



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI

CONVEGNO LINCEO

FROM ATOMS TO COMPLEX BIOMOLECULES: LASER AND COMPUTATIONAL APPROACHES

MARCH 19-20, 2024

Comitato ordinatore: Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia), Vincenzo BARONE (Linceo, Scuola Normale Superiore), Francesco DE MARTINI (Linceo, Sapienza Università di Roma), Massimo INGUSCIO (Linceo, Università Campus Bio-medico di Roma), Giorgio PARISI (Presidente della Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali dei Lincei), Vincenzo SCHETTINO (coordinatore, Linceo, Università di Firenze), Giuseppe ZERBI (Linceo, Politecnico di Milano)

PROGRAMME

Negli ultimi decenni si è avuto un sostanziale sviluppo negli studi della struttura, della dinamica e della reattività di sistemi che vanno da atomi a molecole anche di grande complessità. Questo è stato reso possibile, da un lato, dalla disponibilità, in tutto il campo di frequenze, di sorgenti laser di potenza e di laser ad impulsi ultracorti e, dall'altro lato, dallo sviluppo di nuovi e più efficienti metodi computazionali quanto-meccanici. Nel convegno, che si svolgerà in due mezze giornate, questi sviluppi della ricerca, ai quali Salvatore Califano ha dato sostanziali contributi, saranno discussi con una articolazione in cui si alterneranno relazioni su aspetti sperimentali e teorici.

Tuesday, 19th March

15.00 Giorgio PARISI (Presidente della Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali dei Lincei):
Welcome address

Chair: Francesco DE MARTINI (Linceo, Sapienza Università di Roma)

15.15 Massimo INGUSCIO (Linceo, Università Campus Bio-medico di Roma): *Lasers at LENS: light on the frontier of atoms and molecules*

15.55 Michael L. KLEIN (Temple University): *New Perspectives on Modeling Water*

16.35 Intervallo

Chair: Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia)

16.50 Roberto RIGHINI (Università di Firenze): *Water structure and dynamics by infrared laser spectroscopy*

17.30 Benedetta MENNUCCI (Università di Pisa): *The integration of molecular dynamics and quantum chemistry for investigating photoresponsive proteins*

18.10 Francesco Saverio PAVONE (Università di Firenze): *The brain as a complex integrated system: shedding light on multiscale and multi-temporal dimensions*

Wednesday, 20th March

Chair: Roberta SESSOLI (Lincea, Università di Firenze)

9.00 Michele PARRINELLO (Lincea, IIT Central Research Labs): *Do we really understand catalysis?*

9.40 Giulio CERULLO (Lincea, Politecnico di Milano): *Real-time observation of conical intersections in biomolecules by ultrafast optical spectroscopy*

10.20 Intervallo

Chair: Vincenzo SCETTINO (Lincea, Università di Firenze)

10.35 Andrea CALIFANO (Columbia University): *A First Principle, Mechanism-based Approach to Defeat Cancer at the Single Cell Level*

11.15 Roberto BINI (Università di Firenze): *Exploring the surprising chemistry of simple molecules under high-pressure*



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE



Il convegno è organizzato con il patrocinio dell'Università di Firenze e della Società Chimica Italiana

ROMA - PALAZZO CORSINI - VIA DELLA LUNGARA, 10

Segreteria del convegno: convegni@lincei.it - <https://www.lincei.it/it>

Tutte le informazioni per partecipare al convegno sono disponibili su:

<https://www.lincei.it/it/manifestazioni/atoms-complex-biomolecules-laser-and-computational-approaches>

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