

La chimica computazionale: un valido aiuto per tutti i settori della chimica

Lorenzo Gontrani

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università di Roma Tor Vergata,
Viale degli Ingegneri, I-00133 Roma, Italy

Nel corso del seminario verranno riportati alcuni esempi delle applicazioni della chimica computazionale a problematiche di vario tipo, di cui mi sono occupato nella carriera scientifica. Partendo dall'interpretazione delle misure di diffrazione di raggi X e IR matrix, si passa poi allo studio delle proprietà delle biomolecole in soluzione mediante il metodo PCM, per approdare poi al campo della *drug discovery* e della bioinformatica. Gran parte della produzione scientifica riguarda però il campo dei liquidi ionici (ILs), sistemi che hanno conquistato una posizione rilevante nel campo dei materiali innovativi. Tali materiali sono stati studiati in dettaglio con misure di diffrazione e spettroscopiche, e le metodiche computazionali hanno permesso di interpretare e prevedere correttamente le osservazioni più salienti, come la presenza di ordine mesoscopico nel sistema. Dopo una rassegna delle scoperte più recenti, con particolare riguardo ai sistemi interamente biocompatibili basati su colina e biomolecole, verranno descritti rapidamente anche alcuni risultati relativi alle miscele liquido ionico/altri solventi, dove si evidenziano interessanti fenomeni critici, come l' "eccesso a basso Q". Seguiranno gli sviluppi più recenti, riguardanti il calcolo delle proprietà elettroniche di coloranti per celle solari di tipo p e di tipo n, la modellizzazione delle proprietà ottiche dei polimeri di carbonio di tipo poli-inico e delle soluzioni acquose di nanoparticelle di grafene con metalli pesanti, sistemi promettenti come sensori fluorescenti per misurare l'inquinamento delle acque.