

# NKS faggruppe for teori og modellering



Generalforsamlingen, Trondheim 12.11.24

## Referat

1. Årsberetningen  
Lederen for faggruppen presenterte årsberetningen. Presentasjonen vedlagt dette dokumentet
2. Medlemstall  
Faggruppen har nådd 97 medlemmer. Det høyeste tallet siden gruppen ble opprettet.
3. EUChemS  
Faggruppen velger en representant til EUChemS på vegne av NKS. Espen Sagvolden er valgt som EUChemS representant
4. Aktiviteter: årsmøte, ZOOM foredrag  
Faggruppens aktiviteter består hovedsakelig av et årlig høstmøte. Generalforsamlingen avholdes i forbindelse med dette møtet.
5. Budsjett for 2024 og regnskap for 2023  
Regnskap for 2023 ble godkjent av generalforsamlingen. Budsjettet for 2024 ble vedtatt. Faggruppen har i de siste årene hatt større utgifter enn inntekter, men vil i nærmere fremtid være nødt til å revidere modellen for å få økonomien i balanse igjen.
6. Generalforsamlingen godkjenner forslaget om det nye styret  
Sammensetning av det nye styret ble enstemmig vedtatt. Styret er dermed:
  - **Styreleder: Thomas Bondo Pedersen (UiO, på valg 2024-2026)**
  - **Nestleder: Bjørn Olav Brandsdal (UiT, på valg 2024-2025)**
  - Kasserer: Ida-Marie Høyvik (NTNU, ikke på valg 2023-2025)
  - Sekretær: Espen Sagvolden (SINTEF, ikke på valg 2023-2025)
  - **Medlem: Marco Foscato (UiB, på valg 2024-2026)**
  - Medlem: Magnus Ringholm (UiT, ikke på valg 2023-2025)
  - **Vara: Abril Castro (UiO, på valg 2024-2026)**
  - Vara: Sarai Folkestad (NTNU, ikke på valg 2023-2025)
  - Revisor: Per-Olof Åstrand (NTNU, ikke på valg 2023-2025)
  - Valgkomiteen
  - Trygve Helgaker (UiO, 2023-2025)
  - **Vidar R. Jensen (UiB, 2024-2026)**
7. Neste årsmøte  
Styret fikk mandatet til å definere tid og sted for det neste høstmøtet.

Referent

Luca Frediani  
Bondo Pedersen

KassererStyreleder

Ida-Marie Høyvik

Thomas

Vedlegg: presentasjonen fra styrelederen.

PER-OLOF ÅSTRAND



# NKS Faggruppe for Kvantekjemi og Modellering

---

Årsberetning 2024

# Agenda

---

Årsberetning

---

Regnskap

---

Valg til styret

---

Eventuelt

# A little history

---

- Established in 2008 on the initiative of CTCC (predecessor of Hylleraas)
- Now one of the largest divisions of NKS
  - 2024: 97 members
  - 2023: 88 members
  - 2022: 89 members
  - 2021: 74 members
- Main activities:
  - Annual meetings organized by UiB, NTNU, UiT, UiO
  - Online (e.g., zoom) seminars, organized by UiB, NTNU, UiT, UiO
  - Represents Norway in EUChemS-DCTC

# (Almost) new activity!

---

- NKS publishes the magazine “Kjemi” (bimonthly)
- Editorial board from early 2023
  - Leaders of the sections (or other representative)
  - Each section is expected to contribute (at least) 1 article per edition
  - Level: dissemination to fellow chemists
- Board members: encourage local members to contribute!

# Another “new” activity!

---

- Digital seminars within the section
  - Can be part of ordinary local seminar series
- Local or international researchers in theoretical chemistry
- Started in Oslo on November 10, 2023
  - Prof. Marcel Swart, University of Girona, Spain (invited by the Young Researcher Parliament at Hylleraas in Oslo)
  - Next up:
    - UiB (spring 2024)
    - NTNU (fall 2024)
    - UiT (spring 2025)





# European Chemical Society (EUChemS)

---

- Board member of EUChemS Division for Computational and Theoretical Chemistry, representing NKS: Espen Sagvolden, SINTEF
- The last two years, EUChemS-DCTC's main activity has been the bi-annual CompChem conference and the awards awarded by the division. CompChem2023 was held in Thessaloniki (Greece) in August 2023. During the conference, the Walter Thiel-Award for the beginning of a promising scientific career was awarded to Felix Plasser (Loughborough University), and the lifetime-achievement award Professor Hans Lischka (Vienna). The conference was well attended by Norwegian students.
- The premier activity in 2024 was ECC9 in Dublin, where Odile Eisenstein (UiO) was plenary speaker.
- CompChem 2025 will be held in Naples (Italy) September 15-18,2025.



