

## **Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 08-10-2020**

Il giorno 8 Ottobre 2020 alle ore 14.00 si riunisce in modalità telematica il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI),

Sono presenti in collegamento skype i consiglieri Proff. Carlo Adamo, Isabella Daidone, Giovanna Fronzoni (segretario-tesoriere), Claudio Greco, Gloria Mazzone, Maria Cristina Menziani, Michele Pavone, Mirco Zerbetto, assente giustificato Prof. Vincenzo Barone (past-president)

Il Presidente dichiara aperta la riunione e procede alla discussione dell'

### **Ordine del giorno:**

- 1) Comunicazioni del Presidente
- 2) Relazione sulle attività della divisione
- 3) Bilancio consuntivo 2019 e preventivo 2020
- 4) Premi miglior lavoro scientifico
- 5) Varie ed eventuali

### **1) Comunicazioni dal Consiglio centrale:**

a) Conferimento delle medaglie SCI 2020. È stata conferita la medaglia Pisani a Benedetta Mennucci e la medaglia Avogadro a Vincenzo Barone. Congratulazioni al past past e al past president della divisione.

#### **b) Tesseramento**

Il 2020 ha interrotto il regolare e consistente aumento del numero dei soci avuto negli ultimi anni. Alla stessa data di settembre, nel 2019 avevamo 3893 iscritti, mentre nel 2020 ne abbiamo 3395, con una riduzione di circa il 13%. La diminuzione è ovviamente legata al fatto che molti nostri Soci hanno l'abitudine di iscriversi in occasione di qualche convegno da noi organizzato. L'analisi evidenzia come questa situazione di riduzione degli iscritti riguarda praticamente tutte le divisioni e sezioni.

Il Consiglio centrale ha deciso di mantenere invariate l'importo delle quote associative per il 2021.

c) Proseguono i lavori per l'organizzazione del XXVII Congresso Nazionale da "SCI2020" a "SCI2021" a Milano. Si sta improntando l'elenco dei relatori su invito con grande difficoltà dovuta da un lato all'incertezza sulla possibilità di svolgere il congresso nel 2021 in presenza e, dall'altro, agli impegni accumulati dai relatori in seguito all'interruzione di attività congressuali per il COVID.

d) sono stati sorteggiati i membri delle GEV VQR 2015-19. Per il SSD CHIM/02: Alessandro Fortunelli (primo ricercatore CNR), Francesco Nastasi (RU, UniMe), Riccardo Ruffo (PA, UniMiB).

e) A causa della situazione legata a COVID-19 il consiglio centrale ha approvato una modalità semplificata per la conduzione delle assemblee dei soci. L'assemblea si terrà in modalità telematica; assieme alla convocazione dell'Assemblea verranno inviati i documenti relativi all'OdG. Tutti i Soci avranno 10 giorni di tempo per chiedere informazioni e richieste di chiarimenti sui documenti o esprimere pareri contrari, decorsi i dieci giorni varrà il principio del silenzio/assenso.

## 2) Relazione sulle attività della divisione

Il presidente illustra le attività della divisione nel corso del 2020.

A causa dell'emergenza Covid-19 le attività della DCTC hanno riguardato esclusivamente l'assegnazione dei premi divisionali.

L'andamento delle iscrizioni alla DCTC ha subito un calo nel 2020. Alla stessa data di settembre, nel 2019 avevamo 131 iscritti effettivi, mentre nel 2020 ne abbiamo 99, con una riduzione di circa il 24%. Solo 14 le prime iscrizioni.

	1/09/2019	1/09/2020	PRIME ISCRIZIONI 2020
CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE	131	99	14

Per incentivare l'adesione di nuovi soci il presidente propone di scrivere una lettera di presentazione delle attività della DCTC indirizzata ai nuovi assunti nelle università e centri di ricerca che operano in campo computazionale. A tale scopo chiede ai membri del direttivo di adoperarsi per contribuire a stilare l'indirizzario.

## 3) Bilancio consuntivo 2019 e preventivo 2020

Il Tesoriere (Prof. Fronzoni) comunica che il saldo del conto corrente intestato alla DCTC aggiornato al 10 luglio 2020 è pari a 6488.94 Euro.

Il Tesoriere illustra brevemente il bilancio consuntivo 2019, che si è chiuso con un saldo cassa pari a 3850,91 Euro ed un residuo attivo pari a 3781,60 Euro (mancate entrate derivanti dal congresso SCI 2018 di Trieste). Nel 2019 non ci sono state entrate. Le uscite sono state pari a 3099,52 euro distribuite come segue: spese bancarie 111.59 euro, medaglia Roetti e targa Scrocco, pagate per errore due volte per un totale di 443,93 euro (di cui 222,03 euro verranno recuperati nel 2020 per la stessa voce di spesa), 6 borse congresso DCTC2019 Arcavacata di Rende 1500 euro, premio Roetti 2019 1000 euro, rimborso spese per diplomi congresso DCTC 44 euro.

