

**“L’elegante coordinata danza degli atomi”****Abstract di Michele Parrinello**

Nella fase gassosa molecole ed atomi si muovono indipendentemente gli uni dagli altri e se mi si può perdonare questa rappresentazione antropomorfa sono po' come individui isolati. Nelle fasi liquide e solide invece le molecole sono in stretto contatto fra di loro. Questo conduce a interessanti comportamenti collettivi. Tali comportamenti collettivi dipendono da condizioni ambientali come la temperatura e la pressione che inducono spesso a grandi cambiamenti di fase con grandi fluttuazioni in vicinanza della transizione da una fase all'altra. Le simulazioni numeriche ci consentono di studiare in dettaglio questi fenomeni e di ottenere una descrizione vivida del comportamento del sistema e del contrasto fra comportamenti di singole molecole e comportamenti collettivi.