

Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 20-11-2024

Il giorno 20 novembre 2024 alle ore 17:00 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, Maria Cristina Menziani, Fabrizia Negri, Mirco Zerbetto, e il dott. Marco Mendolicchio (fino alle ore 17:55); assenti giustificate le prof.sse Nadia Rega e Giovanna Fronzoni.

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

Ordine del giorno:

1. Comunicazioni
2. Attività Divisionali per il 2025
3. X EuChemS Chemistry Congress - contributo DCTC all'avvio dell'organizzazione
4. Varie ed eventuali

1. Comunicazioni

Il presidente ricorda che in data odierna, 20 novembre, è stato aperto il seggio virtuale per l'elezione del nuovo presidente SCI (triennio 2026-2028) e delle rappresentanze in seno al Direttivo del Gruppo Giovani. A tal proposito, chiede ai consiglieri del C.D. DCTC di attivarsi presso le varie Sedi per favorire un afflusso elevato alle urne dei soci DCTC.

2. Attività Divisionali per il 2025

2.1 Organizzazione congresso Euchems CompChem 2025

Il Presidente aggiorna sullo status quo del prossimo congresso di Euchems CompChem 2025 che si terrà a Napoli insieme al congresso annuale della DCTC e con la partecipazione delle European Federation for Medicinal Chemistry (EFMC). Per quanto riguarda le date, a seguito della calendarizzazione dell'evento per la celebrazione dell'ottantesimo compleanno del prof. Michele Parrinello (<https://indico.ictp.it/event/10863>) proprio nelle date originariamente previste per il congresso (tra 8 e 12 settembre), si è prevista la ricalendarizzazione di quest'ultimo; sono stati quindi definiti come giorni congressuali per Euchems CompChem 2025 il 15, 16, 17 e 18 Settembre 2025, dal lunedì al giovedì, quattro giorni pieni.

Il Comitato Organizzatore è composto da: Michele Pavone (Chair), Nadia Rega (Co-Chair), Marco De Vivo (Co-Chair), Orlando Crescenzi, Ana Belen Muñoz Garcia, Paola Cimino, Alessio Petrone, Arianna Massaro, Adriana Pecoraro, Francesca Fasulo, Claudio Greco (presidente SCI-DCTC),

Tanja van Mourik (chair Euchems-DCTC), Nadia Elghobashi-Meinhardt (tesoriere Euchems-DCTC).

Il Comitato Scientifico e' composto dai membri del direttivo Euchems-DCTC e del direttivo SCI-DCTC con il ruolo di advisor nella preparazione e approvazione del programma scientifico del congresso.

Il congresso prevede 6 speakers invitati per Keynote lectures di 40 minuti, di questi 3 saranno a carico del Comitato Organizzatore, 1 a carico della DCTC di Euchems, 1 a carico della DCTC della SCI e 1 a carico della EFMC, dove si intende che la proposta dello speaker fatta da ciascuno corrisponde poi alla copertura dei costi di viaggio e alloggio. Facendo seguito a una serie di contatti intercorsi tra il Presidente e tutti i consiglieri nei giorni precedenti la riunione oggetto di questo verbale, il CD discute le possibili prospettive per contribuire alla definizione della lista di keynote speaker, nei termini sopra descritti, e conviene nel dar mandato al Chair di contattare il prof. Filippo De Angelis per estendergli l'invito a tenere una Keynote lecture.

Il congresso inoltre prevede 15 Invited Lectures di 25 minuti e 40 Oral contributions di 12 minuti, inoltre 30 poster saranno selezionati per Flash talk di 3 minuti. Questo oltre alla sessione dei premi dove ci saranno le invited previste per i premiati.

Durante il congresso si prevede di organizzare due Round Tables, una su Quantum Computing e un'altra su Digital Discovery, queste due tavole rotonde saranno una piattaforma per confrontarsi con le prospettive di sviluppo hardware e software nell'ambito del quantum computing e dell'intelligenza artificiale applicata al discovery e design di drugs e di materiali avanzati.

Lo slot previsto per l'assemblea divisionale annuale è per Mercoledì 17 settembre alle ore 17, lo stesso giorno è poi prevista la cena sociale alle 20:00.

Le quote di iscrizione saranno molto simili allo scorso congresso Euchems e sono:

Membri SCI-Euchems 500 euro (early registration) 650 (late registration)

Studenti SCI-Euchems 350 euro (early registration) 500 (late registration)

Le quote includono oltre alla registrazione e a tutto il materiale del congresso, anche due coffee-break e un lunch a buffet al giorno, ma è esclusa la cena sociale e sarà prevista una quota extra (70 euro) da selezionare in fase di registrazione. Come da richiesta del C.D. DCTC, si prevede che ci sarà anche la possibilità di iscrizioni giornaliere, ma sarà definita solo dopo la stesura del programma e quindi dopo la deadline per l'early registration.

Infine, a breve sarà disponibile una pagina web con le prime info del convegno.

Il C.D. esprime soddisfazione riguardo agli sviluppi riportati dal Presidente, il quale continuerà a contribuire al coordinamento tra C.D. DCTC e Chair.

