



I.T.I.S. "ALESSANDRO ROSSI"  
Via Legione Gallieno, 52 – 36100 Vicenza  
Distretto Scolastico n. 33 – Vicenza Est  
tel. 0444-500566 – fax 0444-501808  
e-mail: [info@itisrossi.vi.it](mailto:info@itisrossi.vi.it) – C.F. 80016030241



Il Dipartimento di Chimica dell'ITIS Rossi è lieto di presentare

# The Chemistry Matinees

## La Probabilità in Chimica (Modelli Stocastici e Dinamica Molecolare)

PROF. DIEGO FREZZATO. *PH.D.*

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE - UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Mercoledì 02/05/2018 – Dalle ore 11:30 alle ore 12:35 – Aula Magna ITIS ROSSI

I fenomeni su **scala macroscopica** abitualmente studiati dal chimico sono descrivibili in termini "**deterministici**", cioè con una (ragionevole) certezza sul loro esito. Ad esempio, il decorso di una reazione chimica ha una **cinetica** descritta da equazioni che consentono di calcolare la **concentrazione** di ogni specie in funzione del **tempo**. Tuttavia, quando si indagano eventi che interessano **single molecole**, insieme di **poche molecole**, o strutture su scala **nanoscopica** in mezzi condensati fluidi, la certezza lascia spesso il posto all'aspettazione (**expectation**) su ciò che **si osserverà in un istante futuro**. La descrizione deterministica viene quindi sostituita da una **visione probabilistica** e, da ormai un secolo, la sfida per il **chimico-fisico** consiste nel costruire modelli per effettuare **predizioni realistiche sugli stati futuri**. Mentre in ambito **quanto-meccanico** l'aleatorietà sull'esito di una osservazione è **intrinseca**, nel **contesto classico** essa scaturisce dall'impossibilità pratica di **descrivere in modo esatto** il sistema in questione (e quindi la sua **dinamica**), o dalla **mancanza di informazione completa** su di esso. Casi esemplari sono le **dinamiche molecolari "stocastiche"** quali il **moto browniano** e le **fluttuazioni conformazionali** di molecole dotate di flessibilità interna, il **decorso di reazioni chimiche coinvolgenti bassi numeri di molecole**, e la **storia di una singola molecola** tra le tante coinvolte in un network di reazioni. In questo incontro, mediante esempi, si cercherà di cogliere come la **probabilità** entra nelle scienze chimiche.

Vicenza, 23/02/2018

Il Referente del Progetto TCM

F.to Prof. Roberto Zanrè

Il Dirigente Scolastico

F.to Prof. Alberto Frizzo