

AVOGADRO COLLOQUIA: FORUM DI DISCUSSIONE SULLE INNOVAZIONI IN CHIMICA

Vincenzo Barone

past President Società Chimica Italiana



La seconda edizione degli “Avogadro Colloquia”, istituiti dalla SCI nel 2011, si è tenuta a Pisa, presso la Scuola Normale Superiore, il 27 settembre 2013 ed è stata dedicata allo stato ed alle prospettive della modellizzazione computazionale anche in relazione al prossimo programma europeo Horizon2020.

La giornata è stata caratterizzata da quattro conferenze plenarie tenute da noti esperti internazionali del settore (Carlo Adamo, Emily Carter, Michele Parrinello e Maurizio Prato) e da numerosi brevi interventi di giovani ricercatori italiani, che hanno avuto l'opportunità di presentare i loro risultati e di confrontarsi, sia con altri coetanei, che con numerosi esperti italiani e stranieri.

Durante la giornata sono stati anche consegnati i premi Scrocco e Roetti della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale.

La scelta della tematica è collegata alla considerazione che il tradizionale duopolio della ricerca scientifica tra approcci sperimentali (‘in vitro’) e teorici si è arricchito negli ultimi anni di un nuovo paradigma, quello delle simulazioni numeriche o esperimenti *in silico*, che, guardati dapprima con molto scetticismo, si stanno rivelando strumenti insostituibili in moltissimi campi della ricerca chimica.

A conferma di quest'affermazione, il premio Nobel 2013 per la Chimica è stato assegnato a tre pionieri della cosiddetta chimica computazionale: Martin Karplus (Université de Strasbourg e Harvard), Michael Levitt (Stanford University) e Arieh Warshel (University of Southern California). Dalle motivazioni dell'assegnazione del prestigioso premio, si evince come il maggior merito dei tre ricercatori sia stato quello di aver proposto un'idea tanto semplice, quanto fruttuosa: combinare ingegnosamente diversi modelli basati sulla fisica classica, quantistica e dei mezzi continui, al fine di simulare *in silico* fenomeni chimici nel contesto di sistemi molecolari complessi. Molti dei cosiddetti modelli ‘multi-scala’ oggi in uso nei laboratori di ricerca più avanzati derivano direttamente dal lavoro pionieristico di Karplus, Levitt e Warshel ed hanno un raggio di applicazione sempre più esteso, che spazia dalle scienze della vita a quelle che si interessano di nuovi materiali, fino ad abbracciare le più avanzate nanotecnologie.

Dal punto di vista metodologico, tra le principali sfide che attendono oggi la chimica computazionale vi è la costruzione di modelli sempre più flessibili e sofisticati che, da una parte, includano la dinamica molecolare quantistica (trattazione quantistica dei nuclei, oltre che degli

elettroni) e, dall'altra, forniscano la possibilità di calcolare osservabili chimico-fisiche con la stessa accuratezza sperimentale. Quest'ultimo aspetto è di particolare interesse a causa del proliferare di nuove e complesse tecniche sperimentali, i cui risultati sono difficilmente interpretabili senza far ricorso al calcolo di strutture e proprietà molecolari.

Grazie allo sviluppo di calcolatori sempre più potenti e di software sempre più sofisticati, flessibili e di uso immediato, i metodi della chimica teorica e computazionale sono dunque entrati oggi a far parte, a pieno titolo, dell'arsenale della ricerca nei campi più avanzati della chimica.

Nuove sfide si offrono oggi alla ricerca in questo campo, che vanno dall'archiviazione e uso di masse di dati sempre più grandi (il problema dei cosiddetti big data) allo sviluppo di interfacce sempre più potenti e naturali per l'interazione uomo-computer (realtà virtuale ed aumentata, ecc.).

Gli studi più recenti, in corso anche presso la Scuola Normale Superiore (www.dreams.sns.it), sono volti alla realizzazione e all'uso sistematico, nel prossimo futuro, di strumenti virtuali (microscopi, spettroscopi, ecc.) di uso semplice e flessibile, che possano affiancare ed integrare la strumentazione sperimentale di laboratorio.

Questi ed altri temi strettamente collegati sono stati affrontati e discussi nell'Avogadro Colloquium 2013, che si è rivelato un successo, sia dal punto di vista del numero dei partecipanti, che da quello, anche più importante, della qualità degli interventi.