

## **Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 24-02-2023**

Il giorno 24 Febbraio 2023 alle ore 14.30 presso la sala B del Centro Congressi dell'Università di Napoli Federico II si riunisce in modalità mista 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 eletti proff. Giovanna Fronzoni (collegamento Skype), Gloria Mazzone, Mirco Zerbetto, Enrico Bodo, Nadia Rega e prof.ssa Maria Cristina Menziani quale Presidente uscente (past-President). Sono stati invitati a partecipare alla riunione dal Presidente i membri del consiglio direttivo precedente, tra questi sono presenti alla riunione i proff. Vincenzo Barone, Michele Pavone e, in collegamento Skype, la prof.ssa Isabella Daidone e il dott. Marco Mendolicchio.

Il Presidente dichiara aperta la riunione e il CD nomina il consigliere Mirco Zerbetto segretario pro-tempore per questa riunione con il compito di redigere il verbale.

### **Ordine del giorno:**

1. Comunicazioni
2. Nomine di Vice-Presidente e Segretario-Tesoriere
3. Bilancio consuntivo 2022
4. Congresso Divisionale 2023
5. Altre attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative
6. Varie ed eventuali
7. Indicazione dei membri cooptati nel Consiglio Direttivo

Preliminarmente, il Presidente chiede di inserire il punto all'OdG (**Consiglio Direttivo ristretto ai soli membri eletti presenti Enrico Bodo, Giovanna Fronzoni, Claudio Greco, Gloria Mazzone, Nadia Rega, Mirco Zerbetto**): Designazione delegati della DCTC alla Division of Computational and Theoretical Chemistry EuChemS. Il consiglio unanime approva e l'OdG risultante è di seguito riportato:

### **Ordine del giorno aggiornato:**

1. Comunicazioni
2. Nomine di Vice-Presidente e Segretario-Tesoriere
3. Bilancio consuntivo 2022
4. Congresso Divisionale 2023
5. Altre attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative
6. Varie ed eventuali
7. Indicazione dei membri cooptati nel Consiglio Direttivo

### **OdG - Consiglio Direttivo ristretto**

1. Designazione delegati della DCTC alla Division of Computational and Theoretical Chemistry EuChemS

## **1. Comunicazioni**

Greco comunica che sono state approvate dal CUN le declaratorie relative ai nuovi gruppi scientifico disciplinari (GSD) introdotti dalla nuova normativa approvata nella passata legislatura. Vengono illustrate all'assemblea le declaratorie dei GSD di area chimica e vengono discusse in particolare le implicazioni relative all'ampiezza della formulazione che caratterizza molte di esse.

Greco informa che il 14 febbraio 2023 si è tenuta una riunione informale tra il neo-eletto Presidente della SCI, prof. Gianluca Maria Farinola e i presidenti di tutte le Divisioni. Tra le principali questioni affrontate vi è stata quella delle imminenti elezioni dei consiglieri CUN che, nel caso dell'area chimica, riguarderanno sia la rappresentanza dei ricercatori, sia quella delle due fasce della docenza universitaria; alla riunione era presente su invito anche il prof. Roberto Purrello, attuale consigliere CUN per la fascia dei PO. Greco ha riassunto gli sviluppi della discussione e illustrato le prospettive relative a possibili candidature sui ruoli dei professori associati e ordinari, e dei ricercatori. Ulteriori questioni e note di rilievo comunicate dal Prof. Farinola hanno riguardato, tra le altre: (i) l'imminente organizzazione di eventi pubblici relativi al ruolo della chimica nella mitigazione del climate change, frutto di una collaborazione tra SCI e Società Geologica Italiana; (ii) l'ottima crescita delle attività svolte nel contesto dei Giochi della Chimica; (iii) l'invito del Presidente a usare con maggior frequenza la sede della SCI a Roma per le riunioni dei consigli direttivi divisionali. Riguardo all'ultimo dei precedenti punti, Greco propone che la prossima riunione del Direttivo DCTC si tenga a Roma verso fine aprile.

Il Presidente comunica che il congresso EuChemS CompChem 2023 si terrà a Salonicco (Grecia) dal 27 al 31 agosto 2023. La Divisione europea si aspetta un'ampia partecipazione e l'individuazione di possibili sponsor da parte delle divisioni dei vari Paesi. Greco invita a contattare i rappresentanti DCTC, che verranno designati in uno dei successivi punti all'OdG, per suggerire proposte funzionali al successo del congresso europeo.

