



MARTEDÌ 18 MARZO 2025 - ore 14.30

Online Piattaforma MS Teams

Un viaggio interattivo e in realtà aumentata alla scoperta di strutture molecolari

(Prof.ssa Laura Belvisi)

Nell'incontro saranno illustrati alcuni siti web a libero accesso che offrono strumenti interattivi utilizzabili da computer, tablet e smartphone per visualizzare modelli molecolari e animazioni 3D, ed esplorare anche in realtà aumentata strutture, reattività, dinamica e interazioni di molecole in vari ambiti della chimica.

Nella prima parte verranno presentate le risorse disponibili nel sito del Protein Data Bank (PDB), il più importante archivio per dati di struttura in 3D di proteine e acidi nucleici e loro complessi con varie molecole, quali ad esempio farmaci e altre molecole dotate di attività biologica. Tali dati sono di pubblico dominio e accessibili gratuitamente. Il sito web del database offre l'accesso ai dati strutturali e diversi strumenti interattivi per la visualizzazione e l'analisi delle strutture 3D determinate con tecniche sperimentali o computazionali. Il sito comprende anche una sezione dedicata a risorse per la didattica e ad argomenti di attualità in vari ambiti delle scienze.

Nella seconda parte verranno presentate alcune risorse online per studiare e insegnare la chimica utilizzando tecnologie di realtà aumentata su computer, telefoni e tablet. Tali risorse comprendono strumenti di modellazione molecolare virtuale per esplorare la struttura, la dinamica e la stereochimica delle molecole di interesse o analizzare esempi di riconoscimento molecolare per una serie di biomolecole e complessi macromolecolari predefiniti.

