

## **Verbale dell'Assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 26.09.2013.**

Il giorno giovedì 26 settembre 2013, alle ore 17:30, presso la Sala degli Stemmi della Scuola Normale Superiore di Pisa (Palazzo Carovana - edificio principale) ha inizio l'assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC), regolarmente convocata dal Presidente Prof. Gianfranco Pacchioni (convocazione inviata il giorno 1 luglio 2013).

L'ordine del giorno risulta essere il seguente:

- 1) Comunicazioni
- 2) Relazione sulle attività
- 3) Candidature alla Presidenza e Consiglio Direttivo 2014-2016
- 4) Varie ed eventuali

### **1) Comunicazioni del Presidente**

Nulla.

### **2) Relazione sulle attività della Divisione**

Il Presidente dà la parola al Tesoriere Prof. Stener per illustrare l'andamento dei soci effettivi ed aderenti, la situazione di bilancio e le attività congressuali della Divisione. Il numero di soci per l'anno 2012 è stato di 84 soci effettivi e 84 soci aderenti, mentre per il 2013 (situazione aggiornata a settembre) risultano 89 soci effettivi e 74 soci aderenti. Si riscontra purtroppo un elevato numero (circa 20) di soci inadempienti, cioè di soci effettivi in ritardo con il pagamento della quota sociale. Per quanto riguarda la situazione di bilancio, l'esercizio 2012 è stato il primo anno in cui è iniziata l'attività economica della DCTC, a partire dal congresso DCTC2012 di Pisa. Il bilancio consuntivo 2012 ha portato a 3442 Euro di entrate (essenzialmente dal congresso DCTC2012) e 1551 Euro di uscite (1000 Euro di contributo alla SCI e 551 euro tra premi e spese bancarie) per un saldo attivo di +2291 Euro. Per l'esercizio 2013 al momento risultano 5079 Euro di entrate (congresso DCTC2013) e 2550 Euro di uscite (2000 Euro di contributo alla SCI e 550 euro tra premi e spese bancarie) per un saldo attivo 2013 pari a 2529 Euro. Sommando i saldi attivi di entrambe le annate si ottiene un saldo netto pari a 4820 Euro. La situazione di cassa, aggiornata al 31 agosto 2013 corrispondente all'ultimo estratto conto del c/c presso la DB, risulta pari a +4465,65 che si discosta dal bilancio assestato per -354,35 Euro. Tale differenza è imputata al fatto che gli sponsor di DCTC2013 (E4 e HP) non hanno ancora versato il contributo concordato. Il Presidente interviene ricordando che tutte le attività del Consiglio Direttivo sono state a carico dei singoli (rimborso missioni) sgravando quindi il bilancio da queste spese. Considerato che il bilancio della divisione nei prossimi anni non si potrà discostare di molto da quanto avvenuto in passato, sarà opportuno mantenere questa consuetudine anche per il prossimo Consiglio Direttivo.

Le attività congressuali della divisione sono iniziate al congresso SCI2011 a divisioni riunite, svoltosi a Lecce, durante il quale c'è stato uno spazio riservato alla divisione e spazi interdivisionali gestiti in comune tra DCTC e altre divisioni, i partecipanti ai lavori della DCTC sono stati circa 60. Il congresso non ha portato utili alla DCTC.

Il primo congresso divisionale DCTC2012 si è svolto a Pisa nel febbraio 2012, ha visto la adesione di ben 121 partecipanti, quindi con una grande affluenza, alta qualità dei contributi e largo coinvolgimento di giovani ricercatori, gli utili sono stati pari a 3142 Euro.

Il secondo congresso divisionale DCTC2013 si è svolto a Padova nel febbraio 2013, ha visto la adesione di ben 110 partecipanti, quindi con affluenza e caratteristiche analoghe a DCTC2012, gli utili sono stati pari a 5379 Euro.

Nel 2014 è previsto un congresso SCI a divisioni riunite a Rende in settembre, quindi il prossimo congresso divisionale è previsto nel 2015.

La divisione ha il suo spazio all'interno del sito web della SCI, che è stato aggiornato di recente. In pratica il vecchio sito della DCTC è stato provvisoriamente inserito nel nuovo sito della SCI. La pagina della DCTC viene comunque aggiornata (verbali del direttivo e delle assemblee, premi, congressi DCTC). Tuttavia sarà necessario a breve creare una nuova pagina web della DCTC all'interno del nuovo sito SCI. Il nuovo direttivo dovrà farsi carico di questo lavoro.

Il Presidente riprende la parola, per illustrare le attività divisionali inerenti i premi. Sin dall'inizio il presente Direttivo si è impegnato a istituire dei premi per giovani ricercatori, iniziando dalla Medaglia Roetti (istituita nel 2011) e il Premio Scrocco (istituito nel 2012).

