

## Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 06-10-2023

Il giorno 6 Ottobre 2023 alle ore 16.30 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, Giovanna Fronzoni, Gloria Mazzone, Fabrizia Negri, Nadia Rega, Mirco Zerbetto e il dott. Marco Mendolicchio; assente giustificata la prof.ssa Maria Cristina Menziani. È stato invitato a partecipare alla riunione dal Presidente il dott. Marco De Vivo, rappresentante SCI nel Consiglio Direttivo della Computational and Theoretical Chemistry (CTC) Division di EuChemS.

### Ordine del giorno:

- 1) Comunicazioni
- 2) Organizzazione attività divisionali nel congresso SCI2024
- 3) Aggiornamento su summer/winter schools
- 4) Designazione del candidato DCTC per la Ciamician-Gonzales Lectureship
- 5) Varie ed eventuali

Il prof. Greco propone di trattare in prima battuta il punto 2 all'OdG, dato che l'ospite, invitato per partecipare alla discussione del predetto punto, può trattenersi in riunione fino alle ore 17.00; si procede come proposto, invertendo i punti 1 e 2 all'OdG.

### 1. Organizzazione attività divisionali nel congresso SCI2024

Il prof. Greco informa il CD delle ultime notizie relative all'organizzazione del convegno (sito web: <https://sci2024.org>); Le date sono da lunedì 26-08 a venerdì 30-08, sono previste 5 sessioni plenarie e 4 sessioni riservate ai lavori delle singole divisioni. La suddivisione degli slot previsti, della durata di due ore, tra le varie divisioni è ancora *in fieri*; una prima distribuzione tentativa diffusa dal Presidente della SCI, prof. Farinola, indica che ai lavori divisionali DCTC potrebbero essere assegnati tre slot da due ore. Greco informa il CD di essere stato interpellato informalmente dalla Divisioni di Chimica Fisica per l'organizzazione di una sessione congiunta ChimFis-DCTC; contatti analoghi sono stati stabiliti con la Divisione di Chimica Farmaceutica (DCF), e per approfondire le discussioni a tal proposito, sentita la Presidente della DCF (prof.ssa Maria Laura Bolognesi), è stato invitato alla riunione il dott. Marco De Vivo, il quale, oltre al ruolo di rappresentanza in sede EuChemS ricordato in premessa, è membro del Consiglio Direttivo della DCF. Il dott. De Vivo ha confermato l'interesse della DCF verso l'organizzazione di una sessione congiunta durante il congresso e commenti di reciproco tenore vengono espressi dal CD DCTC. Dato il fatto che non è ancora disponibile un quadro sufficientemente dettagliato riguardo alla suddivisione degli spazi e dei tempi nell'ambito del congresso, si conviene di attendere che vi sia una più chiara definizione di tali aspetti prima dell'avvio della discussione su possibili speaker su invito e sulla tematica della sessione congiunta. Il dott. De Vivo ribadisce la propria disponibilità ad operare a supporto del CD DCTC in questo ambito, col placet di quest'ultimo; lascia poi la seduta alle ore 16:55.

Il Presidente riprende la parola per rappresentare che, in merito alla sessione congiunta ChimFis-DCTC, ha avuto un colloquio telefonico col delegato della Divisione di Chimica Fisica su tale tema (prof. Piero Ugliengo): i contenuti della telefonata col prof. Ugliengo sono di tenore analogo a quelli sopra riportati relativamente alla sessione congiunta DCF-DCTC. Greco comunica quindi che aggiornerà tempestivamente il CD non appena vi saranno novità significative. Infine, il CD discute della possibilità di avviare un dialogo con la Divisione di Chimica Inorganica (DCI) per l'organizzazione di una sessione congiunta DCI-DCTC; si conviene sull'opportunità di avviare contatti informali con il CD della DCI e con il suo Presidente, al fine, auspicabilmente, di porre le basi per lo sviluppo di una sessione DCI-DCTC in SCI2024.

## **2. Comunicazioni**

Il Presidente comunica di essere stato contattato dall'ufficio editoriale della rivista "La Chimica e l'Industria" per un invito a scrivere un report sul congresso DCTC2023 di Pisa SNS, appena conclusosi; tale report avrà la forma di un testo per la neonata Newsletter della SCI. Su stimolo del prof. Bodo, il CD coglie l'occasione per discutere della pianificazione delle attività previste per la Newsletter, in considerazione del fatto che – per questo stesso periodo – era già stata prevista la stesura di un altro contributo, di natura divulgativa su proteine luminescenti, a cura della prof.ssa Rega. Si conviene quindi di procedere in parallelo con i due contributi, da completarsi nel corso del periodo ottobre-novembre.

Il Presidente comunica che è stata presentata al Consiglio Direttivo della divisione CTC di EuChemS la proposta per l'organizzazione del convegno 2025 della Computational and Theoretical Chemistry Division di EuChemS a Capri (prima metà di settembre 2025). La proposta, inviata alla Presidente della CTC Division, Tanja van Mourik, dal prof. Michele Pavone (rappresentante SCI nel Consiglio Direttivo della CTC di EuChemS) ha avuto il pieno supporto del Presidente della SCI. L'esito della selezione della sede del congresso è atteso entro il mese di ottobre.

