

Colloqui interdipartimentali sui nuovi metodi computazionali

Carissime/i colleghe/i, carissime/i studentesse/i, le simulazioni numeriche hanno avuto un enorme impatto sullo sviluppo delle scienze quantitative fin dall'avvento dei Computer. In particolare, negli ultimi anni, sono stati introdotti nuovi metodi computazionali che stanno trasformando (in modo talvolta inaspettato) l'attività di ricerca in parecchi settori scientifici.

Sentiamo la necessità di discutere questi sviluppi recenti a livello trasversale rispetto ai singoli dipartimenti, perché i moderni approcci computazionali vengono efficacemente applicati in tutte le scienze quantitative. Crediamo quindi che in questo ambito il cosiddetto "transfer of knowledge" offra opportunità che sono potenzialmente estremamente vantaggiose.

Per tutte queste ragioni abbiamo intenzione di organizzare un ciclo di seminari sui moderni metodi computazionali e loro applicazioni in ambito scientifico. Intendiamo strutturare questi incontri in modo assolutamente **NON specialistico**, con una presentazione degli argomenti che sia comprensibile anche a tutti coloro che non sono esperti dell'argomento in discussione. Non mancherà la descrizione di aspetti tecnici delicati, ma questi saranno limitati ai metodi computazionali utilizzati.

La lunghezza del ciclo di seminari, l'estensione e la profondità degli argomenti che verranno discussi dipenderanno in larga misura dall'interesse e dall'entusiasmo che verranno suscitati in tutta la comunità che fa parte della Macroarea di Scienze o le orbita attorno.

Theoretical-computational modeling of quantum processes in complex chemical systems

by ANDREA AMADEI ^a

Modeling complex molecular systems, involving a huge number of interacting particles and characterized by the coexistence of quantum and classical-like degrees of freedom, represents the challenge of the forefront research in Chemistry. By combining atomistic Molecular Dynamics simulations with specific theoretical models developed in our group, we reconstructed in details several quantum processes (ranging from the spectroscopic behavior to chemical reactions and vibrational state dynamics) within a complex chemical system (liquids, solutions and biomacromolecules), explicitly addressing the quantum-classical coupling within the statistical mechanical framework. In this presentation I will illustrate the basic concepts of the theoretical-computational models used, showing a few applications to infrared (IR) spectroscopic behavior and vibrational state dynamics in solvated Myoglobin.

^aDipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università degli Studi di Roma Tor Vergata