

## Målsättningar

### Kemistsamfundets sektion för teoretisk kemi

Sektionen skall sträva efter att stimulera och stärka den teoretiska kemin i Sverige. Teoretisk kemi skall här förstås i ett brett sammanhang, som utveckling och tillämpning av matematiska modeller på problem inom kemi. Exempel inkluderar:

- Utveckling av teoretisk-kemiska metoder
- Molekylmodellering med kvantkemiska eller molekylmekaniska metoder
- Simuleringar baserad på statistisk termodynamik, flödesdynamik m.m.
- Applikation av multiskalmodeller
- Kvantitativa struktur-aktivitets-samband
- Datorbaserad utveckling av nya material, läkemedel, m.m.
- Kinetiska reaktionsnätverk

Aktiviteter som används för att stimulera forskning och samarbete:

- Utdelning av priser enligt tidigare beslut (BRO och IFH). IFH-priset utannonseras under senhösten varje år, med deadline i januari året efter; en evalueringsgrupp inom styrelsen utses i slutet av varje år, ffa bland ordinarie ledamöter.
- Arrangemang av årliga möten, gärna i samband med större konferenser.
- En kartläggning av den teoretiska kemin i Sverige. Sammanställning av ett häfte (PDF) med en kort beskrivning av alla teoretiskt verksamma grupper i Sverige. Vi ber alla gruppledare att skriva en sammanställning på max en A4-sida enligt en mall, med länkar (aktiva i PDF-dokumentet) och upp till fem relevanta publikationer. Dokumentet (eller som separata dokument) läggs upp som länk på hemsidan.
- Web-sida på [www.chemsoc.se](http://www.chemsoc.se), vilken behöver kontinuerligt ny input för att hållas uppdaterad och aktuell.
- Hjälp att förmedla information vid personalrekrytering (doktorandtjänster, postdoc-platser, m.m.).
- Korta pressreleaser om viktiga upptäckter baserade på (svensk) teoretisk kemi, teoretiska kemister som fått utmärkelser, etc.
- Populärvetenskapliga artiklar i exv. Kemivärlden, eller till dagstidningar.
- Andra aktiviteter som är till gagn för den teoretiska kemins utveckling och position i Sverige.