

CORSO DI STUDIO *Physics (LM-17)*
ANNO ACCADEMICO 2024-2025

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 2025 |
| 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> |

| | |
|--|--|
| Criteria di valutazione | 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. |
| Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale | Esame orale (100%) |
| Altro | |
| | . |