

Dinamica molecolare *ab initio* dell'imidazolo in acqua

Candidato: **Giada Funghi** giada.funghi@stud.unifi.it

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

Correlatore: *Marco Pagliai* marco.pagliai@unifi.it

L'imidazolo, come tale o come costituente in altre molecole, ha importanti applicazioni in campo biologico, farmacologico e tecnologico. La molecola interagisce, formando legami ad idrogeno di tipo accettore o donatore, con l'acqua e questo è uno dei motivi per cui è solubile in essa. Per studiare accuratamente le interazioni tra acqua ed imidazolo, sono state condotte simulazioni di dinamica molecolare *ab initio* con il metodo Car-Parrinello (CPMD), in cui il potenziale è determinato nell'ambito della teoria del funzionale della densità. L'analisi delle traiettorie delle simulazioni CPMD consente di ottenere informazioni sia sui legami ad idrogeno accettore e donatore che su quelli impropri del tipo $H \cdots \pi$. Poiché il funzionale di scambio e correlazione BLYP, adottato nelle simulazioni CPMD, non è in grado di rappresentare correttamente le interazioni dispersive, è stata condotta anche una simulazione con correzioni semiempiriche per descrivere in modo appropriato questo contributo al potenziale. Lo studio di una serie di proprietà strutturali, dinamiche e spettroscopiche dell'imidazolo in acqua è stato pertanto compiuto confrontando i risultati con e senza correzioni per le forze dispersive, così da comprenderne il ruolo nelle interazioni tra eterociclo e solvente. In particolare, è stato osservato che i legami ad idrogeno di tipo accettore e donatore sono influenzati solo marginalmente dalla presenza delle forze dispersive, mentre quelli che coinvolgono l'anello mostrano maggiori discrepanze.

Le proprietà strutturali ottenute sono risultate in accordo sia con precedenti simulazioni che con misure sperimentali, ed hanno fornito utili informazioni sull'importanza dell'introduzione delle correzioni per le interazioni di van der Waals nello studio di questo tipo di sistemi molecolari in soluzione acquosa. Grazie a questi risultati potranno essere messi a punto nuovi modelli per la descrizione di una serie di proprietà spettroscopiche per l'imidazolo in soluzione acquosa.