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

Gli effetti descritti dalla solvatazione:

* Di lungo raggio: **polarizzazione** e **orientazione** **del** **dipolo**
* Di 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)

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

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.

La è composta da tre contributi:

Stimare la **SASA** è **molto importante.**

Per la un modo non quantistico è il Generalized Born, 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 **creano un campo elettrostatico**. Quindi abbiamo un termine di campo elettrostatico nell’hamiltoniano, quindi un SCF che tiene conto del solvente.