

# Insegnare la *molecular dynamics* come pratica interpretativa in un contesto di *Team-Based Learning*

Renato Lombardo

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche  
dell'Università di Palermo

e-mail: [renato.lombardo@unipa.it](mailto:renato.lombardo@unipa.it)

---

**Abstract.** Molecular dynamics is increasingly introduced in chemistry and life science courses, yet students often experience difficulties in interpreting simulation outputs and relating different descriptors to a coherent explanation. In this context, molecular dynamics can be approached as an interpretative practice rather than as a set of techniques. The experience described here was implemented in a graduate-level physical chemistry course for biotechnology students within a Team-Based Learning framework, designed to promote discussion, comparison of viewpoints and collective decision making based on available evidence. Particular attention is given to how students move from a descriptive reading of individual indicators to a more integrated interpretation through group interaction. The implementation and the observed learning dynamics are discussed, highlighting both strengths and critical aspects. The role of guided questioning, also supported by AI, is considered in relation to the development of students' ability to construct and justify interpretations. The experience suggests that focusing on interpretation and decision making can contribute to making physical chemistry more meaningful and closer to scientific practice.

**Keywords:** Team-Based Learning; molecular dynamics; chimica fisica; apprendimento collaborativo; intelligenza artificiale

---

## 1. Introduzione

Nei corsi di chimica fisica rivolti a studenti di area biologica e biotecnologica emerge spesso una difficoltà strutturale: il collegamento tra modelli teorici e sistemi reali. Gli studenti, con background eterogenei e una preparazione non sempre solida in matematica e fisica, tendono a percepire la disciplina come astratta e distante dalle applicazioni di interesse. Questa difficoltà è ben documentata nella letteratura sulla didattica delle scienze, che evidenzia come l'apprendimento risulti particolarmente problematico quando richiede il coordinamento di più livelli di rappresentazione e la costruzione di significato a partire da modelli [1, 2].

Il caso della *molecular dynamics* è emblematico di questa tensione. Sebbene essa sia sempre più presente nei curricula di chimica e scienze della vita, il suo valore didattico non risiede tanto nell'esecuzione delle simulazioni, quanto nella capacità di interpretarne i risultati [3]. Gli studenti si trovano infatti di fronte a una molteplicità di descrittori che spesso non forniscono semplici risposte dirette, ma richiedono di essere messi in relazione tra loro e interpretati nel contesto del sistema studiato. In assenza di un adeguato supporto, l'analisi tende a ridursi a una lettura descrittiva dei grafici: si osservano andamenti, si riconoscono pattern, ma raramente si arriva a costruire una spiegazione coerente del comportamento molecolare. Il problema non è quindi solo "capire i grafici", ma comprendere che cosa significhi usarli per prendere decisioni motivate.

### 1.1 La *molecular dynamics* come pratica interpretativa

In questa prospettiva, insegnare la *molecular dynamics* significa soprattutto insegnare a interpretarla. I diversi descrittori utilizzati nelle analisi rappresentano prospettive parziali sul sistema e acquistano significato solo quando vengono messi in relazione tra loro. Un esempio tipico riguarda l'inter-

pretazione congiunta di descrittori come la *Root Mean Square Deviation* (RMSD), *Root Mean Square Fluctuation* (RMSF), o indicatori di persistenza delle interazioni. Un andamento relativamente stabile dell'RMSD può suggerire che la struttura complessiva del sistema sia conservata nel tempo. Tuttavia, un'analisi dell'RMSF può evidenziare regioni con elevata flessibilità, in particolare in prossimità del sito di legame. In questo caso, una lettura superficiale porterebbe a concludere che il sistema sia stabile, mentre un'interpretazione più articolata suggerisce la presenza di dinamiche locali rilevanti per la funzione o per la stabilità del complesso. Analogamente, la persistenza delle interazioni tra ligando e proteina può fornire informazioni sulla stabilità del legame che non emergono direttamente dall'analisi delle fluttuazioni strutturali. Nessuno di questi indicatori, preso singolarmente, è sufficiente per trarre una conclusione: è il loro confronto che consente di costruire un'interpretazione plausibile. Questo tipo di ragionamento riflette da vicino la pratica scientifica, nella quale i dati non forniscono risposte immediate, ma devono essere integrati in un quadro interpretativo coerente [4, 5]. L'interpretazione diventa quindi un processo attivo, che richiede di confrontare ipotesi alternative, valutare la coerenza tra evidenze e giustificare le proprie conclusioni.

