 40 anni di età, quindi suggerisce di migliorare la comunicazione. Alfonso Pedone ribadisce la sua ferma posizione, sempre tenuta in seno al Consiglio Direttivo, di mantenere il vincolo non solo dell'appartenenza alla SCI ma anche di essere soci effettivi della DCTC.

Considerate le posizioni emerse dalla discussione, il Presidente stabilisce di sottoporre all'Assemblea due diverse proposte da votare in contrapposizione. La proposta A consiste nell'inserire nel bando dei premi il vincolo di essere socio SCI quale requisito di partecipazione e di dare indicazione alla commissione di considerare che l'attività di ricerca del candidato debba essersi

svolta prevalentemente in Italia. La proposta B consiste nel NON richiedere l'appartenenza alla SCI come requisito di partecipazione e dare indicazione alla commissione di considerare che l'attività di ricerca del candidato debba essersi svolta prevalentemente in Italia. La proposta A ottiene 24 voti, la proposta B ottiene 3 voti, risultano 2 astenuti, quindi risulta approvata a maggioranza la proposta A. L'Assemblea dà quindi mandato al consiglio direttivo di stilare i bandi dell'edizione 2016 dei premi Roetti e Scrocco secondo i regolamenti vigenti della SCI e recependo l'esito della votazione dell'Assemblea.

Il Prof. Stener informa l'Assemblea che il Consiglio Direttivo della DCTC ha ravvisato opportuno estendere le attività della DCTC anche con delle iniziative di carattere prettamente scientifico-culturali. Il primo evento di questo genere, promosso congiuntamente dalla DCTC e dalla Scuola Normale Superiore di Pisa, consiste in una giornata tematica sulle proprietà ottiche e plasmoniche di cluster metallici, che si terrà nella Sala Azzurra della SNS il giorno 1 aprile 2016. L'evento è ancora in corso di definizione e appena possibile sarà pubblicizzato tramite mailing-list e sito web. In ogni caso la partecipazione sarà gratuita e la DCTC contribuirà alle spese per il pranzo o il coffee break. Il Prof. Stener invita anche gli altri membri del direttivo ma anche i singoli soci a promuovere iniziative analoghe.

3) Bilancio Consuntivo 2014 e Bilancio Preventivo 2015

Il Presidente passa la parola al Prof. Stener, Tesoriere della Divisione, per illustrare il bilancio consuntivo 2014. Preliminarmente il Prof. Stener comunica che la SCI ha deciso di trasferire tutti i conti correnti (quindi anche quello della DCTC) dalla Deutsche Bank alla Banca Prossima. Al momento le pratiche di trasferimento si sono concluse e il nuovo conto corrente è già operativo. Il Tesoriere illustra brevemente il bilancio consuntivo 2014, che si è chiuso con un saldo cassa pari a 3141.15 Euro. Nel 2014 non ci sono state entrate (solamente un residuo di 500 Euro relativo al congresso DCTC2013) mentre le uscite sono state pari a 1755.26 Euro, di cui 1000 per le borse di partecipazione al congresso SCI2014 di Rende, 305.73 euro di spese bancarie (molto elevate a causa dell'estinzione del conto corrente presso la DB) e 164.70 euro per la medaglia Roetti. Il bilancio consuntivo 2014 era già stato visionato ed approvato all'unanimità nel consiglio direttivo del 08.05.2015. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Consuntivo 2014 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità.

Il Presidente passa nuovamente la parola al Prof. Stener, Tesoriere della divisione, per illustrare il bilancio preventivo 2015. Per quanto riguarda il bilancio preventivo 2015, risultano due voci in entrata: 1888.90 Euro derivanti da una distribuzione degli utili del congresso SCI2014 di Rende promossa dal Presidente Riccio e 5500 Euro di utili previsti dal congresso divisionale DCTC2015. La stima di 5500 euro di utili dal congresso DCTC2015 deriva da 10000 euro di entrate tra iscrizioni e sponsor (HP ha gentilmente sponsorizzato per 3000\$), 4500 euro di spese (1650 euro coffee break, 750 euro pranzo del 15.12.2015, 1450 euro vigilanza e 650 euro di cancelleria).

