

Titolo:	Il laboratorio chimico virtuale: reazioni ed esperimenti al computer
Descrizione:	<p>La chimica computazionale si colloca tra la teoria e l'esperimento, e permette di prevedere le proprietà molecolari utilizzando i principi della chimica teorica mediante l'uso del supercalcolo (cioè il calcolo ad alte prestazioni basato su cluster di computer ad alte prestazioni), completando e arricchendo l'informazione sperimentale.</p> <p>La chimica computazionale può dare risposte a domande fondamentali per le scienze molecolari e dei materiali. Come si ripiega una proteina? Come si dispongono le molecole quando si depositano su una superficie? Qual è il meccanismo di una sintesi organica complessa? Si possono progettare nuovi farmaci o nuovi materiali con il computer? Come si spiega l'attività biologica di un enzima? Sono tutti quesiti ai quali il laboratorio virtuale della chimica computazionale può dare risposte nuove e intelligenti, che integrano l'evidenza sperimentale o svelano particolari inaccessibili all'esperimento.</p>
Numero studenti	Massimo 15
Impegno Lavoro	Dopo una panoramica esaustiva sul tema chimica e computer, l'attività da svolgere insieme consiste in una serie di esperimenti virtuali al computer (tipicamente in un'aula di informatica) in cui gli studenti sono guidati nella costruzione di semplici molecole, visualizzazione di meccanismi di reazioni elementari e brevi dinamiche.
Referente	Laura Orian