

ANNO ACCADEMICO: **2016-2017**INSEGNAMENTO/MODULO **METODOLOGIE INFORMATICHE PER LA CHIMICA**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **Altre Attività**DOCENTE: **Dott. Sergio Brutti**e-mail: **sergio.brutti@unibas.it**

sito web:

telefono: **0971205455**

cell. di servizio:

Lingua di insegnamento: **ITALIANO**

n. CFU:5 (3 di lezione e 2 di esercitazioni/laboratorio)	n. ore: 48 (24 di lezione e 24 di esercitazione/laboratorio)	Sede: Potenza Dipartimento/Scuola: Dipartimento di Scienze CdS: CHIMICA (L27)	Semestre: I (date previste di inizio e fine corso: 03/10/2016, 15-31/01/2017)
---	---	---	---

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO

- *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.*

PREREQUISITI

- *Matematica 1; Matematica per la chimica*

CONTENUTI 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. Stimatori del Valor Vero e dell'incertezza, regressioni lineari, metodo delle equazioni normali, metodi di interpolazione e intrapolazione, intervalli di confidenza nella stima delle incertezze.

METODI DIDATTICI

- *Le attività didattiche si articolano in lezioni frontali in classi con materiale didattico di supporto disponibile online. Alle lezioni frontali si aggiungono 8 esercitazioni informatiche individuali. Queste ultime si articolano in esercitazioni (tutorial) di autoapprendimento assistito dal docente ed esercitazioni di profitto (esoneri)..*

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Durante lo svolgimento del corso sono previsti 8 esoneri parziali in coincidenza con le esercitazioni informatiche individuali. Il superamento di 7 esoneri su 8 con votazione media maggiore di 18 consente di completare l'esame con una prova orale. Gli studenti che non superano almeno 7 esoneri su 8 con votazione media maggiore di 18 devono sostenere un esame pratico (esercitazione informatica individuale) e un esame orale.

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

- *DB Hibbert JJ Gooding. Data Analysis for chemistry – Oxford University Press*
- *Materiale didattico online disponibile sul sito-docente www2.unibas.it/sbrutti*

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

Il docente è disponibile per spiegazioni integrative durante l'orario di ricevimento (martedì 9-11), mediante email (sergio.brutti@unibas.it), o al telefono (0971 205455) previo accordo per un appuntamento.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

Gennaio-Febbraio-Giugno-Luglio-Settembre-Dicembre 2017

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI
