

## **Verbale della riunione del Consiglio Direttivo della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 21.04.2023.**

Il giorno 21 Aprile 2023 alle ore 14:45, si riunisce in una stanza presso la sede centrale della Società Chimica Italiana (SCI) il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana, convocato dal Presidente Prof. Claudio Greco.

Sono presenti i consiglieri proff. Enrico Bodo, Giovanna Fronzoni (Segretario-tesoriere), Gloria Mazzone, Mirco Zerbetto, Isabella Daidone, Marco Mendolicchio e Fabrizia Negri.

Sono assenti giustificati i consiglieri Maria Cristina Menziani e Nadia Rega.

Il Presidente dichiara aperta la riunione e procede alla discussione dei vari punti all'ordine del giorno.

L'ordine del giorno è il seguente:

- 1) Comunicazioni;
- 2) Bilancio preventivo 2023;
- 3) Attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative (anche in relazione al congresso EuChemS e alle Scuole);
- 4) Congresso divisionale 2023 (Pisa);
- 5) Varie ed eventuali.

In apertura, il Presidente Greco chiede di aggiungere all'OdG il seguente punto: "Modalità di iscrizione a congressi divisionali dei membri del Gruppo Senior"; chiede inoltre di invertire i punti 2 e 3. Il CD unanime approva e l'OdG viene quindi integrato come di seguito:

- 1) Comunicazioni;
- 2) Attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative (anche in relazione al congresso EuChemS e alle Scuole);
- 3) Bilancio preventivo 2023;
- 4) Congresso divisionale 2023 (Pisa);
- 5) Modalità di iscrizione a congressi divisionali dei membri del Gruppo Senior;
- 6) Varie ed eventuali.

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

### **1) Comunicazioni**

- Le iscrizioni al 20-04-2023 sono: 113 soci effettivi e 39 soci aderenti, in linea con la situazione alla medesima data dell'anno 2022.

- Greco comunica che il suo nominativo è stato inserito tra i membri dello Scientific Committee di EuChemS CompChem 2023

### **2) Attività della divisione: premi, andamento iscrizioni e iniziative (anche in relazione al congresso EuChemS e alle Scuole)**

Greco avvia la discussione sul terzo punto all'OdG commentando i dati comunicati al punto precedente, riguardo allo stato attuale delle iscrizioni alla SCI con status di effettivo o aderente alla DCTC; Greco invita i consiglieri a continuare la loro azione di comunicazione dell'importanza dell'iscrizione alla SCI presso la comunità dei chimici teorici e computazionali, ed inoltre esprime il proprio auspicio che la Divisione possa proseguire nel suo trend di crescita del numero di iscritti.

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

1. Premio di Laurea Pier Luigi Nordio, riservato a laureati magistrali (o quinquennali);
2. Premio di Dottorato Giuseppe Del Re, riservato a dottori di ricerca entro due anni solari dal conseguimento del dottorato;
3. Premio Scrocco, riservato ogni anno a un giovane ricercatore al di sotto di **trentacinque** anni che abbia 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 ogni anno a un giovane ricercatore al di sotto di **quarantadue** anni che abbia 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
5. 6 borse di partecipazione da 250 euro ciascuna.

I premi consistono in:

Premio Nordio 2023 - diploma e iscrizione SCI

Premio Del Re 2023 - diploma, borsa di studio e comunicazione su invito al primo convegno nazionale della divisione

Premio Scrocco 2023 - targa, diploma, comunicazione al primo convegno nazionale della divisione su invito e iscrizione alla SCI

Premio Roetti 2023 - medaglia, diploma, 500 euro e comunicazione su invito al primo convegno nazionale della divisione.

Il CD, decide di procedere con la seguente tempistica per la pubblicazione dei bandi dei premi e delle borse di partecipazione:

*28 Aprile (venerdì): pubblicazione bandi*

*30 Maggio (martedì): scadenza domande*

*20 Giugno (martedì): comunicazione vincitori*

Il CD delega i Proff. Zerbetto e Fronzoni alla preparazione dei bandi delle borse e dei premi divisionali.

