

Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 31-01-2024

Il giorno 31 gennaio 2024 alle ore 10.15 si riunisce in modalità telematica il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI), regolarmente convocato dal Presidente prof. Claudio Greco.

Sono presenti i consiglieri proff. Enrico Bodo, Isabella Daidone, Gloria Mazzone, Fabrizia Negri, Nadia Rega, Mirco Zerbetto, Giovanna Fronzoni e il dott. Marco Mendolicchio; assente giustificata la prof.ssa Maria Cristina Menziani. Partecipano su invito, limitatamente alla discussione del punto 3 del seguente OdG, anche i delegati DCTC per le sessioni divisionali per il congresso SCI2024 che non sono consiglieri (dott. Giovanni Di Liberto, dell'Università di Milano – Bicocca, e dott.ssa Greta Donati, afferente all'Università di Napoli Federico II).

Espleta le funzioni di Segretario per la seduta corrente la prof.ssa Fronzoni.

Ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Bilancio consuntivo 2023
3. Attività divisionali nel prossimo Congresso Nazionale SCI 2024 di Milano
4. Premi divisionali
5. Candidature per le Medaglie SCI2024
6. Altre attività della Divisione: andamento iscrizioni e iniziative
7. Varie ed eventuali

1. Comunicazioni

Il presidente comunica che è stato pubblicato sulla newsletter della SCI l'articolo riguardante il congresso nazionale della DCTC tenutosi a Pisa a settembre 2023; l'articolo sottolinea il successo che il congresso ha rappresentato per la Divisione, in termini di numero di partecipanti (con notevole rappresentanza di giovani), ampiezza e rilevanza dei temi trattati dai relatori nell'ambito delle conferenze e della Tavola rotonda sui temi del finanziamento alla ricerca.

Il presidente comunica che il Consiglio Centrale SCI auspica che si discuta presso i Consigli Direttivi la questione dell'opportunità del mantenimento della SCI-List, essendo quest'ultima un canale comunicativo che tende a sovrapporsi alla nuova newsletter; il CD discute brevemente sull'effettiva opportunità di tale situazione e sul ruolo – non del tutto chiaro – che la SCI-List copre nel nuovo contesto; il presidente riporterà al CC l'esito di tali discussioni.

Il presidente comunica al CD che al Board della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (CTC) di EuChemS è stata inviata dal prof. Michele Pavone, in collaborazione con la prof.ssa Rega, una proposta per portare a Napoli l'edizione 2025 del congresso CTC. Il programma tentativo attualmente all'attenzione del Board CTC prevede che il congresso si tenga nel corso della prima

metà di settembre 2025; in caso di approvazione della proposta, sarà necessario valutare la soluzione migliore per la collocazione del congresso nazionale della DCTC in termini di periodo di svolgimento e location; ci si propone di trattare la questione in maggior dettaglio nel corso delle prossime riunioni del CD.

Il presidente segnala che la prof.ssa Cecilia Coletti (UNICH) lo ha contattato per proporre l'invito di un membro del CD DCTC quale speaker su invito al congresso internazionale MES2024, che sta organizzando nella sede di Pescara (<https://www.mes2024.it/>). Il presidente, avendo stabilito preliminari contatti con i membri del CD, designa la prof.ssa Fabrizia Negri come potenziale speaker da segnalare alla prof.ssa Coletti.

Il presidente segnala inoltre che diversi colleghi afferenti a università italiane hanno scritto alla sua attenzione avanzando informali richieste di finanziamento di congressi da loro organizzati (copertura di borse per giovani effettivi della DCTC). A tal proposito, il presidente fa presente che altre Divisioni offrono tale tipo di supporto a congressi non-SCI/non-EuChemS, buona pratica alla quale, in linea di principio, sarebbe bene – a suo avviso – allinearsi quanto prima; esprime però il parere che questa particolare fase non sia la più adatta per intraprendere nuove direzioni in tal senso, poiché è necessario prevedere la copertura di spese, la cui entità non è ancora chiara, relative al congresso SCI2024 di Milano, che – tra le altre cose – ha messo a bando un notevolissimo numero di borse a sostegno della partecipazione di giovani della DCTC. Propone quindi un aggiornamento sull'argomento non appena si avranno più elementi solidi di discussione, nel corso di prossime riunioni del CD.