## **2. Nomine di Vice-Presidente e Segretario-Tesoriere**

Il Presidente propone la prof.ssa Nadia Rega per la carica di Vice Presidente. La prof.ssa Rega conferma la sua disponibilità e il CD approva ad unanimità.

Il Presidente propone la prof.ssa Giovanna Fronzoni per la carica di Segretario Tesoriere. La prof. Fronzoni conferma la sua disponibilità e il CD approva ad unanimità.

## **3. Bilancio Consuntivo 2022**

Il Tesoriere (Prof. Fronzoni) ricorda che il bilancio consuntivo 2021 si è chiuso con un saldo cassa pari a 3919,81 euro.

Nel 2022 ci sono state due entrate:

- 1) gli utili del workshop organizzato a Firenze (aprile 2022) pari a 590,96 euro;
- 2) gli utili del congresso DCTC 2022 di Modena (settembre 2022) pari a 6370 euro

Le uscite nel 2022 ammontano a 2560,30 euro, ripartite come segue:

- spese bancarie: 167 euro;
- 2 quote di iscrizione alla SCI soci junior (premio Nordio 2021, premio VS-CTC dicembre 2020) pari a 120,00 euro;
- Premi Roetti e Scrocco: 773,30 euro;
- 6 borse di partecipazione al congresso DCTC di Modena da 250 euro ciascuna, per un totale di 1500 euro.

Il bilancio consuntivo 2022 si è pertanto chiuso con un saldo cassa pari a 8320,47 euro.

Il CD approva il bilancio consuntivo 2022 della DCTC all'unanimità.

#### **4. Congresso Divisionale 2023**

Il Presidente ricorda che nella scorsa Assemblea della DCTC erano state proposte la candidatura di Pisa-SNS e Sapienza/L'Aquila per il congresso del 2023. Il dialogo promosso a valle dell'assemblea aveva consentito di raggiungere un accordo sulla presentazione della prima tra le due sedi per il congresso dell'anno in corso, con previsione di riproposizione di Sapienza/L'Aquila alla prima occasione utile. Il Prof. Barone, in qualità di proponente della candidatura Pisa-SNS, comunica che il Congresso DCTC 2023 potrà aver luogo a Pisa dal 20 al 22 settembre 2023, presso la Scuola Normale Superiore. Il numero di sessioni di cui il congresso si potrà comporre dipenderà dall'eventuale inclusione, nel programma, di una tavola rotonda sui temi delle politiche sulla ricerca di base. Si decide di valutare con attenzione tale possibilità e di aggiornare la discussione in merito a questo punto nel corso della prossima riunione del CD. L'organizzazione comprenderà i coffee break. Il prof. Barone verificherà la possibilità che i pranzi, per i partecipanti junior, si tengano in mensa (non saranno inclusi nell'iscrizione). Viene infine segnalato che è già disponibile un sito internet che presenta un possibile schema organizzativo del congresso, che – al netto della questione della tavola rotonda – ricalca la struttura del precedente congresso DCTC tenutosi a Modena. Greco segnala che metterà a disposizione il relativo link a tutti i membri del CD non appena tecnicamente possibile. Il CD all'unanimità approva la proposta di organizzazione del Congresso DCTC 2023 a Pisa nelle date indicate, e decide di aggiornarsi sulle questioni aperte (inclusa la definizione dei relatori su invito) in occasione della riunione del CD che si terrà in aprile.

#### **5. Altre attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative**

Il Presidente aggiorna l'assemblea sullo stato attuale delle iscrizioni alla DCTC, e invita il CD a promuovere nelle varie sedi la questione dell'importanza dell'iscrizione tra i colleghi.

Riguardo ai premi conferiti dalla DCTC, il Presidente, su suggerimento della Prof.ssa Fronzoni, propone che il prossimo bando del premio Scrocco preveda per il vincitore, in aggiunta a diploma, targa e invito a tenere una conferenza al primo congresso organizzato dalla Divisione dopo la scadenza del bando, anche l'iscrizione gratuita alla SCI per l'anno successivo a quello del bando. Il CD unanime approva.