Il CD passa a discutere la proposta relativa all'istituzione di 3 borse per un importo di 350 euro ciascuna per incentivare la partecipazione dei giovani ricercatori EuChemS CompChem 2023; l'importo proposto dal Presidente per ciascuna borsa tiene conto in particolare dei costi legati all'iscrizione e al trasferimento nel luogo dove il congresso si svolgerà (Salonico). Greco propone inoltre di definire un bando che preveda modalità di partecipazione, di selezione dei candidati e di erogazione della borsa in analogia con quanto normalmente fatto per le borse di partecipazione ai congressi nazionali, e di pubblicare il relativo bando entro la prima settimana del mese di maggio. Il CD unanime approva.

Infine, per quanto riguarda l'organizzazione delle Scuole, il presidente invita il prof. Zerbetto a prendere parola per un aggiornamento sulla pianificazione della Scuola "Approcci stocastici classici e quantistici per l'interpretazione di processi dinamici in fasi condensate". Il prof. Zerbetto illustra il programma di massima previsto per la Scuola, che si terrà presso l'Università di Padova nel corso del primo semestre solare 2024 e prevedrà un'organizzazione su 4 giorni, 6 ore al giorno (lezioni + esercitazioni).

Relativamente al budget, si ipotizza la partecipazione di 20-30 studenti, e la presenza di 15 docenti; agli studenti verrà richiesta una quota di 50 euro per partecipare alla scuola. Nel modulo di registrazione verrà data la possibilità agli studenti di chiedere i pasti in mensa per 3 pranzi, aggiungendo 24 euro alla quota di partecipazione. Segue quindi un prospetto di massima relativo alle entrate e alle uscite previste.

	Entrata / Euro	Uscita / Euro
Quota di partecipazione*	1000 – 1500	
Progetto di eccellenza	3000	
Coffee breaks**		1400 – 1800
Materiale		500
Pranzo sociale***		700 – 900
<b>Totale</b>	<b>4000 – 4500</b>	<b>2600 – 3200</b>

\*Per 20-30 studenti. Un eventuale supporto dalla DCTC sarà nel coprire qualche retta.

\*\*Stimato 10 Euro a persona (20-30 studenti + 15 docenti), solo per le 4 lezioni.

\*\*\*Stimato 20 Euro a persona (20-30 studenti + 15 docenti).

Il CD unanime approva le attività proposte e le relative previsioni di gestione delle medesime.

### 3) Bilancio preventivo 2023

Il Tesoriere (Prof. Fronzoni) ricorda che il bilancio consuntivo 2022, approvato nella riunione del consiglio direttivo del 24 febbraio 2023, si è chiuso con un saldo cassa pari a 8320,47 euro.

Il Tesoriere illustra il bilancio preventivo 2023 (Allegato 1), in cui si considera una sola entrata, relativa agli utili del congresso DCTC 2023 - Pisa, la cui stima è pari a 6500 euro.

Le uscite attualmente previste per il 2023 ammontano a 3980 euro, ripartite come segue:

- spese bancarie: stima pari a 170 euro;
- 1 quota di iscrizione alla SCI per il 2023 socio junior (premio Nordio 2022, assegnato a Chiara Nania) pari a 60,00 euro;
- 2 quote di iscrizione alla SCI per il 2023 (rimborso iscrizione Congresso Modena 2022, Gandolfi e Delle Piane) pari a 170 euro;
- Premi Roetti, Scrocco e del Re 2023 : stima pari a 1030 euro ( medaglia e targa : 280 euro; premio Roetti : 500 euro; premio del Re, corrispondente ad una borsa di partecipazione al congresso DCTC 2023 : 250 euro);
- 5 borse di partecipazione al congresso DCTC - Pisa 2023 da 250 euro ciascuna, per un totale di 1250 euro;
- 1 premio di 250 euro attribuito alla miglior comunicazione orale del congresso DCTC – Pisa 2023;
- 3 borse di partecipazione al Congresso EuChemS - CompChem 2023 da 350 euro ciascuna, per un totale di 1050 euro.

Si prevede quindi un saldo cassa al 31.12.2023 pari a 10840,47 euro.

Il CD approva all'unanimità il bilancio preventivo 2023 della DCTC.

