

La sfida dell'informatica molecolare

Vincenzo Balzani

Dipartimento di Chimica "G. Ciamician"
Università di Bologna
vincenzo.balzani@unibo.it

Tra il dire e il fare c'è di mezzo
... la Chimica

Scienza Giovane, Bologna
12 novembre 2011

Se pensi
che l'istruzione
sia costosa,
prova l'ignoranza.

Derek Bok,
Harvard University, USA

La Scienza educa alla democrazia

Le caratteristiche della scienza
rigore, oggettività, dubbio,
confronto, collaborazione,
libertà di pensiero, accettazione
del dissenso, rifiuto di
sottostare ad imposizioni
sono i pilastri della democrazia.

Se tu ed io ci scambiamo
un dollaro, restiamo sempre
con un dollaro ciascuno.

Se invece ci scambiamo
un'idea, dopo tu ne hai due
ed io pure.

Dan Zandra



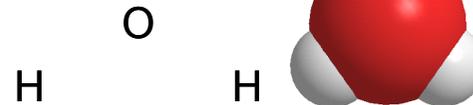
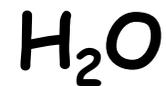
Un albero è fatto
essenzialmente di aria e di sole.
Quando brucia
torna ad essere aria
e nel calore della fiamma
ci ridà il calore fiammeggiante del sole
che era stato imprigionato
per convertire l'aria in albero.

Richard Feynman

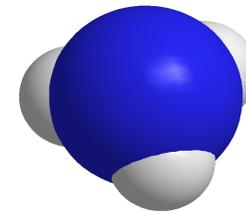
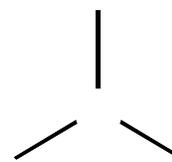
Le molecole

sono **molto piccole** (miliardesimi di metro: nanometro), ma sono “oggetti” con **dimensione, composizione, forma e struttura** specifiche:

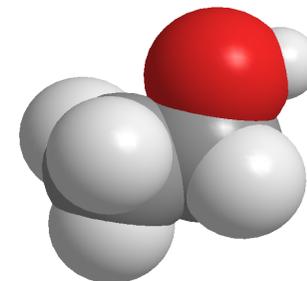
acqua



ammoniaca



alcol etilico



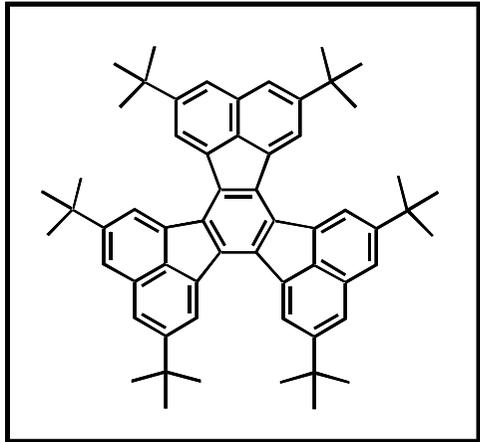
L'acqua è costituita da molecole, H_2O

In una goccia d'acqua ci sono circa
 10^{21} molecole

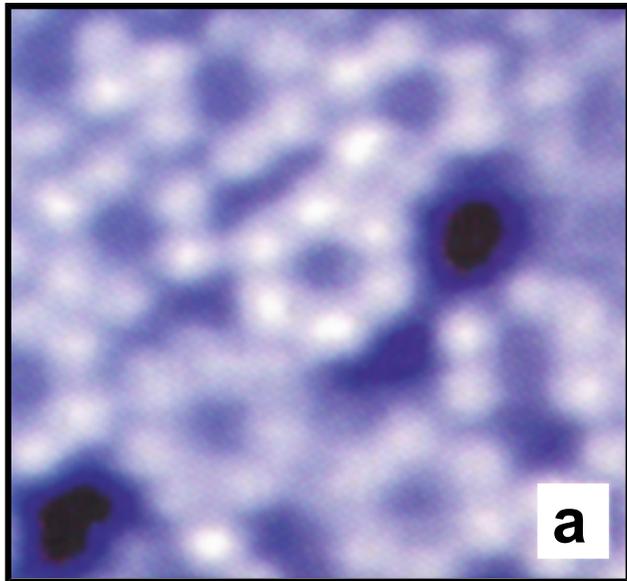
Se volessimo contarle al ritmo di una
al secondo, ci vorrebbero
30.000 miliardi di anni

Goethe si opponeva all'uso del
microscopio.

Diceva che se c'era qualcosa che
non si poteva vedere ad occhio
nudo, non si doveva andarla a
vedere, perchè evidentemente era
nascosta per qualche buona ragione.



Formula chimica della molecola di
hexa-tert-butyldecacyclene

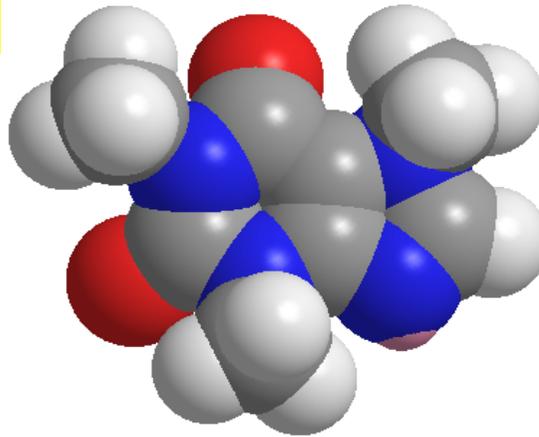
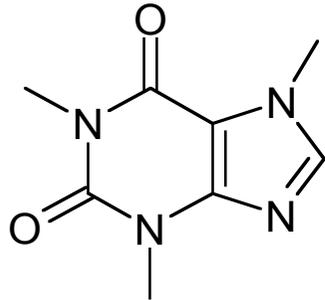


Immagini, ottenute con una tecnica speciale, di molecole di *hexa-tert-butyldecacyclene* appoggiate su una superficie.

