

Simulazioni Multi-Scala in materia condensata: un progetto che dura da mezzo secolo

Le simulazioni al computer sono ormai considerate uno strumento imprescindibile nell'ambito della struttura della materia, includendo sia quella inanimata (struttura e ingegneria dei materiali) che quella vivente (biochimica e biologia molecolare). Infatti, la rappresentazione in silico di un sistema molecolare complesso costituisce una sorta di ponte tra misura sperimentale e teoria: da un lato, la simulazione consente di raggiungere una risoluzione spaziale e temporale inaccessibile all'esperimento aiutando l'interpretazione delle misure. Dall'altro, il confronto tra osservabili misurati e calcolati consente validazione e miglioramento di teorie e modelli. Il livello di accuratezza e la massima dimensione del sistema simulabile sono limitati dalla potenza del computer. Sebbene la legge di Moore abbia assicurato fino ad oggi l'incremento esponenziale di quest'ultima, la spinta ad estendere le scale spazio-temporali delle simulazioni senza perdere accuratezza ha prodotto lo sviluppo e combinazione sinergica e coerente di metodi che rappresentano il sistema a diverse risoluzioni. Si intende qui illustrare questo che viene chiamato approccio multi-scala, attraverso una prospettiva storica che parte alla fine degli anni '60 e culmina nel Nobel per la chimica, assegnato nel 2013 a Karplus, Levitt, e Washel, padri fondatori del metodo. In questo mezzo secolo, l'approccio è stato implementato, utilizzato e affinato da un esercito di ricercatori da tutti i continenti, in quello che si potrebbe chiamare il più globale progetto scientifico della storia della ricerca.

Primary author: Dr TOZZINI, Valentina (Istituto Nanoscienze Cnr - NEST-Pisa)

Presenter: Dr TOZZINI, Valentina (Istituto Nanoscienze Cnr - NEST-Pisa)