



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI E FONDAZIONE «GUIDO DONEGANI»

CONVEGNO

1925: DAI NUMERI QUANTICI AL SISTEMA PERIODICO. UNA RIVOLUZIONE IN CHIMICA

25-26 NOVEMBRE 2025

Comitato ordinatore: Vincenzo AQUILANTI (Linco, Università di Perugia), Vincenzo BARONE (Linco, Scuola Normale Superiore di Pisa), Ugo COSENTINO (Piano Nazionale Lauree Scientifiche), Claudio GRECO (Presidente DCTC, Società Chimica Italiana), Benedetta MENNUCCI (Linco, Università di Pisa), Gianfranco PACCHIONI (Linco, Università di Milano-Bicocca), Vincenzo SCHETTINO (Linco, Università di Firenze), Margherita VENTURI (Divisione di Didattica, SCI)

PROGRAMMA

Nel 1925, Wolfgang Pauli formulò il famoso principio di esclusione, un concetto fondamentale della meccanica quantistica che stabilisce che due elettroni in un atomo non possono avere lo stesso insieme di numeri quantici. Questo principio spiega la struttura elettronica degli atomi e la disposizione regolare degli elementi nella tavola periodica, fornendo le basi per la comprensione della chimica degli elementi. A cento anni da questa scoperta rivoluzionaria, il convegno ripercorrerà le tappe che hanno portato alla formulazione delle leggi della meccanica quantistica e alla nascita della chimica moderna. Oggi grazie a questi principi è possibile non solo descrivere e comprendere la natura di molecole, liquidi, solidi o la reattività chimica ma anche progettare con strumenti teorici composti e materiali dalle straordinarie proprietà.

Martedì 25 novembre, Palazzo Corsini

14.30 *Indirizzi di saluto*

Carlo DOGLIONI (Presidente della Classe di Scienze Fisiche e Naturali dell'Accademia Nazionale dei Lincei)

Chair: Vincenzo BARONE (Linco, INSTM)

14.50 Teodoro LAINO (IBM Research Europe, Zurigo): *Dai numeri quantici all'intelligenza artificiale: riscrivere la chimica con un nuovo alfabeto*

15.20 Cristina PUZZARINI (Università di Bologna): *Nessuno è isolato: molecole nell'atmosfera e nello spazio*

15.50 Filippo LIPPARINI (Università di Pisa): *Nessuno è isolato: molecole in soluzione*

16.20 Intervallo

Chair: Claudio GRECO (Presidente DCTC, Società Chimica Italiana)

16.50 Silvia CASASSA (Università di Torino): *Capire i solidi cristallini: dai difetti ai termoelettrici*

17.20 Alessandro FORTUNELLI (CNR-ICCOM Pisa): *Elegante, efficiente e rispettoso dell'ambiente: nuovi sviluppi della catalisi omogenea ed eterogenea*

Chair: Benedetta MENNUCCI (Lincea, Università di Pisa)

17.50 Presentazione flash poster

Silvia ALESSANDRINI (Università di Bologna): *Molecole tra le stelle: la prospettiva della chimica quantistica sul mezzo interstellare*

Matteo BRIGANTI (Università di Firenze): *Il ponte di Eraclito: spin molecolari tra chimica e tecnologie quantistiche*

Carmen COPPOLA (Università di Siena): *Chimica computazionale e Machine Learning: alla ricerca di nuovi coloranti per l'Internet of Things*

Giulia DALL'OSTO (Elettra Sinctrotrone Trieste): *Modelli continui oltre il solvente: nanoparticelle plasmoniche*

Giovanni DI LIBERTO (Università di Milano-Bicocca): *Catalisi a singolo-atomo: un viaggio nel Sistema Periodico visto con le lenti della chimica quantistica*

Francesco DI MAIOLO (Università di Parma): *Cambiare le regole del gioco: dai gap singoletto-tripletto invertiti agli interruttori radicalici*

