

Indice

I	Il chimico moderno e l'informatica	1
1	Le attività produttive del chimico e l'elaboratore elettronico	5
1.1	La produzione industriale chimica	8
1.1.1	Il sensore	10
1.1.2	Il sistema di elaborazione	12
1.1.3	La miniaturizzazione	14
1.2	Il laboratorio analitico	16
1.2.1	Il laboratorio tradizionale	17
1.2.2	Il calcolatore e la misura chimica	19
1.2.3	Dall'officina al Metalaboratorio	21
1.2.4	L'analisi chimica nelle altre discipline	22
1.3	L'elaboratore e l'esperimento chimico	24
1.3.1	L'esperimento gestito da computer	24
1.3.2	La gestione dei dati sperimentali	25
1.3.3	L'esperimento e il modello interpretativo	27
1.3.4	L'esperimento virtuale	30
2	L'informatica nelle attività intellettuali del chimico	33
2.1	Prodotti generici	34
2.1.1	La gestione dell'elaborazione per icone e finestre	34
2.1.2	Elaboratori di testo: Word e LATEX	36
2.1.3	Fogli elettronici: Excel	41
2.1.4	Presentazione: Power Point	43
2.2	Prodotti specifici	45
2.2.1	Grafica Molecolare	43
2.2.2	Calcolo numerico, simbolico e ipertestuale	45

2.3	La visualizzazione: la chimica per immagini	50
2.3.1	Trattamento e visualizzazione dei dati	52
2.3.2	Il meccano molecolare	53
2.3.3	La visualizzazione per la diagnosi e la simulazione	55
3	La telematica e il chimico	59
3.1	Dalle reti alla metarete	60
3.1.1	Le reti e la nostra civiltà	61
3.1.2	Le reti telematiche e l'informazione	61
3.1.3	La metarete Internet	63
3.2	La rete e la ricerca scientifica	64
3.2.1	La rete GARR	65
3.2.2	La Rete e il Web	66
3.2.3	La ricerca delle informazioni in rete	67
3.2.4	L'informazione chimica	70
3.2.5	Dall'associazione alla comunità virtuale dei chimici	74
3.3	Internet come strumento di lavoro	76
3.3.1	Le riviste on line: la biblioteca virtuale	76
3.3.2	Internet e la presentazione del lavoro	81
3.3.3	Internet e il calcolo chimico	83
3.3.4	I problem solving environment (PSE)	85
3.3.5	Internet e l'insegnamento	86
3.3.6	Verso i sistemi esperti	89
II	Verso la realtà virtuale molecolare	93
4	Gli strumenti chimici	97
4.1	La struttura elettronica	98
4.1.1	La funzione d'onda atomica	99
4.1.2	La funzione d'onda molecolare	100
4.2	Le funzioni dei nuclei	103
4.2.1	La superficie di energia potenziale	104
4.2.2	Il calcolo quantistico della funzione nucleare	105
4.2.3	Metodi classici	107
4.2.4	Tecniche statistiche	110
4.3	I sistemi complessi	111
4.3.1	Dalle molecole complesse alle molecole della vita	111

4.3.2	La sintesi di nuove molecole	113
4.3.3	La BioInformatica	115
5	Gli strumenti informatici	123
5.1	Strutture e categorie della conoscenza	124
5.1.1	Le relazioni	124
5.1.2	La costruzione dell'informazione	126
5.1.3	La costruzione degli algoritmi	127
5.2	La programmazione direttiva	129
5.2.1	I linguaggi direttivi	129
5.2.2	La pseudocodifica	131
5.2.3	Il linguaggio FORTRAN	134
5.3	La programmazione ad oggetti	136
5.4	La realtà molecolare: una realtà a dimensione nanometrica	138
5.4.1	Tempo e spazio del virtuale	139
5.4.2	Immergersi nel web	140
5.4.3	Il cibernazio	141
5.4.4	Gli archetipi fondamentali	142
5.4.5	La realtà virtuale	144
5.4.6	Il linguaggio della realtà virtuale	145
5.4.7	La realtà virtuale molecolare	147
III	Scienza e tecnologia: Chimica e Informatica	149
6	Il contributo della chimica all'informatica	155
6.1	I semiconduttori e la chimica	158
6.1.1	Produzione dei semiconduttori	160
6.1.2	Purificazione e drogaggio	162
6.1.3	L'assemblaggio del transistor	163
6.2	Le stampanti	164
6.3	I supporti della memoria	166
6.3.1	La registrazione magnetica	166
6.3.2	La registrazione ottica	170
6.4	La circuiteria organica	171
6.4.1	Il transistor polimerico	173

6.4.2 Dispositivi video	174
6.5 Il calcolatore quantistico	178
6.6 Epilogo	178