

GRUPO ESPECIALIZADO EN QUÍMICA Y COMPUTACIÓN (GEQC)

MEMORIA DE ACTIVIDADES AÑO 2022

Indicar las actividades realizadas durante el año 2022, 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.**

Durante 2022 se han llevado a cabo las siguientes acciones:

(AP) Organización de la **II Reunión del GEQC** en el marco del 12th Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2022, Vigo, 2022).

(AP) Organización del Simposio **“Computers in Chemistry: From Calculations on Complex Systems to Automated Predictions (COMP-CHEM)”**, en la XXXVIII Reunión Bienal RSEQ (Granada, 2022), a cargo de *Inés Corral* (tesorera GEQC) y *Gonzalo Jiménez-Osés* (secretario 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 y dotados con 800 € para cada una de las dos categorías establecidas: A. Investigadores Predoctorales y B. Investigadores Postdoctorales. A dichos premios se presentaron un total de 9 candidaturas.

(AP) II Convocatoria **“Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional**, dotado con 800 €. A dichos premios se presentaron un total de 6 candidaturas.

(PT) Co-financiación de 4 simposios temáticos en la XXXVIII Reunión Bienal RSEQ (Granada, 2022): S2. *Catálisis en Química Sostenible*; S3. *Materiales para Energía*; S5. *Computadoras en Química*; S11. *Nuevos Sistemas Funcionales Autoensamblados*.

(PT) **Financiación de 8 cuotas de inscripción a la XXXVIII Reunión Bienal RSEQ** (Granada, 2022) para miembros jóvenes del Grupo.

(PT) Patrocinio de la Escuela “School on High-Performance Multilayer Molecular Dynamics Approaches”, organizada por *Inés Corral* (tesorera GEQC) y *Juan José Nogueira*.

(AP) 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, 600 seguidores). Estos canales se utilizan para publicar noticias del grupo, ofertas de trabajo, convocatorias de premios, etc.

PLAN DE TRABAJO AÑO 2023

Indicar las actividades planificadas para el 2023, reflejando si son AP o PT. **Máximo una página.**

Para el año 2023 se proponen las siguientes actividades, cuya ejecución estará supeditada a su posibilidad de materialización según la situación sociosanitaria y disponibilidad económica:

(AP) Organización del **Simposio "Reactividad química: métodos computacionales y aplicaciones"**, dentro de los actos de la XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, a celebrar en Zaragoza del 25 al 29 de junio de 2023. Los co-organizadores de dicho simposio son *Carmen Rovira Virgili* y *Marcel Swart* (*vicepresidentes GEQC*).

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

(AP) V Convocatoria **"Premio a los mejores artículos en el área de Química y Computación" publicados en el año 2022**, dirigidos a investigadores pre- y postdoctorales.

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

(PT) Compromiso de co-financiación de un máximo de tres simposios temáticos dentro de los actos de la XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, a celebrar en Zaragoza del 25 al 29 de junio de 2023.

(AP) 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 2023, 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 XXXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química, a celebrar en Zaragoza del 25 al 29 de junio de 2023.

(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) Convocatoria de elecciones para la renovación parcial de la Junta de Gobierno del GEQC.

(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.