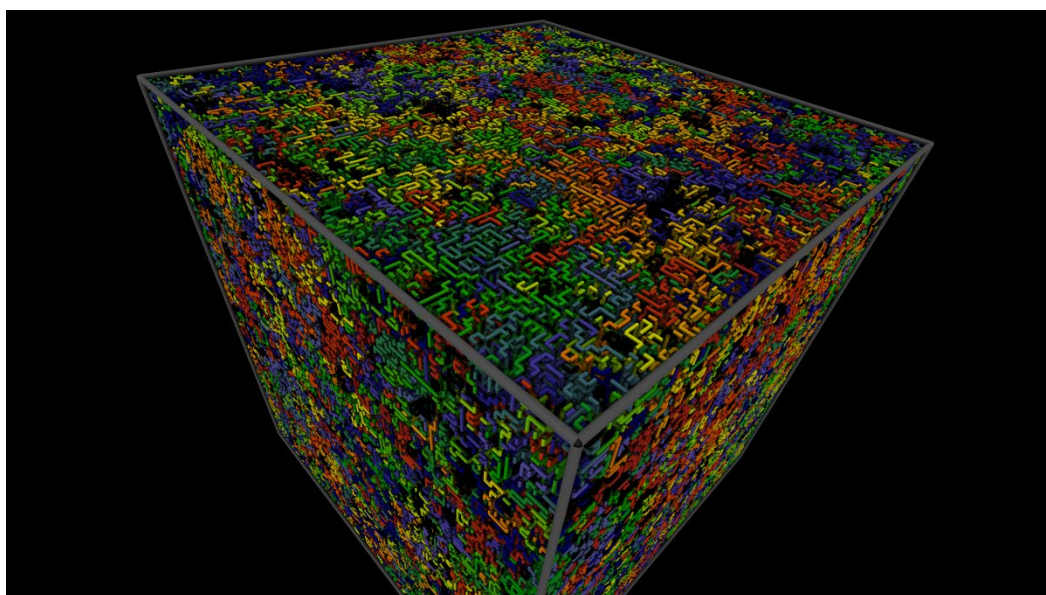


COMUNICATO STAMPA

Una nuova svolta in una storia intricata

Un nuovo metodo Monte Carlo basato sull'autoassemblaggio consente di simulare sistemi polimerici su scale mai raggiunte prima. Le simulazioni mostrano che gli intrecci tra le catene non sono diffusi, ma si concentrano in nodi e concatenamenti localizzati.



Trieste, 21 Agosto 2026

Le lunghe catene di polimeri sono ovunque: nei materiali sintetici, nella materia soffice, nei sistemi biologici come i cromosomi e nei modelli matematici di filamenti e nodi. Quando molte di queste catene sono impacchettate ad alta densità, formano quello che i fisici chiamano un fuso polimerico. In un ambiente così affollato, ciascuna catena è vincolata da quelle che la circondano. Questi intrecci sono fondamentali nel determinare il comportamento dei materiali polimerici, ma ne rendono anche molto complessa la simulazione. All'aumentare della lunghezza delle catene, infatti, cresce rapidamente il tempo necessario per ottenere una nuova configurazione indipendente, fino a rendere proibitivo il costo computazionale per effettuare simulazioni in sistemi di grandi dimensioni.

Da oltre settant'anni, gli scienziati ricorrono a numerosi "trucchi" per accelerare le simulazioni, tra cui i metodi Monte Carlo, che introducono mosse artificiali per

esplorare più rapidamente le configurazioni possibili del sistema. Nonostante i progressi ottenuti, il limite principale è rimasto invariato: in un fuso polimerico denso, ogni variazione deve propagarsi attraverso una rete di catene fortemente intrecciate, rendendo la simulazione inevitabilmente lenta.

