



**20-22 SETTEMBRE**  
2023

**VIII CONGRESSO NAZIONALE DELLA DIVISIONE  
DI CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE  
DELLA SOCIETÀ CHIMICA ITALIANA**

**Sala Stemmi**  
**Sala Azzurra**

Palazzo della Carovana  
Scuola Normale Superiore  
Piazza dei Cavalieri, 7  
PISA

**INFO**  
eventiculturali@sns.it



## 20 SEPTEMBER

13:30 Registration

15:00 Opening (DCTC President, Authorities)

### SESSION 1 - Chairperson: **VINCENZO BARONE**

15:15 [P1] **GIANFRANCO PACCHIONI** (Università di Milano-Bicocca)  
*Modeling Single Atoms Catalysts*

15:45 [O1] **LORENZO BRICCOLANI-BANDINI** (Università degli Studi di Firenze)  
*Concerted vs. Stepwise Proton Transfer reactions in the [2,2'-bipyridyl]-3,3'-diol molecule: a static and dynamic ab-initio investigation*

16:00 [O2] **VINCENZO VIGNA** (Università della Calabria)  
*Exploring Machine Learning Techniques for Molecular Property Prediction*

16:15 [O3] **SARA DEL GALDO** (Università Roma Tre)  
*On the study of thermoresponsive (adsorbent) species at the nanoscale: the case of polyoxazolines*

16:30 [F1] **PATRIZIA MAZZEO** (Università di Pisa)  
*A Fast Method for Polarizable QM/MM Excited-State Dynamics in Complex Systems*

16:35 [F2] **GABRIELE IUZZOLINO** (Scuola Superiore Meridionale)  
*Photophysics of a Nucleic Acid-Protein Photo-Crosslinking Model System in Methanol Solution through AIMD simulation*

16:40 [F3] **ALESSIO BARTOCCI** (Università di Trento)  
*A multiscale approach to decipher allosteric cannabinoid binding at the glycine receptor  $\alpha_1$*

16:45 Coffee Break

### SESSION 2 - Chairperson: **FABRIZIA NEGRI**

17:15 [P2] **MASSIMILIANO ASCHI** (Università degli Studi dell'Aquila)  
*"There's plenty of room at the" border between classical mechanics and quantum chemistry*

- 17:45 [04] **ANDREA LOMBARDI** (Università degli Studi di Perugia)  
*Enhanced molecular networks by invariant shape coordinates*
- 18:00 [05] **ILARIA BARLOCCO** (Università di Milano-Bicocca)  
*Does the Oxygen Evolution Reaction follow the classical  $\text{OH}^*$ ,  $\text{O}^*$ ,  $\text{OOH}^*$  path on single atom catalysts?*
- 18:15 [06] **YASI DAI** (Università di Bologna)  
*Ambipolar charge transport in organic semiconductors: the role played by diradical character*
- 18:30 [07] **GUIDO RAOS** (Politecnico di Milano)  
*Breaking polymer chains, networks and films, with a computer*
- 18:45 [S1] Sponsor  
*E4 Computer Engineering*

## 21 SEPTEMBER

### SESSION 3 - Chairperson: **MIRCO ZERBETTO**

- 9:00 [P3] **ALESSIO PETRONE** (Università degli Studi di Napoli Federico II)  
*First principles methods for photo-induced phenomena and non-equilibrium dynamics*
- 9:30 [08] **DARIO FRASSI** (Università di Pisa)  
*Photoisomerization dynamics of spiropyrans*
- 9:45 [09] **RICCARDO CORTIVO** (Università degli Studi di Padova)  
*A multiscale approach to coupled nuclear and electronic dynamics: quantum-stochastic Liouville equation*
- 10:00 [010] **TEODORO PIZZA** (Università degli Studi di Salerno)  
*Charge and Energy Transfer Kinetics in Ternary Organic Solar Cells*
- 10:15 [011] **RICCARDO CONTE** (Università degli Studi di Milano)  
*Semiclassical vibrational spectroscopy from small molecules to solvated biomolecules*
- 10:30 Coffee Break

## SESSION 4 - Chairperson: **MARCO MENDOLICCHIO**

- 11:00 [P4] **SILVIA CASASSA** (Università di Torino)  
*CRYSTAL: A program for solid state physics and chemistry*
- 11:30 [O12] **SILVIA DI GRANDE** (Scuola Normale Superiore)  
*Accuracy meets Feasibility for Structural and Spectroscopic Investigations: The Study of DNA Basis Tautomers by Novel Parameter-Free Approaches*
- 11:45 [O13] **GIOVANNI BISTONI** (Università degli Studi di Perugia)  
*Combining High Accuracy and Chemical Insight with Local Coupled Cluster Methods*
- 12:00 [O14] **PIERPAOLO D'ANTONI** (Università degli Studi di Trieste)  
*Boosting hybrid kernel TDDFT with STO by Resolution of Identity: implementation and application to a series of ligand protected nanoalloys*
- 12:15 [O15] **ABDERRAHMANE SEMMEQ** (Università degli Studi dell'Aquila)  
*Dye-encapsulated zeolitic imidazolate framework (ZIF-71) for fluorochromic sensing, insights from Molecular Dynamics and TDDFT*
- 12:30 Lunch