Ogni molecola ha un diametro di 1,5 nanometri

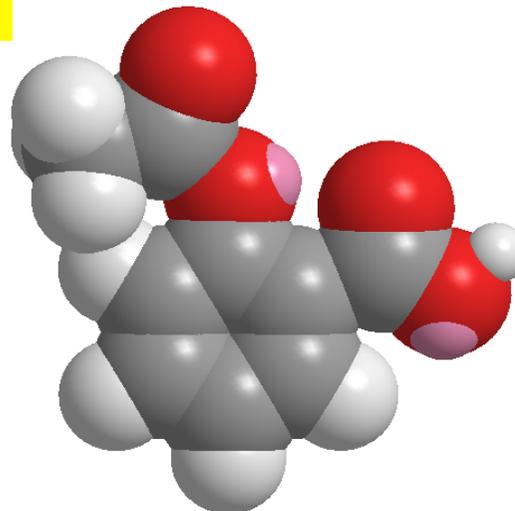
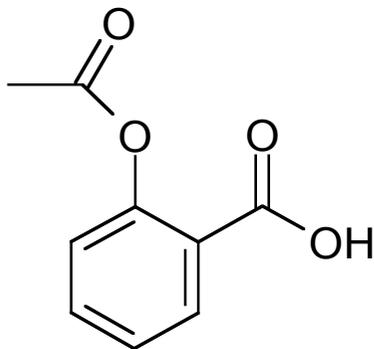
caffeina

molecola naturale



acido acetil salicilico $C_9H_8O_4$

molecola artificiale



Le molecole sono “oggetti” tridimensionali con una loro propria **composizione, dimensione, struttura e forma;** da queste loro caratteristiche derivano le loro proprietà (effetto sugli organismi, ecc).

Il duplice ruolo del chimico

Esploratore:

esplora il mondo (ha scoperto circa 5 milioni di molecole naturali) e cerca di capire come funziona (es. la fotosintesi delle piante).

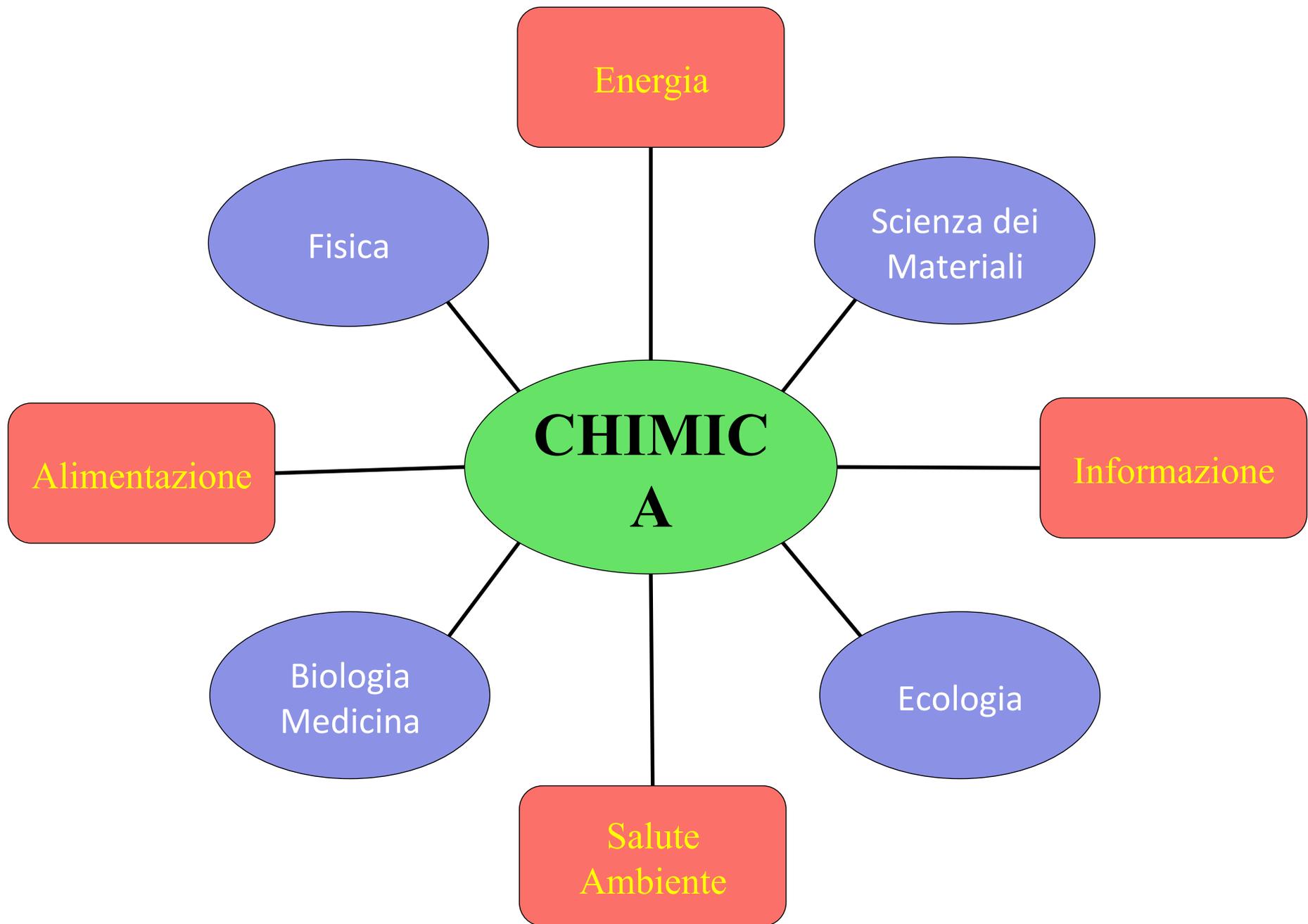
Inventore:

Crea nuove molecole (finora circa 15 milioni di molecole artificiali) e nuovi processi (es. fotovoltaico).