Un nuovo studio SISSA, di Enrico Fornasa, Francesco Slongo e Cristian Micheletti, propone una strategia diversa per superare questo collo di bottiglia. Ispirandosi ad alcune idee provenienti dal quantum computing, i ricercatori hanno affrontato il problema da una nuova prospettiva. Il metodo sviluppato, denominato Self-Assembly Monte Carlo, o SAMC, non considera più il sistema come un intreccio fisso che deve rilassarsi lentamente. Consente invece ai legami locali di rompersi e riformarsi, permettendo al fuso polimerico di riorganizzarsi in modo molto più efficiente, pur continuando a generare configurazioni in equilibrio che hanno un significato fisico.

«Il passaggio fondamentale è stato smettere di chiedere all'intreccio di rilassarsi attraverso la lenta propagazione delle deformazioni lungo catene principali reciprocamente aggrovigliate», spiega Cristian Micheletti, professore di Biofisica molecolare e statistica alla SISSA. «Abbiamo invece permesso a polimeri vicini di riconnettersi mediante uno scambio di legami, riorganizzando così in profondità le loro catene principali. Il metodo non intende riprodurre la reale dinamica microscopica di un fuso polimerico, ma rappresenta un modo estremamente efficiente per campionarne le configurazioni di equilibrio».

Questa libertà aggiuntiva avrebbe potuto rendere il metodo rapido, ma privo di significato fisico: dopo numerosi scambi di legami, le lunghe catene iniziali avrebbero potuto frammentarsi in una sorta di pulviscolo composto da catene molto più corte, molte delle quali chiuse su sé stesse a formare anelli. È invece avvenuto il contrario: sono emerse spontaneamente catene lineari giganti, che occupavano quasi l'intero volume, lasciando soltanto una piccola popolazione di anelli corti. Il sistema ha quindi conservato il comportamento essenziale atteso per un fuso polimerico denso.

Il risultato segna un importante salto di scala. SAMC consente di generare configurazioni contenenti fino a 10^9 particelle, raggiungendo dimensioni molto superiori a quelle normalmente accessibili con gli approcci convenzionali. A questa scala, il collo di bottiglia non è più rappresentato dalla produzione delle configurazioni, ma dall'archiviazione, dalla visualizzazione e dall'analisi dell'enorme quantità di dati generati.

«Quando produrre configurazioni indipendenti diventa più facile che osservarle, significa che il problema computazionale ha cambiato scala», afferma Micheletti.

«È questo che ci offre SAMC: l'accesso a un regime nel quale la domanda non è più soltanto se sia possibile portare il sistema all'equilibrio, ma quali nuove informazioni fisiche si possano ricavare da configurazioni che, fino a oggi, erano troppo grandi per poter essere gestite».

Le simulazioni gettano inoltre nuova luce sulla distribuzione spaziale degli entanglement quando lunghe catene polimeriche sono impacchettate ad alta densità. Gli intrecci presenti all'interno di una singola catena e quelli tra coppie di polimeri vicini non risultano distribuiti diffusamente nello spazio. Si manifestano invece sotto forma di nodi e concatenamenti localizzati, separati da lunghi tratti caratterizzati da un intreccio molto debole.

Il risultato apre la strada allo studio di sistemi densi di catene che vanno oltre la fisica idealizzata dei polimeri, includendo materiali progettati, reti polimeriche e sistemi biologici di materia soffice. Tra le possibili applicazioni future figurano lo studio di polimeri sottoposti a confinamento spaziale — per esempio all'interno di canali, fenditure e cavità — e l'impiego delle configurazioni generate mediante SAMC come condizioni iniziali per simulazioni di dinamica molecolare più dettagliate.

USEFUL LINKS:

[Full Paper](#)

Doi:

<https://doi.org/10.1038/s41467-026-74480-4>

IMAGE: L'immagine mostra un sistema massimamente denso di milione di particelle che si sono auto-organizzate per formare dieci polimeri giganti (colorati) e un insieme di piccoli anelli (neri).
Credits: Cristian Micheletti, SISSA.

SISSA

Scuola Internazionale
Superiore di Studi Avanzati
Via Bonomea 265, Trieste
W www.sissa.it

Facebook, Twitter
[@SISSAschool](#)

CONTATTI

Alessandro Tavecchio

M atavecch@sisa.it

T +39 040 3787 472

Nico Pitrelli

M pitrelli@sisa.it

T +39 040 3787549