

## Chimica computazionale

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

**La Chimica computazionale** è una branca della [Chimica](#) che utilizza la simulazione al computer per aiutare a risolvere i problemi chimici. Usa metodi di [Chimica teorica](#), incorporati in programmi per computer efficienti, per calcolare le strutture e le proprietà di molecole e solidi. È necessario perché, a parte i risultati relativamente recenti riguardanti lo ione molecolare d'idrogeno (catione di idrogeno), il problema quantico di molti corpi non può essere risolto analiticamente, men che meno in forma chiusa. Mentre i risultati computazionali normalmente completano le informazioni ottenute dagli esperimenti chimici, in alcuni casi può prevedere fenomeni chimici finora non osservati. È ampiamente impiegata nella progettazione di nuovi farmaci e materiali.

Esempi di tali proprietà sono la struttura (cioè le posizioni previste degli atomi costituenti), le energie assolute e relative (interazione), le distribuzioni elettroniche della densità di carica, i dipoli e i momenti multipolari più alti, le frequenze vibrazionali, la reattività o altre grandezze spettroscopiche e le sezioni trasversali per collisione con altre particelle.

I metodi usati coprono sia situazioni statiche sia dinamiche e spaziano da molto approssimati a estremamente accurati; questi ultimi sono solitamente ottenibili solo per piccoli sistemi. I metodi *ab initio* si basano interamente sulla [Meccanica quantistica](#) e sulle costanti fisiche di base. Altri metodi sono chiamati empirici o semi-empirici perché usano ulteriori parametri empirici.

Entrambi gli approcci *ab initio* e semi-empirici implicano approssimazioni. Questi vanno da forme semplificate di equazioni di principi che sono più facili o più veloci da risolvere, a approssimazioni che limitano la dimensione del sistema (per esempio, condizioni al contorno periodiche), ad approssimazioni fondamentali alle equazioni sottostanti che sono richieste per raggiungere qualsiasi soluzione. La maggior parte dei calcoli *ab initio* rende l'[Approssimazione di Born-Oppenheimer](#) (che semplifica enormemente l'[Equazione di Schrödinger](#)) sottostante, assumendo che i nuclei rimangano sul posto durante il calcolo. In linea di principio, i metodi *ab initio* convergono alla soluzione esatta delle equazioni sottostanti quando il numero di approssimazioni è ridotto. In pratica, tuttavia, è impossibile eliminare tutte le approssimazioni e l'errore residuo rimane inevitabilmente. L'obiettivo della chimica computazionale è di minimizzare questo errore residuo mantenendo tracciabili i calcoli.

In alcuni casi, i dettagli della struttura elettronica sono meno importanti del comportamento spazio-temporale a lungo termine delle molecole. Questo è il caso degli studi conformazionali delle proteine e della termodinamica del legame proteico-ligando. Sono utilizzate approssimazioni classiche alla superficie di energia potenziale, in quanto sono computazionalmente meno intensive dei calcoli elettronici, per consentire simulazioni più lunghe della dinamica molecolare.

**Extrapedia Science**

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

From:

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

Permanent link:

[http://extrapedia.org/db/chimica\\_computazionale](http://extrapedia.org/db/chimica_computazionale)

Last update: **13/06/2021 17:05**