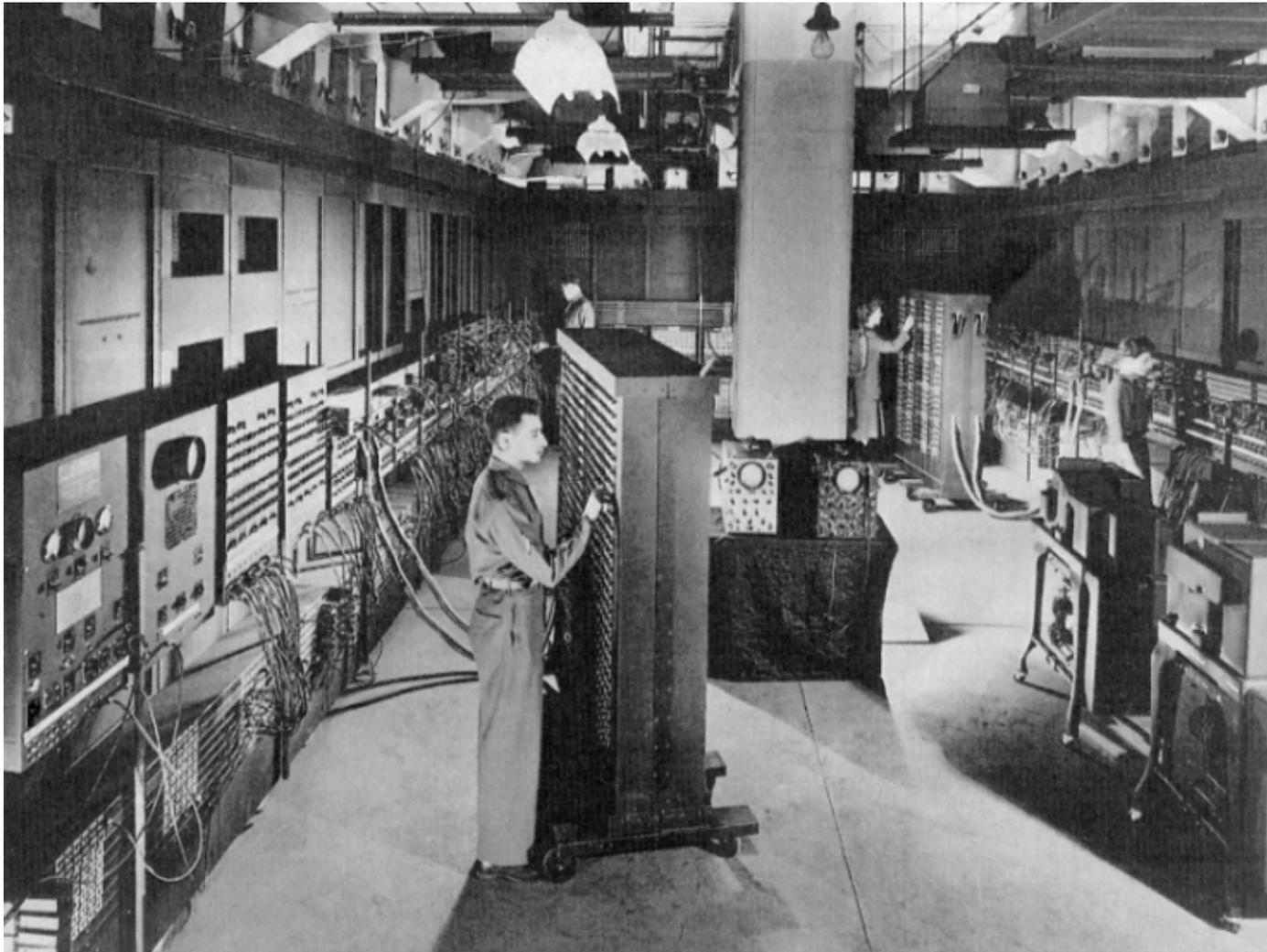
La **Chimica** è un "libro" non soltanto da "leggere" (molecole e processi naturali), ma anche da "scrivere" (molecole e processi artificiali).

La parte da "leggere" è ancora molto vasta; quella che si può "scrivere" è praticamente infinita.

Ecco perché la **Chimica** caratterizzerà
il nostro futuro



ENIAC: il primo computer elettronico (1944)
30 ton 19000 valvole 200 kW



Computer elettronico 2011

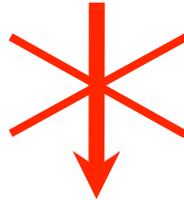
< 1 kg 100 milioni di transistor 65 W

Materiali macroscopici



approccio "dall'alto"
(fisici, ingegneri)

MICRO TECNOLOGIA (10^{-6} m)
(ad es. microcircuiti)



NANO TECNOLOGIA (10^{-9} m)
nuove tecnologie per l'informatica,
la medicina, la scienza dei materiali, ecc.

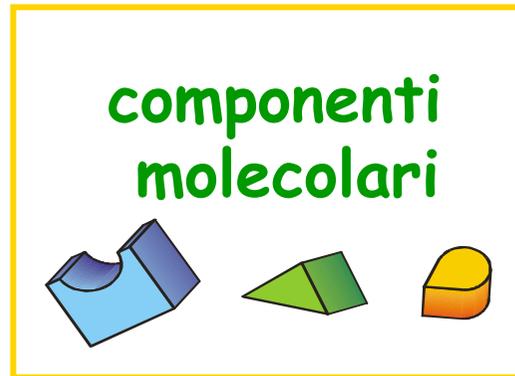


approccio "dal basso"
(chimici)

Molecole

Nanotecnologia

ideazione
e sintesi



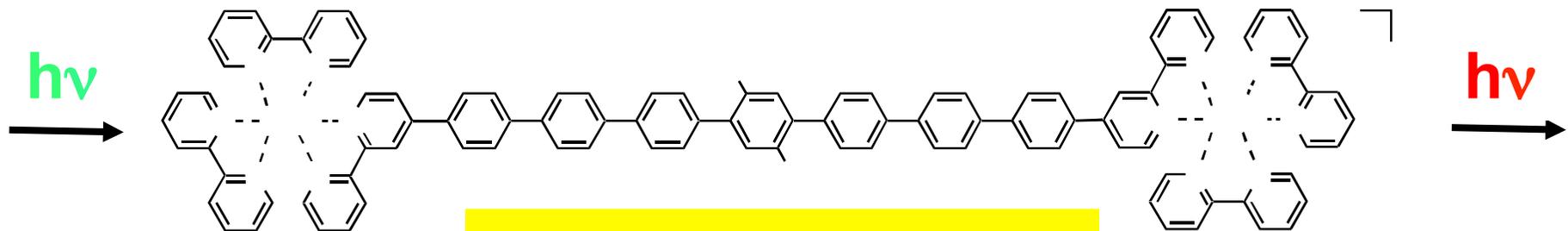
proprietà
(chimiche,
fisiche, ...)

