

Corso seminariale anno accademico 2023/24

SEMESTRE: primo

CORSO DI LAUREA: magistrale (fisica, chimica, CTF, biotecnologie)

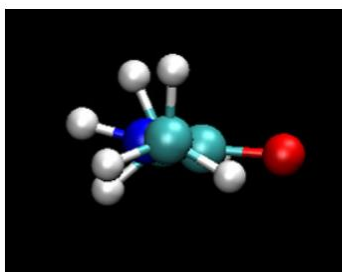
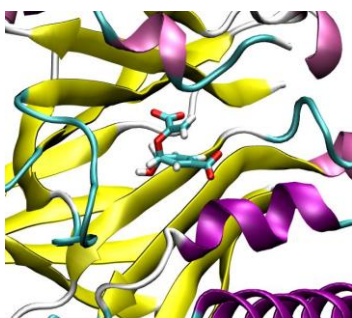
TITOLO CORSO: Introduzione pratica alle simulazioni QM/MM

DOCENTI: Silvia Gervasoni, Giuliano Mallocci

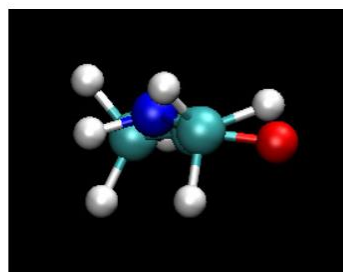
NUMERO CFU: 3

DESCRIZIONE/PROGRAMMA DEL CORSO:

Il laboratorio fornisce un'introduzione ai metodi ibridi QM/MM di fisica molecolare computazionale. L'attività del corso si svolgerà in ambiente Linux e comporterà l'uso dei principali comandi della shell bash, programmi di editing/visualizzazione molecolare (VMD, Pymol) e visualizzazione/analisi dati (Gnuplot, Python-Matplotlib). Il corso è suddiviso in due parti: la prima incentrata sulla simulazione di una piccola molecola organica in solvente esplicito, la seconda sulla modellazione di reazioni enzimatiche mediante tecniche di enhanced sampling. Per entrambe le parti verrà utilizzato il programma Amber, disponibile sulle macchine di calcolo del laboratorio. Per ogni argomento verranno forniti gli elementi teorici necessari allo svolgimento delle esercitazioni pratiche.



Classical (MM)



QM

MODALITA' DI SVOLGIMENTO:

Sessioni pratiche presso il Laboratorio Computazionale, Dipartimento di Fisica – 1° piano Torre A. Ciascuna sessione sarà preceduta da una breve introduzione teorico/pratica supportata da slides.

TESTI DI RIFERIMENTO:

Slides teoria/tutorial pratici e capitoli selezionati forniti dai docenti.

MODALITA' D'ESAME:

Prova pratica Incentrata sugli esempi di simulazioni QM/MM trattate nel corso.