



di Giuseppe B. Suffritti
 Dipartimento di Chimica
 Università di Sassari
 pino@uniss.it

VII CONVEGNO Complex systems: structure, properties, reactivity and dynamics

Il Convegno è il proseguimento di una serie di incontri che alcuni gruppi di ricerca italiani di chimica teorico-computazionale ogni due anni organizzano per fare il punto sugli studi riguardanti calcoli e simulazioni di sistemi complessi di interesse chimico.

Si è rinnovato ad Alghero, lo scorso giugno, l'incontro nazionale dei chimici teorici e computazionali che si occupano dello studio e dello sviluppo delle tecniche investigative sui sistemi complessi: interazione radiazione-materia, sistemi di interesse biologico, fasi condensate, nanomateriali, processi cinetici. Anche se solitamente la maggior parte delle relazioni riguarda aspetti teorici e computazionali, non manca mai il confronto con gli specialisti delle ricerche sperimentali. Lo stile del convegno è stato,

come tradizione, sobrio, con un programma impegnativo tutto dedicato all'attività scientifica e alla discussione.

Nonostante una quota di partecipazione particolarmente ridotta, si è riusciti ad assicurare un sostanzioso rimborso spese a tutti i giovani non strutturati, grazie anche al contributo della Divisione di Chimica Fisica della SCI e dell'Ente Regionale per il Diritto allo Studio Universitario.

Sede del Convegno è stato il Porto Conte Ricerche, un Centro di ricerche regionale in una posizione incantevole, all'interno

del Parco naturale di Porto Conte, che comprende la zona di Capocaccia con la sua Riserva marina.

Il programma scientifico era suddiviso in cinque sessioni tematiche, due tavole rotonde e una sessione poster. Nella sessione "Interazione radiazione-materia e dinamiche di stati eccitati", coordinata da Fabrizia Negri, si è trattato di progettazione di dispositivi fotocromici, di spettroscopia nello stato condensato (calcoli ed esperimenti), di previsione delle velocità delle reazioni fotochimiche, della teoria

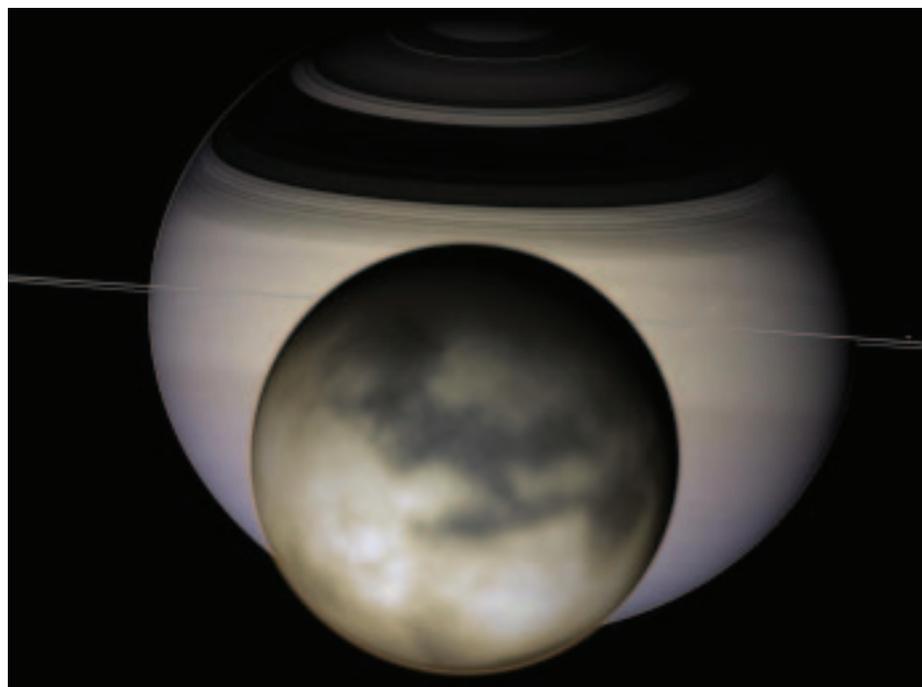
degli stati elettronici eccitati e dei motori molecolari azionati dalla luce.

Antonio Raudino ha coordinato la sessione sui "Sistemi di interesse biologico", nella quale sono stati presentati modelli "a grana grossa" per descrivere la fase chirale nematica del DNA e la teoria dell'idratazione idrofobica. Un approccio teorico quantistico è invece stato utilizzato nelle relazioni riguardanti il calcolo dei parametri spettroscopici delle molecole biologiche, di reazioni enzimatiche e fotochimiche e per la determinazione della struttura di agenti di contrasto per risonanza magnetica *in vivo*.

Di carattere principalmente metodologico è stata, come dice il titolo, la sessione

stalli liquidi, di liquidi molecolari, delle proprietà degli elastomeri e della solvatazione di ioni in metanolo; modelli quantistici per studiare il trasferimento elettronico in materiali funzionali e per la previsione dell'effetto del mezzo sulle proprietà molecolari e spettroscopiche.

