

## **Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 07-02-2020**

Il giorno 7 Febbraio 2020 alle ore 11.30 presso la sala riunioni del Dipartimento "Giacomo Ciamician" dell'Università di *Bologna* si riunisce il Consiglio Direttivo (CD) della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI), regolarmente convocato dal Presidente Prof. Maria Cristina Menziani.

Sono presenti i consiglieri eletti proff. Carlo Adamo (collegamento skype), Gloria Mazzone, Claudio Greco, Mirko Zerbetto e prof. Vincenzo Barone quale Presidente uscente (past-President). È assente il consigliere eletto prof Michele Pavone. Sono stati invitati a partecipare alla riunione dal Presidente i membri del consiglio direttivo precedente, tra questi sono presenti alla riunione i proff. Emilia Sicilia e Mauro Stener

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

### **Ordine del giorno:**

1. Comunicazioni
2. Indicazione dei membri cooptati nel Consiglio Direttivo
3. Nomine di Vice-Presidente e Segretario-Tesoriere
4. Attività divisionali nel prossimo Congresso Nazionale SCI 2020 di Milano
5. Medaglie e premi divisionali
6. Varie ed eventuali

### **Consiglio Direttivo ristretto**

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

### **Consiglio Direttivo ristrettissimo**

1. Candidature per la Medaglie SCI 2020

### **1. Comunicazioni**

Il Presidente chiede di inserire il punto all'odg (**Consiglio Direttivo ristretto ai soli membri eletti presenti Carlo Adamo, Claudio Greco, Maria Cristina Menziani, Gloria Mazzone e Mirko Zerbetto**): Designazione delegati della DCTC alla Division of Computational and Theoretical Chemistry EUCHEMs e di spostare il punto relativo alle Candidature per la Medaglie SCI 2020 come ultimo punto a **Consiglio Direttivo ristrettissimo ai soli membri eletti presenti Claudio Greco, Maria Cristina Menziani, Gloria Mazzone e Mirko Zerbetto**. Il Prof. Carlo Adamo esce in quanto incompatibile essendo componente della Commissione scientifica SCI che delibererà sui vincitori. Il consiglio unanime approva.

- Sono stati trasferiti gli utili (3781,60 euro) del convegno della divisione di Trieste del 2018, gli utili del convegno 2019 di Rende saranno versati a chiusura del bilancio 2019 della Sci. Pertanto il saldo al 31 dicembre è 3099.52 + 3781.60 a cui si aggiungeranno circa 4000 euro utili 2019 Rende.

- I delegati della DCTC alla Division of Computational and Theoretical Chemistry EUCHEMS (Antonio Laganà e Mauro Stener) hanno terminato il loro mandato nel 2017-2019. La procedura per indicare i nuovi delegati è la seguente: una volta che il CD ha designato i membri, il Presidente della Divisione DCTC procede alla compilazione dell'apposito modulo sul sito: <https://www.euchems.eu/divisions/nomination-of-delegates> e a informare via e-mail il Presidente della Division of Computational and Theoretical Chemistry Prof Péter Szalay, la segretaria Generale dell'EuChemS, Dr. Nineta Hrastelj ([nineta.hrastelj@euchems.eu](mailto:nineta.hrastelj@euchems.eu)) e il Presidente della SCI Prof. Gaetano Guerra. Il Prof. Stener illustra l'organizzazione della Divisione Europea, i compiti e gli impegni dei delegati.
- E' giunto l'invito da parte del Presidente SCI Prof. Guerra a bandire Borse di partecipazione (500 euro ciascuna) convegno Euchems per i giovani. Il congresso biennale europeo 8th EuChemS Chemistry Congress (ECC8) si terrà a Lisbona dal 30 agosto al 3 settembre 2020. Oltre al convenzionale programma scientifico, includerà un programma interamente dedicato ai giovani chimici organizzato da EYCN <http://www.euchems2020.org/>. EuChemS e la Società Chimica Portoghese mettono a disposizione borse di studio da 500 EUR per studenti di laurea e di dottorato. Le Divisioni SCI bandiranno a breve ulteriori borse per favorire la partecipazione dei Soci Giovani. Scadenza abstract per presentazioni orali: 29 febbraio. Il programma non prevede una sezione dedicata o un coinvolgimento attivo della Divisione Chimica teorica e computazionale europea nell'organizzazione delle sessioni previste per cui il CD non ritiene al momento di dover contribuire con borse stanziare e da mandato al Presidente di acquisire ulteriori informazioni dal Presidente della divisione europea.

