

A Miramare gli inventori del metodo che consente la simulazione di fenomeni atomici e molecolari

## Car e Parrinello: il Nobel? Incrociamo le dita...

di Fabio Pagan

**TRIESTE** Se provate a chieder loro quando si aspettano la telefonata da Stoccolma, si schermiscono e dicono di non volerli pensare. Un po' sul serio e un po' per scaramanzia. Perché, se un altro Nobel dovesse arrivare da queste parti (dopo quello al pakistano Abdus Salam nel '79 e quello al goriziano Carlo Rubbia nell'84), sarà per merito di una coppia di scienziati della materia che poco più di vent'anni or sono – proprio qui a Trieste – posero le basi di un metodo che consente la simulazione di fenomeni atomici e molecolari e che da loro prende il nome: Car-Parrinello Molecular Dynamics.

Roberto Car (triestino, oggi alla Princeton University) e Michele Parrinello (messinese, oggi al Politecnico di Zurigo) si sono ritrovati in questi giorni al Centro di fisica teorica assieme a tanti colleghi e amici italiani e stranieri. L'occasione: il simposio organizzato per festeggiare i 60 anni di Car. Tre giorni densissimi di relazioni e discussioni hanno dato la misura del successo di un metodo che ha aperto una terza via alla ricerca: dopo la teoria e l'esperimento, ecco la simulazione numerica al computer, che permette di utilizzare i dati reali per esplorare situazioni impossibili da verificare in loco o da realizzare in laboratorio.

L'algoritmo di Car e Parrinello è oggi largamente usato per studiare la struttura di materiali solidi e liquidi, nell'analisi di problemi chimici, biologici, farmacologici. Qualche esempio?

Si possono ricreare al computer condizioni estreme di temperatura e pressione, accertando che al centro della Terra si sfiorano i 6000 gradi e che il cuore dei pianeti Urano e Nettuno è ricco di diamanti. E poi tutto quanto concerne la nuova frontiera delle nanotecnologie: nanotubi di carbonio, fullereni, nanoatrito...

«Tutto cominciò nell'inverno del 1984», ricorda Roberto Car. «Fu allora che conobbi Michele e tra noi due ci fu una risonanza immediata. Io mi occupavo di struttura elettronica dei cristalli, lui di meccanica statistica e dinamica molecolare. Così mettemmo insieme le rispettive competenze».

All'epoca i due erano sul-

la soglia della quarantina. Car (di origine fiumana) si era laureato in ingegneria nucleare al Politecnico di Milano, aveva lavorato in Svizzera e poi negli Stati Uniti ai laboratori Ibm di Yorktown Heights ed era appena tornato a Trieste, alla Sissa. Parrinello, laureato in fisica a Bologna, era invece professore associato al Dipartimento di fisica teorica dell'ateneo triestino, che ha tuttora sede nel «main building» dell'Ictp.

Fu così che lavorando soprattutto di sera, quando i computer erano più liberi, Car e Parrinello si dedicarono a un problema che all'epoca rappresentava una sfida affascinante per chi si occupava di fisica dello stato solido: il silicio liquido.

«Si sapeva per via sperimentale che il silicio, fondendo, passa da semiconduttore a metallo», spiega Roberto Car. «Ma non c'era alcuna teoria soddisfacente per descrivere la transizione di fase».

Testimoni raccontano che furono notti di bora tempestosa quelle in cui Car e Parrinello scrissero a Miramare l'articolo più importante della loro carriera. Lo inviarono a *Physical Review Letters*, rivista prestigiosissima e selettiva, che lo pubblicò nel novembre del 1985. Il titolo: «Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory».

L'effetto fu subito dirompente e da allora quell'articolo ha avuto migliaia di ci-



Roberto Car e Michele Parrinello al Centro di fisica teorica di Trieste (foto di Massimo Silvano)

tazioni. Una recente statistica dell'*American Physical Society* lo pone al quinto posto tra gli articoli della rivista più citati. E l'im-

portanza del loro algoritmo è confermata dai riconoscimenti che i due – in coppia o da soli – hanno ricevuto a livello internazionale. ///

Da quell'inverno del 1984 la dinamica della vita li ha separati. Roberto Car è rimasto alla Sissa fino al 1991, diventando profes-

Uno prosegue le sue ricerche alla Princeton University l'altro al Politecnico di Zurigo

re ordinario. Poi è andato in Svizzera a insegnare all'Università di Ginevra e a dirigere il centro di fisica computazionale dei materiali al Politecnico di Losanna. Fino al 1999, quando ha accettato l'incarico di professore alla Princeton University.

Parrinello, dopo una parentesi alla Sissa, si è trasferito in Svizzera, prima all'Ibm di Zurigo, poi a Stoccarda e infine al Politecnico di Zurigo (il celebre Eth), dove è professore di scienze computazionali.

Ma la «danza» degli atomi e delle molecole resta al centro dei loro interessi. Spiega Roberto Car: «A Princeton, col mio gruppo, cerchiamo di applicare il nostro algoritmo per simulare sistemi con l'acqua, all'interfaccia della biologia. E ci occupiamo di materiali compositi che si ispirano a sistemi biologici e di trasporto di elettroni in nanostrutture». Parrinello, invece, è affascinato soprattutto dalla possibilità di progettare al computer nuovi farmaci. E dallo studio delle molecole proteiche: «Funzionano bene quando sono ripiegate su se stesse. Ma quando le proteine si aprono possono diventare pericolose, si aggregano tra loro. E abbiamo l'Alzheimer».

