



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA



DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE

Avviso di Seminario

Corso di Laurea in Fisica
Corso di Laurea in
Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Materiali

A.A. 2014/2015

**Edificio “Angelo Camillo De Meis” (Coppito 2),
Aula C1.12 (piano terra)**

Mercoledì 15/04/2015 h. 16.00

Prof. Massimiliano Aschi

*Derivazione di osservabili di interesse chimico tramite simulazioni al computer:
il caso degli spettri in soluzione*

L'attività di ricerca del gruppo di Chimica Generale del Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche è incentrata sullo sviluppo, l'implementazione e l'applicazione di metodologie computazionali per la modellazione di osservabili termodinamiche, spettrali e cinetiche in sistemi molecolari in fase condensata (prevalentemente fase liquida).

In questo seminario, dopo una breve introduzione di natura metodologica sugli strumenti computazionali effettivamente utilizzati, ci focalizzeremo su alcuni recenti risultati relativi alla spettroscopia UV-Visibile (assorbimento ed emissione), IR ed NMR in sistemi molecolari e bio-molecolari.