## 2. Indicazione dei membri cooptati nel Consiglio Direttivo

Su proposta del Presidente il CD approva ad unanimità la cooptazione nel CD della prof.ssa Giovanna Fronzoni dell'Università di Trieste. Riguardo la possibilità di indicare un secondo membro cooptato, il CD discute dell'opportunità di cooptare un collega proveniente da una sede (Università o CNR) non rappresentata nell'attuale CD. Dopo ampia discussione, il CD ritiene non necessario individuare subito il secondo membro cooptato e incarica il Presidente di compiere le opportune esplorazioni.

## 3. Nomine di Vice-Presidente e Segretario-Tesoriere

Il Presidente propone il prof. Claudio Greco per la carica di Vice Presidente. Il prof. Greco conferma la sua disponibilità e il CD approva ad unanimità.

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

## 4. Attività divisionali nel prossimo Congresso Nazionale SCI 2020 di Milano

Claudio Greco in qualità di delegato della DCTC nel comitato di organizzazione locale del prossimo Congresso Nazionale SCI 2020 informa il CD delle ultime notizie relative all'organizzazione del convegno. Le date sono da domenica 13 a giovedì 17 settembre, sono previste 4 sessioni plenarie e 4 sessioni riservate ai lavori delle singole divisioni. Le assemblee divisionali annuali sono fissate al lunedì 14 mattina.

Il Prof. Greco informa che perviene, da parte dell'organizzazione (nella persona della Prof. Elena Selli) la richiesta a uniformare le borse di partecipazione alla cifra di 260 euro.

Dopo ampia discussione il CD decide di stanziare **6 BORSE** di partecipazione da 260 euro a copertura delle spese di iscrizione e 6 borse di partecipazione di 200 euro. Le borse possono essere cumulative. Una delle borse va al vincitore del premio di Dottorato Del Re.

**Proposte per gli speakers delle sessioni plenarie:**

Il presidente informa che in seguito alla consultazione telematica dei membri del CD avvenuta il 27 gennaio 2020 dal quale erano emersi i seguenti nominativi:

Tim Clark <https://www.chemistry.nat.fau.eu/ccc/groups/clark-group/> (Friedrich Alexander University Erlangen-Nürnberg)

Victor Batista <https://chem.yale.edu/people/victor-batista> (Università di Yale),

Maria Ramos <https://www.fc.up.pt/pessoas/mjramos/index.html> (Università di Porto)

Alan Aspuru-Guzik <https://matter.toronto.edu/>

Sharon Hammes-Schiffer, <https://www.hammes-schiffer-group.org/> (Università di Yale)

Ursula Roethlisberger <https://www.epfl.ch/labs/lcbc/roethlisberger/>

ha sottoposto all'esame degli organizzatori i seguenti nominativi:

Tim Clark - Computational material science

<https://www.chemistry.nat.fau.eu/ccc/groups/clark-group/> (Friedrich Alexander University Erlangen-Nürnberg)

e/o Maria J Ramos Computational Biochemistry (Enzyme catalysis):

<https://www.fc.up.pt/pessoas/mjramos/index.html> (Università di Porto)

Inoltre il presidente, in seguito all'esito della consultazione telematica del CD avvenuta il 27 gennaio 2020, ha segnalato l'interesse della Divisione all'Evento satellite: **Ruolo della Chimica nella produzione e controllo dei farmaci biotecnologici**

Il Prof. Greco informa il CD di essere stato interpellato informalmente dalla Divisione di Elettrochimica per l'organizzazione di una sessione comune estesa anche alla Chimica Fisica.

