



## **SCHEDA DELL'INSEGNAMENTO (SI) ELEMENTI DI MODELLISTICA COMPUTAZIONALE**

**SSD: CHIMICA FISICA (CHIM/02)**

DENOMINAZIONE DEL CORSO DI STUDIO: BIOLOGIA (P30)  
ANNO ACCADEMICO 2022/2023

### **INFORMAZIONI GENERALI - DOCENTE**

DOCENTE: CRESCENZI ORLANDO  
TELEFONO: 081-674209 - 081-674206 - 081-674205 - 081-674204 - 081-674202  
EMAIL: orlando.crescenzi@unina.it

### **INFORMAZIONI GENERALI - ATTIVITÀ**

INSEGNAMENTO INTEGRATO: NON PERTINENTE  
MODULO: NON PERTINENTE  
CANALE: A-Z  
ANNO DI CORSO: III  
PERIODO DI SVOLGIMENTO: SEMESTRE II  
CFU: 6

#### **INSEGNAMENTI PROPEDEUTICI**

Chimica Generale ed Inorganica

#### **EVENTUALI PREREQUISITI**

Gli studenti devono possedere i concetti di base di matematica, fisica e chimica corrispondenti ai corsi impartiti nel biennio.

#### **OBIETTIVI FORMATIVI**

Obiettivo del corso è fornire le conoscenze di base necessarie per un utilizzo consapevole ed efficace dei principali strumenti teorici e computazionali in uso per la simulazione di sistemi biomacromolecolari. I necessari concetti di base matematici, chimico-fisici ed informatici vengono introdotti ad un livello di approfondimento tale da consentire una valutazione ragionata degli ambiti di applicabilità e delle limitazioni dei vari approcci modellistici. Viene fornita un'introduzione al sistema operativo Unix, utilizzato nelle esercitazioni al computer.

## RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI (DESCRITTORI DI DUBLINO)

### Conoscenza e capacità di comprensione

Lo studente deve dimostrare di aver compreso nelle linee generali le potenzialità e gli ambiti di applicazione dei più comuni approcci modellistici per la simulazione di sistemi biomacromolecolari (proteine, acidi nucleici), e di aver acquisito le conoscenze di base necessarie per un uso consapevole degli strumenti di modellizzazione.

### Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Lo studente dovrà essere in grado di discriminare fra i diversi ambiti di applicazione dei più diffusi approcci per la modellizzazione computazionale di sistemi chimici di interesse biologico; dovrà inoltre avere acquisito le abilità fondamentali nell'uso del sistema operativo Unix, e possedere le capacità di base per impostare simulazioni di meccanica e di dinamica molecolare e per analizzarne criticamente i risultati.

## PROGRAMMA-SYLLABUS

**Concetti di base:** sistemi di coordinate; superfici di energia potenziale; grafica molecolare; unità di misura; concetti matematici: espansioni in serie.

**Campi di forza:** termini di un tipico campo di forza; caratteristiche generali di un campo di forza; termini di stretching, di bending, torsionali; torsioni improprie; termini di interazione; interazioni non-bonded; interazioni elettrostatiche; modelli elettrostatici di cariche puntiformi; calcolo delle cariche parziali atomiche; cariche parziali per sistemi macromolecolari; interazioni di Van der Waals; potenziale di Lennard-Jones.

**Minimizzazioni energetiche:** definizioni generali; derivate dell'energia; metodo sequenziale univariato; metodi del primo ordine; metodo degli steepest descents; metodo dei gradienti coniugati; metodi del secondo ordine; metodo di Newton-Raphson; scelta del metodo di minimizzazione; minimi, massimi, punti di sella; criteri di convergenza.

**Tecniche di simulazione:** dinamica molecolare; metodo di Monte Carlo; paragone tra i due approcci; condizioni periodiche al contorno; cutoff delle interazioni non-bonded; liste dei vicini; cutoff basati su gruppi.

**Dinamiche molecolari:** concetto di integrazione numerica delle equazioni differenziali; esempi di integrazione numerica: oscillatore armonico, moto planetario; metodi alle differenze finite; algoritmo di Verlet; algoritmo leap-frog; scelta del time step; frequenze tipiche dei moti molecolari: spettro IR; cenni sull'uso di constraints: SHAKE; controllo della temperatura e della pressione.

**Metodo di Monte Carlo:** numeri pseudocasuali; calcolo di un integrale col metodo di Monte Carlo; cenni sul metodo di Metropolis. Esplorazione sistematica dello spazio conformazionale: grid search.

**Introduzione al sistema operativo Unix:** concetti di base; struttura gerarchica; permessi; principali comandi Unix.

**Esercitazioni al computer.**

## MATERIALE DIDATTICO

A.R. Leach, *Molecular modelling: Principles and applications*, seconda edizione, Prentice Hall, 2001.

## MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO-MODULO

Lezioni frontali, esempi pratici ed esercitazioni al computer

## VERIFICA DI APPRENDIMENTO E CRITERI DI VALUTAZIONE

### a) Modalità di esame

- Scritto
- Orale
- Discussione di elaborato progettuale
- Altro

### In caso di prova scritta i quesiti sono

- A risposta multipla
- A risposta libera
- Esercizi numerici

### b) Modalità di valutazione

Lo studente verrà interrogato sugli argomenti del corso per valutare il grado di completezza della sua risposta, il livello di integrazione tra i vari contenuti del corso, il raggiungimento di una visione organica dei temi affrontati, la padronanza espressiva e la proprietà nel linguaggio scientifico. La partecipazione attiva durante le esercitazioni al computer sarà un elemento di valutazione positiva.