

Verbale della Riunione del Consiglio Direttivo DCTC del 22 e 29-04-2024

I giorni 22 alle ore 11:00 e 29 aprile 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), convocato dal Presidente Prof. Claudio Greco.

Sono presenti i consiglieri proff. Enrico Bodo, Isabella Daidone, Gloria Mazzone, Fabrizia Negri (solo il 22/4), Nadia Rega, Mirco Zerbetto, Giovanna Fronzoni (Segretario-tesoriere), Maria Cristina Menziani (solo il 29/4) e il dott. Marco Mendolicchio (solo il 22/4).

Ordine del giorno:

- 1) Comunicazioni;
- 2) Bilancio preventivo 2024;
- 3) Attività della Divisione: andamento iscrizioni, premi, borse e altre iniziative;
- 4) Organizzazione delle attività DCTC al Congresso SCI-2024;
- 5) Varie ed eventuali.

1. Comunicazioni

Il presidente comunica che il congresso SCI2024 sta avendo un notevole successo in termini di iscrizioni, a tal punto che il C.O. ha dovuto introdurre un cap massimo di iscrizioni previste (2500), con contestuale chiusura delle iscrizioni a singola giornata congressuale per il personale con afferenza non industriale.

2. Bilancio preventivo 2024

Il Tesoriere (Prof. Fronzoni) comunica che il saldo iniziale al 4.01.2024 è pari a 17668,85 euro e illustra il bilancio preventivo 2024.

Si considera una sola entrata pari a 380 euro, relativa alle iscrizioni residue (relative al mese di gennaio) alla scuola SMS (Stochastic Models and Simulations)-2024 organizzata dal Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Padova. Globalmente le entrate della scuola (iscrizioni) sono state pari a 1100 euro mentre le uscite (relative al catering), più sotto contabilizzate, ammontano a 896,01 euro: gli utili relativi alla scuola sono quindi pari a 203.99 euro

Le uscite attualmente previste per il 2024 ammontano a 8836,01 euro, ripartite come segue:

- spese bancarie : stima pari a 170 euro;
- spese catering della scuola SMS-2024 : 896,01 euro

- quote di iscrizione alla SCI per il 2024 (vincitori premi DCTC 2023) : 200 euro
- quote di iscrizione alla SCI per il 2024 (rimborso iscrizione Congresso Pisa 2023): 110 euro;
- Premi Roetti e Scrocco : 800 euro (medaglia e targa : 300 euro; premio Roetti : 500 euro);
- Premio del Re : borsa di studio di 250 euro (a parziale copertura delle spese di missione per il Congresso SCI-Milano 2024);
- 11 borse di partecipazione al Congresso SCI - Milano 2024 da 310 euro ciascuna, per un totale di 3410 euro;
- 3 borse di partecipazione al Congresso EuChemS - CompChem 2024 da 350 euro ciascuna, per un totale di 1050 euro.
- rimborso spese di partecipazione al Congresso SCI - Milano 2024 degli invited speakers della DCTC : 1950 euro

Si prevede quindi un saldo cassa al 31.12.2024 pari a 9232,16 euro.

Il CD approva all'unanimità il bilancio preventivo 2024.

3. Attività della Divisione: andamento iscrizioni, premi, borse e altre iniziative

Andamento iscrizioni

L'andamento delle iscrizioni mostra il consolidamento di un trend positivo: al 21/4 i Soci DCTC effettivi sono 166; la somma dei soci effettivi ed aderenti è pari a 222. Il presidente esprime soddisfazione riguardo a questo quadro complessivo e ringrazia i membri del C.D. per l'impegno profuso nel pubblicizzare presso la comunità dei chimici teorici e computazionali la rilevanza della partecipazione attraverso l'adesione alla DCTC.

Premi e borse

Nella riunione del 22 aprile 2024 il Presidente propone di costituire delle commissioni di membri del direttivo con il compito di individuare i vincitori per ogni premio. Con previsione di impegnare ciascun consigliere in non più di una commissione, considerati i candidati e dopo aver verificato l'assenza di conflitti di interessi tra candidati e membri delle commissioni costituenti, si propongono le seguenti commissioni:

Premio Roetti: (n.domande ricevute 5): Bodo, Zerbetto;

Premio Scrocco: (n.domande ricevute 5): Negri, Daidone;

Premio Del Re: (n.domande ricevute 2): Mendolicchio e Greco;

Premio Nordio: (n.domande ricevute 8): Mazzone, Fronzoni.

Per quanto riguarda il bando per le 3 borse di partecipazione al congresso EuChemS2024, sono state ricevute 3 domande (dott. Emanuele Casali, dott. Alessandro Azzali, dott.ssa Francesca D'Ambrosio); considerata l'ottima qualità dei CV dei candidati, si ritiene opportuno assegnare le 3 borse disponibili ai suddetti candidati.

Il CD aggiorna al 29 aprile ore 17:00.

Il CD, dopo aver valutato le domande secondo i criteri enunciati dai bandi propone i seguenti vincitori (Allegati 1-4):

Premio Roetti: Enrico Ronca;

Premio Scrocco: Giovanni Di Liberto;

Premio Del Re: Francesca Fasulo e Stefano Scoditti, *ex aequo*;

Premio Nordio: Davide Barbiero;

Il Presidente procederà alla comunicazione delle motivazioni ai vincitori.

Altre Iniziative

Il presidente segnala che è in fase di definizione la sede per il congresso EuChemS CTC CompChem 2025, con candidatura proposta da parte della rappresentanza DCTC in EuChemS (prof. Michele Pavone, dott. Marco De Vivo). Qualora quest'ultima candidatura avesse successo, il congresso europeo avrebbe luogo a Napoli; lo sviluppo della proposta ha coinvolto anche la prof.ssa Rega. Il presidente segnala la possibilità, discussa anche con il presidente SCI in una recente missione presso la Sede centrale insieme col prof. Pavone, di tenere il congresso DCTC 2025 contestualmente al congresso EuChemS. La prof.ssa Rega conferma che tale soluzione è pienamente sostenibile in termini di risorse strutturali disponibili. Il presidente sottolinea che organizzare i due momenti congressuali in modo contestuale rappresenterebbe un'occasione notevole di integrazione tra le comunità nazionale ed europea dei chimici teorico-computazionali. Il C.D. conviene sull'opportunità di tale integrazione ed invita il presidente a perseguire questo obiettivo, in collaborazione con la rappresentanza DCTC in EuChemS.

4. Organizzazione delle attività DCTC al Congresso SCI-2024

Il presidente comunica che entro il 30 aprile devono essere definite le attività divisionali nell'ambito del congresso SCI-2024, che si terranno giovedì 29/8 per tutte le Divisioni; comunica inoltre che il C.O., per quanto riguarda le presentazioni orali, ha deciso di assegnare 24 slot da 15' ai contributi inviati alla DCTC nell'ambito del programma della giornata del 29/8. Il Presidente propone di individuare una commissione che assegni i contributi orali (in base ai titoli e agli abstract) alla sessione divisionale DCTC e propone di includere in tale commissione tutti i consiglieri nominati e cooptati. Il presidente propone inoltre per se stesso e per il past-president un ruolo di armonizzazione ed integrazione delle proposte provenienti dalla commissione, tenuto conto degli esiti dell'assegnazione dei premi Del Re, Scrocco e Roetti, e delle selezioni degli abstract nell'ambito delle sessioni tematiche interdivisionali che comporranno il programma congressuale nella giornata di mercoledì 28/8.

5. Varie ed eventuali

Nessuna

La seduta si chiude alle ore 18:30

Trieste, 29 aprile 2024

Il Segretario
Prof.ssa Giovanna Fronzoni

Il Presidente
Prof. Claudio Greco