Il CD, dopo ampia discussione, accoglie con favore la proposta e ritiene opportuno discutere anche con altre divisioni e gruppi inter-divisionali la possibilità di sessioni condivise. A questo proposito, il Prof Greco e Prof. Pavone sono delegati dal CD a mantenere i contatti con la Divisione di Chimica Fisica ed Elettrochimica e la Dott. Mazzone è delegata dal CD a prendere contatti con la Divisione di Chimica Inorganica per l'organizzazione di sessioni comuni su tematiche quali: Interazione teoria ed esperimento nello studio di sistemi complessi.

I proff. Zerbetto e Adamo sono delegati dal CD ad organizzare una bozza del programma per quanto riguarda le due sessioni autonome della divisione, che tra l'altro deve prevedere due/tre comunicazioni su invito per i vincitori dei premi divisionali.

## 5. 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 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 a 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 a 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

Il CD, dopo aver preso visione delle scadenze del Convegno (Invio abstract - 15 Aprile 2020, Comunicazione accettazione contributo - 15 Maggio 2020, Iscrizione congresso senza maggiorazione - 15 Giugno 2020, versamento quota iscrizione dei presentatori - 15 luglio 2020) decide di procedere con la seguente tempistica per la pubblicazione dei bandi dei premi e delle borse di partecipazione:

*27 Febbraio: pubblicazione bandi*

20 Aprile: scadenza domande

1 Giugno: comunicazione vincitori

Il CD delega il Dott. Zerbetto coadiuvato dalla Dott.ssa Mazzone, dal Prof. Stener e dalla Prof. Fronzoni alla preparazione dei bandi delle borse e dei premi divisionali.

Altri premi quali il premio poster e comunicazione orale al congresso e le borse di partecipazione al prossimo congresso SCI saranno discusse alla prossima riunione del CD.

## **6. Varie ed eventuali**

Il CD discute la possibilità di implementare diverse attività di divulgazione della Chimica Teorica e Computazionale quali ad esempio l'organizzazione di workshop tematici e di scuole destinate a studenti di dottorato e giovani ricercatori. Il CD delega il Proff. Adamo e la Dott.ssa Mazzone a preparare una proposta per la prossima riunione del Direttivo per una scuola invernale (da tenersi indicativamente a febbraio) di argomento inorganico-computazionale, e il Dott. Zerbetto una su modelli stocastici.

Altri argomenti da considerare per giornate tematiche e/o scuole invernali sono: machine learning in chimica e Metodi computazionali per il Drug-design (eventualmente in collaborazione con la Divisione di Chimica Farmaceutica)

Inoltre, il CD delega il Dott. Zerbetto alla gestione del sito web della Divisione nel portale della SCI e la Prof. Fronzoni alla gestione della mailing-list.

## **Consiglio Direttivo ristretto**

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

Dopo discussione del profilo di potenziali candidati (Claudio Greco, Michele Pavone, Cristina Puzzarini) il CD ad unanimità incarica il Presidente di procedere all'indicazione dopo aver raccolto i CV (including current job position, key achievements and publications relevant for the nomination) (maximum 1000 characters).

## **Consiglio Direttivo ristrettissimo**

### **1. Candidature per la Medaglie SCI 2020**

#### **“Amedeo Avogadro, Stanislao Cannizzaro, 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 la prof. Vincenzo Barone

#### **“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

Dopo discussione del profilo di potenziali candidati il CD ad unanimità incarica il Presidente di candidare la professoressa Benedetta Mennucci

Avendo esaurito i punti all'ordine del giorno e non essendoci altro da discutere la seduta è tolta alle ore 14:00, del che è verbale.

Bologna, 7 Febbraio 2020

Il Segretario  
Mirko Zerbetto

Il Presidente  
Prof. Maria Cristina Menziani

