

CORSO DI STUDIO *Physics (LM-17)*

ANNO ACCADEMICO 2023-2024

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Spectroscopy and Computer Modeling of Molecular Systems*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	1°
Periodo di erogazione	2° semestre: Marzo – Maggio 2024
Crediti formativi universitari (CFU/ECTS)	6
SSD	CHIM/03
Lingua di erogazione	Inglese
Modalità di frequenza	Raccomandata, non obbligatoria

Docente	
Nome e cognome	Savino Longo
Indirizzo mail	savino.longo@uniba.it
Telefono	080 5442088
Sede	Dipartimento di Chimica, Via E. Orabona 4, 70125 Bari (BA)
Sede virtuale (Codice Microsoft Teams)	
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Mercoledì dalle 15 alle 19; si raccomanda tuttavia di inviare una e-mail all'indirizzo carla.coppola@uniba.it per accertarsi della disponibilità del docente

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
150	40	15	95
CFU/ECTS			
6	5	1	

Obiettivi formativi	Introduzione ai metodi della spettroscopia usati in chimica ma adattati per l'uso dei fisici. Metodi di calcolo utilizzabili nella simulazione della struttura, della dinamica e della spettroscopia delle diverse fasi della materia, da quella gassosa a quella biologica, principalmente con l'utilizzo di strumenti accessibili direttamente via browser.
Prerequisiti	Conoscenze di base di chimica e fisica quantistica a livello di laurea in fisica.

Metodi didattici	Lezioni con proposta di casi di studio. Codici informatici pratici. Discussione di casi reali.
-------------------------	--

Risultati di apprendimento previsti	
DD1 Conoscenza e capacità di comprensione	<ul style="list-style-type: none"> o Comprensione del metodo scientifico, della natura e delle modalità della ricerca in Fisica o Conoscenza dei metodi spettroscopici in diversi intervalli di energia o Utilizzo della modellazione computerizzata e della meccanica quantistica per comprendere le proprietà dei sistemi chimici in molte applicazioni

<p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<ul style="list-style-type: none"> o Capacità di identificare gli elementi essenziali di un fenomeno o Capacità di utilizzare lo strumento dell'analogia per applicare soluzioni conosciute a problemi nuovi (problem solving) o Capacità di progettare e di mettere in atto procedure sperimentali o teoriche per risolvere problemi della ricerca accademica e industriale o per il miglioramento dei risultati esistenti o Capacità di utilizzo di strumenti di calcolo matematico analitico e numerico o Lo studente è in grado di applicare teorie fisiche a sistemi molecolari/cristalli/biomolecole/materiali, conoscere i moderni metodi disponibili per utilizzare i computer per modellare la dinamica del sistema molecolare <ul style="list-style-type: none"> ● Autonomia di giudizio <ul style="list-style-type: none"> o Capacità di lavorare con crescenti gradi di autonomia, anche assumendo responsabilità nella programmazione di progetti e nella gestione di strutture o Gli studenti sono incoraggiati a scegliere soluzioni personali ai problemi proposti e a proporre casi di studio interessanti che possano costituire parte essenziale del colloquio d'esame. ● Abilità comunicative <ul style="list-style-type: none"> o Competenze nella comunicazione in lingua italiana e in lingua inglese nei settori avanzati della Fisica o Saper esporre le particolarità dei casi di studio e proporre tecniche di soluzione, è incoraggiata la discussione in classe ● Capacità di apprendere in modo autonomo <ul style="list-style-type: none"> o Acquisizione di strumenti conoscitivi di base per l'aggiornamento continuo delle conoscenze o Saper estrarre informazioni operative per casi di studio reali da testi formali, utilizzando codici informatici, tecniche matematiche avanzate, intelligenza artificiale
<p>Contenuti di insegnamento (Programma)</p>	<p>Modellistica molecolare: Dinamica molecolare classica. Trattamento quantistico degli elettroni nelle molecole.</p> <p>Spettroscopia molecolare: Transizioni elettroniche nei sistemi pi-greco. Spettroscopia vibrazionale, modi di vibrazione e frequenze di gruppo. Cenni alla spettroscopia NMR. Impiego di tecniche spettroscopiche per il riconoscimento di strutture molecolari.</p> <p>Comprensione fisica e modellazione dei sistemi biologici: La natura molecolare degli enzimi. Dinamica e utilizzo dell'energia nei sistemi biologici. Alcuni esempi di sistemi molecolari complessi. Teorie e modelli per la simulazione al computer.</p> <p>Pratica: Utilizzo di vari software per la costruzione di modelli molecolari e l'analisi di sistemi pi delocalizzati. Codifica e costruzione molecolare nel linguaggio SMILES.</p> <p>Introduzione alle tecniche di intelligenza artificiale (AI) applicate ai sistemi molecolari</p>
<p>Testi di riferimento</p>	<p>Harris, Daniel C., and Michael D. Bertolucci. <i>Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy</i>. Dover</p> <p>Cartwright H.M.: <i>Applications of artificial intelligence in chemistry</i>, Oxford</p> <p>Goodsell, D. S. <i>The machinery of life</i>. Springer.</p>
<p>Note ai testi di riferimento</p>	<p>Solo alcuni capitoli e in solo alcune sezioni</p>
<p>Materiali didattici</p>	<p>Diapositive delle lezioni (disponibili su richiesta)</p>
<p>Valutazione</p>	
<p>Modalità di verifica dell'apprendimento</p>	<p>Esame orale, basato sull'esposizione seminariale dello studente su un caso di studio concordato con il docente, utilizzando una presentazione powerpoint e codice informatico.</p>

<p>Criteria di valutazione</p>	<p>Saper applicare la teoria alla discussione di spettri molecolari reali. Essere in grado di proporre una tecnica di modellazione computerizzata specifica per un problema reale che coinvolge molecole e/o superfici nel contesto di un'applicazione reale. Saper utilizzare veri e propri programmi per ottenere informazioni utili.</p>
<p>Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p>Esame orale (100%)</p>
<p>Altro</p>	