

GRUPO ESPECIALIZADO EN QUÍMICA Y COMPUTACIÓN (GEQC)

Nº de miembros: 230

MEMORIA DE ACTIVIDADES AÑO 2023

Indicar para cada actividad (PT) realizada durante el año 2023, los organizados por el Grupo o por la Asociación (AP) 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 2023 se han llevado a cabo las siguientes acciones:

(AP) Organización del Simposio **“S13. Reactividad química: métodos computacionales y aplicaciones – ChemReact”**, en la XXXIX Reunión Bienal RSEQ (Zaragoza, 2023), a cargo de *Carme Rovira y Marcel Swart (vicepresidentes 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 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 10 candidaturas.

(AP) III Convocatoria **“Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional**, dotado con 800 €. A dichos premios se presentaron un total de 12 candidaturas.

(AP) I Convocatoria de **Ayudas para la Organización de Eventos Científicos del Grupo Especializado en Química y Computación**, dotada con 1500 €. A dicha convocatoria se presentaron un total de 8 propuestas.

(AP) Elecciones para la renovación parcial de la Junta de Gobierno del GEQC. Se han renovado los cargos de Presidenta (*Carme Rovira Virgili*), Vicepresidente (*Josep Maria Poblet Rius*), Secretario (*Gonzalo Jiménez Osés*) y Vocal (Vocal: *Antonio Márquez Cruz*).

(PT) Co-financiación de 3 simposios temáticos en la XXXIX Reunión Bienal RSEQ (Zaragoza, 2023): *S2. Materiales Avanzados Disruptivos: Síntesis, Propiedades y Aplicaciones – DisMATER*; *S13. Reactividad química: métodos computacionales y aplicaciones – ChemReact*; *S14. Química Biológica Inorgánica y Orgánica (BIOChem) – BIOChem*.

(PT) **Financiación de 10 cuotas de inscripción a la XXXIX Reunión Bienal RSEQ (Zaragoza, 2023)** para miembros jóvenes del Grupo (8 predoctorales y 2 postdoctorales).

(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 2024

Indicar las actividades planificadas para el 2024, reflejando si son AP o PT. **Máximo una página.**

Para el año 2024 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 **III Reunión del GEQC** en el marco del 13th Congress on Electronic Structure Principles and Applications (ESPA2024, Tarragona, 2024).

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

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

(AP) II Convocatoria de **Ayudas para la Organización de Eventos Científicos del Grupo Especializado en Química y Computación**.

(PT) Patrocinio de la Escuela *“Cheminformatics, automation, and machine learning in chemistry: from fundamental concepts to emerging techniques”*, organizada por Juan Vicente Requena (Universidad de Zaragoza).

(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 2024, 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.

(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.