



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI

CONVEGNO LINCEO

QUANTUM MECHANICS APPLIED TO EARTH SCIENCES

26-27 MARCH 2025

Comitato ordinatore: Vincenzo AQUILANTI (Linco, Università di Perugia), Luca BINDI (Linco, Università di Firenze), Giovanni FERRARIS (Linco, Università di Torino), Massimo INGUSCIO (Linco, Università Campus Bio-Medico di Roma), Annibale MOTTANA (Linco, Università degli Studi Roma Tre), Roberta OBERTI (Linco, Istituto di Geoscienze e Georisorse - CNR Pavia), Giulio Armando OTTONELLO (Linco, Università di Genova, coordinatore), Antonio SGAMELLOTTI (Linco, Università di Perugia).

PROGRAMME

Quantum mechanics applied to Earth Sciences is a fascinating and increasingly important field of study. While traditionally quantum mechanics has been associated more with the realm of particle physics and the study of subatomic particles, its applications to earth sciences have become evident and significant to help us understand the fundamental processes that occur within Earth's geological structures. This includes the behavior of atoms and molecules in minerals, the properties of materials under extreme pressure and temperature conditions, and the mechanisms behind geological phenomena such as earthquakes, volcanic eruptions, and the formation of rocks.

Wednesday, 26th March

14.30 *Welcome addresses from the Presidency of the Academy*

15.00 Matteo COCOCCIONI (Università di Pavia): *Hubbard-corrected DFT functionals in the study of thermoelastic properties of minerals*

15.40 Donato BELMONTE (Università di Genova): *Thermodynamic and thermophysical properties of minerals in the quasi-harmonic approximation: testing the accuracy of hybrid functionals*

16.20 Coffee Break

16.35 Bartolomeo CIVALLERI (Università di Torino): *Using localized basis sets to modelling solids: from minerals to porous materials*

17.15 Maurizio COSSI (Università del Piemonte Orientale): *Integral equation formalism of the polarized continuum method and its potential applications*

17.55 Carlo GATTI (CNR, Milano): *Electronic localization and delocalization: Implications on terrestrial materials in various states of aggregation*

Thursday, 27th March

- 9.00 Razvan CARACAS (IPGP, Paris): *Density relations in deep magma oceans*
- 9.40 Giorgio SANGIOVANNI (University of Würzburg): *Iron and Nickel at Earth's core conditions: implications for geomagnetism*
- 10.20 Dario ALFÈ (Università di Napoli Federico II): *The inner core nucleation paradox*
- 11.00 Coffee Break
- 11.15 Piero UGLIENGO (Università di Torino): *Chemical reactivity of interstellar dust*
- 11.55 Artem OGANOV (Skoltech): *Predictive crystallography: new high-pressure compounds and novel phenomena*
- 12.25 Discussion, final remarks and outlooks

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/quantum-mechanics-applied-earth-sciences>

Per partecipare in presenza 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

L'attestato di partecipazione al convegno viene rilasciato esclusivamente a seguito di partecipazione in presenza fisica e deve essere richiesto al personale preposto in anticamera nello stesso giorno di svolgimento del convegno