Il presidente segnala che si è aperto il bando “European Young Chemist’s Award”, indicandone i dettagli per la loro diffusione. Il premio verrà conferito durante il congresso EuChemS 2024, che si terrà a luglio a Dublino.

2. Bilancio consuntivo 2023

Il Tesoriere (prof.ssa Fronzoni) illustra il bilancio consuntivo 2023, ricordando che il saldo cassa al 4.01.2023 era pari a 8320.47 euro.

Le entrate nel 2023 ammontano a 13732.68 euro e sono così ripartite:

- iscrizioni congresso DCTC 2023 – Pisa : 11430 euro;
- sponsorizzazione Congresso DCTC -Pisa di E4 Computer Engineering S.P.A : 1500 euro;
- iscrizioni Winter School SMS 2024 – Padova : 720 euro;
- interessi conto corrente : 82.68 euro.

Le uscite nel 2023 ammontano a 4381,30 euro, ripartite come segue:

- spese bancarie : 167 euro;
- quote iscrizione SCI - 2023 (premio e rimborsi Congresso Modena) : 310 euro;
- 5+1 borse di partecipazione al congresso DCTC - Pisa 2023 : 1500 euro;
- premio miglior poster Congresso DCTC – Pisa 2023 : 250 euro;
- Medaglia/targa Roetti/Scrocco 2023 : 298.30 euro ;
- spese Congresso DCTC – Pisa : 806 euro;

- 3 borse di partecipazione al Congresso EuChemS - 2023 : 1050 euro.

Il tesoriere sottolinea che gli utili del Congresso DCTC 2023 organizzato a Pisa ammontano a 10624 euro.

Il bilancio consuntivo 2023 si è pertanto chiuso con un saldo cassa pari a 17671.85 euro.

Il direttivo approva il bilancio consuntivo 2023 all'unanimità

3. Attività divisionali nel prossimo Congresso Nazionale SCI 2024 di Milano

Il presidente aggiorna il CD sullo stato di avanzamento dei lavori relativi alla preparazione del congresso SCI2024 (26-30 agosto). La sessione divisionale si terrà giovedì 29 agosto, ed è previsto che abbia una durata di mezza giornata complessiva. In questa sessione vi sarà, in apertura, il talk su invito del prof. Michele Parrinello, che ha accolto favorevolmente la proposta di partecipazione formulatagli dal CD; a seguire, la sessione divisionale ospiterà anche i talk dei premi divisionali per i quali è prevista una conferenza del vincitore. Il presidente propone che tutto lo spazio rimanente sia dedicato a talk su abstract, in modo da favorire il più possibile la partecipazione al programma da parte di coloro che hanno presentato spontaneamente un contributo; il CD si mostra favorevole a tale approccio. A tal riguardo, il presidente esprime l'auspicio che in particolare vi sia una numerosa partecipazione da parte di giovani, anche sfruttando l'occasione del programma "1000borse", e chiede ai membri del CD di continuare la loro opera di diffusione della notizia di questa opportunità tra i giovani soci DCTC.

Si passa poi ad un aggiornamento sulle singole sessioni interdisciplinari (giornata del 28 agosto); il presidente ricorda che le sessioni nelle quali la DCTC figura quale host sono la sessione sull'intelligenza artificiale (delegato DCTC: prof. Greco; co-host: Divisione di Chimica Fisica) e la sessione "New Reactions" (delegato DCTC: prof.ssa Daidone e Mazzone; co-host: CNR); inoltre, la DCTC è coinvolta nell'organizzazione delle sessioni sulla catalisi (delegato DCTC: dott. Giovanni di Liberto), sulla education, communication and outreach (delegato DCTC: dott. Mendolicchio) e su gender equality (delegata DCTC: dott.ssa Greta Donati).