In questo contesto, l'obiettivo didattico non è semplicemente trasmettere conoscenze sui singoli descrittori, ma sviluppare la capacità di utilizzarli in modo coordinato per costruire decisioni motivate. Approcci didattici attivi risultano particolarmente adatti a tale scopo, in quanto promuovono la partecipazione, il confronto e la costruzione condivisa del significato [6, 7].

L'esperienza descritta nel presente lavoro si inserisce in questa prospettiva, proponendo un'attività basata sul *Team-Based Learning* in cui gli studenti sono chiamati a interpretare dati di *molecular dynamics* e a prendere decisioni collettive a partire da evidenze multiple.

## 2. L'attività didattica in un contesto di Team-Based Learning

Per affrontare le difficoltà legate all'interpretazione dei dati di *molecular dynamics*, è stata progettata un'attività didattica basata sul Team-Based Learning (TBL). La scelta di questo approccio è motivata dalla sua coerenza con l'obiettivo di sviluppare competenze interpretative: il TBL, infatti, mette gli studenti nella condizione di confrontare punti di vista diversi, esplicitare il proprio ragionamento e costruire decisioni condivise a partire da evidenze.

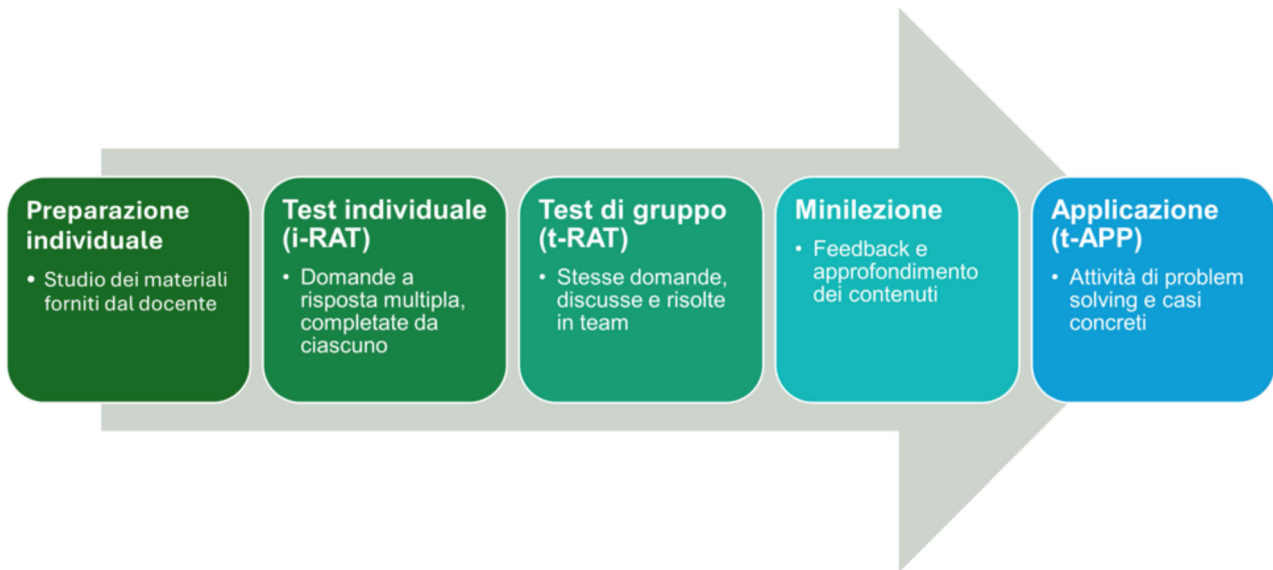
L'attività è stata implementata all'interno di un insegnamento di chimica fisica in un corso di laurea magistrale per biotecnologi e ha coinvolto un numero limitato di studenti, con background eterogenei. In questo contesto, il lavoro in piccoli gruppi e la strutturazione delle fasi si sono rivelati elementi fondamentali per sostenere il processo di apprendimento.