Il CD approva il bilancio consuntivo 2019 della DCTC all'unanimità.

Per quanto riguarda il bilancio preventivo 2020, si considerano due entrate: 1) il saldo degli utili dal congresso DCTC2018 svoltosi a Trieste pari a 3781.60 euro 2) gli utili dal congresso DCTC 2019 che si è svolto all'Università della Calabria nel settembre 2019 pari a 1592,77 Euro.

Le uscite previste nel 2020 ammontano a 3980,0 euro, ripartite come segue: spese bancarie 120 euro, Premio Roetti 1000 euro, iscrizione alla SCI per il premio Nordio 60 Euro, premi per il miglior lavoro scientifico nelle tre categorie previste dal bando (in totale 4 premi, di cui 2 *ex aequo*), 2800 euro.

Si prevede quindi al 31.12.2020 un saldo cassa pari a 5245,28 Euro.

Segue una breve discussione e la prof. Fronzoni fornisce i chiarimenti richiesti.

Il CD approva il bilancio preventivo 2020 della DCTC all'unanimità.

## 4) Premi miglior lavoro scientifico

Il Prof. Claudio Greco relaziona sui lavori della commissione costituita dai Proff. Isabella Daidone, Claudio Greco e Michele Pavone riunitasi il giorno 2 ottobre 2020 per analizzare le domande

pervenute relativamente al bando per il “Premio Miglior Lavoro Scientifico”, conferito a soci giovani della divisione, autori di una ricerca originale, pubblicata su una rivista scientifica internazionale nel periodo 01 gennaio 2017 – 10 giugno 2020 e condotta in Italia nell’area dei metodi teorici e degli approcci computazionali.

Sono pervenute 15 domande: 6 per l’ambito sistemi complessi, 3 per l’ambito sistemi innovativi e 6 per l’ambito sviluppo metodologico.

La commissione pone l’accento, in generale, sull’elevata qualità delle pubblicazioni presentate dai candidati, nonché sull’ottimo livello dei CV scientifici di questi ultimi, a dimostrazione della vitalità del settore chimico computazionale e teorico in Italia.

A seguito di approfondita analisi degli studi presentati, e dati il rigore metodologico, l’originalità delle ricerche nel campo della chimica teorica e computazionale e l’evidenza del contributo degli autori candidatisi, la commissione unanime concorda nel suggerire al Direttivo della DCTC, quali vincitori del Premio miglior lavoro scientifico:

ambito “sistemi complessi”- **Fortuna Ponte** “Insights from Computations on the Mechanism of Reduction by Ascorbic Acid of Pt<sup>IV</sup> Prodrugs with Asplatin and Its Chlorido and Bromido Analogues as Model Systems” (Chem. Eur. J. 2018, 24, 9572). *“Per il distinto contributo allo studio della reattività e delle proprietà redox di complessi di Pt(IV), che evidenzia in modo originale il ruolo cruciale della chimica quantistica nella caratterizzazione preclinica di profarmaci antitumorali”;*

ambito “sistemi innovativi” - **Jacopo Fregoni** “Strong Coupling with Light Enhances the Photoisomerization Quantum Yield of Azobenzene” (Chem 2020, 6, 250). *“Per l’importante contributo nell’ambito dell’emergente chimica polaritonica allo sviluppo e implementazione di una strategia innovativa teorico-computazionale per trattare l’accoppiamento forte luce-materia in condizioni di nano-confinamento e capace di riprodurre l’aumento della resa quantica di una reazione chimica osservata sperimentalmente”;*

ambito “sviluppo metodologico” *ex aequo* - **Silvia Alessandrini** “Extension of the “Cheap” Composite Approach to Noncovalent Interactions: The jun-ChS Scheme” (J. Chem. Theory Comput. 2020, 16, 988). *“Per il distinto contributo nella definizione e validazione di un nuovo protocollo computazionale generale per la caratterizzazione spettroscopica accurata di complessi molecolari di natura non covalente”;*

e **Francesco Di Maiolo** “Dynamical Disorder and Resonance Energy Transfer: a Novel Quantum-Classical Approach” (Phys. Chem. Chem. Phys. 2020, 22, 1061). *“Per il distinto contributo allo sviluppo di un metodo teorico volto allo studio dei fenomeni di trasferimento risonante di energia quale strumento di caratterizzazione della dinamica di stati fotoeccitati in presenza di disordine dinamico”.*

## 5) Varie ed eventuali

Il Prof. Pavone propone l’organizzazione di un convegno telematico entro la fine dell’anno. Si conviene di presentare in quell’ambito i vincitori dei premi divisionali. Il presidente affida l’organizzazione ai proff. Daidone, Mazzone e Pavone.

La seduta viene tolta alle ore 15.00

Trieste, 08-10-2020

Il Segretario  
Prof. Giovanna Fronzoni

Il Presidente  
Prof. Maria Cristina Menziani