Il presidente cede la parola alla dott.ssa Donati per un aggiornamento sulle attività di sua competenza. A valle della riunione organizzativa tenutasi il giorno 29 Gennaio 2024, cui la delegata ha partecipato, gli aggiornamenti sono stati:

1 – Il nome della Sessione Interdivisionale è stato cambiato da "Gender Equality" a "Diversity, Equity and Inclusion".

2 – Sarà valutato nelle successive riunioni se introdurre anche "Ethics" nel nome della Sessione.

3 – La Sessione si svolgerà il giorno 28 Agosto 2024 dalle ore 14:30 alle ore 18:30.

4 – La prima parte (14:30-16:30) sarà dedicata a 4 interventi da 30 minuti ciascuno. La dott.ssa Vanessa Seifert è confermata come speaker. Altre proposte sono state: il prof. Campanella (ex presidente SCI), la prof.ssa Mariasole Banno', il dottor Matteo Guidotti. Si è pensato anche di includere interventi di esponenti di realtà aziendali.

5 – Riguardo i contenuti della seconda parte della Sessione il dibattito è ancora aperto. Sono state avanzate ipotesi di: presentazione sondaggi relativi al gender balance, rappresentazioni teatrali/danza. Inoltre, si pensa di dedicare parte della Sessione alla presentazione delle linee guida europee in merito alla scrittura di progetti scientifici ed articoli scientifici che tengano conto del gender balance.

Infine, la delegata DCTC ha proposto: l'intervento di una psicologa-psicoterapeuta per affrontare un aspetto (scelto insieme agli altri delegati) relativo alla "Diversity, Equity and Inclusion",

videochiamata con rappresentante del mondo accademico internazionale relativamente all' inclusione in termini di omosessualità, intervento di una prof.ssa di economia che già affronta questo tema tra le sue linee di ricerca, dibattito sulle "quote rosa", dibattito a valle della visione di un filmato contenente esperienze di donne nel mondo accademico nazionale in diverse fasi della carriera accademica.

Il presidente ringrazia la delegata e cede la parola al delegato per la sessione sulla catalisi, dott. Di Liberto. Il Dott. Di Liberto comunica che la giornata dedicata alla catalisi sarà guidata dal gruppo interdivisionale di catalisi e dalla divisione di chimica inorganica. Sono molte le divisioni a contribuire. Sia la sessione mattutina che pomeridiana saranno costituite da plenary speakers, contributed, e da tavole rotonde. In una di esse c'è la possibilità che possa farne parte un teorico parlando di potere predittivo di calcolo usando approcci diversi che includano intelligenza artificiale. Attenzione verrà posta a costi, che si cercherà di mantenere contenuti.

Il presidente ringrazia il dott. Di Liberto, che lascia la riunione insieme con la dott.ssa Donati; cede poi la parola al dott. Mendolicchio, che aggiorna il CD sulla sessione relativa all'education, communication and outreach. Il dott. Mendolicchio nota in avvio come siano molte le divisioni a contribuire alla sessione. All'interno di questa, verrà consegnata la medaglia SCI Illuminati. Per gli invitati alle "keynotes" delle sessioni tematiche è previsto il pagamento della quota di iscrizione al congresso da parte delle Divisioni, mentre il rimborso delle spese di viaggio, vitto e alloggio sono a discrezione del proponente. All'interno della pianificazione preliminare, sono stati previsti 15 slot da 30 minuti. Si valuta il possibile inserimento di uno spettacolo teatrale incentrato sulla meccanica quantistica.

