



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI E FONDAZIONE «GUIDO DONEGANI»

CONVEGNO

CINETICA CHIMICA ALLE MICRO, MESO, BIOSCALE
CHEMICAL KINETICS AT MICRO-, MESO-, BIO-SCALES
DEDICATED TO GIANGUALBERTO VOLPI (1928-2017, LINCEO FROM 1994)

27-28 MARZO 2023

Comitato ordinatore: Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia), Vincenzo BALZANI (Linceo, Università di Bologna), Massimiliano BARCHI (Linceo, Università di Perugia), Vincenzo BARONE (Linceo, Scuola Normale Superiore di Pisa), Maurizio BRUNORI (Linceo, Sapienza Università di Roma), Mario CAPITELLI (Università di Bari), Sergio CARRÀ (Linceo, Politecnico di Milano), Gennaro MARINO (Linceo, Università di Napoli 'Federico II'), Massimo MORBIDELLI (Linceo, Politecnico di Milano), Annibale MOTTANA (Linceo, Università Roma Tre), Vincenzo SCHETTINO (Linceo, Università di Firenze), Antonio SGAMELLOTTI (Linceo, Università di Perugia)

PROGRAMMA

Si propone l'approfondimento a vari livelli del tema interdisciplinare della cinetica chimica, dei suoi fondamenti, dell'ampio raggio delle sue applicazioni, a settant'anni dalla pubblicazione [Boato, Careri, Cimino, Molinari, Volpi Nuovo Cimento, 10, 993 (1953), J Chem Phys, 24, 783 (1956)] originata da una ricerca, oggi riconosciuta pietra miliare del campo.

La cinetica chimica si pone come centrale nel percorso moderno tra i processi molecolari (osservabili sperimentalmente su scala microscopica) e i sistemi complessi, che si evolvono in tempi tali da giustificarne la descrizione al livello dell'equilibrio macroscopico. La transizione tra reagenti e prodotti in un processo reattivo e le proprietà degli intermedi nelle interazioni luce-materia richiedono dedicata attenzione sia nella sperimentazione che nella teoria, con profonde implicazioni nella scienza della catalisi, nella biofisica e biochimica, nella chimica industriale e farmaceutica, nella geochimica e nelle evoluzioni degli ambienti terrestri nelle biosfere e nel cosmo, richiedendo trattazioni a livello della chimica quantistica e della dinamica molecolare dei sistemi di non equilibrio.

Lunedì 27 marzo

14.00 *Indirizzi di saluto*

Giorgio PARISI (Linceo, Vicepresidente dell'Accademia Nazionale dei Lincei)

Sergio CARRÀ (Linceo, Politecnico di Milano)

Mario CAPITELLI (Università di Bari)

1 sessione - Presiede: Antonio SGAMELLOTTI (Linceo, Università di Perugia)

14.30 Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia): *Settant'anni dopo...*

15.00 Piergiorgio CASAVECCHIA (Università di Perugia): *Elementary Reactions in Combustion and Astrochemical Environments*

15.30 Fernando PIRANI (Università di Perugia): *Intermolecular interactions and the weakly bound precursor states of elementary processes*

16.00 Intervallo

2 sessione - Presiede: Gennaro MARINO (Linceo, Università di Napoli 'Federico II')

16.20 Raffaella OCONE (Heriot-Watt, Edimburgo): *Apparent kinetics of catalytic and bioenergetic processes*

16.50 Gianvito VILÈ (Politecnico di Milano): *Single atom catalysts for sustainable chemical processes: molecular-scale advances and new opportunities*

17.20 Carlo CAVALLOTTI (Politecnico di Milano): *Evolution of chemical kinetics from qualitative to quantitative science: theory and applications*

Martedì 28 marzo

3 sessione - Presiede: Brunetto Giovanni BRUNETTI (Università di Perugia)

- 9.15 Antonio LAGANÀ, (Università di Perugia): *From molecular beam technologies to virtual experiments and communities*
- 9.45 Vincenzo BARONE (Linco, Scuola Normale Superiore di Pisa): *Formation routes of key bricks of life in the interstellar medium*
- 10.15 Cecilia COLETTI (Università di Chieti): *Long-range interactions and quantum effects in collision dynamics*
- 10.45 Intervallo

4 sessione - Presiede: Vincenzo SCETTINO (Linco, Università di Firenze)

- 11.00 Valter CARVALHO-SILVA (Anapolis, Brasil): *Rise and decline in the temperature dependence of chemical and biophysical processes*
- 11.30 Dario DE FAZIO (CNR): *Quantum reactive dynamics of elementary chemical processes: time independent vs wave packet methods*
- 12.00 Franco VECCHIOCATTIVI (Università di Perugia), Stefano FALCINELLI (Università di Perugia): *Coulomb Explosion of Molecular Dications: From the Ionosphere of Mars to Fuels Production via Plasma Assisted CO₂ Hydrogenation*
- 12.30 Daniela ASCENZI (Università di Trento): *Charge driven chemical reactions: from plasma processes to astrochemistry*

5 sessione - Presiede: Maurizio BRUNORI (Linco, Sapienza Università di Roma)

- 14.00 Matthew GUBERMAN-PFEFFER (Yale University, USA): *Assessing Thermal Response of Redox Conduction for anti-Arrhenius Kinetics in a Microbial Cytochrome Nanowire*
- 14.30 Paolo ASCENZI, (Università di Roma Tre): *Human Serum Albumine, a multifaced enzyme*
- 15.00 Stefano GIANNI (Sapienza Università di Roma): *Mechanisms of protein folding*
- 15.30 Intervallo
- 15.45 Vincenzo AQUILANTI (Linco, Università di Perugia): *Conclusioni*

ROMA - PALAZZO CORSINI - VIA DELLA LUNGARA, 10
Segreteria del convegno: convegni@lincei.it – <http://www.lincei.it>

Tutte le informazioni per partecipare al convegno sono disponibili su:

<https://www.lincei.it/it/manifestazioni/cinetica-chimica-alle-micro-meso-bioscale-convegno>

Nel rispetto delle limitazioni imposte per l'emergenza Covid-19, il numero dei posti in sala sarà limitato (vedi: <https://www.lincei.it/it/news/misure-fronteggiare-lemergenza-epidemiologica>).

Per partecipare al convegno è necessaria l'iscrizione online

Fino alle ore 10 è possibile l'accesso anche da Lungotevere della Farnesina, 10

I lavori potranno essere seguiti dal pubblico anche in streaming

* * *

La conferenza si svolge nell'ambito dei Days on Sciences of Change and Transitions seguirà il 29 marzo la giornata: *Processi di non-equilibrio e laser-chimica: dalle biosfere al cosmo* dedicata alla professoressa della Sapienza Anna Giardini, recentemente scomparsa, che di Volpi fu allieva e per lunghi anni collaboratrice

La giornata si terrà a Roma nella Biblioteca dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, Villa Torlonia
<https://www.accademiaxl.it/processi-di-non-equilibrio-e-laser-chimica-dalle-biosfere-al-cosmo-convegno-a-roma/>
diretta streaming su <https://www.accademiaxl.it/live>