Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	Gianfranco
Cognome	Bocchinfuso

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	Chimica Computazionale di Sistemi Biologici
Inglese	

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A. 2022/2023 ○ L ◉ LM ○ LM CU

CdS	Chimica
Codice	
Canale	unico
CFU	6
Lingua	Italiano

Docente del modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Nome	
Cognome	

Denominazione modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Italiano	
Inglese	

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Capacità di utilizzare tecniche simulative di dinamica molecolare con campi di forza classici CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: Conoscenza e comprensione dei principi delle simulazioni di dinamica molecolare CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: Capacità di applicazione delle simulazioni di dinamica molecolare anche al fine di determinare le energie di legame in complessi di interesse biologico e medico AUTONOMIA DI GIUDIZIO: valutazione critica dei diversi approcci simulativi ABILITÀ COMUNICATIVE: Capacità di riassumere in modo critico i risultati sperimentali acquisiti in simulazioni di dinamica molecolare
Inglese	LEARNING OUTCOMES: Usage of simulations based on molecular dynamics simulations with classical force fields KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: Knowledge and understanding of the principles of Molecular Dynamics simulations APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: Ability to use molecular dynamics simulations to evaluate the binding free energy in complex involving biological molecules MAKING JUDGEMENTS: Critical evaluation of different simulative approaches COMMUNICATION SKILLS: Ability to critically summarize results acquired by using molecular dynamics simulations

Università degli Studi di Roma “Tor Vergata”

Facsimile Scheda Insegnamento

Prerequisiti

Italiano	Principi della meccanica newtoniana, della termodinamica e della termodinamica statistica
Inglese	Principles of newtonian mechanics, of thermodynamics and statistical thermodynamics

Programma

Italiano	Campi di forza classici. Esplorazione dello spazio delle fasi. Simulazioni di dinamica molecolare micronanoniche e canoniche. Campionamento aumentato dello spazio delle fasi (simulazioni REMD e metadinamica). Valutazione della energia di legame mediante tecniche MM/PBSA e simili. Valutazioni dello spazio delle fasi mediante tecniche di "" campinamento ad ombrello" e valutazione del potenziale di forza medio. Dinamiche molecolari di non equilibrio. Esercitazioni pratiche
Inglese	Classical force fields. Sampling of the conformational and configurational space. Canonical and micro-canonical molecular dynamics simulations. Enhanced sampling techniques (Replica Exchange Molecular Dynamics and metadynamics) . Evaluation of the binding free energy by means of Molecular Mechanics/Poisson Boltzmann Surface et similia. Umbrella sampling simulations to evaluate the Potential Mean Force. Non equilibrium Molecular Dynamics simulations. Laboratory activity.

Modalità di valutazione

- ☐ Prova scritta
- ☒ Prova orale
- ☐ Valutazione in itinere
- ☒ Valutazione di progetto
- ☐ Valutazione di tirocinio
- ☐ Prova pratica
- ☐ Prova di laboratorio

Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

Italiano	L'esame consiste in una prova scritta ed una prova orale. La prova orale verterà su tutti gli argomenti svolti e includerà una discussione delle relazioni sulle esperienze di laboratorio svolte. Graduazione del voto dell'esame orale: 18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato. 22-25, lo studente ha acquisito in modo approfondito i concetti di base della disciplina ed è adeguatamente in grado di effettuare i collegamenti tra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto. 26-29, lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare autonomamente le conoscenze acquisite. Mette in evidenza
Inglese	The evaluation is made through i a oral exam. The students have to prepare a report on the laboratory experience that will be considered in the final score. Graduation of the grade of the oral exam: 18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and expresses himself with a sufficiently correct and appropriate language. 22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline and is adequately able to make the connections between the various subjects. Presents linearity in the structuring of speech. The language is appropriate and correct. 26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. He is able to independently apply and re-elaborate the acquired knowledge. It highlights a wealth of references and logical-analytical skills with a fluid, appropriate and varied language.

Testi adottati

Italiano	materiale fornito dal docente
Inglese	sheets of the lessons and other materials from the teacher

Bibliografia di riferimento

Italiano	
Inglese	

Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☐ Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	Lezioni frontali (40 ore) ed esperienze di laboratorio (12 ore)
Inglese	Lessons (40 hours) and laboratory (12 hours)

Modalità di frequenza

◉ Frequenza facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	La partecipazioni alle esperienze di laboratorio è obbligatoria
Inglese	The presence at the laboratory experiences is mandatory