# 22. Landsmøte i Kjemi, UiO, 17-18 juni 2024

---

- Co-organizer from “Faggruppen”: Michele Cascella, UiO
- 3 lectures on theoretical and computational chemistry
  - Matteo dal Peraro, EPFL:  
Single-molecule sensing with aerolysin pore-forming toxin
  - Nathalie Reuter, UiB:  
Mechanisms of peripheral protein-membrane interfacial events: what can simulations teach us?
  - Sigbjørn Løland Bore, UiO:  
Realistic phase diagram of water from first principles





# Economy

<b>NORSK KJEMISK SELSKAP</b>			
Faggruppe for Kvantekjemi og modellering			
<b>Resultatregnskap for perioden 01.01.-31.12.</b>		<b>2023</b>	<b>2022</b>
<b>Inntekter</b>	<b>Note</b>		
Tilskot frå NKS		6 600	6 475
Deltakaravgift, haustmøte			72 720
Tilskot frå Hylleraas	2	28	19842
Renter			0
<b>Sum inntekter</b>		<b>6 628</b>	<b>99 037</b>
<b>Kostnader</b>			
Haustmøte, deltakarkost + bankett			93 646
Eksterne foredragshaldarar			14 951
Ymse, haustmøte			3 807
Tilskudd til NKS haustmøte Sundvolden	1	40 000	
omkostninger		2	100
<b>Sum kostnader</b>		<b>40 002</b>	<b>112 504</b>
<b>Årets resultat</b>		<b>-33 374</b>	<b>-13 467</b>

# Economy

NORSK KJEMISK SELSKAP				
Faggruppe for Kvantekjemi og modellering				
BALANSE PR 31.12.		Note	2023	2022
<b>Eiendeler</b>				
<b>Betalingsmidler</b>				
DnBNOR, konto 1503.07.00632			136 805	150 021
<b>Sum betalingsmidler</b>			136 805	150 021
<b>Kortsiktige fordringer</b>				
Tilskot frå Hylleraas				19842
<b>Sum kortsiktige fordringer</b>				19 842
<b>Sum eiendeler</b>			136 805	169 863
<b>Gjeld og egenkapital</b>				
<b>Kortsiktig gjeld</b>		1	-40 000	-39 684
				-39 684
<b>Egenkapital</b>				
Egenkapital			136 805	169 863
<b>Sum gjeld og egenkapital</b>			96 805	130 179
<b>Sted, dato</b>				
Trondheim 31.01.2024				Trondheim 31 Jan 2024
Ida Marie Høyvik				Per Olof Åstrand
Kasserer				Revisor

# Economy

NORSK KJEMISK SELSKAP				
Faggruppe for Kvantekjemi og modellering				
Resultatregnskap for perioden 01.01.-31.12.		2024 (hittil)	2023	
Inntekter	Note			
Tilskot frå NKS		6 600	6 600	
Deltakaravgift, haustmøte		109200		
			28	
Renter			0	
<b>Sum inntekter</b>		115 800	6 628	
Kostnader				
Haustrmøte, deltakarkostnad + bankett		109200		
Eksterne foredragshaldarar, Landsmøte i Kjemi		13757		
EuChems		22880		
Tilskudd til NKS haustmøte Sundvolden	1		40 000	
omkostninger			2	
<b>Sum kostnader</b>		145 837	40 002	
<b>Årets resultat</b>		-30 037	-33 374	

# Board

- **Leader: Thomas Bondo Pedersen (UiO, election 2024-2026)**
- **Deputy leader: Bjørn Olav Brandsdal (UiT, election 2024-2025)**
  - Replaces Giovanni Occhipinti (UiB)
- Treasurer: Ida-Marie Høyvik (NTNU, 2023-2025)
- Secretary: Espen Sagvolden (SINTEF, 2023-2025)
- **Member: Marco Foscatto (UiB, election 2024-2026)**
- Member: Magnus Ringholm (UiT, 2023-2025)
- **Deputy member: Abril Castro (UiO, election 2024-2026)**
- Deputy member: Sarai Folkestad (NTNU, 2023-2025)
- Auditor: Per-Olof Åstrand (NTNU, 2023-2025)
- Election committee
  - Trygve Helgaker (UiO, 2023-2025)
  - **Vidar R. Jensen (UiB, 2024-2026)**