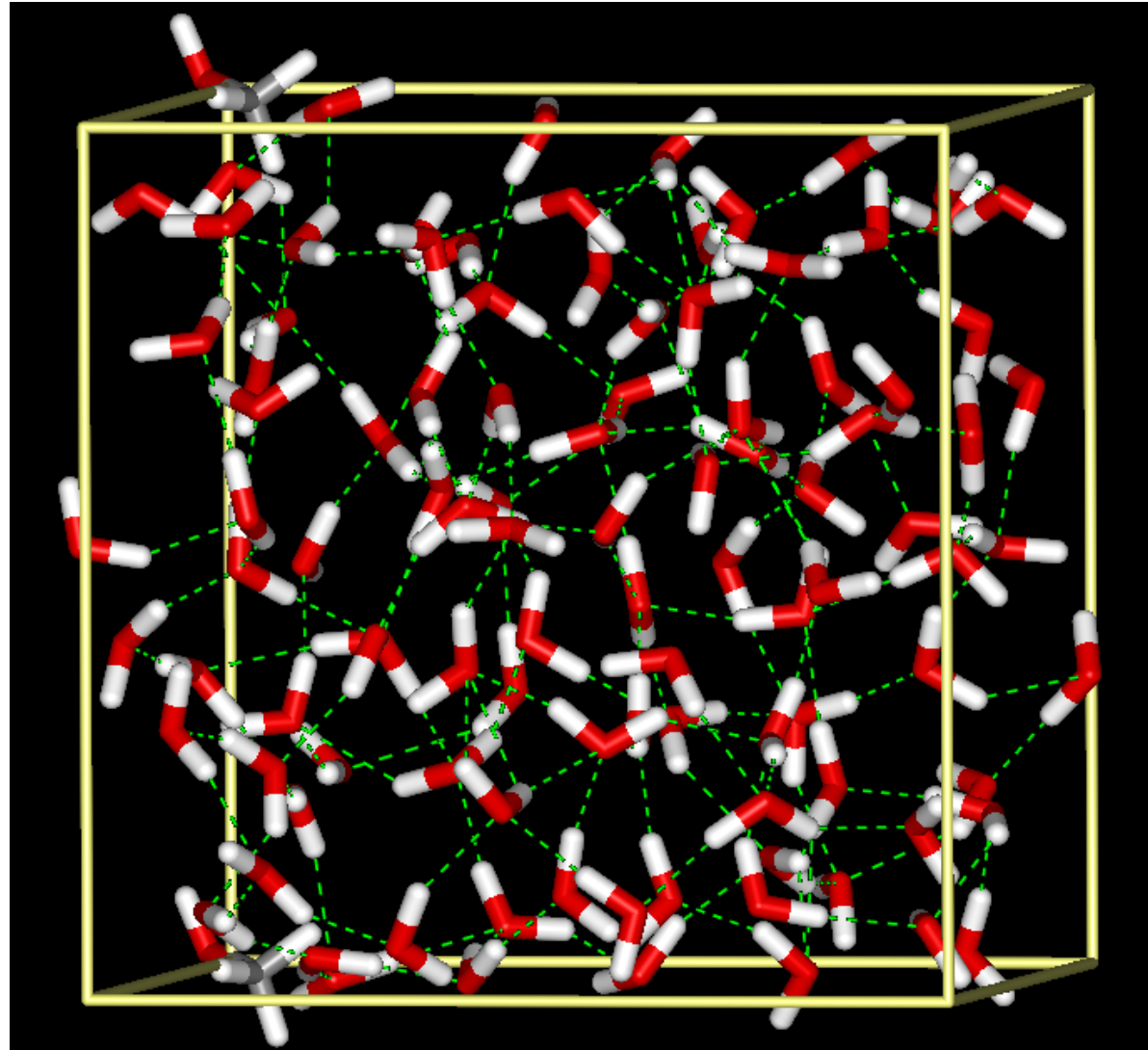


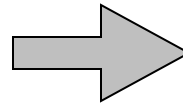
Modelagem Molecular

Kaline Coutinho



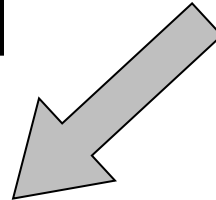
Estudo de materiais na Física:

