

## GRUPO ESPECIALIZADO / SECCIÓN TERRITORIAL DE QUÍMICA Y COMPUTACIÓN

### MEMORIA DE ACTIVIDADES AÑO 2021

Indicar las actividades realizadas durante el año 2021, 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, el número de participantes y la periodicidad del evento (bienal, anual, ocasional). **Máximo dos páginas.**

La 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)** Organización del **I Simposio Virtual GEQC-RSEQ** celebrado de manera telemática a través de la plataforma Zoom durante el 17 y 18 de Junio de 2021. Durante dicho simposio se impartieron conferencias invitadas a cargo de los 8 premiados en las distintas convocatorias de premios organizadas por el Grupo desde su constitución, y conferenciantes de reconocido prestigio como los profesores K. N. Houk (University of California, Los Angeles), José Elguero (Consejo Superior de Investigaciones Científicas) y Juan Bertrán (Universidad Autónoma de Barcelona). Asimismo, se impartieron 15 comunicaciones flash. La asistencia promedio al Simposio fue de unos 60 participantes, alcanzándose máximos en torno a 80 participantes. En dicha reunión se celebró, también de manera telemática, la Junta Ordinaria de Gobierno del GEQC.

**(AP)** III Convocatoria **“Premio a los mejores artículos en el área de Química y Computación” publicados en el año 2020**, dirigidos a investigadores pre- y postdoctorales y dotados con 800 € (2 primeros premios) y 500 € (dos segundos premios) para cada una de las dos categorías establecidas: A. Investigadores Predoctorales y B. Investigadores Postdoctorales. A dichos premios se presentaron un total de 7 candidaturas.

**(AP)** I Convocatoria **“Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional**, dotados con 800 € (primer premio) y 500 € (segundo premio). A dichos premios se presentaron un total de 11 candidaturas.

**(AP)** Migración y mantenimiento de la **página web del GEQC** (<https://geqc.rseq.org>), en el servidor y formato general de la RSEQ, y perfiles en las redes sociales (Twitter y Facebook, >250 seguidores). Estos canales se utilizan para publicar noticias del grupo, ofertas de trabajo, convocatorias de premios, etc.

## PLAN DE TRABAJO AÑO 2022

Indicar las actividades planificadas para el 2022, reflejando si son AP o PT. **Máximo una página.**

Para el año 2022 se proponen las siguientes actividades, cuya ejecución estará supeditada a su posibilidad de materialización según la situación sociosanitaria y disponibilidad económica:

**(AP)** Organización de la **II Reunión del GEQC** en el marco del 12<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2022) en Vigo, entre el 21 y el 24 de Junio de 2022. La reunión contará 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 2021**, dirigidos a investigadores pre- y postdoctorales.

**(AP)** II Convocatoria **“Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional**.

**(AP)** Organización del **Simposio “Computers in Chemistry”, dentro de los actos de la XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**, a celebrar en Granada del 27 de junio al 30 de julio de 2022. Los co-organizadores de dicho simposio son *Inés Corral (tesorera GEQC)* y *Gonzalo Jiménez-Osés (secretario GEQC)*.

**(PT)** Compromiso de co-financiación de diversos simposios temáticos dentro de los actos de la XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, a celebrar en Granada del 27 de junio al 30 de julio de 2022.

**(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 2022, 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.

Dentro de este programa de ayudas, se destinará una parte significativa a financiar la asistencia de investigadores jóvenes a la XXXVIII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, a celebrar en Granada del 27 de junio al 30 de julio de 2022.

**(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.