Per le uscite si prevedono i consueti 200 euro di gestione c/c e 230 Euro per la medaglia Roetti e la targa Scrocco. Quindi si prevede un saldo cassa al 31.12.2015 pari a 10099.92 Euro. Il bilancio preventivo 2015 era già stato visionato ed approvato all'unanimità nel consiglio direttivo del 08.05.2015. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Preventivo 2015 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità e prende atto con piacere dell'iniziativa del Presidente della SCI di trasferire una parte degli utili del congresso SCI2014 di Rende alle divisioni.

4) Vincitori edizione 2015 Medaglia Roetti e premio Scrocco

Il Presidente annuncia i vincitori del "Premio Carla Roetti" 2015 per ricercatori al di sotto dei quarant'anni che si siano distinti per creatività, capacità di innovazione, autonomia e indipendenza nello sviluppo e nell'applicazione di metodologie in chimica teorica e computazionale, nonché del "Premio Eolo Scrocco" 2015 per giovani ricercatori al di sotto dei trentatré anni attivi nello sviluppo e nell'applicazione di metodologie in chimica teorica e computazionale. Per l'edizione 2015, sono giunte 4 domande per il premio Roetti e 5 domande per il premio Scrocco. L'assegnazione è stata fatta interpellando una commissione di italiani all'estero, esperti in varie

aree della chimica teorica e computazionale: Andreoni, Ciofini e Spezia. Il Consiglio Direttivo, preso atto delle valutazioni espresse dalla suddetta commissione esterna composta da ricercatori italiani che svolgono la loro attività all'estero, ha unanimemente deciso di assegnare il "Premio Carla Roetti" 2015 al Dott. Stefano Bovino per il suo originale contributo all'estensione dei metodi della chimica teorica e computazionale nel campo dell'astrofisica. Ha altresì unanimemente deciso di assegnare il "Premio Eolo Scrocco" 2015 al Dott. per il suo originale contributo allo sviluppo e all'implementazione di metodi ab initio per lo studio delle proprietà dei solidi.

5) Intervento del Prof. A. Laganà, chair della Divisione di Chimica Computazionale di Euchems, su azioni europee di interesse per la comunità italiana dei chimici computazionali e nomina del secondo rappresentante della divisione di chimica teorica e computazionale nel consiglio della divisione europea

Il Presidente dà la parola ad Antonio Laganà per l'illustrazione delle iniziative Euchems di interesse per la comunità della DCTC. Antonio Laganà illustra le azioni europee con l'ausilio di slides, in particolare informa l'Assemblea su:

- SESSIONE DCC al Congresso ECC6-SIVIGLIA Sett 2016
- SERVIZI EUCHEMS e rapporti con ECTN
- CONGRESSO Divisione EU e NOMINA SECONDO MEMBRO ITALIANO NEL DIRETTIVO DI DIVISIONE
- VIRTUAL ENVIRONMENTS e H2020
- EDITORIA

Per quanto riguarda la divisione CC europea, Antonio Laganà sottolinea in particolare che:

- Sono trascorsi 20 ANNI DALLA FONDAZIONE DELLA DIVISIONE (Primo congresso NANCY 1994, 2002 Assisi, 2008 Venezia)
- Nel 2015, il congresso della divisione europea CC si è tenuto a FULDA (DE) 30/8-3/9: 144 PARTECIPANTI (29 paesi), 12 SESSIONI, 47 ORALI (B. Mennucci + 5 IT), 87 POSTER (sovrapposizione evitata con CF)
- IL PROSSIMO CONGRESSO DELLA DIVISIONE CC SI TERRA' A BARCELLONA (4-7 Settembre 2017)
- Per quanto riguarda il secondo membro italiano nel direttivo della divisione europea il Presidente indica il Prof. Stener che si è detto disponibile. L'Assemblea approva.

6) Organizzazione del Congresso Divisionale 2016

Il Presidente informa l'Assemblea che per quanto riguarda il congresso divisionale DCTC2016 ha ricevuto la disponibilità da parte della Scuola Normale Superiore di Pisa di organizzare il congresso a Follonica nella seconda metà di settembre 2016, congiuntamente con il congresso della divisione di chimica fisica, con un'eventuale sovrapposizione di una giornata tra i due eventi. Per quanto riguarda gli anni successivi, considerato che nel 2017 si svolgerà il congresso SCI a divisioni riunite, l'Assemblea prende atto della disponibilità delle sedi di Palermo (Dario Duca) e Trieste (Mauro Stener).

7) varie ed eventuali

Nulla.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 18:30.

Roma, 15 dicembre 2015

Il Segretario

Prof. Mauro Stener

Il Presidente

Prof. Benedetta Mennucci