### 2.1 Il Team-Based Learning

Il Team-Based Learning (TBL) è un approccio di apprendimento cooperativo strutturato che combina preparazione individuale, lavoro in gruppi stabili e attività applicative basate su decisioni condivise. A differenza di forme più informali di lavoro di gruppo, il TBL prevede una sequenza precisa di fasi e una forte responsabilità individuale, che si integra con la costruzione collettiva della conoscenza [8]. Un elemento centrale del TBL è la formazione di gruppi eterogenei e stabili nel tempo. Nel caso descritto, i gruppi sono stati costruiti tenendo conto del background degli studenti e del loro livello di preparazione, in modo da distribuire competenze diverse all'interno di ciascun team. Questo ha favorito il confronto tra punti di vista differenti e ha reso la discussione una componente essenziale del processo di apprendimento. L'attività si è articolata secondo la sequenza mostrata in figura 1.

La prima fase prevede una preparazione individuale, nella quale gli studenti studiano materiali introduttivi sui concetti di base della *molecular dynamics* e sui principali descrittori utilizzati per analizzarne i risultati. Questa fase è fondamentale per garantire una partecipazione attiva alle fasi successive.

Segue un test di prontezza individuale (i-RAT), composto da domande a scelta multipla, che ha lo scopo di verificare la comprensione dei concetti chiave e rendere esplicite eventuali difficoltà. Lo stesso test viene poi ripetuto in gruppo (t-RAT), richiedendo agli studenti di discutere le risposte e raggiungere un consenso. Questa fase non ha solo una funzione valutativa: il confronto tra pari permette di chiarire fraintendimenti, mettere a confronto interpretazioni diverse e costruire una base condivisa di comprensione.



**Figura 1.** Struttura dell'attività di *Team-Based Learning*: preparazione individuale, test di prontezza individuale (i-RAT), test di gruppo (t-RAT), fase di chiarimento e attività applicativa (t-APP)

Dopo una breve fase di chiarimento guidata dal docente, si passa all'attività applicativa da svolgere in gruppo (t-APP), che rappresenta il cuore del TBL. In questa fase agli studenti viene proposto un problema complesso, per il quale non esiste una risposta immediata o univoca, e viene richiesto di prendere una decisione motivata.

Nel caso specifico, l'attività è stata progettata a partire da uno studio reale di *molecular dynamics* su una proteasi virale [9], opportunamente semplificato a fini didattici. Gli studenti, organizzati nei loro gruppi, hanno analizzato dataset contenenti diversi descrittori strutturali e dinamici e sono stati chiamati a selezionare il candidato più promettente tra più sistemi leganti/proteina, giustificando la loro scelta sulla base dei dati disponibili.

Un aspetto cruciale della progettazione è che nessun indicatore, preso singolarmente, è sufficiente per rispondere alla domanda. Gli studenti devono quindi confrontare e integrare informazioni diverse, passando da una lettura descrittiva dei grafici a una valutazione complessiva del comportamento molecolare. In questo senso, la struttura del TBL risulta particolarmente coerente con l'obiettivo di sviluppare una competenza interpretativa.

## 2.2 L'uso dell'intelligenza artificiale come supporto al ragionamento

Durante la fase applicativa è stato introdotto un agente (*Isacco*) basato su intelligenza artificiale (AI), utilizzando in particolare ChatGPT 5.1, configurato come "tutor socratico". L'uso dell'AI è stato concepito come supporto alla riflessione, non come strumento per ottenere rapidamente una risposta. In linea con quanto discusso nella letteratura recente sull'impiego delle tecnologie generative in educazione, l'efficacia di questi strumenti dipende, infatti, in modo decisivo dal modo in cui vengono integrati nel design didattico [10].

L'obiettivo non era fornire agli studenti un sistema in grado di risolvere il problema, ma un interlocutore capace di stimolare il ragionamento attraverso domande e richieste di giustificazione. Questo approccio si ispira ai principi del tutoring socratico, nei quali il supporto non consiste nel fornire soluzioni, ma nel guidare progressivamente il processo di interpretazione [11, 12].

