

## **Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 13.05.2014.**

Il giorno 13 maggio 2014, presso la sede di Firenze del Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali (INSTM), sita in via Giusti 9, alle ore 11:30 si riunisce il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI), regolarmente convocato dal Presidente, prof. Benedetta Mennucci. Oltre il Presidente, sono presenti i consiglieri eletti: il Prof. Massimiliano Aschi, la Prof. Chiara Cappelli, il Prof. Bartolomeo Civalleri e il Prof. Alfonso Pedone. Risulta assente giustificato il past-president, Prof. Gianfranco Pacchioni.

L'ordine del giorno è il seguente:

- 1) comunicazioni
- 2) approvazione verbale del 28.01.2014 e cooptazione
- 3) bilancio consuntivo 2013 e preventivo 2014
- 4) organizzazione sessione DCTC e sessioni congiunte congresso SCI2014
- 5) riorganizzazione sito web DCTC
- 6) discussione preliminare congresso europeo DCF-DCTC settembre 2015 e CHITEL2015 luglio 2015
- 7) discussione preliminare scuola DCTC
- 8) discussione su iniziative per aumentare l'interesse verso la divisione
- 9) varie ed eventuali

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

### **1) Comunicazioni**

La Prof. Cappelli comunica che sarà organizzato un workshop in occasione degli 80 anni del Prof. Jacopo Tomasi, che si svolgerà a Pisa dal 31 agosto al 1 settembre. Il sito web del workshop è il seguente: [www.dcci.unipi.it/tomasi2014-05-13](http://www.dcci.unipi.it/tomasi2014-05-13).

### **2) approvazione verbale del 28.01.2014 e cooptazione consigliere**

Il verbale in oggetto si riferisce alla seduta tenuta per via telematica il 28 gennaio 2014. Non essendoci osservazioni, il verbale viene approvato all'unanimità.

Il Presidente propone di cooptare nel CD la Prof. Emilia Sicilia dell'Università della Calabria, per le sue competenze nel campo della chimica quantistica inorganica, in modo da allargare ulteriormente gli orizzonti culturali del direttivo. Il CD approva all'unanimità.

### **3) bilancio consuntivo 2013 e preventivo 2014**

Il Tesoriere (Prof. Stener) illustra brevemente il bilancio consuntivo 2013, che si è chiuso con un saldo cassa pari a 4396 Euro. Nel 2013 ci sono state entrate pari a 4506 Euro (dal congresso DCTC2013 di Padova) e uscite pari a 2428, di cui 2000 per trasferimenti alla sede centrale per il risanamento di bilancio della SCI, circa 200 euro di spese bancarie e 230 euro per la medaglia Roetti e le due targhe Scrocco. Si rileva anche un residuo attivo pari a 500 Euro, derivante da sponsorizzazioni, versati sul c/c nel corso del 2014. Il CD approva all'unanimità.

Per quanto riguarda il bilancio preventivo 2014, come unica voce di entrata risultano i 500 Euro relativi a sponsorizzazioni dell'anno precedente (residuo attivo 2013), in quanto non è previsto il congresso divisionale. Per le uscite si prevedono i consueti 200 euro di gestione c/c, 230 Euro per la medaglia Roetti e la targa Scrocco, 285 Euro per una missione del Prof. Stener al Consiglio Centrale e infine 960 Euro per 3 borse di studio riservate a soci effettivi DCTC non strutturati per partecipare al congresso SCI2014. Quindi si prevede un saldo cassa al 31.12.2014 pari a 3221 Euro. Il CD approva all'unanimità.

#### **4) organizzazione sessione DCTC e sessioni congiunte congresso SCI2014**

Il Presidente illustra l'organizzazione del congresso, in particolare gli accordi presi con le altre divisioni per l'organizzazione delle sessioni comuni. Si discute la lista delle possibili keynote per le varie sessioni. Si discute anche sulle possibili azioni da intraprendere per incrementare il numero di iscrizioni al congresso. L'assemblea di divisione si terrà nel pomeriggio del giorno 8 settembre 2014.

