



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## MODELLISTICA MOLECOLARE PER I SISTEMI COMPLESSI

**BENEDETTA MENNUCCI**

|                 |         |
|-----------------|---------|
| Anno accademico | 2018/19 |
| CdS             | CHIMICA |
| Codice          | 204CC   |
| CFU             | 3       |

|                                                       |           |         |     |                    |
|-------------------------------------------------------|-----------|---------|-----|--------------------|
| Moduli                                                | Settore/i | Tipo    | Ore | Docente/i          |
| MODELLISTICA<br>MOLECOLARE PER I<br>SISTEMI COMPLESSI | CHIM/02   | LEZIONI | 24  | BENEDETTA MENNUCCI |

### Obiettivi di apprendimento

#### *Conoscenze*

Lo studente che completa il corso sarà in grado di dimostrare una conoscenza di base dei metodi computazionali mirati alla simulazione di processi e proprietà (principalmente di tipo spettroscopico) di sistemi molecolari che interagiscono con il loro ambiente.

#### *Modalità di verifica delle conoscenze*

Solo mediante l'esame finale

#### *Capacità*

Lo studente sarà in grado di discutere una presentazione orale sull'attività svolta durante il corso

#### *Modalità di verifica delle capacità*

Solo mediante l'esame finale

#### *Comportamenti*

Lo studente potrà acquisire la capacità di utilizzare il formalismo variazionale come tecnica unificatrice per i metodi multiscala polarizzabili

#### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Solo mediante l'esame finale

#### *Prerequisiti (conoscenze iniziali)*

Lo studente dovrebbe conoscere i concetti principali della meccanica quantistica e delle sue applicazioni in chimica.

### Indicazioni metodologiche

- le lezioni frontali si svolgono con ausilio di slide
- il sito di elearning del corso è usato per scaricare materiale didattico
- le interazioni tra studente e docente al di fuori delle ore di lezione avvengono attraverso ricevimenti e uso della posta elettronica

#### *Programma (contenuti dell'insegnamento)*

Il corso presenta le principali strategie di calcolo finora sviluppate per descrivere proprietà e processi di sistemi molecolari in ambiente di diversa complessità (solventi, matrici proteiche, ecc.).

In particolare, l'attenzione sarà su metodi ibridi che combinano una descrizione quantico-meccanica per la parte del sistema di maggiore interesse e una descrizione classica per il resto. In questo quadro, gli aspetti teorici e numerici fondamentali delle formulazioni QM/MM o QM/continuum saranno presentati insieme ad esempi delle loro applicazioni.

Particolare attenzione verrà prestata allo sviluppo di un formalismo generale per i metodi ibridi.

#### *Bibliografia e materiale didattico*

Slides delle lezioni e articoli apparsi negli ultimi anni sulle principali riviste scientifiche di settore.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

### Indicazioni per non frequentanti

Registrarsi alla pagina E-learning del corso per scaricare le slides/note delle lezioni.

### Modalità d'esame

- L'esame è composto da una prova orale che consiste in un colloquio.
- La prova orale non è superata se il candidato non risponde correttamente, esprimendosi in modo chiaro e usando la terminologia corretta, almeno alle domande sui concetti principali presentati nel corso.

*Ultimo aggiornamento 20/11/2018 14:04*