

WINTER MODELLING

WORKSHOP DI CHIMICA TEORICA E COMPUTAZIONALE

Alfonso Pedone

Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche

Università di Modena e Reggio Emilia

alfonso.pedone@unimore.it

La settima edizione del workshop Winter Modelling si è tenuta lo scorso marzo a Modena, presso il complesso San Geminiano dell'Università di Modena e Reggio Emilia (<http://wintermodeling.sns.it/>)

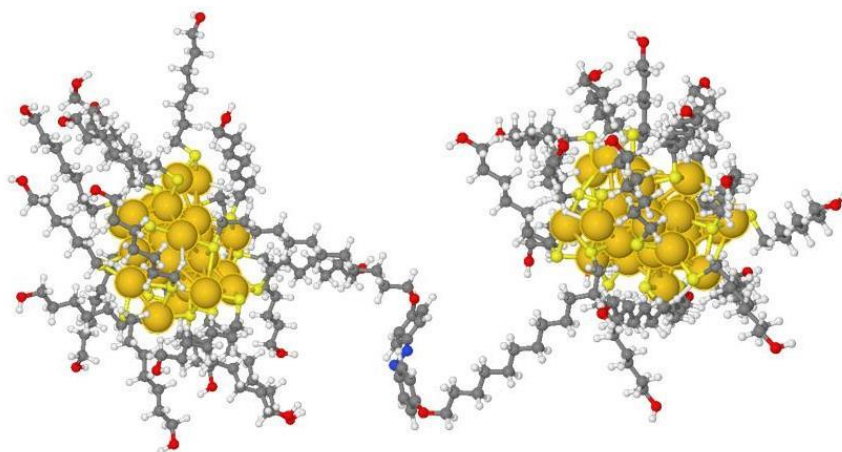


Figura raffigurante due nanocluster di oro protetti da tioli alifatici collegati tramite uno spaziatore organico fotoreattivo. Sistemi di questo tipo trovano applicazioni nel campo della nanoelettronica grazie alle loro peculiari proprietà optoelettroniche

Lo scopo principale del workshop è stato quello di riunire i chimici teorico-computazionali italiani e stranieri per presentare e discutere gli ultimi sviluppi nel settore, creando un'occasione di incontro tra ricercatori italiani in formazione, quali ad esempio dottorandi e assegnisti, e ricercatori esperti.

L'evento è stato caratterizzato da sei conferenze plenarie tenute da eminenti personalità di fama internazionale: Roberto Dovesi (Università di Torino), Carlo Adamo (Chemie ParisTech, Francia), Rebecca Wade (Università di Heidelberg, Germania), Maria Ramos (Università di Porto, Portogallo), Vincenzo Barone (Scuola Normale Superiore di Pisa) e Nadia Rega (Università di Napoli). Inoltre 25 giovani ricercatori italiani e stranieri hanno presentato i loro risultati in brevi interventi.

Durante la giornata del 14 marzo la Commissione Scientifica dell'evento ha consegnato i premi per i tre migliori contributi poster ai giovani ricercatori Claudio Greco (Università di Milano Bicocca), Angelo Giussani (Università di Bologna) e Greta Donati (Università di Napoli Federico II), che vedono pubblicato il contenuto del loro lavoro in questo numero de *La Chimica e l'Industria*.

Nella stessa giornata il Presidente della Società Chimica Italiana Raffaele Riccio ha presieduto l'evento per la consegna della medaglia 'Cesare Pisani' a Vincenzo Barone (professore ordinario di Chimica Teorica e Computazionale alla Scuola Normale di Pisa) per 'il rilevante contributo scientifico, di ampio respiro internazionale, nel campo della modellistica teorico-computazionale, fornito attraverso un significativo e consistente apporto innovativo allo sviluppo di metodi quanto-meccanici, con particolare riferimento alla teoria del funzionale densità e alla spettroscopia computazionale.'

Il workshop si è svolto a pochi mesi dall'assegnazione del premio Nobel per la Chimica 2013 ai chimici computazionali Martin Karplus (Université de Strasbourg e Harvard), Michael Levitt (Stanford University) e Arieh Warshel (University of Southern California) "per lo sviluppo di modelli multiscala per i sistemi chimici complessi". Questo premio ha dimostrato ancora una volta che oggi la chimica computazionale è uno strumento essenziale

della scienza contemporanea per l'interpretazione e la comprensione di dati sperimentali e per la progettazione di nuovi sistemi con proprietà ben definite.

Infatti, negli ultimi decenni si è assistito ad un enorme progresso della chimica computazionale grazie allo sviluppo di metodi avanzati per la determinazione delle proprietà di solidi, liquidi e molecole, di algoritmi di calcolo parallelo efficienti nonché all'aumentata potenza di elaborazione.

Tecniche computazionali basate sulla meccanica classica e quantistica vengono usate ormai abitualmente nello studio delle proprietà di molecole biologiche e dei processi vitali a cui prendono parte o nella progettazione di nuovi farmaci per debellare patologie contemporanee.

Le metodologie computazionali però hanno un ruolo altrettanto importante nello studio di materiali inorganici complessi, come catalizzatori microporosi, materiali usati per l'immagazzinamento di molecole con alto contenuto energetico oppure tossiche, superconduttori ad alta temperatura, biomateriali, nonché di nanomateriali ibridi con proprietà ottiche particolari che li rendono elementi fondamentali per la progettazione di efficienti collettori di energia, agenti di contrasto per *imaging* cellulare e terapeutici per il trattamento del cancro oltre che per lo sviluppo di nuovi dispositivi optoelettronici per le telecomunicazioni e l'informatica.

Sebbene lo sviluppo di microprocessori sempre più potenti e di metodi di calcoli sempre più efficienti hanno reso possibile lo studio computazionale di sistemi chimici sempre più complessi numerose sfide sono ancora aperte.

Tra questi possiamo citare il noto problema della predizione della struttura delle proteine dalla sola conoscenza della sequenza amminoacidica, lo studio degli effetti biologici dell'interazione tra nanomateriali inorganici e proteine, lo studio della reattività chimica usando metodi classici (i cosiddetti campi di forza reattivi), la dinamica di stati eccitati di molecole usando sia metodi quantistici che classici, la predizione di strutture cristalline di molecole e materiali.

Questi ed altri temi strettamente collegati sono stati affrontati e discussi durante il Winter Modelling 2014, 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.