

CORSO DI ELEMENTI DI MODELLISTICA COMPUTAZIONALE

Il corso di Elementi di modellistica computazionale è costituito da 3 CFU di lezioni frontali comprensive di esercitazioni in aula e ricapitolazioni.

OBIETTIVI FORMATIVI DA ACQUISIRE:

Conoscenze:

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 chimici di interesse biologico.

Capacità:

Metodologie statistiche e bioinformatiche

Comportamenti:

Valutazione, interpretazione di dati sperimentali di laboratorio, sicurezza in laboratorio, valutazione della didattica

PROPEDEUTICITA'

“Chimica Generale ed Inorganica e laboratorio”, “Chimica organica e laboratorio”, “Matematica”, “Fisica e laboratorio”. Prerequisiti: Conoscenze di base di chimica biologica

PROGRAMMA

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. Termini di bending. Termini 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

MATERIALE DIDATTICO UTILIZZATO E CONSIGLIATO

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

MODALITA' VERIFICA E VALUTAZIONE DELL'APPRENDIMENTO

Esame orale.

La commissione d'esame, nominata dal CCS accerterà e valuterà collegialmente la preparazione dello studente attribuendo il voto finale sulla base di un adeguato numero di prove e di verifiche. La frequenza assidua e la partecipazione alle attività in aula sono considerati elementi positivi di valutazione.

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE PER LA VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Orlando Crescenzi (presidente), Pompea Del Vecchio, Nadia Rega, Michele Pavone