Greta DONATI (Università di Napoli Federico II): *La versatilità della chimica teorico-computazionale: dalla chimica farmaceutica alla chimica verde*

Laura FALIVENE (Università di Salerno): *Modelli predittivi affidabili per catalizzatori più efficienti*

Francesca FASULO (Università di Napoli Federico II): *Quando la meccanica quantistica incontra le batterie del futuro: la chimica dell'ossigeno e la sfida dell'energia pulita*

Maria Grazia FORTINO (Università della Magna Grecia Catanzaro): *Aspetti teorici delle perovskiti chirali ibride*

Tommaso GIOVANNINI (Università di Roma Tor Vergata): *Verso una migliore integrazione della meccanica classica e quantistica nei modelli multiscala: il ruolo della repulsione di Pauli*

Ciro Achille GUIDO (Università del Piemonte Orientale): *Fotofisica molecolare in ambienti complessi: nuove prospettive dalla teoria dei sistemi quantistici aperti*

Federico LAZZARI (Scuola Superiore Meridionale): *Dai frammenti ai farmaci e ai soft materials: un approccio QM Δ -ML integrato*

Marco MENDOLICCHIO (Scuola Normale Superiore di Pisa): *Interpretare le vibrazioni molecolari: teoria e simulazione al servizio della chimica*

Francesco MUNIZ MIRANDA (Università di Modena e Reggio Emilia): *Dal red shift al blue shift: come il legame a idrogeno modula le frequenze vibrazionali*

Fortuna PONTE (Università della Calabria): *Stati eccitati: il motore della fototerapia antitumorale*

Sergio RAMPINO (Università di Padova): *Teoria e calcolo: la chimica al confine con la fisica, la matematica e l'informatica*

Umberto RAUCCI (IIT Genova): *Alla scoperta della materia con l'intelligenza artificiale: la nuova frontiera della chimica computazionale*

Diego SORBELLI (Università di Perugia): *Dalla struttura elettronica alla coerenza di spin: molecole ingegnerizzate per l'informazione quantistica*

18.30 Sessione poster

**Mercoledì 26 novembre, Auditorium di Villa Farnesina
in collaborazione con Fondazione i Lincei per la scuola**

10.00 *Indirizzi di saluto*

Chair: Gianfranco PACCHIONI (Lincoo, Università di Milano-Bicocca)

10.15 Margherita VENTURI (Università di Bologna): *La Tavola Periodica: ieri, oggi e domani*

10.40 Ugo COSENTINO (Università di Milano-Bicocca): *Macroscopico e microscopico: due mondi diversi che si devono parlare*

11.05 Intervallo con presentazione poster tematici

Francesca FASULO (Università Napoli Federico II): *Quando la meccanica quantistica incontra le batterie del futuro: la chimica dell'ossigeno e la sfida dell'energia pulita*

Umberto RAUCCI (IIT Genova): *Alla scoperta della materia con l'intelligenza artificiale: la nuova frontiera della chimica computazionale*

Sergio RAMPINO (Università di Padova): *Teoria e calcolo: la chimica al confine con la fisica, la matematica e l'informatica*

Federico LAZZARI (Scuola Superiore Meridionale): *Intelligenza umana e intelligenza artificiale: accordi e disaccordi*

Chair: Vincenzo AQUILANTI (Lincoo, Università di Perugia)

11.50 Teresa FORNARO (Istituto Nazionale di Astrofisica, Arcetri): *I mattoni molecolari della vita e la ricerca della vita nel Sistema Solare*

12.15 Michele PAVONE (Università di Napoli Federico II): *Dal legame chimico ai materiali intelligenti*

12.40 *Conclusioni*

*Il convegno è organizzato in collaborazione con la Società Chimica Italiana
e Fondazione Lincei per la Scuola*

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/1925-dai-numeri-quantici-al-sistema-periodico-una-rivoluzione-chimica>

Per partecipare al convegno è necessaria l'iscrizione online
I lavori potranno essere seguiti dal pubblico anche in streaming

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

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