2.2 X EuChemS Chemistry Congress - contributo DCTC all'avvio dell'organizzazione

Il Presidente comunica che il prossimo EuChemS Chemistry Congress (ECC10) si terrà ad Anversa dal 12 al 16 luglio 2026. Il Prof. Javier García-Martínez, Chair dello Scientific Committee, ha avviato una consultazione dei working parties, dell'EYCN e delle Società che fanno parte di EuChemS. Tra le richieste fatte alla Sede Centrale SCI, girate poi dal Presidente Farinola alle Divisioni SCI, vi è la

richiesta di suggerimenti e proposte in merito a speaker, temi scientifici, subtemi e possibili membri del comitato scientifico, da far pervenire a stretto giro (22 novembre p.v.). Il Presidente si riserva di proporre ai consiglieri del C.D. una prima rosa di nomi per possibili speaker per il congresso, da discutere e integrare e su cui eventualmente convergere entro il termine sopra indicato. Il C.D., anche sulla base del notevole successo della sessione riguardante l'uso dell'A.I. in chimica computazionale al congresso SCI 2024 di Milano, valuta la possibilità di proporre il tema "A.I. in chemistry" (subtema: A.I. and theoretical methods). Il C.D., unanime, conviene sull'opportunità di indicare al presidente Farinola tale proposta, contestualmente indicando il Prof. Enrico Bodo ai fini della composizione del comitato scientifico in formazione.

2.2 Organizzazione Scuole DCTC

Il prof. Greco ricorda che è in corso di pianificazione una Scuola sul trattamento teorico di biomolecole, a cura delle prof.sse Daidone e Mazzone; in particolare, si sta convergendo sull'idea di focalizzare la Scuola sul tema degli approcci QM/MM in biomolecole; nell'ipotesi che la Scuola si possa tenere a Roma (sede particolarmente conveniente da vari punti di vista, tra i quali quello logistico e di disponibilità di spazi e risorse utili alle attività didattiche), 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. Viene ricordato che nel corso del 2025 si svolgerà a Roma il Giubileo, con notevoli impatti previsti su disponibilità di alloggi e sul loro costo. Si conviene quindi di individuare come periodo indicativo preferenziale per lo svolgimento della Scuola la fine del mese di Gennaio del 2026.

3. **Varie ed eventuali**

Il prof. Bodo aggiorna il Direttivo riguardo alle attività in corso di programmazione nell'ambito del Gruppo Interdivisionale per l'Accumulo e la Conversione elettrochimica dell'energia (ACee); diverse sono le attività già calendarizzate e/o in corso di definizione:

- (i) First National Conference of ACee - Padua, 11-13 June 2025
- (ii) Educational Learning Modules on Li-ion Batteries (ELMO-LION), 3rd PhD Educational Summer School, Padua 28th July - 1st August
- (iii) International School of Electrocatalysis of ACee (SCI) in 2025 ISECAT2025

Le date dell'ultima iniziativa nel precedente elenco verranno definite nelle prossime riunioni del Direttivo ACee.

Il Presidente pone all'attenzione del CD una questione relativa ai futuri bandi per premi DCTC; a tal proposito, ricorda che nei bandi per i premi dell'anno corrente, il CD aveva deciso di introdurre, a differenza dei bandi degli anni precedenti, una specifica previsione di esclusione dalla possibilità di partecipare ai bandi per i membri in carica del CD medesimo. L'esclusione dalla partecipazione ai predetti bandi dei membri del CD DCTC era stata esplicitata anche in funzione della scelta del CD in carica e dei precedenti di cooptare il membro del Direttivo del Gruppo Giovani SCI, in una logica di trasparenza e linearità delle politiche implementate del Direttivo DCTC, nell'ambito dell'autonomia garantita dal Regolamento generale della SCI. In tale contesto e in ottica futura, il Presidente nota che sta per entrare in vigore una modifica del Regolamento generale della SCI, che rende membri di diritto dei CD delle Divisioni i membri eletti del Direttivo del Gruppo Giovani, soci effettivi delle Divisioni medesime. Il Presidente pone quindi ai membri del CD DCTC il tema dell'attualità della previsione di esclusione dai bandi per i premi DCTC dei membri del CD, data anche l'istituzione della predetta nuova figura di diritto di Consigliere del CD DCTC; la partecipazione dei giovani colleghi alle attività della Divisione va senz'altro incoraggiata ed ha cruciale rilevanza per la Divisione, e d'altro canto il Presidente ritiene che impedire l'accesso ai bandi specialmente in fase di

inizio carriera possa rappresentare un elemento che rende l'impegno di soci giovani entro la DCTC e la SCI in generale meno attrattivo. Si apre un'ampia discussione tra i Consiglieri, che pone l'accento sulla necessità di soppesare gli aspetti messi in evidenza dal Presidente – di notevole rilevanza – con quelli pure rilevanti e relativi alla assicurazione di evitare conflitti di interesse entro il CD. Il Presidente, recepite le osservazioni del Consiglieri, propone al CD un suo intervento diretto sui testi dei bandi già nei primi mesi del prossimo anno, tenendo anche conto della criticità da lui rappresentata e condivisa col CD relativa all'universalità dell'esclusione dai bandi per i premi finora prevista, ciò al fine di pervenire a modifiche che saranno oggetto di future discussioni e delibere in vista dell'istituzione dei premi DCTC 2025.

La seduta si chiude alle ore 18:20

Modena, 20 novembre 2024

Il Segretario
Prof.ssa Maria Cristina Menziani

Il Presidente
Prof. Claudio Greco