

La Chimica al Computer

La Chimica è una scienza che permea in maniera più o meno visibile la nostra vita quotidiana: dalla cottura e/o conservazione dei cibi, alla tintura di tessuti, nell'uso di prodotti di primaria importanza quali i farmaci o le materie plastiche. L'impatto sullo sviluppo tecnologico di questa disciplina era già stato evidenziato nel 1732 dal Georg Ernst Stahl: "...la chimica è un'arte di straordinaria importanza poiché era capace di produrre effetti nei corpi che non si verificano spontaneamente, perché il chimico può imitare tutti gli effetti della natura e trovarne di nuovi...". Comprendere come funziona un processo chimico è quindi fondamentale per poter capire come e perché ci ammaliamo, come poter sintetizzare farmaci che ci aiutino a guarire o come ottenere nuovi materiali migliori, ad un costo minore e magari riciclabili.

In questo contesto sebbene tradizionalmente la figura professionale del chimico è legata ad una attività laboratoriale empirico/sperimentale che ha le sue fondamenta nel trattato ottocentesco (*Corso di Filosofia Positiva del 1830*) del filosofo francese Auguste Comte, il quale scriveva che "ogni tentativo di utilizzare metodi matematici nello studio di problemi chimici deve essere considerato profondamente irrazionale e contrario allo spirito della chimica. Se l'analisi matematica dovesse un giorno assumere un ruolo prominente nella chimica – una aberrazione che fortunatamente è quasi impossibile – ciò produrrebbe una rapida e generale degenerazione di questa scienza" in realtà gli sviluppi della Chimica Fisica (ovvero di quella branca della chimica che si occupa dello studio delle leggi fondamentali che presiedono alle trasformazioni chimiche) ed in particolare della Chimica Teorica/computazionale oggi consentono, attraverso un approccio multidisciplinare in cui la trasformazione in algoritmi delle leggi della fisica e della chimica, di far avvenire un processo chimico non in una provetta, ma in un mondo virtuale, nel mondo dei numeri di un computer.

Come in un simulatore di volo un pilota d'aereo impara a pilotare, così la chimica computazionale studia problemi chimici cercando di riprodurre nella maniera più accurata possibile ciò che effettivamente ha luogo in un laboratorio tradizionale o in natura o nel nostro organismo, un chimico computazionale "vede" sullo schermo del suo computer gli atomi e le molecole che si incontrano, interagiscono e si trasformano come se si trattasse di un film che riproduce quanto accade nella realtà assumendo un ruolo complementare al metodo sperimentale. Il confronto tra i risultati dei calcoli teorici e i corrispettivi valori sperimentali permette una loro migliore comprensione e dare indicazioni su nuovi esperimenti da condurre e suggerire la sintesi mirata di nuove molecole per specifiche applicazioni.



Quello che sembra essere il mondo in cui gli uomini vivono è in realtà una realtà simulata costruita da macchine, "The Matrix"

Per prenotare un seminario occorre compilare il modulo presente al seguente link:

<https://www.studenti.unige.it/portalescuole/seminari/>