## **3. Aggiornamento su summer/winter schools**

Il Presidente ricorda che, sulla base di specifica proposta approvata dal CD, presso l'Università di Padova è in corso di organizzazione una Scuola invernale riguardante i modelli stocastici, che si terrà dal 6 al 9 febbraio 2024. Il prof. Zerbetto, promotore della Scuola e membro del C.O., relaziona sulle ultime novità relative ai lavori di programmazione della Scuola. Riprendendo la parola, il prof. Greco ricorda che è in fase di definizione anche l'avvio della pianificazione per una Scuola in ambito bioinorganico teorico, a cura delle prof.sse Daidone e Mazzone; il CD discute riguardo al periodo più propizio per organizzare tale Scuola, convenendo sull'importanza di mantenere opportunamente distanziati i vari eventi in cui la DCTC è coinvolta nel corso della restante parte di mandato dell'attuale CD. Il Presidente ricorda infine che erano stati stabiliti contatti preliminari con l'ICTP di Trieste per esplorare la possibilità di organizzare una Scuola su temi di comune interesse con la DCTC; ICTP pubblica specifiche call per il supporto di tali iniziative. La prof.ssa Fronzoni, nei giorni precedenti la riunione odierna, aveva raccolto del materiale dal sito web dell'ICTP – condiviso con il CD – in merito alla forma di tali bandi. Questi prevedono quale requisito lo sviluppo di uno specifico progetto per Scuole di durata plurisettimanale; il CD, anche alla luce delle precedenti esperienze maturate presso la DCTC nell'organizzazione di Scuole dal formato più compatto, ha discusso approfonditamente sulle prospettive offerte dal bando dell'ICTP. In tale contesto, si è notato come un altro tipo di iniziative di potenziale interesse sostenute dall'ICTP sono i Workshop tematici. Il CD conviene sull'opportunità di aggiornarsi su tali temi nel corso delle prossime riunioni, che saranno informate anche dagli esiti della valutazione della proposta di organizzazione del congresso

CTC EuChemS a Capri (cfr. punto precedente) e su eventuali altre iniziative che coinvolgeranno la DCTC a valle del congresso SCI2024.

#### **4) Designazione del candidato DCTC per la Ciamician-Gonzales Lectureship**

Il Presidente comunica che a marzo 2023 il Consiglio Centrale della SCI ha provveduto a nominare la Commissione internazionale per l'attribuzione della Ciamician-Gonzales Lectureship per il triennio 2023 – 2025. La Commissione è chiamata ad individuare lo scienziato spagnolo che la SCI premierà per l'anno 2023 invitandolo a tenere la prestigiosa Lectureship adempiendo così all'accordo istituito nel 2004 tra la stessa SCI e la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). La Commissione selezionerà il premiato tra le candidature ricevute dai Presidenti delle Divisioni scientifiche della nostra società e sottoporrà il nominativo individuato al Consiglio Centrale della SCI per la deliberazione ufficiale. Il premiato sarà chiamato a tenere, nel corso del 2024, due o tre conferenze in università od istituzioni di ricerca italiane che saranno ufficializzate successivamente. I Presidenti di ciascun CD sono stati chiamati a individuare, di concerto col Consiglio Direttivo, una candidatura autorevole per questo importante premio che lega saldamente la chimica italiana a quella spagnola. La candidatura dovrà essere presentata entro il 15 ottobre p.v.

Si apre quindi la discussione riguardo alle figure rilevanti per una possibile candidatura; il CD ritiene di particolare valore la proposta pervenuta dalla prof.ssa Negri, che indica quale possibile candidato il prof. Juan Carlos Sancho Garcia (Universidad de Alicante, <https://cvnet.cpd.ua.es/curriculum-breve/es/sancho-garcia-juan-carlos/10239>). Con il placet del CD, il Presidente propone l'eventualità di convocare una breve riunione del CD all'inizio della settimana entrante, qualora si ritenesse necessario discutere ulteriori approfondimenti.

#### **5) Varie e eventuali**

Il Presidente segnala che al CTC di EuChemS è stato proposto di organizzare una "Sessione Speciale" all'ECC9 a Dublino il prossimo anno, e la Presidente della CTC ha indicato la necessità di iniziare a pensare a potenziali relatori, proponendo per questa sessione l'argomento "Machine Learning". Questo è anche uno dei sottotemi del tema Chimica fisica, analitica e computazionale" (Temi ECC-9 – EuChemS 2024), quindi la sessione speciale lo supporterebbe bene.

Il prof. Greco segnala quindi ai membri del CD la possibilità di proporre, con necessità di espressione di motivazione, relatori per questa sessione speciale, e propone di aggiornarsi in merito in occasione della prossima riunione del CD.

Non essendoci altro da discutere, la riunione si chiude alle ore 18.00

Il Segretario  
Prof.ssa Giovanna Fronzoni

Il Presidente  
Prof. Claudio Greco