La sessione sui "Nanomateriali" è stata coordinata da Maurizio Cossi. Le relazioni hanno riguardato lo studio teorico e sperimentale dei siti attivi sulle superfici di nanocluster di catalizzatori; lo studio computazionale delle proprietà di molecole adsorbite sulla superficie di semiconduttori, della struttura biovetri e delle superfici di materiali silicatici; l'adsorbimento a due



"Modelli e metodologie per lo studio di fasi condensate", coordinata da Antonino Polimeno. Si sono affrontati diversi argomenti: le prospettive dell'uso della spettroscopia ottica bidimensionale per lo studio di sistemi molecolari complessi; la simulazione, con diverse tecniche, di cri-

fotoni di aggregati di porfirine in soluzione e disperse in polimeri.

L'ultima sessione, coordinata da Vincenzo Aquilanti, ha avuto come tema i "Processi cinetici". Sono stati presentati alcuni studi sperimentali sull'uso di impulsi laser per il controllo di processi chimico-fisici, su rea-

zioni che avvengono in ambienti extraterrestri (di interesse per lo studio delle proprietà dell'atmosfera di Titano), sulla fotoisomerizzazione della tiocianina e sulla frammentazione omolitica di cationi chirali (gli ultimi due con una parte computazionale). Le relazioni di carattere teorico-computazionale hanno trattato di reazioni elementari e di modelli di cinetiche di non equilibrio nei plasmi.

La prima tavola rotonda, coordinata da Giuseppe Suffritti, dal titolo "Dinamica molecolare e metodi multiscale" ha passato in rassegna gli sviluppi recenti dei diversi metodi per la simulazione della dinamica di sistemi complessi, da quelli *ab initio* di carattere generale (Car-Parrinello) o specifici per i cristalli, alla "metadinamica", che consente un'accelerazione della dinamica lungo alcune specifiche coordinate (una tecnica particolarmente utile per lo studio



di processi attivati), all'uso di coordinate ipersferiche per l'analisi della dinamica di sistemi, ai metodi a "grana grossa", come l'elaborazione di modelli realistici ma non atomistici per lo studio dei cristalli liquidi o lo sviluppo di automi cellulari probabilistici per la simulazione dei processi diffusivi in materiali microporosi.

Nell'altra tavola rotonda, coordinata da Jacopo Tomasi e Giorgio J. Moro ("Chimica teorica: quali prospettive scientifiche ed organizzative?") si è discusso della situazione attuale, particolarmente in Italia, della ricerca teorico-computazionale e delle diverse prospettive di maggior coordinamento o aggregazione. Tali argomenti vengono trattati estesamente in questo numero della Rivista.

Tra i poster alcuni hanno presentato complementi delle relazioni orali, ma per la maggior parte hanno illustrato i risultati di ulteriori ricerche. Tra questi ultimi si possono ricordare alcuni studi con una parte sperimentale e una teorica: sui legami idrogeno tra molecole d'acqua e atomi di gas nobili, sulla strutture e caratteristiche di piccoli cluster di silicio e sulla conformazione degli oligopeptidi. Le simulazioni riportate nei poster hanno riguardato la struttura supermolecolare del collagene, la polimerizzazione in materiali mesoporosi, la struttura e le proprietà di adsorbimento di dendrimeri di polifenilene e la dinamica di fluidi molecolari in ambienti nanoconfinati. Altri studi hanno utilizzato tecniche di chimica computazionale

quantistica a diversi livelli di approssimazione, dove necessario, associate a simulazioni classiche o semiclassiche, per studiare gli effetti dei legami idrogeno sulle proprietà del radicale nitrossido, la reazione del metanolo con vinil-ossirani, gli spettri di fluorescenza di sistemi con gradi di libertà interna in presenza di solvatazione dinamica e l'interazione di enzimi con leganti fluorurati.

Le ricerche di carattere teorico-metodologico erano rappresentate da un nuovo metodo per l'elaborazione di accurati campi di forza intramolecolari da calcoli *ab initio* e da un modello dei primi stadi della fusione tra membrane lipidiche mediate da recettori.

L'impressione generale che si è potuta trarre dall'ascolto delle relazioni e dalle discussioni è che la ricerca sui sistemi complessi sta avviandosi, grazie non solo alla disponibilità di strumenti di calcolo sempre più potenti, ma anche allo sviluppo di nuove metodologie, verso una maturazione che consentirà, e in alcuni casi consente già ora, di integrare efficacemente l'aspetto sperimentale e teorico-computazionale per raggiungere una comprensione sempre più completa dei fenomeni e consentire la progettazione di materiali e dispositivi con proprietà nuove e interessanti.

Va particolarmente evidenziata, infine, la presenza, non solo tra i partecipanti ma anche tra i relatori, di numerosi giovani ricercatori (dottorandi, assegnisti, collaboratori a vario titolo) che rappresentano un capitale umano e una speranza da sostenere e non disperdere.

Il libretto degli abstract e la locandina del Convegno sono ancora disponibili sul sito web curato da Antonino Polimeno (www.chfi.unipd.it/~alghero05).