



COMUNICATO STAMPA  
8 agosto 2009

## L'ICTP assegna la Medaglia Dirac a due esperti del metodo di simulazione della dinamica molecolare

Il Centro internazionale di fisica teorica "Abdus Salam" - ICTP ha annunciato i vincitori della Medaglia Dirac 2009: si tratta di Roberto Car e Michele Parrinello, premiati per il loro rivoluzionario metodo di simulazione numerica di dinamica molecolare da principi primi.

Il cosiddetto "Metodo Car-Parrinello" unisce tramite una teoria nota come teoria funzionale di densità (Density Functional Theory - DFT) il calcolo quantitativo dell'energia degli elettroni con la simulazione in tempo reale della dinamica molecolare newtoniana del moto meccanico degli atomi e delle molecole. Il metodo ha permesso una conoscenza ampia e fondamentale delle proprietà della materia, e ha consentito ai fisici della materia ma anche a chi scienziato non è di visualizzare gli atomi in movimento durante i processi chimici e fisici.

"Con la Medaglia Dirac di quest'anno, l'ICTP intende dare un pubblico riconoscimento all'impatto enorme che il metodo Car-Parrinello ha avuto sulla creazione delle simulazioni molecolari", ha dichiarato il direttore dell'ICTP K. R. Sreenivasan. Ha poi aggiunto: "Questa è la prima volta che l'assegnazione della Medaglia Dirac riconosce il pieno merito della fisica computazionale, di cui il metodo Car-Parrinello è una delle grandi pietre miliari".

"Fino agli anni '80, la simulazione della dinamica molecolare era poco più che un gioco. Infatti occorreva troppo tempo per calcolare le vere forze elettroniche che agiscono sugli atomi per poterle utilizzare in una successiva simulazione. Per questo motivo i calcoli venivano generalmente eseguiti con forze empiriche, inventate", dice Erio Tosatti, ex direttore ad interim dell'ICTP e ricercatore dello stato solido che alla fine degli anni '70 ha portato Car e Parrinello al Dipartimento di fisica teorica dell'Università di Trieste e alla Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), allora ambedue nella stessa sede dell'ICTP ed in stretta collaborazione con esso.

La soluzione geniale ed elegante trovata da Car e Parrinello per aggirare il problema considera i parametri elettronici della DFT come coordinate atomiche aggiuntive e fittizie e ne causa il moto allo stesso momento del moto degli atomi. I due scienziati pubblicarono un articolo sul proprio metodo sul numero di novembre 1985 di *Physical Review Letters*. Ora quell'articolo è sesto nella graduatoria degli articoli più citati pubblicati in quella rivista, con un totale di 5.027 citazioni. Queste ricerche hanno creato un nuovo paradigma ormai indispensabile per tutti i fisici della materia, per i chimici e anche per i biologi.

Nato a Trieste, Roberto Car insegna presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Princeton negli Stati Uniti. Michele Parrinello, nato a Messina, è professore presso la Eidgenössische Technische Hochschule in Svizzera.

(segue)

La Medaglia Dirac dell'ICTP viene assegnata a scienziati che abbiano contribuito in modo determinante al progresso della fisica, allo scopo di onorare la memoria di Paul Adrien Maurice Dirac, uno dei più grandi fisici del XX secolo. Dalla fine degli anni '60 fino all'inizio degli anni '80, Paul Dirac è venuto spesso a Trieste per insegnare presso l'ICTP, di cui era grande fautore. L'assegnazione della Medaglia viene annunciata ogni anno l'8 agosto, giorno del genetliaco di Paul Dirac. E' accompagnata da un premio in denaro del valore di 5.000 dollari.

La cerimonia di consegna si terrà all'inizio del 2010.

Il Centro internazionale di fisica teorica "Abdus Salam" - ICTP, con sede a Trieste, promuove la ricerca avanzata in fisica e in matematica, con particolare riguardo per i Paesi in via di sviluppo. Il Centro opera nel quadro di un accordo trilaterale tra il Governo italiano, l'Unesco e l'Aiea. Ogni anno circa 7000 scienziati provenienti da tutto il mondo vengono a studiare all'ICTP per frequentare corsi e convegni oppure per periodi di ricerca e di formazione. Per ulteriori informazioni: [www.ictp.it](http://www.ictp.it)

Per ulteriori informazioni sulla Dirac Medal e la lista completa dei vincitori: [prizes.ictp.it/Dirac](http://prizes.ictp.it/Dirac)

Per ulteriori informazioni:

Sig.ra Anna Triolo  
Public Information Office  
ICTP  
Strada Costiera, 11  
34151 Trieste  
tel. 040 2240 564  
fax 040 2240 7564

lun-ven 8:30-16:30

[triolo@ictp.it](mailto:triolo@ictp.it)  
[pressoffice@ictp.it](mailto:pressoffice@ictp.it)