autoassemblaggio
o
sintesi



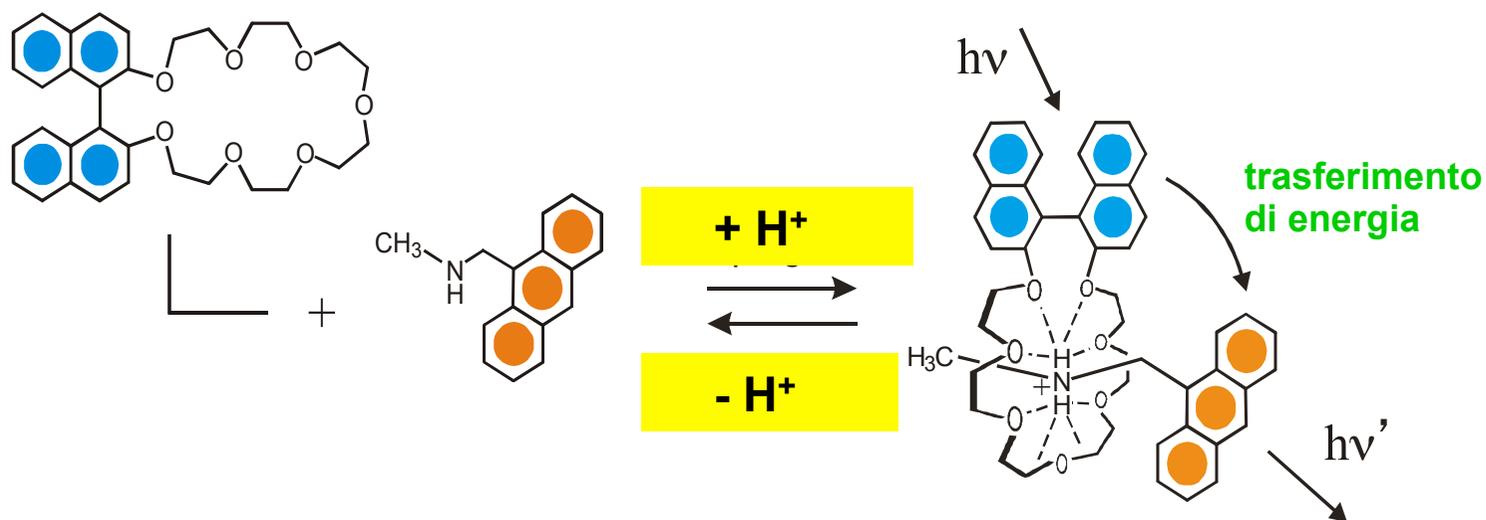
funzione

Filo molecolare

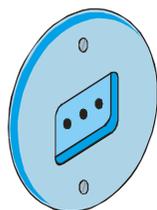


lunghezza: 4.2 nm

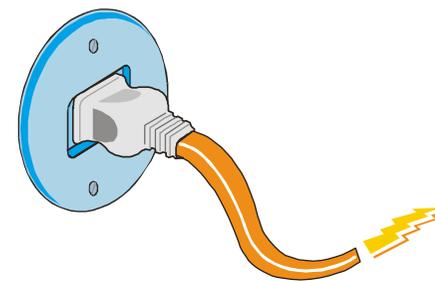
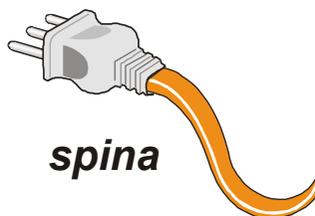
Presca/spina a livello molecolare (nanometrica)