*Isacco* è stato configurato attraverso un insieme di istruzioni di sistema progettate per vincolarne il comportamento. Al sistema è stato fornito accesso agli stessi materiali didattici degli studenti, incluse le slide del corso, gli articoli introduttivi e la descrizione del caso, in modo da garantire coerenza con il contesto disciplinare e con il livello di approfondimento richiesto. L'aspetto più rilevante è che

*Isacco* è stato esplicitamente costretto a non fornire risposte dirette. Le istruzioni prevedevano, ad esempio, il divieto di indicare quale fosse il candidato migliore, il divieto di correggere esplicitamente le risposte degli studenti e l'obbligo di porre domande, richiedere chiarimenti e suggerire confronti tra diversi descrittori.

### 3. Implementazione e risultati dell'esperienza

L'attività è stata implementata in due incontri consecutivi di due ore ciascuno, seguendo la struttura descritta nella sezione precedente. Il primo incontro è stato dedicato alla fase di preparazione e alla *readiness assurance* (i-RAT e t-RAT), nonché alla minilezione di approfondimento, mentre il secondo è stato interamente riservato all'attività applicativa (t-APP). Dal punto di vista operativo, tutti i gruppi hanno lavorato sullo stesso dataset e sullo stesso problema decisionale.

Uno degli aspetti più rilevanti emersi riguarda il modo in cui gli studenti affrontano l'interpretazione dei dati. In una prima fase, le analisi tendono a concentrarsi su un singolo indicatore, ad esempio l'R-MSD; la discussione di gruppo porta, però, a considerare altri descrittori e a rivedere le conclusioni iniziali. Il requisito di una decisione condivisa spinge gli studenti a esplicitare le proprie ipotesi, confrontarle e giustificare la scelta finale.

Anche la fase iniziale ha avuto un ruolo importante. Come tipico nel TBL, le prestazioni nei test di gruppo risultano superiori a quelle individuali, ma soprattutto il confronto tra pari aiuta a chiarire i concetti e a costruire un linguaggio condiviso, facilitando l'ingresso nella fase applicativa, in cui è richiesto un uso coordinato dei descrittori. Per quanto riguarda l'uso dell'intelligenza artificiale, l'agente è stato utilizzato in modo selettivo e non sistematico. Gli studenti tendevano a ricorrervi in momenti di incertezza o per verificare la coerenza delle proprie interpretazioni, piuttosto che come fonte primaria di risposta. Questo uso "moderato" è risultato coerente con l'obiettivo di mantenere il focus sull'attività di gruppo e sulla responsabilità degli studenti nel processo decisionale.

### 4. Conclusioni

Alla luce dell'implementazione, è possibile proporre una breve analisi dei punti di forza e delle criticità dell'approccio adottato.

Tra i principali punti di forza emerge l'elevato livello di coinvolgimento degli studenti, sostenuto dalla dimensione collaborativa e dalla presenza di un compito autentico. L'attività favorisce, inoltre, lo sviluppo di competenze trasversali, come la capacità di argomentare, confrontare interpretazioni e giustificare le proprie scelte sulla base dei dati.

Accanto a questi aspetti, emergono alcune criticità. La progettazione e la gestione dell'attività richiedono un investimento significativo in termini di tempo e competenze didattiche, mentre la complessità del compito può rappresentare una difficoltà nelle fasi iniziali. Anche l'integrazione dell'intelligenza artificiale richiede attenzione, per evitare un uso passivo e mantenere il focus sul processo di interpretazione.

Questi elementi mettono in evidenza un aspetto centrale: l'efficacia di approcci come il Team-Based Learning non dipende solo dalla struttura dell'attività, ma anche dal livello di preparazione con cui vengono progettati e implementati. In tal senso, assume un ruolo fondamentale la formazione dei docenti; l'implementazione dell'attività è stata, infatti, possibile anche grazie alla formazione che hanno ricevuto tramite il *Teaching and Learning Center* (TLC-CIMDU) [13] e al Progetto Mentore [14] dell'Università degli studi di Palermo.

