



UNIVERSITÀ DI PISA

MODELLISTICA MOLECOLARE PER I SISTEMI COMPLESSI

BENEDETTA MENNUCCI

Academic year 2022/23
Course CHIMICA
Code 204CC
Credits 3

| Modules | Area | Type | Hours | Teacher(s) |
|---|---------|---------|-------|--------------------|
| MODELLISTICA MOLECOLARE PER I 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 23/11/2022 19:55