

ANNO ACCADEMICO 2013/2014

Titolo del corso:

Metodologie Informatiche per la Chimica

Docente Titolare del corso: Sergio Brutti
Corso di Laurea : Chimica (triennale)

Obiettivi formativi generali (risultati di apprendimento previsti e competenze da acquisire):

Questo corso si focalizza su tre principali obiettivi formativi:

1. L'uso di vettori, matrici e strumenti di algebra lineare per descrivere la geometria di strutture molecolari e i fondamenti della meccanica molecolare.
2. 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.
3. 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:

1. Introduzione sulle finalità e gli ambiti applicativi degli strumenti informatici di interesse della ricerca chimica
2. Algebra vettoriale e matricale: operazioni elementari e complesse; utilizzo di spreadsheets per la realizzazione di algoritmi computazionali per la soluzione di operazioni in campi vettoriali o tra matrici.
3. 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
4. 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;
5. Rappresentazione di specie molecolari: chemdraw vs. avogadro
6. 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

Testi di riferimento:

Dispense fornite dal docente

Propedeuticità consigliate: Matematica 1, Matematica per la Chimica

Note:

ANNO ACCADEMICO 2013/2014

Class title:

Informatics for chemistry

TEACHER: Sergio Brutti

Corso di Laurea : Chimica (triennale)

TEACHING GOALS:

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.)

Topics:

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.

Testi di riferimento:

Slides provided by the teacher

Pre-requisites: Math 1, Math for chemists

Note:

Dati Relativi all'organizzazione didattica

Scheda dati relativa all'insegnamento di:

Metodologie Informatiche per la Chimica

Denominazione insegnamento in lingua inglese:

Informatics for chemistry

Corso di studio Chimica (triennale)

COMMISSIONE D'ESAME

PRESIDENTE	Sergio Brutti
COMPONENTI	Angela de Bonis
	Camilla Minichino
	Roberto Teghil

DATE APPELLI DI ESAME

Mese	Anno	Giorni
Febbraio	2014	11
Marzo	2014	
Aprile	2014	
Maggio	2014	
Giugno	2014	11
Luglio	2014	22
Settembre	2014	9
Ottobre	2014	7
Novembre	2014	
Dicembre	2014	
Gennaio	2015	20

ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI

GIORNO	DALLE ORE	ALLE ORE	PRESSO
LUNEDI'			
MARTEDI'	10	12	Studio del docente
MERCOLEDI'			
GIOVEDI'			
VENERDI'			

Esame integrato

☐ SI

☒ NO

Modalità d'esame

☐ Prova scritta

☐ Prova orale

☒ Prova scritta e orale