

Meccanica molecolare

Approfondimenti	Info
Quest'argomento non è collegato ad altri approfondimenti correlati. Si consiglia, in ogni caso, di controllare sempre [l'Indice] degli Approfondimenti	Questa pagina è solo improntata in attesa di completamento da parte dei Collaboratori. Se sei interessato a collaborare attivamente con Extrapedia, leggi come fare [Collabora]

La **Meccanica molecolare** usa la [Meccanica classica](#) per modellare sistemi molecolari.

L'[Approssimazione di Born-Oppenheimer](#) è ritenuta valida e l'energia potenziale di tutti i sistemi è calcolata in funzione delle coordinate nucleari utilizzando i campi di forza. La Meccanica molecolare può essere utilizzata per studiare sistemi molecolari di dimensioni e complessità varie: da sistemi biologici di piccole o grandi dimensioni, o assemblaggi di materiali con molte migliaia o addirittura milioni di atomi.

I metodi della Meccanica molecolare legati all'atomistica hanno le seguenti proprietà: Ogni atomo è simulato come una particella. Ad ogni particella è assegnato un raggio (tipicamente il [Raggio di van der Waals](#)), polarità, e una carica netta costante (generalmente derivata da calcoli quantistici e/o da esperimento). Le interazioni legate sono trattate come *molle* con una distanza di equilibrio uguale alla lunghezza del legame sperimentale o calcolato.

Variante su questo tema sono possibili. Per esempio, molte simulazioni hanno storicamente utilizzato una rappresentazione *dell'atomo unito* in cui ciascun gruppo metilico terminale, o unità metilenica intermedia, era considerato una particella, e i grandi sistemi proteici sono comunemente simulati usando un modello di *microsfere* che assegna da due a quattro particelle per amminoacido.

Extrapedia Science

« [Home](#) » - « [Indici Tematici](#) » - « [Indice Scienze Naturali](#) »

From:

<http://extrapedia.org/> - **Extrapedia**

Permanent link:

http://extrapedia.org/db/meccanica_molecolare

Last update: **13/06/2021 17:06**