Esperienze di questo tipo mostrano come un approccio centrato sull'interpretazione e sulla decisione possa contribuire a rendere la didattica della chimica fisica più accessibile e significativa per studenti con background diversi, avvicinandola maggiormente alla pratica scientifica reale.

## Riferimenti bibliografici

- [1] L. A. E. Tibell, C.-J. Rundgren, Educational challenges of molecular life science: characteristics and implications for education and research, *CBE Life Sci. Educ.*, 2010, **9**(1), 25-33 (<https://doi.org/10.1187/cbe.08-09-0055>).
- [2] A. H. Johnstone, Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem, *J. Comput. Assist. Learn.*, 1991, **7**(2), 75-83 (<https://doi.org/10.1111/j.1365-2729.1991.tb00230.x>).
- [3] D. E. Elmore, Why should biochemistry students be introduced to molecular dynamics simulations - and how can we introduce them?, *Biochem. Mol. Biol. Educ.*, 2016, **44**(2), 118-123 (<https://doi.org/10.1002/bmb.20943>).
- [4] Multiple representations in chemical education, in *Models and Modeling in Science Education* (Eds., J. K. Gilbert, D. Treagust), Springer Netherlands, Dordrecht, 2009, Vol. 4 (<https://doi.org/10.1007/978-1-4020-8872-8>).
- [5] N. J. Nersessian, *Creating scientific concepts*, MIT Press, 2010.
- [6] S. Freeman, S. L. Eddy, M. McDonough, et al., Active learning increases student performance in science, engineering, and mathematics, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2014, **111**(23), 8410-8415 (<https://doi.org/10.1073/pnas.1319030111>).
- [7] M. T. H. Chi, Active-constructive-interactive: a conceptual framework for differentiating learning activities, *Top. Cogn. Sci.*, 2009, **1**(1), 73-105 (<https://doi.org/10.1111/j.1756-8765.2008.01005.x>).
- [8] L. K. Michaelsen, M. Sweet, The essential elements of Team-Based Learning, *New Dir. Teach. Learn.*, 2008, **2008**(116), 7-27 (<https://doi.org/10.1002/tl.330>).
- [9] Y. L. Weng, S. R. Naik, N. Dingelstad, M. R. Lugo, S. Kalyaanamoorthy, A. Ganesan, Molecular dynamics and in silico mutagenesis on the reversible inhibitor-bound SARS-CoV-2 main protease complexes reveal the role of lateral pocket in enhancing the ligand affinity, *Sci. Rep.*, 2021, **11**(1), 7429 (<https://doi.org/10.1038>).
- [10] E. Kasneci, K. Sessler, S. Küchemann, et al., ChatGPT for good? On opportunities and challenges of large language models for education, *Learn. Individ. Differ.*, 2023, **103**, 102274 (<https://doi.org/10.1016/j.lindif.2023.102274>).
- [11] A. C. Graesser, P. Chipman, B. C. Haynes, A. Olney, AutoTutor: an intelligent tutoring system with mixed-initiative dialogue, *IEEE Trans. Educ.*, 2005, **48**(4), 612-618 (<https://doi.org/10.1109/TE.2005.856149>).
- [12] K. VanLehn, The relative effectiveness of human tutoring, intelligent tutoring systems, and other tutoring systems, *Educ. Psychol.*, 2011, **46**(4), 197-221 (<https://doi.org/10.1080/00461520.2011.611369>).
- [13] A. M. Maggio, R. Lombardo, D. Chillura Martino, La formazione e l'aggiornamento dei docenti chimici dell'Università di Palermo: le attività del Progetto Mentore e del TLC-CIMDU, *CnS*, 2024, **4**, 4-16 (<https://chimicanellascuola.it/index.php/cns/article/view/198/332>).
- [14] G. Scaccianoce, O. Scialdone, R. Lombardo, I dieci anni del Progetto Mentore all'Università degli Studi di Palermo, in *Mentoring e Didattica Universitaria*, Collana del TLC-CIMDU, Palermo University Press, Palermo, 2024, pp. 159-163.

