

solventi

Fulvio Ciriaco

11 novembre 2025



modelli continui del solvente

- ▶ SCRF(self consistent reaction field, GAMESS), parametri:
 - R : raggio della sfera di contenimento
 - ϵ : coefficiente dielettrico
- ▶ COSMO(conductor like screening model, NWChem, Orca, GAMESS), parametri:
 - solvente** : parametri pretabulati per numerosi solventi
 - R_i : raggi atomici di solvatazione
 - ϵ : coefficiente dielettrico
- ▶ PCM, CPCM (polarizable continuum model, GAMESS, Psi4, Orca), parametri come in COSMO
- ▶ SMD (solvation model based on density, NWChem, Orca), parametri:
 - solvente**
 - ϵ coefficiente dielettrico
 - S_c, S_h frazione di aromaticità e di alogenuri nel solvente
 - S_a, S_b propensità alla formazione di legami ad idrogeno
 - S_h, S_n tensione superficiale e indice di rifrazione



modelli molecolari del solvente

trattamento delle molecole del solvente

- ▶ QM, quantomeccanico
- ▶ EFP (GAMESS, Psi4), con effetti quantomeccanici
- ▶ QM/MM





















