Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

---

1 Programma delle esercitazioni di laboratorio

1. Preparazione
   (a) assegnazione account
   (b) ripasso UNIX elementare
   (c) uso di utilità di sistema: xemacs
   (d) uso di applicativi già installati: gnuplot
2. Simulazione 300K vuoto N,V,E: input + run + analisi output + visualizzazione (VMD)
3. Simulazioni N,V,E in vuoto, analisi delle Energie e loro diagrammi con gnuplot; minimizzazione della struttura
4. Simulazione in solvente: termalizzazione e analisi delle energie
5. Simulazioni negli insiemi (N,V,T) e (N,p,T); analisi delle energie e delle proprietà del sistema (volume, pressione, ...)
6. Dinamica guidata nel vuoto; diagrammi lavoro/distanza con vari percorsi e velocità di forzatura; calcolo ΔG
7. Esercitazione finale: Poly-Ala sostituita nel vuoto: calcolo RMSD e ΔG
8. Esercitazione finale: scrittura relazione

---

2 Valutazione

Vengono valutate globalmente le seguenti conoscenze e capacità emerse nel laboratorio, in particolar modo nell'esercitazione finale:

- uso del calcolatore in ambiente UNIX
- elaborazione numerica, trattamento degli errori, conoscenze generali in ambito scientifico
- conoscenze specifiche riguardo all'argomento del corso
- accuratezza dei risultati
- presentazione dei risultati

La valutazione ottenuta viene espressa in trentesimi ed influenza il voto dell'esame secondo la tabella:

voto esercitazione	*variazione del voto esame finale*
da 0 a 12	-5
da 13 a 18	-3
da 19 a 22	-1
da 23 a 26	0
da 27 a 28	+1
da 29 a 30	+2