



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Insegnamento Metodologie Informatiche per la Chimica**

**Corso di studio:** Chimica (triennale)

**Anno di Corso:** II

**Periodo** secondo semestre  
**didattico:**

**Tipologia:** D. altre attività formative (abilità informatiche)

**Totale Crediti:** 5

**Tipo Esame:** Orale

**Valutazione:** \_\_\_\_\_ voto in trentesimi \_\_\_\_\_

**Lingua di** Italiano, inglese  
**insegnamento:**

inizio corso marzo 2015 fine corso maggio 2016

**APPELLI DI ESAME**

Mese	Anno	Appello previsto
Febbraio	2015	
Marzo	2015	x
Aprile	2015	
Maggio	2015	
Giugno	2015	x
Luglio	2015	x
Settembre	2015	x
Ottobre	2015	x
Novembre	2015	
Dicembre	2015	
Gennaio	2016	x

**COMMISSIONE ESAME:**

Presidente: Sergio Brutti

Componente: Roberto Teghil

Componente: Angela De Bonis

Componente: Camilla Minichino

**ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI**

	dalle ore	alle ore	presso
LUNEDI'			
MARTEDI'	10	13	Studio del docente
MERCOLEDI'			
GIOVEDI'			
VENERDI'			



# **UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**

## **DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

### **Eventuali prerequisiti**

Matematica 1; Matematica per la chimica

#### **Obiettivi Formativi**

Questo corso si focalizza su tre principali obiettivi formativi:

L'uso di vettori, matrici e strumenti di algebra lineare per descrivere la geometria di strutture molecolari e i fondamenti della meccanica molecolare.

L'uso di codici informatici per disegnare e manipolare strutture molecolari in 3D

(ChemDraw e Avogadro) e anche per ottimizzare le strutture molecolari a livello MM.

L'uso di fogli di calcolo per programmare algoritmi finalizzati alla derivazione di proprietà strutturali di molecole in 3D e per realizzare analisi statistiche di dati.

### **Programma del Corso**

Introduzione sulle finalità e gli ambiti applicativi degli strumenti informatici di interesse della ricerca chimica Algebra vettoriale e matriciale: operazioni elementari e complesse; utilizzo di spreadsheets per la realizzazione di algoritmi computazionali per la soluzione di operazioni in campi vettoriali o tra matrici. Elementi di algebra lineare; geometria molecolare: strumenti matematici e analisi delle strutture bidimensionali e tridimensionali. Utilizzo di spreadsheets per l'analisi di strutture molecolari complesse Metodi computazionali per la previsione delle strutture molecolari: meccanica molecolare vs. meccanica quantistica. Equazione di Newton ed equazione di Schroedinger. Force fields: esempi di utilizzo di vari force fields nella previsione della struttura di molecole semplici; Rappresentazione di specie molecolari: chemdraw vs. avogadro Elementi di analisi dei dati: metodi statistici per la trattazione di stringhe di dati sperimentali e computazionali; utilizzo di spreadsheets per l'analisi dei dati

### **Metodi didattici**

Il corso si articola in lezioni frontali per un totale di 3 crediti (24 ore) mediante l'utilizzo di Presentazioni su formato elettronico. Sono previsti 2 crediti di attività di laboratorio informatico (24 ore) nei quali gli studenti Saranno chiamati a sviluppare software e script finalizzati alla valutazione in itinere del percorso formativo di ciascuno Studente.

### **Modalità di verifica dell'apprendimento**

Esame orale coadiuvato dai risultati della valutazione delle relazioni scritte consegnate dagli studenti al termine di ogni esercitazione

### **Testi di Riferimento**

G.Beddard. Applying Maths in the chemical & biomolecular sciences – Oxford University press.

Dispense fornite dal docente.

Altre informazioni:





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**COURSE Informatics for chemistry**

**Course of Chemistry**  
**studies:**

**Academic Year: II**

**ECTS: D**

**Teaching** Lectures & Lab activities

**Methods:**

**Evaluation** Oral exam plus evaluation of the lab activities

**Methods:**

**Evaluation:** score on 30 points

**Semester: II**

**Language:** ITALIAN (and English)

Course beginning on march 2015 ending on may 2015

**Calls for examination**

Month	Year	Expected call
February	2015	
March	2015	x
April	2015	
May	2015	
June	2015	x
July	2015	x
September	2015	x
October	2015	x
November	2015	
December	2015	
January	2016	x

**Examination Panel:**

President: Sergio Brutti

Member: Roberto Teghil

Member: Angela De Bonis

Member: Camilla Minichino

**Previous requirements:**

Math 1; Math for Chemists





**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA**  
**DIPARTIMENTO DI SCIENZE**

**Learning Outcomes:**

These class lessons are aimed at three main knowledge goals:

1. The use of vectors, matrixes and linear algebra equations to describe the geometry of molecular structures in 3D and basics of molecular mechanics.
2. The use of computer codes to draw and to manipulate molecular structures in 3D (ChemDraw and Avogadro) as well as to optimize at molecular mechanics level their structure.
3. The use of spreadsheets to program algorithms for the derivation of structural properties of molecules in 3D and to perform data analysis (linear regressions, plots, etc.)

**Syllabus:**

1. Introduction to the use of informatics in chemistry
2. Matrixes and vectors: simple and complex algebra. Use of spreadsheets to program algorithms capable to solve equations between matrices and vectors.
3. Linear algebra and molecular geometry in 3D. Mathematical tools to analyze molecular structures in 2D and 3D. Use of spreadsheets to study the structure of complex molecules.
4. Computational methods to predict molecular structures: molecular mechanics vs. quantum mechanics.
5. Molecular structure representation: chemdraw vs. Avogadro
6. Basics of statistics for data analysis: use of spreadsheets to analysis experimental and computational data.

**Suggested textbooks**

G.Beddard. Applying Maths in the chemical & biomolecular sciences –  
Oxford University press.

**Further information:**