Il presidente ringrazia il dott. Mendolicchio e invita le prof.sse Daidone e Mazzone ad aggiornare il CD sull'avanzamento dei lavori in preparazione della sessione di loro competenza. Le professoresse riferiscono che la sessione tematica New Reactions, organizzata di concerto con il CNR, e coinvolgendo tutte le divisioni e i gruppi interdivisionali interessati, è stata suddivisa in 4 sotto sessioni, ciascuna con una tematica diversa:

- Organic and organometallic synthesis for fine chemistry
- Computational and characterization methods for reaction mechanisms
- Light and technologies mediated synthetic paradigms
- Challenges for new reactions

Sono state pianificate 12 Keynote da 30', tra comunicazioni su invito e premi divisionali/interdivisionali, e 6 comunicazioni orali da 15' da selezionare dagli abstract presentati. Le rappresentanti della divisione, hanno proposto al direttivo il nominativo di Laura Zanetti-Polzi come keynote su invito per la sessione tematica New Reactions, il quale ha accolto con favore la proposta.

Infine, il presidente, delegato della DCTC per la sessione sull'A.I. in chimica, aggiorna il C.D. sull'esito delle ultime riunioni; la sessione, della durata di una intera giornata, è stata rinominata in "Artificial intelligence and modeling for chemistry"; la sessione verrà aperta dal prof. Michele Ceriotti (EPFL), speaker selezionato di concerto con il delegato della divisione di Chimica Fisica (prof. Piero Ugliengo, UNITO); il prof. Ceriotti ha già confermato la propria adesione. Per le due keynote lecture successive, si propone di contattare i proff. Alfonso Pedone e Giovannimaria Piccini (UNIMORE) e il C.D. accoglie con favore tale proposta. Anche il CNR e le altre Divisioni coinvolte nella sessione (Divisioni di Chimica Farmaceutica, di Chimica per le Tecnologie, di Chimica degli Alimenti) stanno definendo una proposta congiunta su keynote speaker. Il presidente comunica inoltre che ai talk selezionati sulla base degli abstract pervenuti (orali di 15') verrà dedicato uno spazio congruo e che il talk riservato al vincitore della medaglia Cesare Pisani verrà collocato proprio nel corso della sessione interdivisionale sull'A.I. in chimica. Infine, il presidente segnala che dal C.D. della Divisione di Chimica Fisica è venuta la proposta di istituire un premio per la miglior comunicazione orale della sessione (pubblicizzazione dell'opportunità senza emissione di un bando formale; definizione della giuria con il contributo della DCTC; assegnazione del premio nel corso della sessione medesima); il presidente ha, in via preliminare, appoggiato con

convinzione tale iniziativa, ritenendola di notevole importanza per la diffusione della tematica dell'A.I. presso la comunità nazionale; sottopone la questione al C.D., che la accoglie favorevolmente.

4. Premi divisionali

Il CD discute dell'urgenza di emanare quanto prima i bandi per i premi divisionali:

1. Premio di Laurea Pier Luigi Nordio, riservato a laureati/e magistrali (o quinquennali);
2. Premio di Dottorato Giuseppe Del Re, riservato a dottori e dottoresse di ricerca entro due anni solari dal conseguimento del dottorato;
3. Premio Scrocco, riservato a giovani ricercatori o ricercatrici al di sotto di trentacinque anni che abbiano svolto, prevalentemente in Italia, attività di ricerca originale, di rilevante interesse scientifico e riconosciuta importanza nell'area dei metodi teorici e degli approcci computazionali applicati alle scienze chimiche;
4. Premio Roetti, riservato a giovani ricercatori e ricercatrici al di sotto di quarantadue anni che abbiano svolto, prevalentemente in Italia, attività di ricerca originale, di rilevante interesse scientifico e riconosciuta importanza nell'area dei metodi teorici e degli approcci computazionali applicati alle scienze chimiche.

Il CD, dopo aver preso visione delle scadenze del Convegno, e in particolare della deadline per l'invio degli abstract, fissata al 31 marzo 2024, che deve essere preceduto dall'iscrizione al congresso, decide di procedere introducendo modifiche *ad hoc* ai testi dei bandi in funzione di quanto sopra riportato e di stabilire le seguenti tempistiche per le varie fasi di rilievo:

22 Febbraio: pubblicazione bandi

19 aprile: scadenza domande

3 giugno: comunicazione dell'attribuzione del premio ai vincitori

Il C.D. decide inoltre di bandire tre borse di partecipazione per il congresso EuChemS 2024 di Dublino (*vide supra*), con la stessa numerosità (3) e gli stessi importi (350 € ciascuna) già deliberati nel 2023 per le borse per il convegno della Computational and Theoretical Chemistry Division (Salonicco) e con scadenza al 31 marzo per le domande dei candidati.