### 4) Congresso divisionale 2023 (Pisa)

Il dott. Marco Mendolicchio, organizzatore del congresso presenta un'ipotesi di organizzazione del convegno divisionale 2023 (Allegato 2). In linea con le proposte del dott. Mendolicchio, il CD – dopo ampia discussione – converge sulla seguente organizzazione:

il Congresso DCTC2023, in linea con i congressi precedenti, vedrà una molteplicità di sessioni (nello specifico, 9) articolate su 3 giornate: dal pomeriggio del giorno mercoledì **20 settembre 2023** alla mattina del giorno venerdì 22 settembre 2023. Le sessioni si svolgeranno tra la Sala Azzurra e la Sala Stemmi del Palazzo della Carovana, sede della Scuola Normale.

**La deadline per la presentazione degli abstract è fissata al 10 giugno e per l'iscrizione al 30 giugno p.v.**

- Soci SCI ordinaria 120 euro (dopo il 30 giugno: 170 euro),

- Soci SCI agevolata 100 euro (dopo il 30 giugno: 140 euro),
- Non soci SCI ordinaria 200 euro (dopo il 30 giugno: 270 euro),
- Non soci SCI agevolata 180 euro (dopo il 30 giugno: 220 euro).

Si ipotizza l'adesione di circa 70 partecipanti. La quota di iscrizione comprenderà esclusivamente il pranzo del 21 settembre che sarà organizzato da un fornitore esterno e allestito nella Chiostra del Palazzo della Carovana. Una parte delle spese relative ai servizi sarà coperta da finanziamenti provenienti dalla Scuola Normale, per un ammontare ad oggi previsto a 2.000,00 euro.

Per quanto riguarda i pagamenti delle quote di iscrizione al congresso si propone di utilizzare il conto della DCTC per il versamento contestuale a comunicazione di registrazione.

Per quanto riguarda gli abstract si propone di utilizzare la casella di posta appositamente attivata, mentre per il programma scientifico si propone di utilizzare un sito web esterno predisposto dagli organizzatori, e di richiamare tale sito e le informazioni essenziali ivi presenti su una pagina dedicata al congresso sul sito della divisione DCTC.

Si prevede che il numero e la distribuzione di flash talk (5 minuti) e talk full length (15 minuti) sia oggetto di discussione a valle della ricognizione sui contributi che saranno ricevuti. Si prevede inoltre di assegnare 30 minuti agli invited e 15 minuti a ciascuno ai vincitori dei premi Roetti, Scrocco e Del Re 2023.

Greco ricorda che due invited speaker (Proff. Gianfranco Pacchioni e Cristina Puzzarini) erano già stati individuati in una precedente seduta del CD. Il CD, dopo ampia discussione, individua i seguenti nominativi a completamento del quadro degli invited speaker al congresso di Pisa: Prof. M. Aschi (UNIVAQ); Prof.ssa S. Casassa (UNITO), Dott. A. Petrone (UNINA); Prof.ssa A. Pietropaolo (UNICZ).

Il CD, unanime, approva.

#### **5) Modalità di iscrizione a congressi divisionali dei membri del Gruppo Senior**

Il presidente comunica al CD che il neoeletto coordinatore del Gruppo Senior, prof. Franco Alhaique, ha richiesto a mezzo email di considerare la possibilità che le Divisioni deliberino a che i membri del Gruppo possano iscriversi ai congressi divisionali a titolo gratuito, ciò al fine di favorire la partecipazione a colleghi che normalmente hanno possibilità quantomeno ridotte di accedere a fondi a copertura delle spese di trasferta e partecipazione ai meeting. In tale email, il prof. Alhaique ha ricordato che alcune Divisioni già hanno deliberato in tal senso.

Date tali premesse, Greco propone al CD di approvare la previsione che, a partire dal congresso DCTC 2025, i membri del Gruppo possano iscriversi ai congressi della DCTC a titolo gratuito.

Il CD, unanime, approva.

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

Nessuna

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 16:50.

Roma, 21-04-2023

Il Segretario  
Giovanna Fronzoni

Il Presidente  
Prof. Claudio Greco