

Simulazione della materia, Trieste anticipa il futuro

Fisica & supercalcolo. Dopo aver inaugurato l'era dell'informatica scientifica, la Sissa studia come creare materiali partendo da proprietà desiderate

Antonio Larizza



Dal nostro inviato

TRIESTE

Dopo aver trascorso tre anni nel tempio della fisica dei materiali, i laboratori Ibm di Yorktown Heights, a New York, nel 1984 il fisico Roberto Car torna in Italia alla Scuola internazionale superiore di studi avanzati (Sissa). In tasca ha un codice di calcolo rudimentale, visto con gli occhi di oggi, ma sofisticatissimo per quei tempi. A Trieste Car incontra Michele Parrinello, professore all'Università di Trieste e alla Sissa, formatosi anche lui negli Usa, all'Argonne national laboratory. Insieme, nell'inverno tra l'84 e l'85 creano il metodo Car-Parrinello: un metodo per simulare materiali al computer osservando il moto di atomi e molecole.

Un lavoro che ha avvicinato i due fisici più volte al premio Nobel. E che ha cambiato per sempre la storia della fisica dei materiali e del calcolo scientifico. Ma anche una risposta alla sfida lanciata nel 1929 da Paul Dirac, premio Nobel per la fisica nel 1933. «Tutti i metodi necessari per capire l'intera chimica e gran parte della fisica – aveva scritto il fisico inglese – sono noti. Purtroppo, questa conoscenza è incapsulata in equazioni che nessuno sa risolvere». Ora, alcune di quelle equazioni potevano avere una soluzione.

La stanza in cui Car e Parrinello definirono il loro metodo era anche l'ufficio di Stefano Baroni, allora ricercatore dell'Università di Trieste, che nello stesso inverno insieme al fisico Paolo Giannozzi cominciò a lavorare sul codice Ibm in un'altra direzione, sviluppando la "Teoria perturbativa del funzionale densità": un

metodo per simulare le vibrazioni atomiche dei materiali e la loro risposta a stimoli esterni. Oggi Baroni è professore di fisica teorica della materia condensata alla Sissa e direttore della Fondazione Quantum Espresso. Quantum Espresso è il codice open source nato con il metodo Car-Parrinello e oggi più utilizzato al mondo per la simulazione quantistica dei materiali. Permette di predire le proprietà chimico-fisiche di un materiale usando la sola composizione chimica come dato di input. I paesi Ue affiliati all'impresa comune EuroHPC per il calcolo ad alte prestazioni vantano il più alto numero di autori di articoli scientifici che citano l'uso di Quantum Espresso, seguiti da Usa e Cina. Tra le istituzioni, il Cnr è secondo al mondo per citazioni, dopo il Dipartimento dell'energia americano. Il software compare poi tra gli strumenti di ricerca e nei brevetti di società ed enti come Eni, Leonardo, Bosch, Toyota, Huawei, Samsung, Nasa e Mit.

«La storia del metodo Car-Parrinello e del codice Quantum Espresso – spiega il rettore della Sissa Andrea Romanino – è emblematica per spiegare la capacità della Scuola di attrarre talenti e dar loro strumenti per progetti di frontiera. Nella scienza dei materiali abbiamo mostrato come si poteva utilizzare un supercomputer per fare alta ricerca in fisica». Oggi la Scuola è specializzata in fisica, neuroscienze e matematica. Gianluigi Rozza, professore di Analisi numerica e calcolo scientifico alla Sissa, guida il Matlab: gruppo di ricerca di matematica applicata. Rozza è anche delegato per il trasferimento tecnologico: «Vogliamo promuovere – spiega – le potenzialità della scienza per l'industria e la società».

Grazie a fondi del Pnrr, la Sissa si doterà di un nuovo supercomputer. Tramite la ricerca sul progetto Quantum Espresso – finanziata con circa 4 milioni di euro dal centro europeo MaX e dalla fondazione Ipsc – collabora con produttori di hardware come Nvidia, Intel, Amd e Arm. Non è un caso che il supercomputer Leonardo del Cineca – che quando fu acceso, nel 2022, era il quarto più potente del mondo – sia nato da una partnership tra Sissa, Miur, Cineca e Infn.

La Sissa è una piccola scuola che fa cose grandi. Una fucina di prototipi innovativi che poi diventano standard. La Scuola è stata la prima istituzione in Italia a conferire il titolo di PhD. E ancora, è stata la Sissa, nel 1997, a pubblicare la prima rivista elettronica al mondo distribuita gratuitamente e capace di sfidare monopoli editoriali con il motto «giornale degli scienziati per gli scienziati»: era il *The Journal of High Energy Physics*, oggi prima rivista al mondo per impact factor nel suo campo.

Nata come costola del Centro internazionale di fisica teorica (Ictp) – uno dei pochi posti al mondo in cui negli anni della Guerra Fredda potevano incontrarsi scienziati di entrambi i lati della cortina di ferro e dove di nuovo oggi lavorano insieme fisici russi e ucraini, palestinesi e israeliani – la Sissa non ha mai perso la vocazione alla diplomazia scientifica. Sul sito della fondazione Quantum Espresso campeggia la Guernica di Picasso, «in solidarietà alle vittime di tutte le guerre». La Fondazione, insieme a Sissa e Ictp, offre formazione e risorse di calcolo alla comunità scientifica

di paesi emergenti come Brasile, India e Africa.

Ricordando la frase di Dirac, Baroni ripercorre la strada fatta e traccia gli sviluppi futuri. «Siamo arrivati al punto – spiega – in cui data la struttura di un materiale, si riesce a predirne le proprietà. Il prossimo passo sarà percorrere il cammino inverso. Partire dalle proprietà che voglio ottenere per definire il materiale, senza conoscerne a priori la struttura chimica o magari conoscendola, ma dovendola scartare perché composta da elementi nocivi, costosi, inquinanti, scarsi o presenti in zone politicamente instabili». Ai e reti neurali giocheranno un ruolo chiave. «Siamo agli albori, ma credo che ci si arriverà nel giro di pochi anni», spiega Baroni.

Dal metodo Car-Parrinello in poi, la comunità della Sissa non ha mai smesso di lavorare per liberare sempre più conoscenze, tra quelle incapsulate in equazioni che nessuno sa risolvere.

© RIPRODUZIONE RISERVATA