

Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 17-09-2024

Il giorno 17 settembre 2024 alle ore 16:00 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, Gloria Mazzone, Nadia Rega, Mirco Zerbetto, Giovanna Fronzoni e il dott. Marco Mendolicchio; assenti giustificate le prof.sse Maria Cristina Menziani e Fabrizia Negri. Partecipa su invito, limitatamente alla discussione del punto 2 del seguente OdG, il prof. Michele Pavone (Università di Napoli Federico II).

Espleta le funzioni di Segretario per la seduta corrente la prof.ssa Fronzoni.

Ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Organizzazione delle attività congressuali della Divisione per il 2025
3. Varie ed eventuali

1. Comunicazioni

Il presidente riferisce del buon esito della sessione divisionale e delle sessioni tematiche del congresso SCI2024 per le quali la DCTC ha avuto un ruolo nella definizione del programma scientifico; ringrazia tutti i membri del C.D. DCTC ed i Soci delegati coinvolti.

2. Organizzazione delle attività congressuali della Divisione per il 2025

Il presidente ricorda che, in occasione della riunione del C.D del 29 aprile, il Consiglio ha convenuto sulla opportunità dell'integrazione tra il Congresso annuale divisionale DCTC e il congresso EuChemS CTC CompChem 2025 che, su proposta della rappresentanza DCTC in EuChemS (prof. Michele Pavone, dott. Marco De Vivo) avrà luogo a Napoli nella seconda settimana di settembre del prossimo anno. Indica che la riunione in corso è funzionale alla definizione di linee di indirizzo condivise per implementare tale integrazione, ed a questo fine invita il prof. Michele Pavone ad aggiornare l'assemblea sullo stato dell'arte riguardo ai preparativi del Congresso. Il prof. Pavone riferisce che il Congresso avrà come tema *Chemical Simulations & Sustainable Chemistry for the Future*; si svolgerà dall'8 al 12 settembre 2025 (cinque giorni), con una mezza giornata di break il 10 settembre per permettere visite organizzate con destinazioni ancora da definire. La sede congressuale sarà il Complesso Monumentale S. Maria La Nova. La proposta approvata nel corso dell'Annual Division Meeting della Computational and Theoretical Chemistry Division di EuChemS del 10 luglio 2024 attribuisce al prof. Pavone il ruolo di Chair del congresso, al prof. Greco e al dott. De Vivo il ruolo di co-Chair, ed ai seguenti colleghi il ruolo di membri del C.O.: prof.ssa Paola Cimino, prof. Orlando Crescenzi, prof.ssa Ana B. Muñoz Garcia, prof.ssa Nadia Rega, dott.ssa Francesca Fasulo, dott.ssa Arianna Massaro, dott.ssa Adriana

Pecoraro, dott. Alessio Petrone. Il comitato scientifico sarà invece formato da delegati EuChemS-DCTC, i quali avranno un ruolo consultivo sulla selezione dei contributi scientifici. Sarà inoltre istituito un International Advisory Committee, riservato a personalità di fama internazionale provenienti da enti di ricerca e dall'industria.

Il C.O. si impegnerà alla ricerca di aziende ed enti che siano interessati a sponsorizzare il Congresso, ed a tal proposito il C.D. DCTC viene invitato a contribuire con proprie proposte; il prof. Pavone specifica che vi saranno tre fasce di sponsorizzazione: Gold (15000 €), Silver (10000 €), Bronze (5000 €). Le quote di iscrizione per i partecipanti saranno in linea con le fee dei più recenti congressi EuChemS-DCTC, con quote ampiamente ridotte nel caso dei Soci giovani; specifiche azioni per favorire la partecipazione della comunità nazionale dei chimici teorici e computazionali potranno essere implementate, di comune accordo col C.D. DCTC.

Sono previste 8 KN lecture su invito e 46 contributi orali; lo spazio per gli inviti a speaker afferenti a sedi nazionali potrà coincidere con i talk relativi ai premi previsti dai bandi DCTC, chiaramente nella misura in cui i premi siano attribuiti dalle commissioni a colleghi che operano nel nostro Paese. Su proposta del dott. De Vivo, sentita anche la dott.ssa Zoe Cournia (EuChemS-DCTC Board), la sessione di venerdì 12/9 del Congresso potrà essere dedicata ai temi del drug discovery e drug design teorico-computazionale.

Viene discussa la possibilità di riservare una giornata del Congresso a contributi provenienti dalla comunità nazionale dei chimici teorici e computazionali; il prof. Pavone nota però che tale soluzione non sarebbe facilmente armonizzabile con l'intenzione di far sì che il Congresso sia un momento di integrazione tra la comunità italiana e quella europea. Infine, spazio per l'Assemblea Divisionale DCTC verrebbe allocato nella giornata di mercoledì 10/9, con previsione di accesso libero per i Soci DCTC, indipendentemente dal fatto che siano iscritti o meno al Congresso.

Il C.D. unanimemente esprime soddisfazione riguardo agli sviluppi riportati dal Prof. Pavone, il quale continuerà a coordinarsi il C.D. della DCTC nell'ambito delle successive fasi di pianificazione delle attività congressuali.

3. Varie ed eventuali

Nessuna

La seduta si chiude alle ore 17:10

Trieste, 17 settembre 2024

Il Segretario
Prof.ssa Giovanna Fronzoni

Il Presidente
Prof. Claudio Greco