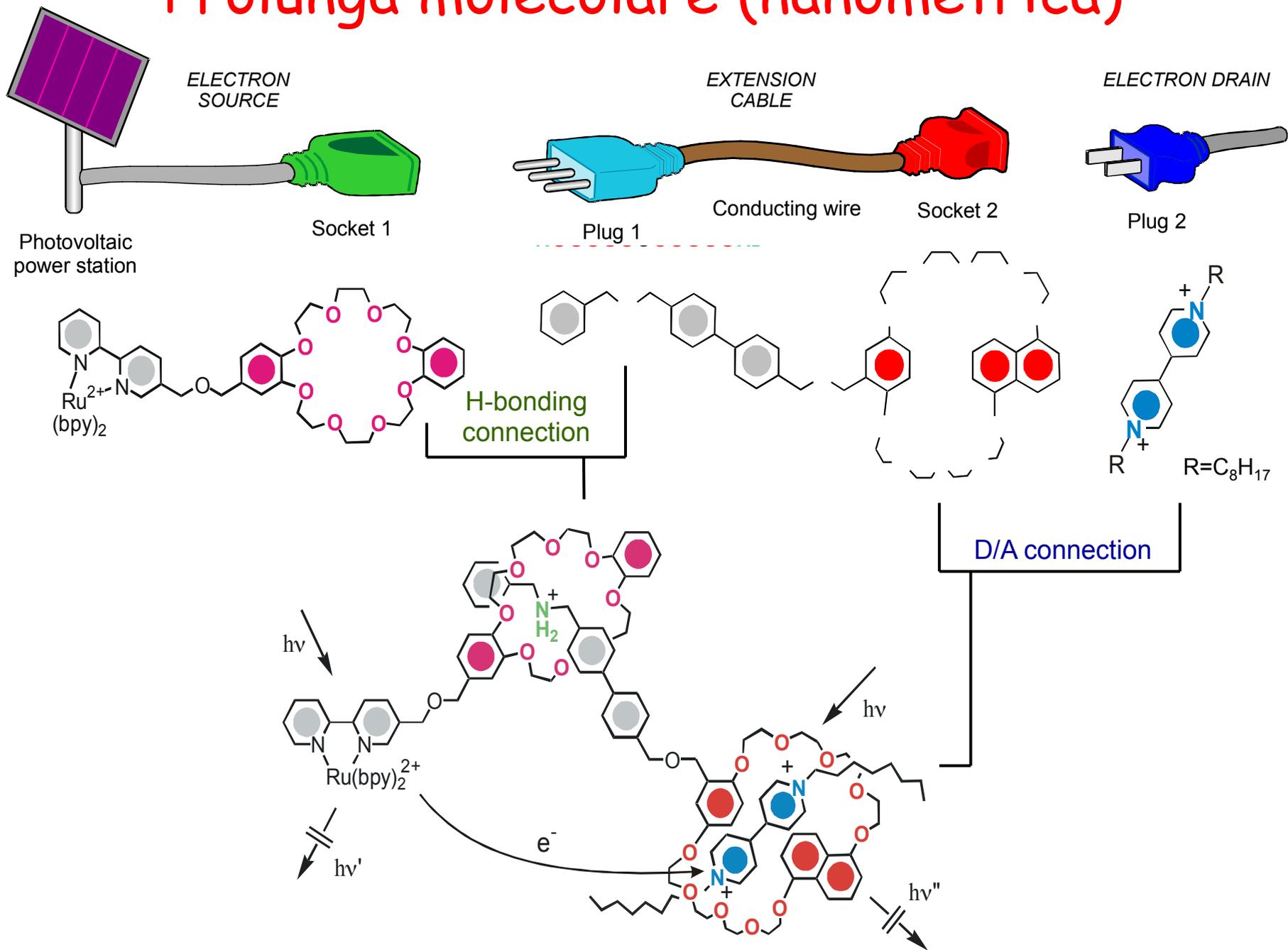
presa



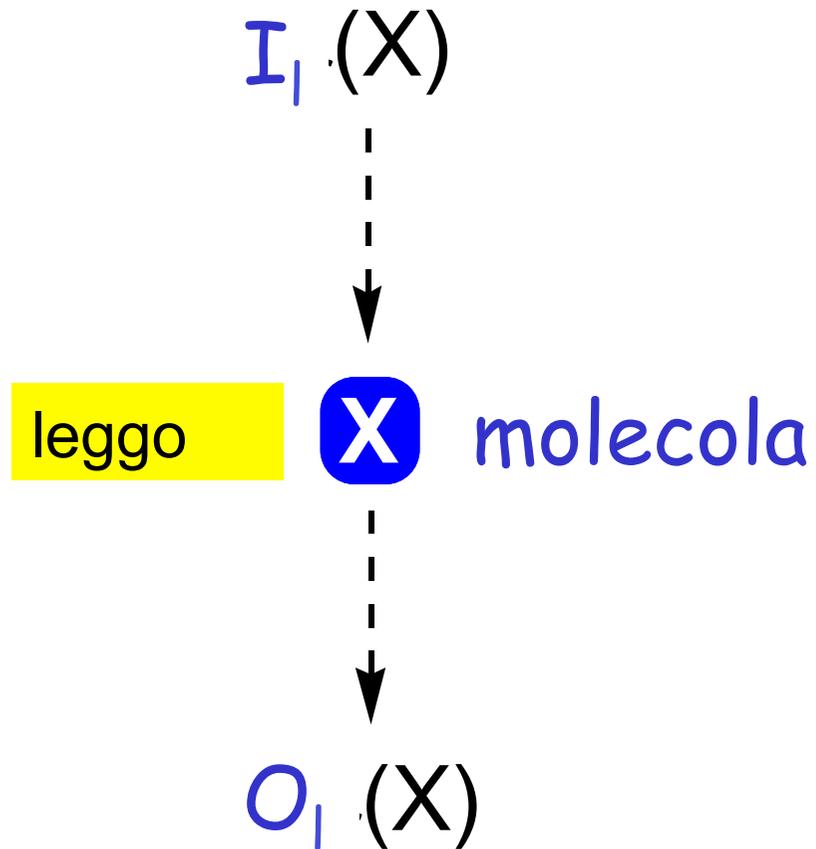
spina



Prolunga molecolare (nanometrica)

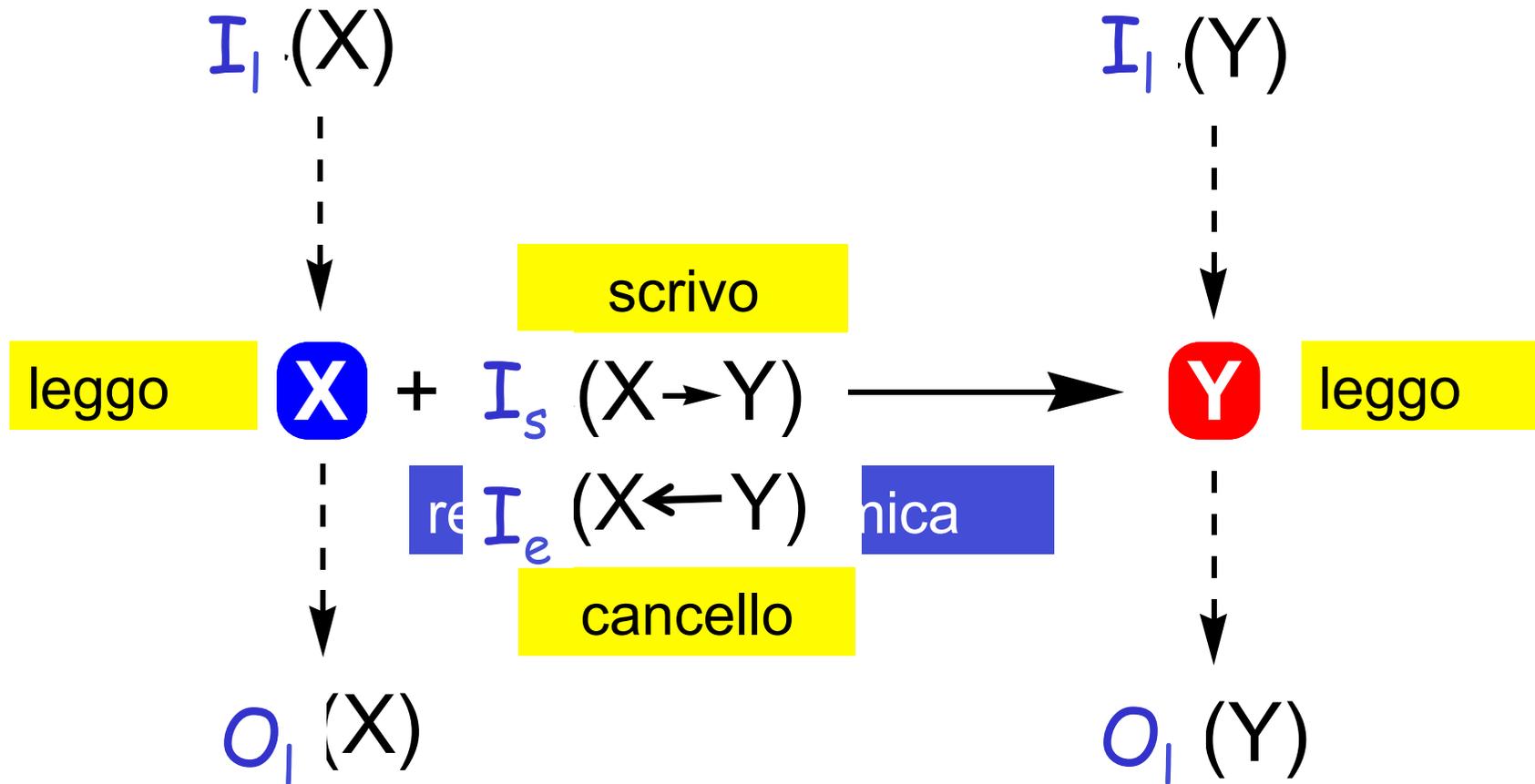


Uso di segnali luminosi per “leggere”

