

## Chimica Computazionale di Sistemi Biologici

*Computational Chemistry of Biological Systems*

<b>A.A.</b>	2025/26	<b>CdS</b>	Chimica
<b>Codice</b>	8067621	<b>Canale</b>	unico
<b>CFU</b>	6	<b>Lingua</b>	Italiano

### DOCENTE RESPONSABILE

**Gianfranco Bocchinfuso**

### OBIETTIVI FORMATIVI

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

	<p><i>Ability to critically summarize results acquired by using molecular dynamics simulations</i></p> <p><b>LEARNING SKILLS:</b> <i>Ability to further improve the acquired knowledge</i></p>
--	--

## PREREQUISITI

<b>Italiano</b>	Principi della meccanica newtoniana, della termodinamica e della termodinamica statistica
<i>Inglese</i>	<i>Principles of newtonian mechanics, of thermodynamics and statistical thermodynamics</i>

## PROGRAMMA

<b>Italiano</b>	<p>Campi di forza classici (tra 4 e 6 ore).</p> <p>Esplorazione dello spazio delle fasi. Simulazioni di dinamica molecolare micronanoniche e canoniche (16-18 ore).</p> <p>Campionamento aumentato dello spazio delle fasi (simulazioni REMD e metadinamica) (6-8 ore).</p> <p>Valutazione della energia di legame mediante tecniche MM/PBSA e simili e metodi alchemici. (4-6 ore)</p> <p>Valutazioni dello spazio delle fasi mediante tecniche di "campionamento ad ombrello" e valutazione del potenziale di forza medio. (2-4 ore)</p> <p>Introduzione alle dinamiche molecolari di non equilibrio. (2 ore)</p> <p>Esercitazioni pratiche (2 di Dinamica molecolare; 1 di metodi alchemici; 1 di Dinamiche di "campionamento ad ombrello")</p>
<i>Inglese</i>	<p><i>Classical force fields. (4-6 h)</i></p> <p><i>Sampling of the conformational and configurational space. Canonical and micro-canonical molecular dynamics simulations. (16-18 h)</i></p> <p><i>Enhanced sampling techniques (Replica Exchange Molecular Dynamics and metadynamics). (6-8 h)</i></p> <p><i>Evaluation of the binding free energy by means of Molecular Mechanics/Poisson Boltzmann Surface et similia and alchemical methods (4-6 h).</i></p> <p><i>Umbrella sampling simulations to evaluate the Potential Mean Force. (2-4 h)</i></p> <p><i>Introduction to the non equilibrium Molecular Dynamics simulations. (2h)</i></p> <p><i>Laboratory activity. (2 on plain dynamics; 1 on alchemical methods; 1 on Umbrella sampling dynamics)</i></p>

## TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA

<b>Italiano</b>	<p>Molecular modelling for beginners / Alan Hinchliffe. — 2nd ed. Editor John Wiley &amp; Sons Ltd. 2008. ISBN 978-0-470-51313-2</p> <p>materiale fornito dal docente</p>
<i>Inglese</i>	<p>Molecular modelling for beginners / Alan Hinchliffe. — 2nd ed. Editor John Wiley &amp; Sons Ltd. 2008. ISBN 978-0-470-51313-2</p> <p><i>sheets of the lessons and other materials from the teacher</i></p>

## MODALITÀ DI SVOLGIMENTO

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

## MODALITÀ DI VALUTAZIONE

### Prova orale Valutazione di progetto

Italiano	<p>L'esame consiste in una prova orale. La prova orale verterà su tutti gli argomenti svolti e includerà una discussione delle relazioni sulle esperienze di laboratorio svolte.</p> <p>Graduazione del voto dell'esame orale:</p> <p>18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina e si esprime con un linguaggio sufficientemente corretto ed appropriato.</p> <p>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.</p> <p>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 una ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario.</p> <p>30 e 30 e lode, lo studente possiede una base di conoscenze completa e approfondita. È in grado di applicare la conoscenza a casi e problemi complessi ed estenderla a nuove situazioni. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillantezza e perfetta proprietà di linguaggio.</p>
Inglese	<p><i>The evaluation is made through an oral exam. The students have to prepare a report on the laboratory experience that will be considered in the final score.</i></p> <p><i>Graduation of the grade of the oral exam:</i></p> <p><i>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline and expresses himself with a sufficiently correct and appropriate language.</i></p> <p><i>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.</i></p> <p><i>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.</i></p> <p><i>30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base. Is able to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. It expresses itself with brilliance and perfect language properties.</i></p>

## MODALITÀ DI FREQUENZA

### Frequenza facoltativa

Italiano	La partecipazione alle esperienze di laboratorio è obbligatoria
Inglese	<i>The presence at the laboratory experiences is mandatory</i>