

## Corso seminariale anno accademico 2025/2026

SEMESTRE: Primo (data d'inizio prevista 13/10/2025)

CORSO DI LAUREA: Magistrale (Fisica, Chimica, CTF, Biotecnologie)

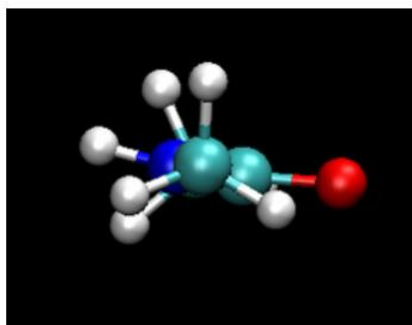
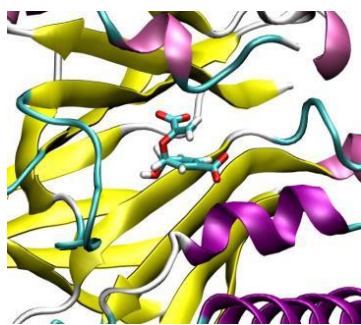
TITOLO CORSO: Introduzione pratica alle simulazioni QM/MM

DOCENTI: Silvia GERVASONI

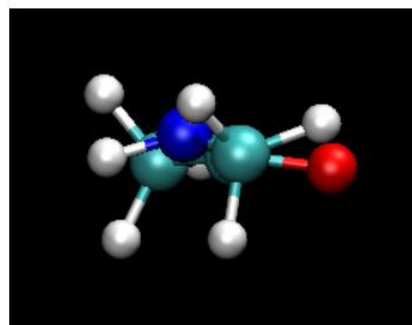
NUMERO CFU: 3

### 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.

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