



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI, FONDAZIONE «GUIDO DONEGANI» E  
ACCADEMIA NAZIONALE DELLE SCIENZE DETTA DEI XL

CONVEGNO

## LA CHIMICA QUANTISTICA A CENT'ANNI DALL'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

25-26 MAGGIO 2026

*Comitato ordinatore:* Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia), Vincenzo BARONE (Linceo, Scuola Normale Superiore Pisa), Vincenzo SCHETTINO (Linceo, Università di Firenze).

### PROGRAMMA

Nel 1926, Erwin Schrödinger, con la formulazione della sua celebre equazione, rese possibile lo sviluppo di tecniche teoriche e computazionali che poterono essere estese alle scienze molecolari, segnando di fatto la nascita della chimica quantistica.

Nei decenni successivi, questi sviluppi accompagnarono—e spesso stimolarono—l'avvento delle scienze informatiche, insieme alle concomitanti applicazioni rivoluzionarie nelle scienze dei materiali e nella biochimica. In quest'ultimo ambito, in particolare, essi hanno contribuito a risultati di grande rilievo, culminati in scoperte premiate con recenti riconoscimenti Nobel.

Il convegno si articola attorno agli sviluppi matematici e formali, nonché agli algoritmi, che hanno reso possibili tali applicazioni. Esso è organizzato in tre principali sezioni tematiche: una prima parte dedicata agli aspetti storici e ai fondamenti teorici; una seconda parte incentrata sulle molecole isolate, con particolare attenzione ai processi elementari e alla reattività in fase gassosa; e una terza parte dedicata alla struttura e alla dinamica molecolare nelle fasi condensate.

Accanto alle relazioni su invito, il programma prevede inoltre contributi aggiuntivi e comunicazioni flash, offrendo ai giovani ricercatori un'importante opportunità per presentare i propri risultati e interagire con la comunità scientifica.

#### Lunedì 25 maggio

14.30 Carlo DOGLIONI (Presidente della Classe di Scienze Fisiche e Naturali): *Indirizzi di saluto*

#### Parte 1. Storia e fondamenti

**Presiede: Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia)**

14.45 David C. CLARY (University of Oxford): *Schrödinger, the equation and beyond*

15.15 Cecilia COLETTI (Università di Chieti): *A Momentum-Space View of Schrödinger's Equation: Kepler-Coulomb Orbitals and Hyperspherical Harmonics*

15.40 Eric CANCÉS (École des Pontes): *The electronic Schrödinger equation and its approximations: a mathematical perspective*

16.05 Coffee break

16.30 Kléber MUNDIM (Universidade de Brasília, Brazil): *Beyond the Wave Function: A Schrödinger-Type Equation for Chemical Reaction Rates*

16.55 Sergio RAMPINO (Università di Padova): *At the border between Chemistry and Physics: analysis and interpretation of molecular electron densities with artificial intelligence*

**Martedì 26 maggio**

**Parte 2. Algoritmi e fase gassosa**

**Presiede: Vincenzo BARONE (Lincoo, Scuola Normale Superiore Pisa)**

- 9.00 Lorianò STORCHI (Università di Chieti): *BERTHA and PyBERTHA: An HPC-enabled four-component Dirac-Kohn-Sham framework*
- 9.25 Valter CARVALHO-SILVA (Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, Brazil): *Renormalized Chemical Kinetics: Wave-Equation Approach Beyond Mean-Field Behavior in Photochemistry*
- 9.50 Andrea LOMBARDI (Università di Perugia): *Hyperspherical Molecular Dynamics*
- 10.15 Coffee break
- 10.40 Maria Pilar DE LARA-CASTELLS (Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Madrid): *After 100 Years of Schrödinger: an Ab initio Journey toward the Molecular-Level Understanding and Predictability of Subnanometric Metal Clusters*
- 11.05 Dario DE FAZIO (CNR, Montelibretti): *Time dependent quantum reactivity through conical intersections*
- 11.30 Majdi HOCHLAF (Eiffel Uni, Paris): *Computational spectroscopy: trends from isolated molecules to adsorbed molecules at interfaces and applications*
- 11.55 Giovanni VILLANI (CNR, Pisa): *Conceptual and Philosophical Aspects of Quantum Chemistry*
- 12.20 Further and Flash Presentations
- Luciano RIBEIRO (Universidade Estadual de Goiás, Brazil): *GSA DVR: Schrödinger Equation Guided Fitting Procedure for Accurate Rovibrational Spectroscopic Properties*
- Júlio César O. RIBEIRO (Universidade Federal de Goiás, Brazil): *The Schrödinger Equation Across Scales: Modeling Pesticides and Pharmaceuticals from Mechanisms to Isotopic Signatures*

**Parte 3. Dinamica molecolare e fase condensata**

**Presiede: Vincenzo AQUILANTI (Lincoo, Università di Perugia)**

- 14.30 Chiara CAPPELLI (Scuola Normale Superiore di Pisa): *Beyond the Gas Phase: Extending the Schrödinger Equation to Complex Chemical Environments*
- 14.55 Ilaria CIOFINI (Chimie Paristech-PSL): *Modelling the excited-state properties of molecular systems: from solution to crystals*
- 15.20 Coffee break

**Presiede: Vincenzo BARONE (Lincoo, Scuola Normale Superiore Pisa)**

- 15.45 Filippo DE ANGELIS (Università di Perugia): *Quantum mechanics at work: Materials and processes in photovoltaics*
- 16.10 Matthew GUBERMANN PFEFFER (New Mexico State University): *Quantum Biochemistry*
- 16.35 *Conclusioni*

ROMA - PALAZZO CORSINI - VIA DELLA LUNGARA, 10  
Segreteria del convegno: [convegni@lincoo.it](mailto:convegni@lincoo.it) - <http://www.lincoo.it>

Tutte le informazioni per partecipare al convegno sono disponibili su:

<https://www.lincoo.it/it/manifestazioni/convegno-la-chimica-quantistica-centanni-dallequazione-di-schrodinger>

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