Il CD delega il prof. Zerbetto coadiuvato dalla prof.ssa Mazzone, alla preparazione dei bandi delle borse e dei premi divisionali. Il dott. Mendolicchio propone, con il favore del C.D. tutto, di aggiungere ai bandi per i premi la previsione che i consiglieri del C.D. DCTC non possano candidarsi per il conferimento dei premi medesimi se in carica all'atto della presentazione della domanda. Il presidente ricorda inoltre di aver segnalato al C.D., in precedenti riunioni, che in occasione della pubblicazione dei bandi 2023 erano pervenute alla sua attenzione richieste di modifica dei bandi, affinché venissero resi più inclusivi, con commenti anche in ordine alla definizione dei termini di partecipazione. Il C.D. delega il prof. Zerbetto e alla prof.ssa Mazzone per la valutazione di eventuali azioni correttive da introdurre nel testo dei bandi, con previsione di un aggiornamento con il presidente per la messa a punto dei testi finali.

5. Candidature per le Medaglie SCI2024

Premi "Stanislao Cannizzaro" e "Giulio Natta"

Questi riconoscimenti sono conferiti a Scienziati che hanno dato contributi eccellenti all'ampliamento delle conoscenze chimiche fondamentali e che si siano distinti a livello

internazionale per l'originalità della loro ricerca e attività in un qualunque settore delle Scienze Chimiche.

Dopo discussione del profilo di potenziali candidati il CD ad unanimità incarica il Presidente di candidare il prof. Gianfranco Pacchioni.

Medaglia "Cesare Pisani"

La Medaglia Cesare Pisani viene assegnata a uno Scienziato in riconoscimento del contributo dato allo sviluppo delle scienze chimiche con particolare riferimento agli aspetti della modellizzazione teorico-computazionale.

Hanno ricevuto precedentemente questa medaglia: Dovesi 2012, Barone 2014, Pacchioni 2017, Mennucci 2020.

Dopo discussione del profilo di potenziali candidati il CD ad unanimità incarica il Presidente di candidare la professoressa Maria Cristina Menziani

6. Altre attività della Divisione: andamento iscrizioni e iniziative

Il presidente comunica che l'andamento delle iscrizioni risulta essere buono, con il numero di soci effettivi DCTC già oltre la sessantina, cosa sicuramente influenzato dall'effetto di "traino" del congresso SCI2024 (la tariffa più economica per iscriversi al congresso scade già il 31 gennaio). Il presidente chiede ai consiglieri di continuare a stimolare rinnovi e nuove iscrizioni presso le varie Sedi.

Il Presidente cede la parola al prof. Zerbetto per un aggiornamento sulle fasi preparative della Scuola sui Metodi Stocastici che si terrà a Padova (6-9 febbraio 2024). Il prof. Zerbetto comunica che, a chiusura delle registrazioni, risultano iscritti 24 studenti, dieci dei quali sono dottorandi dell'Università di Padova, mentre gli altri provengono da otto università italiane con una buona copertura geografica tra nord, centro e sud. Quattordici iscritti sono anche iscritti alla Divisione di Chimica Teorica e Computazionale. Il budget totale della scuola è stato di 1952 euro; di questi, 896 euro sono stati coperti con le quote di iscrizione, mentre i rimanenti 1056 euro sono stati coperti con il cofinanziamento fornito dal Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Padova sul progetto d'eccellenza C2 - Complessità Chimica. Richiede una riflessione lo sbilanciamento di genere, con una sola donna tra i partecipanti.

7. Varie ed eventuali

Nessuna

La seduta si chiude alle ore 12:50

Trieste, 31 gennaio 2024

Il Segretario
Prof.ssa Giovanna Fronzoni

Il Presidente
Prof. Claudio Greco