

Insegnamento: Progettazione e sintesi di biomolecole	
Docente: Borbone Nicola	
Modulo: Modellistica molecolare	
CFU: 5	SSD: CHIM/06
Ore di lezione: 35	Ore di esercitazione: 5
Anno di corso: I Anno (I semestre)	
Obiettivi formativi: L'obiettivo del modulo è di fornire allo studente una conoscenza di base delle tecniche di modellistica molecolare usate per la predizione e la determinazione della struttura tridimensionale dei biopolimeri. Al termine del corso lo studente sarà in grado di comprendere recenti pubblicazioni scientifiche in questo campo, e di approfondire autonomamente i temi di suo interesse	
Contenuti: Introduzione. Definizione e utilità della modellistica molecolare. Accenni di quantomeccanica. Equazione di Schroedinger. Approssimazione di Born-Oppenheimer. Superficie di potenziale elettronico. Metodi <i>ab initio</i> , semiepirici ed empirici per il calcolo della superficie di potenziale elettronico. Meccanica molecolare. Approssimazione della superficie di energia potenziale: i campi di forza, concetti di base, termini dell'energia e le funzioni usate per descriverli. Interazioni non covalenti (VdW e Coulomb) e cutoff. Campi di forze. I termini dell'energia: stiramento, piegamento, torsionale, Van der Waals, coulombiana. Alcuni force fields: MM2, CHARMM, Amber, CVFF, CFF, MOPAC. Minimizzazione. Minimizzazione. Il problema dei minimi multipli. Algoritmi di minimizzazione: Steepest descent; conjugate gradient, Newton-raphson e loro uso. Restraints Dinamica molecolare. Calcolo numerico delle traiettorie. Algoritmo velocity Verlet. Ricerche conformazionali. Metodi per la ricerca conformazionale: ricerca sistematica, ricerca casuale, <i>distance geometry</i> . <i>Distance geometry</i> ed NMR. Dinamica molecolare e <i>simulated annealing</i> . Modelli di proteine basati sull'omologia. Allineamento delle sequenze. Regioni strutturalmente conservate e regioni strutturalmente variabili. Conformazione delle catene laterali. Rifinitura della struttura mediante dinamica molecolare.	