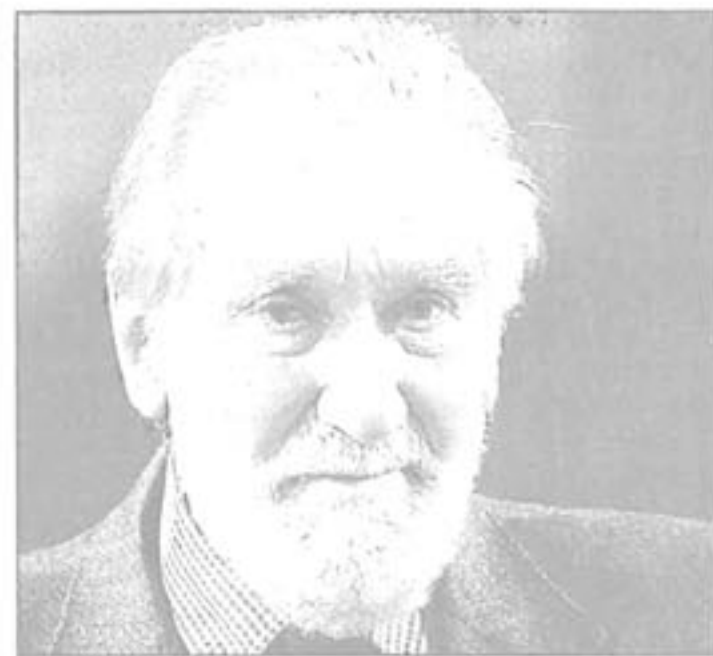
Pur separati, Car e Parrinello continuano a restare in stretto contatto. E periodicamente la «strana coppia» nata nelle notti di bora triestine torna a riunirsi. È successo nel novembre del 2005, quando l'Università di Trieste premiò Roberto Car con la laurea ad honorem. È successo nei giorni scorsi a Miramare. Succederà – forse – prossimamente a Stoccolma. Auguri.

**PREMIO** Ha vinto con il suo libro «Stagioni» pubblicato da Einaudi

## A Mario Rigoni Stern il «Recanati»

**RECANATI** Mario Rigoni Stern con «Stagioni», edito da Einaudi, ha vinto la seconda edizione del Premio Città di Recanati per la narrativa italiana. Lo scrittore nato ad Asiago, 86 anni, che conquistò la fama con «Il sergente nella neve», un racconto autobiografico sull'esperienza di sergente degli alpini nella disastrosa ritirata di Russia, ha dedicato l'ultima fatica, «Stagioni» appunto, alla natura e al suo equilibrio.

La premiazione si è svolta ieri nell'Aula magna del Municipio di Recanati. La giuria, presieduta da Giancarla Mursia, ha scelto il libro di Rigoni Stern; mentre la giuria dei lettori ha premiato Gaetano Savatteri, per «Gli uomini che non si voltano» (Sellerio). A consegnare il premio (un assegno da 15 mila euro) a Mario Rigoni Stern è stata Anna Leopardi.



Lo scrittore Mario Rigoni Stern

**ARTE** L'inaugurazione della mostra al Circolo Fincantieri-Wärtsilä di Trieste

## Premio Caraian, oggi i vincitori

**TRIESTE** S'inaugura oggi, alle 11, nella Sala espositiva del Circolo Fincantieri-Wärtsilä in Galleria Fenice, 2, primo piano a Trieste, la mostra delle opere dei vincitori del XXI Concorso per le arti figurative indetto dalla Fondazione Lilian Caraian e riservato ai giovani artisti della regione Friuli Venezia Giulia, che ancora non hanno compiuto 35 anni.

La giuria, composta dalla presidente della Fondazione Anna Rosa Rugliano, dal critico Marianna Accerboni, dagli artisti Adriano Bon e Franco Vecchiet e presieduta dal presidente del Sindacato Artisti Paolo Marani, ha attribuito il primo premio, consistente in 500 euro, al ventunenne pittore triestino Enea Chersicola; una borsa di studio per frequentare un corso all'Accademia Estiva di Salisburgo, dove fu attiva come allieva anche la Caraian, al ventu-

enne artista italo-argentino Martin Romeo; il terzo premio ex aequo di 250 euro a testa ai triestini Davide Agapito, 22 anni, e Michele Fattor, 32 anni.

Al ventisettenne artista triestino Marco Ghersinich è andata, invece, una segnalazione e la coppa offerta dal Circolo Fincantieri-Wärtsilä.

La manifestazione cade nel 25.º anniversario della morte di Lilian Caravian (1914-1982), poliedrica artista triestina, che operò nelle arti figurative, in campo musicale e nella poesia, ottenendo significativi risultati e riconoscimenti a livello nazionale e internazionale, e che volle che, grazie a un lascito testamentario, si costituisse una fondazione avente lo scopo di incoraggiare e premiare in maniera tangibile i giovani particolarmente meritevoli nelle arti figurative e nella musica.