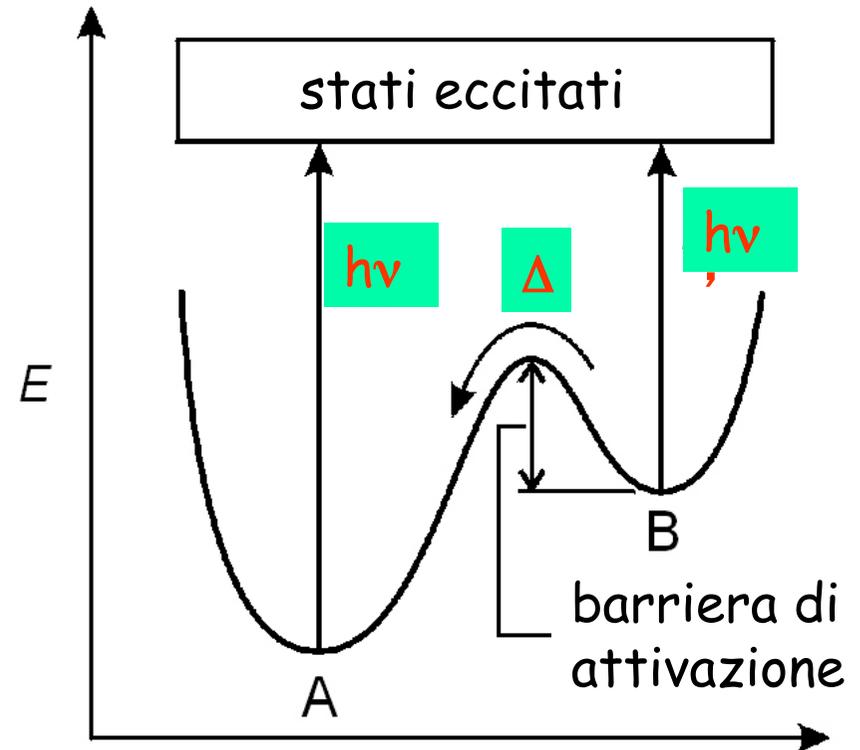
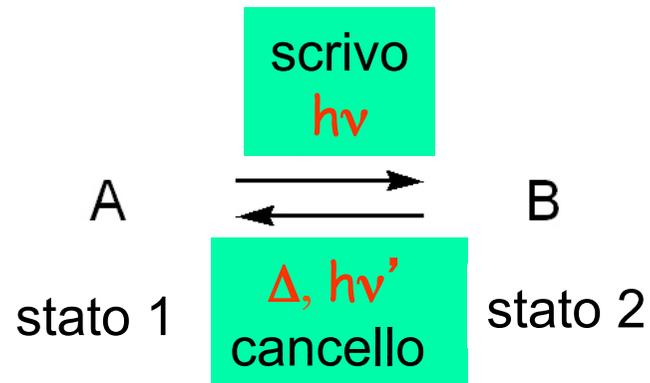


I_1 = input reading
 O_1 = output reading

Uso di segnali luminosi per “leggere”, “scrivere”, e “cancellare”

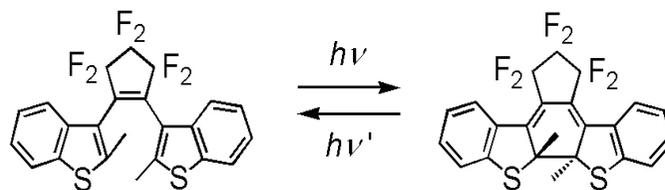


Composti fotocromici

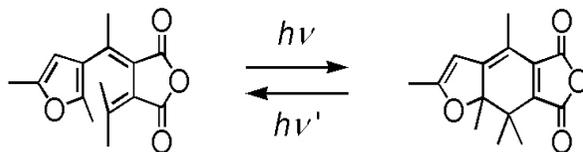


Il bit scritto dal fotone può cancellarsi spontaneamente (Δ) oppure può essere cancellato di proposito, per esempio con un fotone di diversa lunghezza d'onda.