Il Premio Roetti è riservato a ricercatori sino a 40 anni, dotazione del premio 1000 euro/anno grazie alla donazione della famiglia Roetti. Finora ci sono state tre edizioni del premio:

Premio Roetti 2011, 9 domande pervenute, vincitrice Ilaria Ciofini premiata a Lecce (Congresso SCI Settembre 2011)

Premio Roetti 2012, 9 domande pervenute, vincitrice Chiara Cappelli premiata a Padova (Congresso DCTC Febbraio 2013)

Premio Roetti 2013, 6 domande pervenute, vincitore Stefano Corni premiato a Pisa (Avogadro Colloquia, Settembre 2013)

Il Premio Scrocco è riservato a ricercatori sino a 33 anni, finora ci sono state due edizioni del premio:

Premio Scrocco 2012, 5 domande pervenute, Alfonso Pedone premiato a Padova (Congresso DCTC Febbraio 2013), Claudio Greco menzione speciale (Congresso DCTC Febbraio 2013)

Premio Scrocco 2013, 10 domande pervenute, Julien Bloino e Vittorio Limongelli ex-aequo, premiati a Pisa (Avogadro Colloquia, Settembre 2013)

Benché non sia un premio della DCTC ma della SCI, è opportuno ricordare la Medaglia d'Oro Cesare Pisani, che viene conferita ogni 3 anni dalla SCI e rappresenta un premio alla carriera. Interviene il Prof. Barone, facendo presente che, considerato l'elevato numero di medaglie SCI, sarebbe opportuno che un certo numero di queste siano conferite durante i congressi divisionali. Pertanto si dovrà valutare se conferire la prossima Medaglia Pisani durante il prossimo congresso SCI o il prossimo congresso della DCTC.

Il Presidente dà quindi la parola al Prof. Antonio Lagana' per illustrare le attività della Divisione Europea di Chimica Computazionale. Durante l'esposizione vengono illustrati vari punti, tra i quali la cadenza dei congressi, anche in relazione con EUCHEMS, e la possibilità di avere due rappresentanti delle società membro, quindi il prossimo CD della DCTC dovrà individuare un secondo rappresentante. Il Prof. Pacchioni suggerisce che il Presidente eletto potrebbe essere il secondo rappresentante. Il Prof. Lagana' continua ad illustrare le caratteristiche della Virtual Research Community (VRC) e la Virtual Education Community, ricordando iniziative quali il Dottorato Europeo e il master TCCM. Infine illustra la situazione del supercalcolo in Italia e le opportunità di accesso in iniziative americane, quali la EGI-XSEDE.

### **3) Candidature alla Presidenza e Consiglio Direttivo 2014-2016**

Al momento sono giunte al Presidente le seguenti Candidature alla Presidenza della DCTC, in ordine alfabetico:

Orlando Crescenzi (Università Federico II di Napoli)

Benedetta Mennucci (Università di Pisa)

Entrambi i candidati intervengono in assemblea ribadendo la loro disponibilità a candidarsi alla Presidenza e l'importanza del ruolo della DCTC sia come attività divisionali che come sede di discussioni delle problematiche comuni. Dall'Assemblea non emergono altre candidature. Il

Presidente ricorda che per la presidenza potra' essere espressa una sola preferenza in fase di votazione.

Per quanto riguarda il Consiglio Direttivo le candidature risultano essere, in ordine alfabetico:

Massimiliano Aschi (Universita' di L'Aquila)  
Chiara Cappelli (Universita' di Pisa e SNS)  
Bartolomeo Civalleri (Universita' di Torino)  
Claudio Greco (Universita' di Milano Bicocca)  
Alfonso Pedone (Universita' di Modena-Reggio Emilia)  
Emilia Sicilia (Universita' di Cosenza)  
Mauro Stener (uscente, Universita' di Trieste)  
Andrea Vittadini (CNR Padova)

Dall'Assemblea non emergono altre candidature. Presidente ricorda che per il consiglio direttivo, ai sensi del regolamento della divisione, dovranno essere eletti 5 consiglieri e potranno essere espresse due preferenze in fase di votazione.

Il Presidente propone che le votazioni, in forma elettronica, inizino il 10 novembre p.v. e terminino il successivo 6 dicembre. Lo scrutinio si svolgera' quindi al 9 di dicembre. Viene quindi individuato il Comitato Elettorale, che dovra' farsi carico dello spoglio delle schede e dello scrutinio, costituito dai tre componenti: Prof. Gianfranco Pacchioni (Presidente), Prof. Ugo Cosentino e Prof. Giorgio Moro, tutti e tre appartenenti all'Universita' di Milano Bicocca.

Infine si chiede a tutti i candidati di inviare al Presidente un breve CV (1 pagina A4) che saranno inseriti nella pagina web della divisione prima dell'inizio delle votazioni.

Infine il Presidente ricorda che in base al regolamento della DCTC l'elettorato passivo corrisponde ai soci effettivi della DCTC mentre l'elettorato attivo e' allargato ai soci effettivi ed aderenti, i soci inoltre dovranno risultare in regola con il pagamento della quota sociale al momento della convocazione dell'assemblea, convocazione inviata il giorno 1 luglio 2013.

#### **4) Varie ed eventuali**

Il Prof. Barone chiede la parola per aggiornare l'assemblea sugli sviluppi dei rapporti con il CINECA, in seguito al rapporto e all'iniziativa intrapresa durante l'assemblea tenutasi a Padova in febbraio durante il congresso DCTC2013. Si' e' convenuto di organizzare un incontro con i vertici del CINECA per discutere degli sviluppi futuri, tuttavia sembra che il Ministero sia intenzionato ad un aggiornamento della politica che potrebbe introdurre cambiamenti a breve. Considerato che sembra inutile organizzare tale incontro prima che questa linea di cambiamento sia definita, risulterebbe piu' opportuno attendere fino a quando la situazione risultera' piu' nitida. L'assemblea prende atto e concorda nell'attendere il momento giusto per organizzare l'incontro.

Non essendoci altro da discutere, l'Assemblea si conclude alle ore 18:30.

Pisa, 26 settembre 2013

Il Segretario  
Prof. Mauro Stener

Il Presidente  
Prof. Gianfranco Pacchioni