Il CD discute la possibilità di implementare diverse attività di divulgazione della Chimica Teorica e Computazionale quali ad esempio l'organizzazione di scuole destinate a studenti di dottorato e giovani ricercatori. Il CD delega la Dott.ssa Mazzone a preparare una proposta per la prossima riunione del Direttivo per una scuola invernale di argomento inorganico-computazionale, e il prof. Zerbetto una su modelli stocastici. Il Presidente inoltre segnala un colloquio intercorso con il dott. Ali Hassanali dell'International center for theoretical physics (ICTP) su stimolo del prof. Mauro Stener, durante il quale si è anche parlato della possibilità di una proposta congiunta per una scuola di tema chimico-computazionale da presentare congiuntamente nell'ambito del prossimo bando appositamente promosso dall'ICTP; il CD delega le proff. Fronzoni e Rega a proseguire le interlocuzioni al fine della preparazione di una proposta in tale contesto.

Infine, il CD delega il prof. Zerbetto alla gestione del sito web della Divisione nel portale della SCI.

#### **6. Varie ed eventuali**

La prof.ssa Daidone segnala il suo coinvolgimento nell'organizzazione del workshop intitolato "Principles of light-induced charge transfer for optogenetics" che si terrà a Modena dal 3 al 5 luglio

p.v., ( <https://optogenetics.nano.cnr.it/> ); propone al CD di suggerire un nome per un invited speaker da includere nel programma del workshop. Il CD manifesta la propria disponibilità ad impegnarsi in tal senso per fornire una proposta per un intervento su invito entro la metà del mese di marzo.

Il Presidente invita il prof. Bodo, delegato DCTC presso il gruppo di lavoro costituito da rappresentanti delle Divisioni che contribuiscono ad Enerchem e delle Divisioni proponenti il nuovo GI “Chimica per l’Accumulo e la Conversione di Energia”, a relazionare sulle attività del gruppo di lavoro; preliminarmente, il Presidente ricorda che la DCTC supporta l’azione volta alla istituzione del nuovo GI, e il gruppo di lavoro sopra menzionato ha l’obiettivo di ridurre al minimo le sovrapposizioni del GI proposto rispetto ad Enerchem. Il Prof. Bodo segnala che il gruppo di lavoro non si è ancora riunito.

Il Prof. Barone segnala che è in fase di avvio di organizzazione un meeting sui temi della chimica teorica e computazionale, che avrà luogo al termine del congresso DCTC 2023 e si terrà a Castiglione della Pescaia (GR), presso il residence “Riva del Sole”; seguiranno comunicazioni sui dettagli del meeting, non appena disponibili.

Il Presidente propone al CD di valutare l’opportunità che, ai prossimi congressi DCTC, in caso di presenza di partecipanti stranieri, venga usata la lingua inglese per le presentazioni. Vengono quindi discusse le possibili implicazioni relative e il Presidente propone di aggiornare la discussione in occasione della prossima riunione del CD, durante la quale verranno definiti anche gli altri principali dettagli relativi al congresso DCTC di Pisa di settembre 2023

\*\*\* La prof.ssa Daidone e il dott. Mendolicchio escono dal collegamento telematico (16:20) \*\*\*

## **7. Indicazione dei membri cooptati nel Consiglio Direttivo**

Su proposta del Presidente il CD approva ad unanimità la cooptazione nel CD delle prof.sse Fabrizia Negri dell’Università di Bologna e Isabella Daidone, nonché del dott. Marco Mendolicchio, questi ultimi già membri del precedente CD.

## **Consiglio Direttivo ristretto**

### **1. Designazione delegati della DCTC alla Division of Computational and Theoretical Chemistry EuChemS**

Dopo discussione del profilo dei colleghi dai quali sono pervenute candidature spontanee comunicate al Presidente – prof. Michele Pavone e dott. Marco De Vivo, quest’ultimo affiliato all’IIT di Genova in qualità di head del Molecular Modeling & Drug Discovery Lab – il CD ristretto, su proposta del Presidente, approva all’unanimità la designazione di entrambi i candidati ai fini della copertura delle due posizioni di delegato italiano presso la Division of Computational and Theoretical Chemistry EuChemS.

Avendo esaurito i punti all’ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 16:47, del che è verbale.

Napoli, 24 Febbraio 2023

Il Segretario  
Prof. Mirco Zerbetto

Il Presidente  
Prof. Claudio Greco