



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA

DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE

Università degli Studi dell'Aquila
Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche
Corso di Laurea in Fisica
Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Chimiche e dei
Materiali

Seminari per studenti delle Lauree Triennali
A.A. 2015/2016

Via Vetoio, Loc. Coppito, L'Aquila
Edificio "Renato Ricamo" (Coppito 1),
Aula 1.6 (primo piano)

Mercoledì 11 Novembre 2015 h. 14.00

Prof. Mario Marsili

"Artificial Intelligence in Chemistry: Fact or Fiction?"

La Chemioinformatica (ex Computer Chemistry) è una disciplina di nicchia della Chimica che è nata circa 40 anni fa. Lo stimolo iniziale fu quello di esplorare le possibilità di autodeduzione di un computer nel campo della chimica organica. Dopo una iniziale fase di trasformazione delle strutture basilari chimiche, rappresentate in modo semantico nel linguaggio quotidiano del chimico umano, in una rappresentazione più formale, più matematica, si è passati all'ampliamento delle tematiche fino ad includere la sintesi organica, la spettroscopia, la gestione di banche dati chimici, la modellazione molecolare 3D, e l'analisi statistico-matematica di dati chimici anche in larga scala.

Oggi viene offerta una vasta scelta di software mirati per le varie esigenze, ma l'aspetto culturale e scientifico che ancora rappresenta una sfida, risiede nel rapporto fra uomo e computer, inteso come macchina pensante, come Intelligenza Artificiale. Il seminario cerca di illustrare alcune fasi storiche e innovative nel pensiero chimico legato alla sua realizzazione informatica, portando il discorso al limite della conoscenza di oggi e verificando quanto sia realizzabile un "chimico artificiale", a sostituzione o ad affiancamento di noi chimici umani.