Modelli di solvatazione **espliciti**: devi decidere quante molecole usare per l’acqua, e quindi si definisce una superficie: reticolo di molecole d’H2O.

Modelli di solvatazione impliciti.

Gli effetti legati alla solvatazione, sono:

* Non specifici (lungo raggio): polarizzazione e orientazione di dipolo
* Specifici (corto raggio): hydrogen bond, VDW, idrofobe (SASA cavità idrofoba per legare proteine).
* Solvente-soluto: effetto gabbia (quello che si attacca in soluzione non si attacca in gas)

Modelli: QM, MD, QM/MD.

Possiamo calcolare . La costante di cinetica può essere riscritta come .

Abbiamo sia la costante di equilibrio che di reazione. La costante di equilibrio è il rapporto di concentrazioni (tra farmaco e malattia per esempio): se trovo un farmaco che comprime la malattia è buono.

Contributi della = si calcolano in modo parametrico. È importante la superficie di cavità creata -> stimare la SASA, è linearmente proporzionale alla .

Per la ci sono due modi non quantistici (PB e GB), uno quantistico è il **PCM.**

**PCM: Self Consistent Reaction Field.**

Costruisco cavità del solvente, integro (FEM sulla superficie) per trovare le cariche su ogni faccia.

Queste cariche sulla superficie creano un campo elettrostatico. Quindi abbiamo un termine di campo elettrostatico nell’hamiltoniano, quindi un SCF che tiene conto del solvente.

Effetto tunnel che avviene per la reazione: dato che la massa dell’idrogeno è bassa, la probabilità di passare la barriera energetica (bassa per assunzione) anche a temperatura bassa non è nulla. Per questo avviene anche a temperature basse.

La frequenza immaginaria del TST è la . È immaginaria perché (che è la derivata seconda lungo la coordinata di reazione) è negativa. Tanto più la è alta, tanto più la parabola è stretta.

Con frequenze immaginarie > ci possiamo aspettare tunneling a temperatura ambiente.

k costante cinetica.

A temperature basse è molto alta: nessuna molecola passa a 100 K se non per effetto tunnel.

(partizione alta -> passa per forza grazie a tunnel).