

INSEGNAMENTO/MODULO METODOLOGIE INFORMATICHE PER LA CHIMICAANNO ACCADEMICO: **2019-2020**TIPOLOGIA DI ATTIVITÀ FORMATIVA: **ULTERIORI CONOSCENZE INFORMATICHE**DOCENTE: **Camilla Minichino**e-mail: camilla.minichino@unibas.itsito web: scienze.unibas.it/site/home.html.

telefono: 0971/206158

cell.

Lingua di insegnamento: italiano

n. CFU: **3**

(1 di lezione e 2 di esercitazioni/laboratorio)

n. ore: 32

(8 di lezione e 24 di esercitazione/laboratorio)

Sede: **Potenza**Dipartimento/Scuola: **Dipartimento di Scienze**
CdS **Chimica L27****Semestre:1****Dal 01.10.2019 al 20 dicembre - 20 gennaio 2020****OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO**

Il corso si propone di fornire una panoramica sugli strumenti informatici per la raccolta, la gestione, la trasmissione e l'elaborazione di dati di interesse chimico.

Lo studente alla fine del corso deve dimostrare di saper:

- utilizzare pacchetti software per disegnare, visualizzare e manipolare strutture molecolari, eseguire ottimizzazioni geometriche a livello di meccanica molecolare;
- reperire informazioni di carattere chimico utilizzando le fonti appropriate e di organizzare in un data base le informazioni bibliografiche;
- sviluppare semplici algoritmi e implementare programmi di calcolo per la risoluzione numerica di problemi.

PREREQUISITI

Nessuno, ma è fortemente consigliata la conoscenza dei contenuti del corso di Metodi Matematici per la Chimica che si tiene nello stesso semestre.

CONTENUTI DEL CORSO

Codifica e rappresentazione dell'informazione all'interno di un computer.

La rappresentazione tramite computer delle struttura molecolare secondaria e terziaria. La visualizzazione delle molecole e di proprietà molecolari, campi di forza e metodi di meccanica molecolare.

Recupero dell'informazione in ambito chimico: fonti d'informazione primarie, secondarie e terziarie. Le principali banche dati on line e modalità di uso. Riviste chimiche in formato elettronico. Strumenti per la creazione di un data base bibliografico.

Alcune applicazione di metodi numerici in chimica mediante l'uso di fogli di calcolo e/o linguaggi di programmazione interpretati.

METODI DIDATTICI

Lezioni frontali, laboratorio di informatica.

MODALITÀ DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Esame orale che prevede anche la discussione delle relazioni di laboratorio (da consegnare via e-mail almeno una settimana prima dell'esame).

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO, MATERIALE DIDATTICO ON-LINE

- Appunti, presentazioni del corso (<https://cloud.unibas.it/index.php/s/NzkHmHVWajZbCl> e/o <https://elearning.unibas.it/>)

METODI E MODALITÀ DI GESTIONE DEI RAPPORTI CON GLI STUDENTI

All'inizio del corso, dopo aver descritto obiettivi, programma dettagliato e metodi di verifica, il docente comunica la password per accedere al sito su cui viene depositato il materiale didattico. Inoltre raccoglie l'elenco degli studenti, corredato di nome, cognome, matricola, e-mail e (eventualmente) numero di cellulare e ricorda di essere sempre disponibile per informazioni, chiarimenti o aiuto.

Il ricevimento studenti si svolge di norma il martedì ed il mercoledì dalle 11 alle 13 presso lo studio 3D-103B (essendo possibili variazioni, in corrispondenza di impegni ufficiali/istituzionali, si prega di contattare prima il docente via e-mail) ed in altri giorni/orari da concordare.

DATE DI ESAME PREVISTE¹

21/01/2020, 04/02/2020, 20/02/2020, 03/03/2020, 26/05/2020, 09/06/2020, 07/07/2020, 21/07/2020, 15/09/2020, 06/10/2020, 15/12/2020.

SEMINARI DI ESPERTI ESTERNI SI NO

ALTRE INFORMAZIONI

¹Potrebbero subire variazioni: consultare <https://unibas.esse3.cineca.it/ListaAppelliOfferta.do?jsessionid=> per eventuali aggiornamenti.