



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
FIRENZE

Scuola di  
Scienze Matematiche,  
Fisiche e Naturali

Corso di Laurea in Chimica  
Curriculum Scienze Chimiche  
Anno Accademico 2013/2014

**Metodologie computazionali per l'analisi di modi quasi normali di vibrazione da traiettorie di dinamica molecolare**

**Computational methods for the quasi normal modes analysis of molecular dynamics trajectories**

È stato messo a punto un codice per l'analisi dei modi quasi normali di vibrazione per poter effettuare l'assegnamento delle bande degli spettri vibrazionali ottenuti da simulazioni di dinamica molecolare. Il problema che ci siamo proposti di risolvere è analogo a quello che deve essere affrontato sperimentalmente nell'interpretazione di spettri vibrazionali ottici o di scattering inelastico di neutroni. Le bande osservate vengono assegnate come combinazioni di vibrazioni di modi interni della molecola. Per fare questo, la traiettoria viene analizzata con un metodo implementato direttamente in termini di queste vibrazioni semplici che vengono combinate per riprodurre lo spettro vibrazionale. Questa procedura può essere utile in linea di principio per effettuare l'assegnamento di uno spettro sperimentale una volta effettuata una simulazione *realistica* per il sistema. Il metodo implementato non utilizza, a differenza degli altri metodi riportati in letteratura, l'imposizione delle condizioni di Eckart-Sayvetz ad ogni configurazione con un notevole risparmio di tempo di calcolo e semplificazione del codice. Il codice è stato testato su un sistema particolarmente complesso, una soluzione diluita di metilammina in acqua estraendo i modi quasi normali di vibrazione dell'acqua (Quasi-Normal Mode Analysis, QNMA). I modi normali di vibrazione della metilammina sono stati invece calcolati facendo uso del programma GAUSSIAN09 svolgendo i calcoli a due livelli di teoria: Hartree-Fock e DFT. Non è stata effettuata l'analisi QNMA per questa molecola in quanto ha reagito durante la simulazione, compromettendo la possibilità di applicare il metodo.

**Relatore:** Dr. Gianni Cardini - gianni.cardini@unifi.it

**Candidato:** Jacopo Lupi - jacopo.lupi@unifi.it