

Autori:

Dott. Amato Paolo

Università degli Studi di Milano Bicocca - Dip. Informatica, Sistemistica e Comunicazione

Dott. Cerofolini Gianfranco

Prof. Narducci Dario

Università degli Studi di Milano Bicocca - Dip. Scienza dei Materiali

Titolo:

Un approccio non riduzionistico per il calcolo di alcune proprietà di molecole e reazioni chimiche

Abstract:

Dall'introduzione della meccanica quantistica in avanti, la chimica è stata considerata un capitolo della fisica. Tuttavia la chimica conserva dei concetti antecedenti all'introduzione dell'atomo di Bohr, e che nella meccanica quantistica non trovano posto. Difatti mentre quest'ultima descrive le molecole in termini di nuclei ed elettroni che la costituiscono, i chimici sperimentali continuano a utilizzare i concetti di atomo e legame chimico per la predizione di reazioni chimiche e per la spiegazione di diversi fenomeni. Inoltre questi strumenti, seppur scarsamente formalizzati, hanno una grande capacità predittiva e si basano su semplici calcoli aritmetici. Infatti alcune proprietà delle molecole (come le distanze di legame e l'energia interna) si riducono a funzioni semplici di quelle degli atomi e legami che le costituiscono.

Qui viene presentato lo sviluppo in Mathematica di alcuni di questi strumenti di calcolo. Questi strumenti si basano anche sulla proposta di una rigorosa formalizzazione della chimica generale, basata su logica fuzzy e teoria dei grafi, presentata da alcuni degli autori in [1].

L'applicazione accede al database di Chimica di Mathematica per estrarre le matrici di adiacenza (e quindi i grafi) associati alle molecole. A partire da queste matrici vengono poi calcolate quantità quali la somma delle energie di legame di una molecola o l'entalpia di una reazione chimica. Per evitare l'uso di strutture di controllo iterative (come i cicli for), tutti questi calcoli sono realizzati utilizzando le funzioni matriciali di Mathematica, e vengono effettuati sia in forma simbolica che numerica.

Referenze

[1] G.F. Cerofolini e P. Amato, Fuzzy Chemistry: An Axiomatic Theory for General Chemistry, Proceeding of Fuzzy Systems Conference, 2007 (FUZZ-IEEE 2007), pag. 1-6, 2007