

# Corso di Laurea Magistrale in Fisica

## Piano di Studi Fisica Teorica Generale - Fisica della Materia - Fisica Applicata A.A 2013/2014

### Corso di Tecniche di Simulazione Molecolare (CFU 4)

**Dott. Gianluca Lattanzi**  
**e-mail: [gianluca.lattanzi@ba.infn.it](mailto:gianluca.lattanzi@ba.infn.it)**

**Descrizione del corso.** Obiettivo del corso è lo studio delle principali tecniche di simulazione applicate alla fisica molecolare, con lezioni teoriche e pratiche. Le lezioni teoriche saranno dedicate allo studio dei fondamenti teorici dei principali algoritmi di simulazione, con particolare riferimento alla Dinamica Molecolare e ai metodi Monte Carlo in vari *ensembles* termodinamici. Saranno inoltre trattati i principali campi di forza molecolari (Amber, OPLS, Gromos) per la simulazione di biomolecole e saranno accennati i metodi che contribuiscono alla parametrizzazione dei campi di forza. Le conoscenze saranno esemplificate nello studio pratico dei metodi di visualizzazione e di una simulazione in dinamica molecolare di una piccola proteina in soluzione mediante il software open-source VMD-NAMD. Questa fase, prevista a metà corso, consisterà in due lezioni di carattere pratico-applicativo. E' previsto inoltre lo svolgimento di n.1 prova in itinere che consisterà in una simulazione con relazione finale e che potrà, eventualmente, essere valutata nella prova finale di esame.

#### **Risultati di apprendimento.**

Conoscenza e capacità di comprensione:

- Acquisizione degli elementi teorici della fisica computazionale nell'ambito della modellistica molecolare classica. Conoscenza dei principali algoritmi di simulazione e del grado di approssimazione nella descrizione dei fenomeni molecolari.
- Acquisizione delle principali tecniche di studio analitiche per lo studio delle proprietà strutturali e conformazionali delle molecole in ambito multidisciplinare.
- Acquisizione di tecniche di studio per la visualizzazione e modellizzazione dei fenomeni molecolari in ambito multidisciplinare.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione:

- Capacità di studiare e sviluppare modelli utilizzati nella letteratura scientifica più recente per descrivere sistemi molecolari in ambito multidisciplinare (fisica dello stato solido, strutturistica chimica, biologia molecolare).
- Capacità di visualizzare e modellizzare molecole e fenomeni molecolari in ambito multidisciplinare.

## Programma del Corso

- 1. Richiami di meccanica classica (1-2).** Spazio delle fasi. Formulazione Lagrangiana. Formulazione Hamiltoniana. Modello classico di polimero. L'integrale di azione. Lagrangiana di un sistema con vincoli. Principio di Gauss. Moti del corpo rigido: angoli di Eulero e quaternioni. Sistemi non-Hamiltoniani. Teorema di Liouville. Equazione di Liouville.
- 2. Introduzione alla dinamica molecolare: ensemble microcanonico (3-4).** Metodi alle differenze finite: algoritmo di Verlet, algoritmo di Verlet in velocità. Condizioni iniziali. Sistemi con vincoli olonomi: algoritmi SHAKE e RATTLE. Operatore di evoluzione temporale e integratori numerici. Esempi illustrativi.
- 3. Dinamica molecolare nell'ensemble canonico (5-6).** L'Hamiltoniano di Nosé. Hamiltoniano di Nosé-Poincaré. Equazioni di Nosé-Hoover. Catene di Nosé-Hoover. Ensemble isocinetico. Termostato di Langevin.
- 4. Ensemble isobarico (7-8).** Richiami di meccanica statistica. Teorema del viriale. Tensore di pressione. Dinamica molecolare nell'ensemble isoentalpico-isobarico. Dinamica molecolare nell'ensemble isotermico-isobarico. Barostato di Langevin.
- 5. Interazioni a lungo raggio (9-10).** Somme di Ewald. Contributo a lungo raggio. Correzione per l'autointerazione. Contributo a corto raggio. Metodo Smooth Particle Mesh Ewald. Trasformata di Fourier discreta. Algoritmo Fast Fourier Transform.
- 6. Metodo Monte Carlo (11-12).** Campionamento. Campionamento di importanza. Algoritmo di Metropolis. Monte Carlo in ensemble canonico, isotermico-isobarico, gran canonico. Monte Carlo ibrido. Monte Carlo con scambio di repliche. Campionamento di Wang e Landau.
- 7. Calcoli di energia libera (13-14).** Perturbazione adiabatica e integrazione termodinamica. Dinamica adiabatica dall'energia libera (AFED). Uguaglianza di Jarzynski e metodi del non-equilibrio. Eventi rari. Coordinate di reazione. "Blue moon" ensemble. Campionamento a ombrello e istogrammi multipli. Metadinamica e dinamica molecolare accelerata in temperatura (TAMD-dAFED).
- 8. Esercitazione di laboratorio: metodi di visualizzazione (15).** Studio dell'applicazione open-source VMD per la visualizzazione grafica di molecole, proteine e acidi nucleici.
- 9. Esercitazione di laboratorio: NAMD (16).** Dinamica molecolare classica di una proteina in soluzione mediante il programma open-source NAMD. Analisi delle traiettorie: proprietà dinamiche e strutturali.

Modalità di svolgimento delle lezioni: ogni lezione teorica avrà la durata di due ore. Gli argomenti indicati saranno trattati nelle lezioni indicate dai numeri tra parentesi. Le lezioni di carattere applicativo (esercitazioni) saranno svolte nel laboratorio di fisica computazionale.

Testi consigliati:

- M. E. Tuckermann, Statistical mechanics: theory and molecular simulation, Oxford Graduate Texts, 2010.
- D. Frenkel & B. Smit, Understanding Molecular Simulation, Academic Press, 2001.
- NAMD User's Manual (edizione elettronica disponibile).
- Dispense a cura del docente.