#### **5) riorganizzazione sito web DCTC**

Il Prof. Civalleri ha dato la sua disponibilità a curare la migrazione del sito web della DCTC dal vecchio al nuovo sito web della SCI, pertanto parteciperà presso la sede SCI di Roma ad un incontro informativo organizzato dal dott. Morelli il prossimo 6 giugno. Nell'attesa che il nuovo sito diventi operativo, il prof. Stener continuerà a garantire il funzionamento e l'aggiornamento del vecchio sito DCTC. Il Presidente propone che nel nuovo sito sia attivato un forum/blog relativo alle problematiche del calcolo e una sezione contenente informazioni relative ai gruppi italiani di chimica teorica e computazionale, nonché informazioni sulle varie posizioni aperte (dottorati, post-doc, borse ecc.) di interesse per la comunità.

#### **6) discussione preliminare congresso europeo DCF-DCTC settembre 2015 e CHITEL2015 luglio 2015**

Il Prof. Civalleri illustra l'organizzazione a Torino del congresso CHITEL2015 che si svolgerà dal 26 al 31 luglio 2015, presso Torino Incontra (centro congressi della Camera di Commercio di Torino). Sono previste 5 plenarie e una partecipazione di circa 250 persone. E' sicuramente una valida opportunità per la divisione, il Prof. Civalleri avanza due proposte: 1) inserire qualcuno del direttivo della DCTC nel comitato scientifico 2) proporre una riduzione della quota di iscrizione per i membri della divisione DCTC. Il Presidente ringrazia il Prof. Civalleri e si rende disponibile a far parte del comitato scientifico. Si propone che il logo della DCTC sia inserito nel sito web del congresso.

Il Presidente illustra al direttivo the First European Conference on Physical Theoretical and Computational Chemistry che si terrà a Catania dal 6 all'11 settembre del 2015, e che potrebbe rappresentare un'occasione per organizzare congiuntamente il congresso divisionale della DCTC insieme alla divisione di chimica fisica. Il Direttivo esprime parere favorevole all'iniziativa, tuttavia rimane da chiarire come saranno gestite le quote di iscrizione, infatti l'organizzazione del congresso divisionale rappresenta l'unica fonte di entrate per la divisione che sono irrinunciabili per il suo funzionamento. Il Direttivo da mandato al Presidente di definire insieme con la divisione di chimica fisica la gestione finanziaria del congresso, in modo da chiarire l'importo delle quote di iscrizione e la ripartizione degli utili tra le due divisioni.

#### **7) discussione preliminare scuola DCTC**

Il Direttivo ritiene opportuno allargare le iniziative della divisione, che fino ad ora hanno riguardato essenzialmente i premi per i ricercatori (Roetti e Scrocco) e i congressi divisionali. In effetti si ritiene che l'organizzazione di una Scuola di Chimica Teorica e Computazionale possa essere molto utile per la comunità, segue un'ampia discussione per definire le caratteristiche salienti della scuola in modo da renderla attrattiva. Si conviene che il target debba essere costituito da dottorandi o borsisti interessati ad approfondire o ad allargare le proprie competenze in questo ambito. Una possibilità potrebbe essere quella di dare un titolo alla scuola, che però non dovrà essere troppo specifico ma molto ampio. Inoltre si ritiene che la scuola debba prevedere esercitazioni al calcolatore (da effettuarsi i pomeriggi) e lezioni (le mattine), prevedendo la partecipazione di circa 20 persone.

### **8) discussione su iniziative per aumentare l'interesse verso la divisione**

Il Presidente illustra al direttivo le liste dei soci effettivi, aderenti e morosi della DCTC aggiornate al 5.5.2014, prendendo atto di un calo di iscrizioni. Dopo ampia discussione, si conviene di sollecitare i soci morosi a regolarizzare la loro posizione per il 2014. Inoltre si stabilisce di contattare direttamente i colleghi di alcune sedi che risultano essere poco rappresentate ai fini di incrementare il numero degli effettivi.

### **9) varie ed eventuali**

Il Prof. Pedone suggerisce l'istituzione di un premio per la migliore tesi di dottorato di chimica teorica e computazionale.

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 17:10.

Firenze, 13 maggio 2014

Il Segretario  
Prof. Mauro Stener

Il Presidente  
Prof. Benedetta Mennucci