



# UNIVERSITÀ DI PISA

---

## MODELLISTICA MOLECOLARE DI BIOMOLECOLE

### BENEDETTA MENNUCCI

Anno accademico	2022/23
CdS	BIOTECNOLOGIE MOLECOLARI
Codice	110CC
CFU	6

Moduli	Settore/i	Tipo	Ore	Docente/i
MODELLISTICA MOLECOLARE DI BIOMOLECOLE	CHIM/02	LEZIONI	48	BENEDETTA MENNUCCI

#### Obiettivi di apprendimento

##### *Conoscenze*

Lo studente alla fine del corso conoscerà le principali tecniche computazionali che possono essere utilizzate per eseguire

- Un'analisi conformazionale di sistemi molecolari,
- Una simulazione di processi dinamici di sistemi complessi.
- Uno studio di binding ligando-recettore

Oltre al formalismo e alla comprensione teorica di base, gli studenti imparano a eseguire simulazioni di processi dinamici.

Sia gli aspetti teorici del corso che le simulazioni sono progettate per consentire agli studenti di comprendere appieno i limiti e le potenzialità delle simulazioni rispetto ai dati sperimentali in vista di possibili applicazioni biotecnologiche

##### *Capacità*

Lo studente sarà in grado di discutere i contenuti del corso principale utilizzando la terminologia appropriata.

Lo studente saprà utilizzare software di modeling molecolare per lo studio dinamico di sistemi biologici.

##### *Modalità di verifica delle capacità*

Lo studente dovrà preparare e discutere una presentazione orale sugli argomenti svolti durante il corso

##### *Comportamenti*

Lo studente potrà sviluppare la capacità di utilizzare modelli teorici per l'interpretazione di misure sperimentali.

##### *Modalità di verifica dei comportamenti*

Durante il corso, sarà valutata la capacità dello studente nell'interpretare i principali processi chimico-fisici dei sistemi biologici sulla base di comportamenti atomistici e di interazioni intermolecolari.

#### Indicazioni metodologiche

- Le lezioni frontali si svolgono con ausilio di slide
- per il laboratorio computazionale si formano gruppi e si usano i PC delle aule informatiche del Dipartimento di Chimica
- il personale di supporto (tecnici, dottorandi e/o cultori della materia) coadiuva il docente nelle esercitazioni numeriche e nell'assistenza ai laboratori
- il sito di elearning del corso è usato per scaricare materiali didattici, per comunicazioni docente-student
- le interazioni tra studente e docente al di fuori delle ore di lezione/laboratorio avvengono attraverso ricevimenti e uso della posta elettronica

#### Programma (contenuti dell'insegnamento)

- Introduzione alle interazioni intermolecolari
- La Meccanica Molecolare come metodo di calcolo di energie e geometrie di sistemi molecolari.
- Aspetti principali dei metodi numerici utilizzati nell'analisi conformazionale dei sistemi molecolari di interesse biologico.
- Il metodo Monte Carlo e sue applicazioni
- Il metodo della dinamica molecolare nei suoi principali aspetti teorici e numerici.



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

- Il metodo Docking e il suo nello studio del binding ligando-recettore
- Introduzione ai metodi quantistici più utilizzati nella biochimica: alcuni elementi di metodi che combinano approcci quantum-meccanici e classici.

### Bibliografia e materiale didattico

Oltre alle copie delle slides usate nelle lezioni frontali e al materiale didattico disponibile sulla piattaforma elearning del corso, si consigliano argomenti selezionati dal libro "Molecular Modelling: Principles and Applications" di Andrew Leach

### 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 un prova orale.
- La prova orale consiste in un colloquio tra il candidato e il docente del corso.
- 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 12/09/2022 14:36*