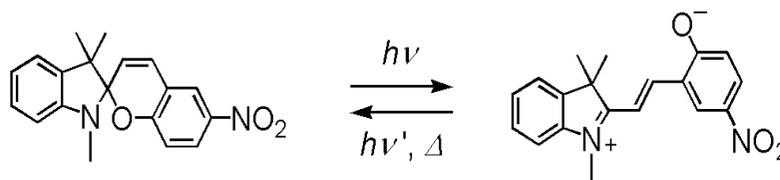
diarylethenes



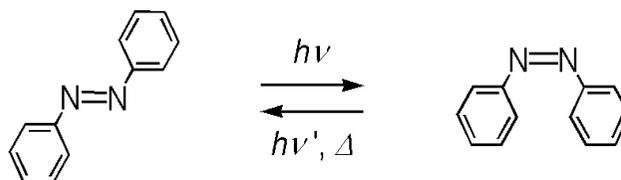
fulgides



spiropyrans



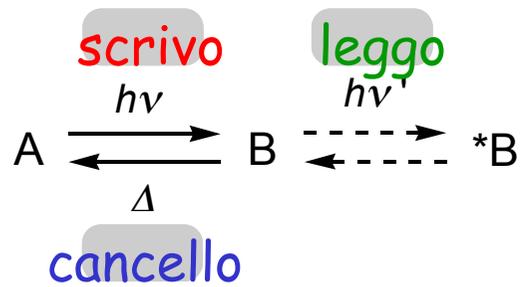
azobenzenes



Esempi di composti fotocromici che possono essere usati come memorie molecolari

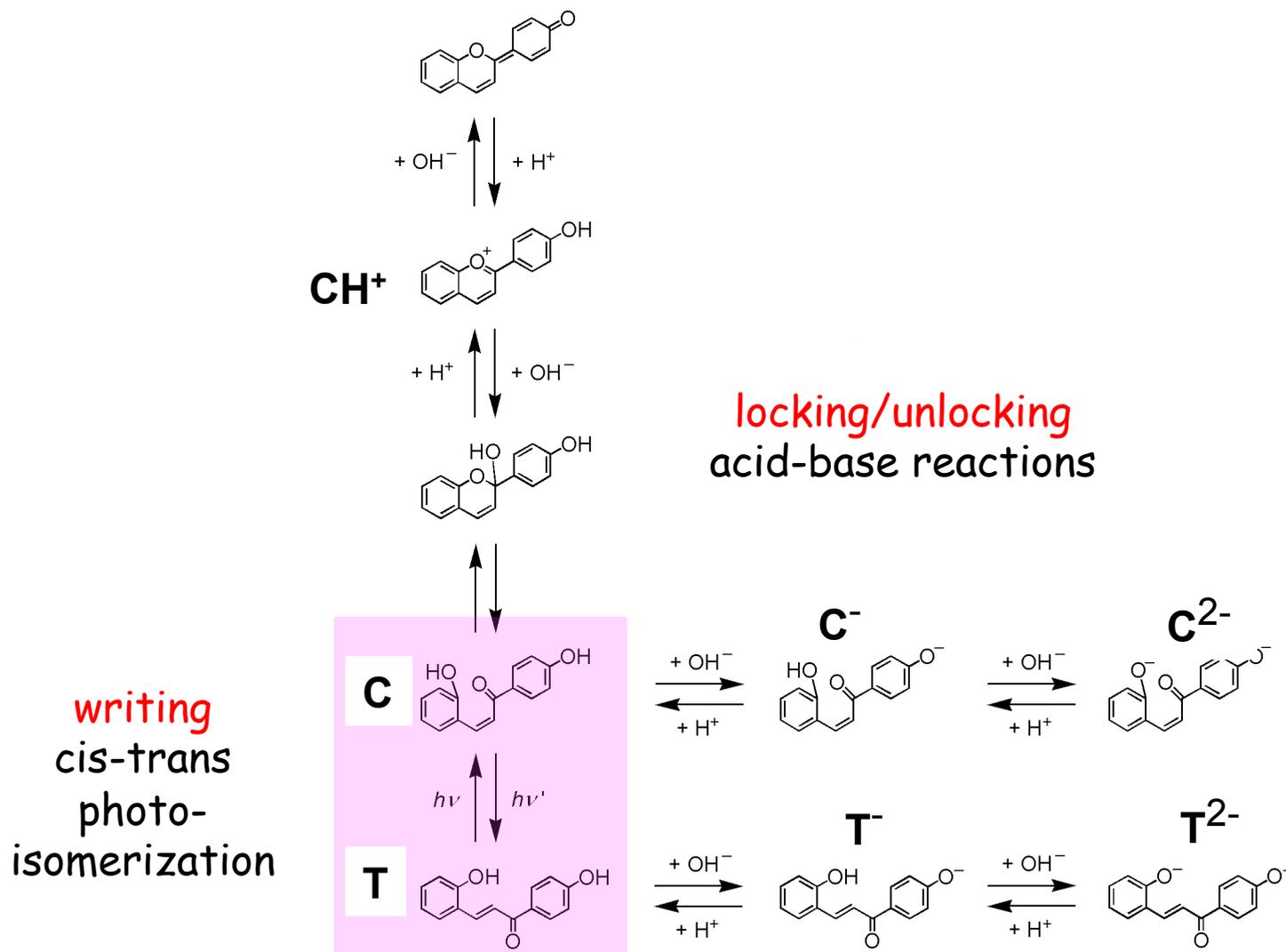
Memorie molecolari

a

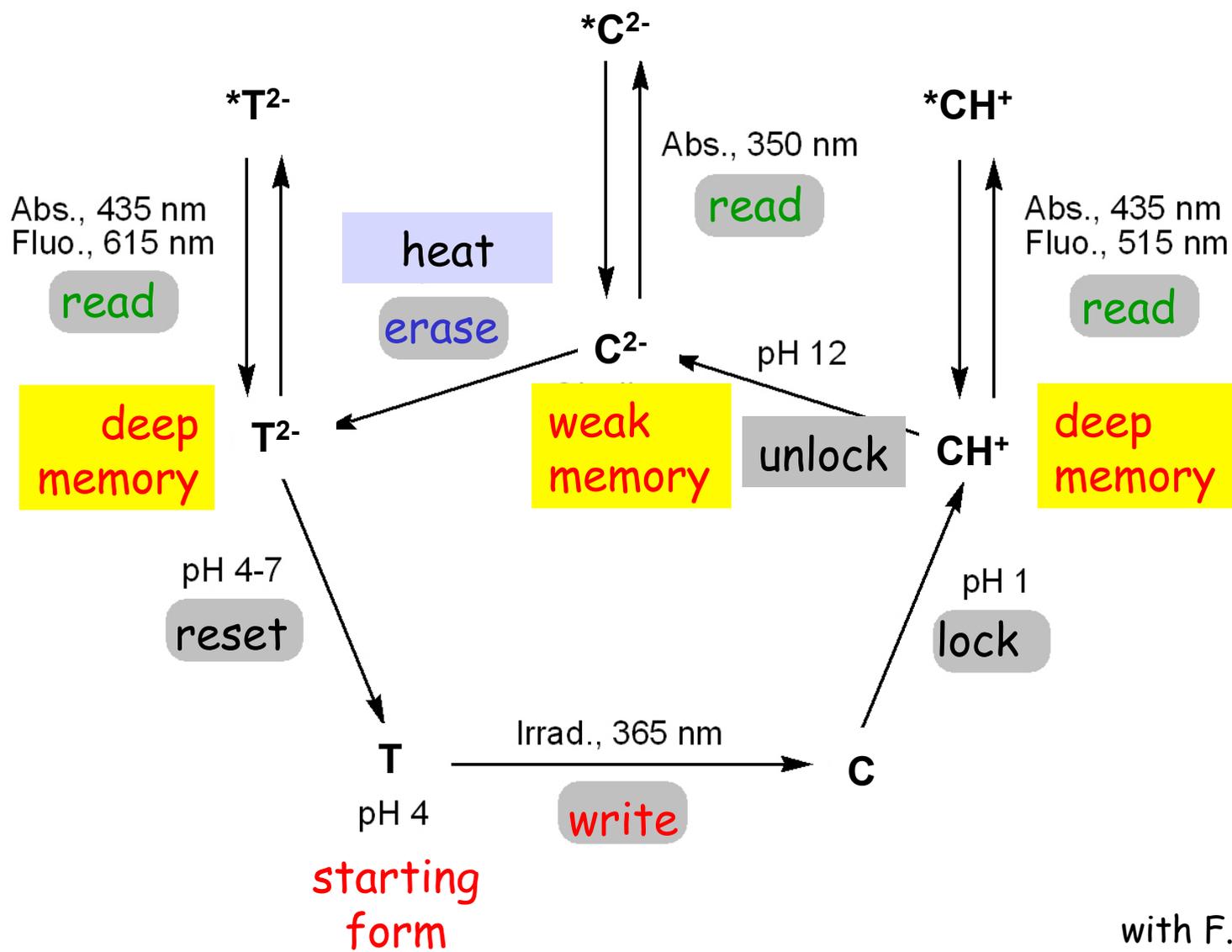


memoria
"debole"

Interconversion of the 9 forms of 4'-hydroxy-flavilium under the effect of photonic or chemical inputs

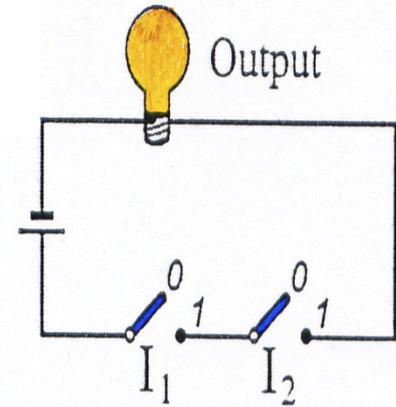


Deep and weak memories with 4'-hydroxyflavilium



with F. Pina

Porta logica AND

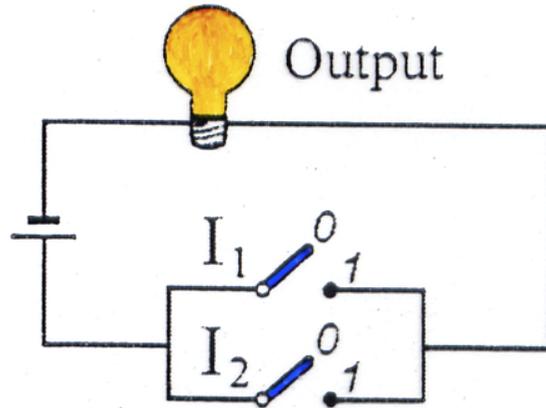


$X \equiv I_1$	$Y \equiv I_2$	Output
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