## SESSION 5 - Chairperson: **GLORIA MAZZONE**

- 14:30 [P5] **CRISTINA PUZZARINI** (Università di Bologna)  
*Unveiling exotic chemistry and molecules in the interstellar medium: The role of quantum-chemical calculations*
- 15:00 [O16] **EDOARDO BUTTARAZZI** (Scuola Superiore Meridionale)  
*The real-time interplay between the ultrafast charge dynamics and nuclear vibrations in dyes for solar cell technologies*
- 15:15 [O17] **GIACOMO SALVADORI** (Università di Pisa)  
*Transient Intermediates in a Bacteriophytochrome Photocycle Revealed by Multiscale Simulations*
- 15:30 [O18] **ADRIANO PIERINI** (Università di Roma "La Sapienza")  
*Mechanistic study of redox mediators in Li-O2 batteries*

- 15:45 [F4] **MICHELE CASORIA** (Università degli Studi di Firenze)  
*Structural properties of N-glycosylated Protein*
- 15:50 [F5] **GIOACCHINO SCHIFINO** (Università di Catanzaro)  
*Chiral self-organization of meso-tetrakis(4-sulfonatophenyl)porphyrin assisted by molecular rotations*
- 15:55 [F6] **GABRIELLA DI GENOVA** (Università degli Studi di Perugia)  
*Theoretical investigation on S(1D) insertion reactions leading to the formation of S-bearing species in space*
- 16:00 Coffee Break

**SESSION 6:** - Chairperson: **CLAUDIO GRECO**

- 16:30 Round Table  
*Il finanziamento della Ricerca negli anni del PNRR*  
**CARLO ADAMO**  
**ANGELA AGOSTIANO**  
**ANDREA CANESCHI**  
**GIANLUIGI CONSOLI**  
**MARCO MANCINI**

- 17:45 Assemblea Divisionale

**SESSION 7:** Awards - Chairperson: **ISABELLA DAIDONE**

- 18:30 Announcement of the winners  
*Roetti Prize*
- 18:35 [A1] **FILIPPO LIPPARINI** (Università di Pisa)  
*New Algorithms and Numerical Strategies from Classical Models to Quantum Chemistry*
- 20:30 Social Dinner, Restaurant "La Clessidra"

## 22 SEPTEMBER

### SESSION 8 - Chairperson: **FEDERICO LAZZARI**

- 9:00 [P6] **ADRIANA PIETROPAOLO** (Università di Catanzaro)  
*Atomistic simulations of chiral polymers and low-dimensional perovskites*
- 9:30 [O19] **ANNA RANAUDO** (Università di Milano-Bicocca)  
*Guiding competitive binding assays using protein-protein interaction prediction: the affitin-Her2 use case*
- 9:45 [O20] **ANNALISA PALLINI** (Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia)  
*Aluminosilicate Glasses: Thermal and Mechanical Properties Simulations*
- 10:00 [F7] **LUIGI CRISCI** (Scuola Normale Superiore)  
*Toward a black-box computation of accurate rate constants for barrierless processes: new hints for a challenging problem*
- 10:05 [F8] **SERGIO RAMPINO** (Università degli Studi di Padova)  
*The roto-conformational diffusion tensor as a tool to interpret molecular flexibility*
- 10:10 [F9] **FRANCESCO FERDINANDO** (Summa (Università degli Studi di Salerno)  
*Electronic Current Densities and Origin-Independent Property Densities Induced by Optical Fields*
- 10:15 Coffee Break

### SESSION 9 - Chairperson: **ENRICO BODO**

- 10:45 [O21] **PIERRAFFAELE BARRETTA** (Università della Calabria)  
*An activatable photosensitizer for Photodynamic Therapy: mechanism of NO photo-release and free radical generation*
- 11:00 [O22] **GIULIO POLI** (Università di Pisa)  
*An in silico platform for evaluating the potential pathogenic impact of hRPE65 missense mutations*
- 11:15 [O23] **ROBERTO PACIOTTI** (Università di Chieti-Pescara)  
*The FMO-GRID based scoring functions to predict the binding energy of ligand-receptor complexes containing metals*

## SESSION 10: Prizes and Medals - Chairperson: GIOVANNA FRONZONI

11:30 Announcement of the winners

***Best Presentation Award (E4 Computer Engineering), Nordio, Del Re, Scrocco***

11:35 [A2] **SILVIA ALESSANDRINI** (Università di Bologna)

***Modelling weak interactions in the gas phase: from non-covalent bond to reactions rates***

11:50 [A3] **MATTEO CAPONE** (Università degli Studi dell'Aquila)

***Illuminating PhotosystemII Catalysis: Molecular Insights from QM/MM Simulations***

12:05 Concluding remarks

[P: PLENARY]

[O: ORAL]

[F: FLASH]

[S: SPONSOR]

[A: AWARD]

### **Local Organizing Committee:**

**VINCENZO BARONE** Scuola Normale Superiore

**NICOLA TASINATO** Scuola Normale Superiore

**MARCO MENDOLICCHIO** Scuola Normale Superiore

**FEDERICO LAZZARI** Scuola Normale Superiore

**NICCOLÒ ALBERTINI** Scientific secretary Scuola Normale Superiore

### **Scientific Committee:**

**CLAUDIO GRECO** Presidente Università di Milano Bicocca

**MARIA CRISTINA MENZIANI** Past-President Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia

**ENRICO BODO** Università di Roma "La Sapienza"

**ISABELLA DAIDONE** Università degli Studi dell'Aquila

**GIOVANNA FRONZONI** Università degli Studi di Trieste

**GLORIA MAZZONE** Università della Calabria

**MARCO MENDOLICCHIO** Scuola Normale Superiore

**FABRIZIA NEGRI** Università di Bologna

**NADIA REGA** Università degli Studi di Napoli Federico II

**MIRCO ZERBETTO** Università degli Studi di Padova