

## Anno accademico 2024/2025

CORSO SEMINARIALE: Introduzione pratica alle simulazioni QM/MM

SEMESTRE: Primo (data d'inizio prevista 14/10/2024)

CORSO DI LAUREA: Magistrale (Fisica, Chimica)

DOCENTI: Silvia Gervasoni

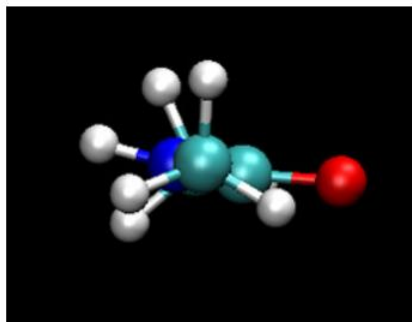
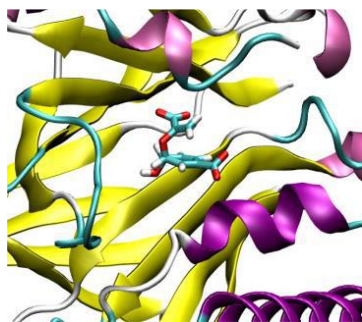
NUMERO CFU: 3 (24h)

### DESCRIZIONE/PROGRAMMA

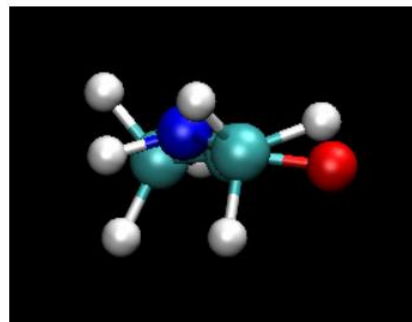
Il laboratorio fornisce un'introduzione ai metodi ibridi QM/MM di fisica molecolare computazionale. Questi metodi integrano simulazioni di tipo classico con quelle quanto-meccaniche, all'interno dello stesso sistema. L'attività del corso si svolgerà in ambiente Linux e comporterà l'uso dei principali 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.

### MODALITÀ DI SVOLGIMENTO:

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



*Classical (MM)*



*QM*

Se interessati scrivere a: [silvia.gervasoni@dsf.unica.it](mailto:silvia.gervasoni@dsf.unica.it)