$X = Na^+$ $Y = H^+$

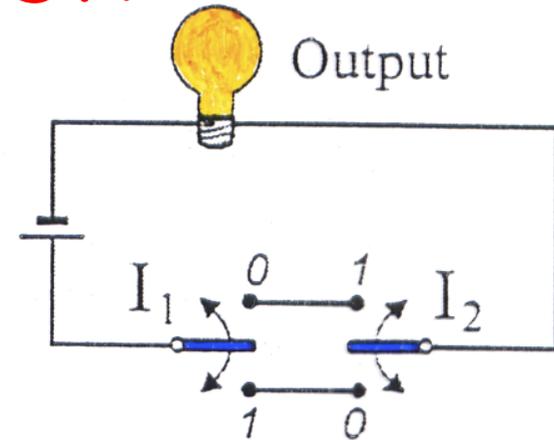
altre porte logiche

OR

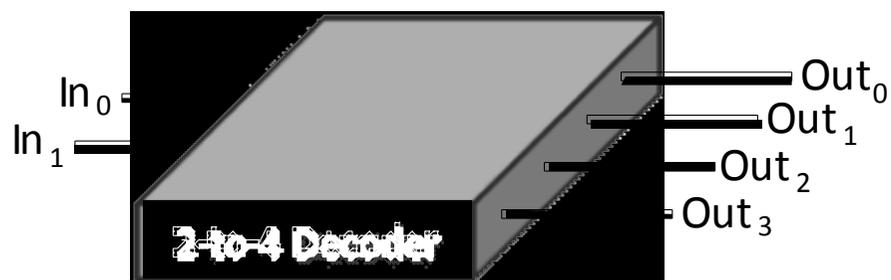


$X \equiv I_1$	$Y \equiv I_2$	Output
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

XOR



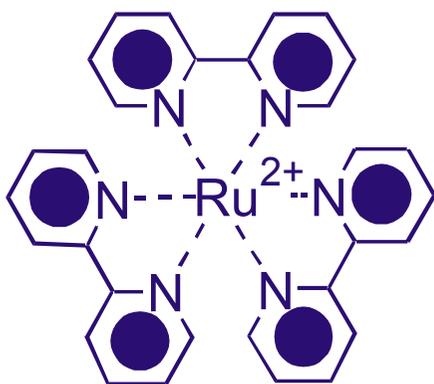
$X \equiv I_1$	$Y \equiv I_2$	Output
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0



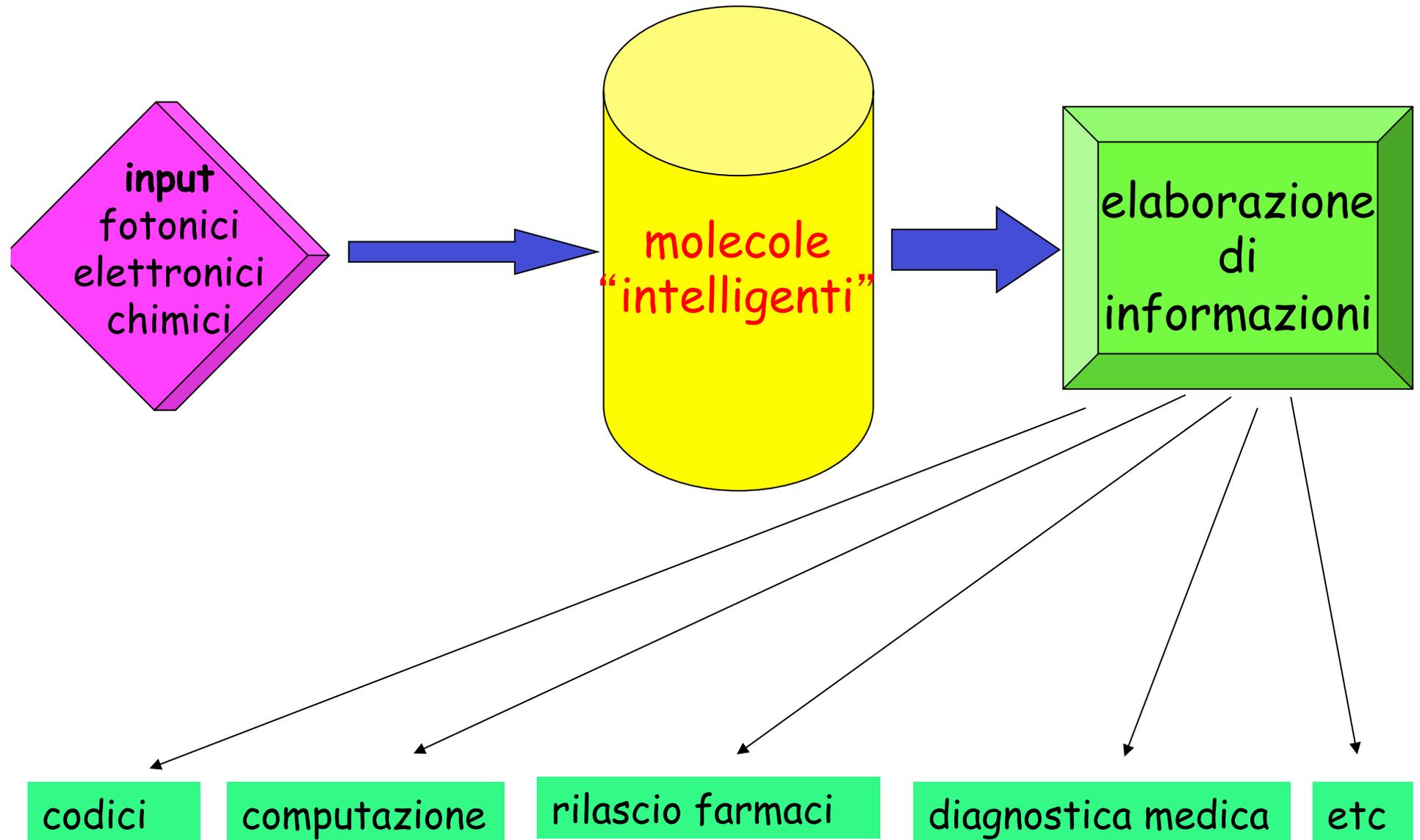
converte 2 input codificati
in 4 distinti output.



comprime 4 input distinti
in 2 output codificati.



La Chimica l'informazione



L'istruzione ha prodotto
un gran numero di persone
capaci di leggere

ma incapaci di distinguere
quello che merita
di essere letto.

G.M. Trevelyan

L'istruzione scientifica
ha prodotto
un gran numero di persone
capaci di lavorare nella scienza

ma incapaci di distinguere
quello che con la scienza merita
di essere fatto.

La Scienza

Per fare che cosa?

La scienza va usata:

- per la pace e non per la guerra
- per alleviare la povertà e non per mantenere i privilegi
- per ridurre e non per aumentare le disuguaglianze fra paesi ricchi e paesi poveri
- per fare patti e non per creare contrasti fra le generazioni