

INSEGNAMENTO DI ELEMENTI DI MODELLISTICA COMPUTAZIONALE

Settore Scientifico - Disciplinare: CHIM/02

CFU: 4

Tipologia attività formativa: a scelta, Moduli: 1

Obiettivi formativi:

Fornire le conoscenze di base necessarie per un utilizzo consapevole ed efficace dei principali strumenti teorici e computazionali a disposizione del biologo molecolare.

Programma sintetico (sillabo):

Il corso presenta una panoramica degli approcci modellistico-computazionali più diffusi nella simulazione di sistemi chimici di interesse biologico.

Vengono discussi: Concetti di base matematici e chimico-fisici; Campi di forza; Minimizzazioni energetiche; Introduzione generale alle tecniche di simulazione; Dinamiche molecolari; Metodo di Monte Carlo; Grid search; Introduzione al sistema operativo Unix.

Esami propedeutici: Chimica Generale ed Inorganica

Prerequisiti: Si consiglia sia preceduto da Chimica Organica e Fisica

Modalità di accertamento del profitto: esame