

INSEGNAMENTO/MODULO METODOLOGIE INFORMATICHE PER LA CHIMICA

ANNO ACCADEMICO: **2017-2018**

TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: altre attività

DOCENTE: Sergio Brutti

e-mail: [sergio.brutti@unibas.it](mailto:sergio.brutti@unibas.it)sito web: [scienze.unibas.it/site/home.html](http://scienze.unibas.it/site/home.html).

telefono: 0971/20215455

cell.

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: 5

( 3 di lezione e 2 di  
esercitazioni/laboratorio)

n. ore: 48

(di 24 lezione e 24 di  
esercitazione/laboratorio)Sede: **Potenza**

Dipartimento/Scuola:

**Dipartimento di Scienze**  
CdS

Semestre

**I Semestre: dal**  
**02/10/2017 al 15-**  
**31/01/2018****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 molare 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](http://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](mailto:sergio.brutti@unibas.it)), o al telefono (0971 205455) previo accordo per un appuntamento.*

**DATE DI ESAME PREVISTE<sup>1</sup>**

*Febbraio (2 appelli); Giugno; Luglio; Settembre; Ottobre*

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI  NO **ALTRE INFORMAZIONI**