

GRUPO / SECCIÓN TERRITORIAL DE **QUÍMICA Y COMPUTACIÓN** / Nº SOCIOS: (lo completa la Secretaría Técnica)

Indicar las actividades realizadas durante el año 2020, indicando si es una actividad propia (AP) o un patrocinio (PT) de otra actividad no directamente organizada por el Grupo o Sección Territorial. Indicar también la difusión que se le ha dado a dichas actividades y número de participantes.

La grave situación sanitaria provocada por la pandemia de Covid 19, ha provocado que la mayoría de los congresos y ayudas previstos para ser convocados este año hayan sido cancelados. No obstante, se han podido llevar a cabo las siguientes acciones:

- **(AP)** III Convocatoria **“Premio a los dos mejores artículos en el área de Química y Computación” publicados en el año 2020**, dirigidos a investigadores pre- y postdoctorales y dotados con 800 (primer premio) y 500 € (segundo premio) para cada una de las dos categorías establecidas: A. Investigadores Predoctorales y B. Investigadores Postdoctorales. Estos premios se resolverán en la primera mitad de 2021.
- Organización del Simposio **“Computers in Chemistry: From Calculations on Complex Systems to Automated Predictions (COMPChem)”**, dentro de los actos de la XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, que estaba prevista celebrar en Granada del 28 de junio al 2 de julio de 2021. Los co-organizadores de dicho simposio son *Inés Corral (tesorera GEQC)* y *Gonzalo Jiménez-Osés (secretario GEQC)*.
- **(PT)** Compromiso de co-financiación de 7 simposios temáticos (**3500 €** ofrecidos en total) propuestos para la XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, que estaba prevista celebrar en Granada del 28 de junio al 2 de julio de 2021:
 - *Computers in Chemistry: From Calculations on Complex Systems to Automated Predictions (COMPChem)*
 - *Electrocatalysis for Renewable Energy Conversion*
 - *The Chemistry of Emerging Porous Materials*
 - *Materials for Energy*
 - *Sustainable Chemistry for Emerging Energy Technologies*
 - *Catalysis for the Production of Sustainable Fuels and Chemicals: Experimental and Computational Approaches*
 - *La Química Supramolecular en la Frontera de las Ciencias Moleculares, de Materiales y Biológicas*
- **(AP)** Mantenimiento de la **página web del GEQC** (<https://quimcomp.wordpress.com>), que será próximamente migrada al servidor y formato general de la RSEQ, y perfiles en las redes sociales (Twitter y Facebook, >200 seguidores). Estos canales se utilizan para publicar noticias del grupo, ofertas de trabajo, convocatorias de premios, etc.

No usar más de **dos** páginas.

GRUPO / SECCIÓN TERRITORIAL DE **QUÍMICA Y COMPUTACIÓN** / Nº SOCIOS: (lo completa la Secretaría Técnica)

Para el año 2021 se han planificado las siguientes actividades (indicar si es AP o PT):

- **(AP)** Organización de la **I Reunión del GEQC**. Ante las circunstancias acaecidas y ante la imposibilidad de celebración de reuniones co-organizadas con otros grupos y asociaciones de manera presencial, dicha reunión se celebrará de manera telemática. La reunión se organizará en forma de seminarios online que contarán con conferencias a cargo de los galardonados en ediciones anteriores de nuestros *“Premios a los mejores artículos en el área de Química y Computación”*, tanto en categorías postdoctoral como predoctoral, junto con conferencias invitadas a cargo de investigadores de reconocido prestigio internacional.

En dicha reunión se celebrará la Junta Ordinaria de Gobierno del GEQC

- **(AP)** IV Convocatoria **“Premio a los mejores artículos en el área de Química y Computación” publicados en el año 2020**, dirigidos a investigadores pre- y postdoctorales.
- **(AP)** I Convocatoria de Ayudas para Asistencia a Congresos a cargo de miembros del GEQC. Dichas ayudas podrán ser solicitadas por todos los miembros del Grupo que asistan a cualquier reunión científica a lo largo de 2021, si bien se valorarán preferentemente las solicitudes de miembros jóvenes. De manera preferente se concederán becas a los miembros más jóvenes del grupo para asistir a eventos organizados por el GEQC.
- **(PT)** Se tendrán en consideración solicitudes para la financiación de reuniones, workshops y escuelas organizadas por miembros del grupo GEQC. En función de la demanda y disponibilidad económica, se considerará la posibilidad de lanzar una convocatoria con este fin en el próximo año.
- **(AP)** Continuar el mantenimiento y actualización de nuestra página web, así como seguir mejorando nuestra presencia en redes sociales y las actividades a captar nuevos miembros para el grupo.

Firma del Presidente del Grupo/Sección Territorial



Ignacio Tuñón García de Vicuña

Presidente Grupo Especializado en Química y Computación

No usar más de **una** página.