A matéria é composta por átomos e moléculas



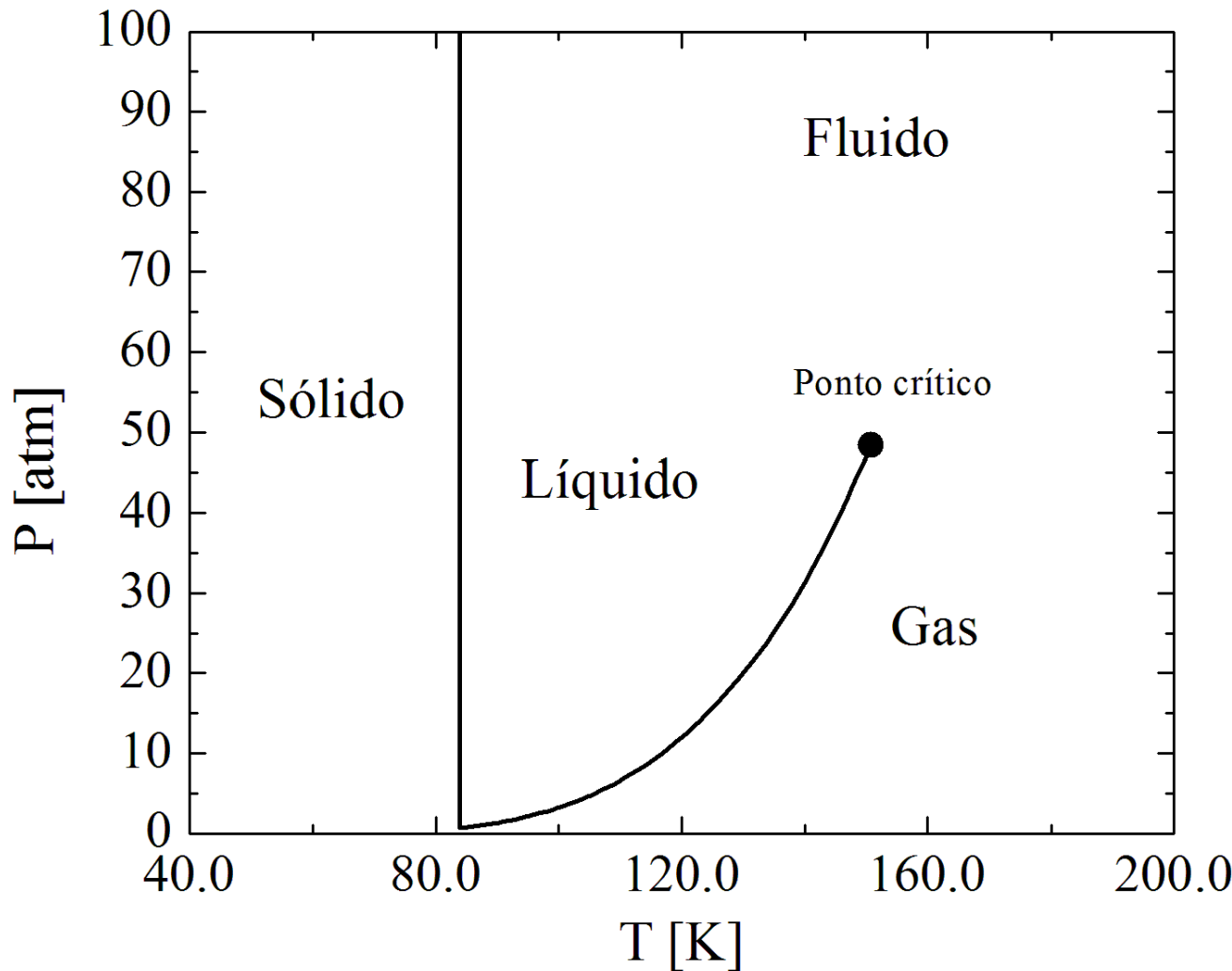
O estudo teórico não permite tratar quantidades macroscópicas da matéria.

$$1 \text{ mol} = 6,02 \times 10^{23}$$



Geralmente, fazemos simplificações e desenvolvemos modelos

Primeira abordagem: Diagrama de fase



- Nas CNTP: sólidos e gases.
- Sempre há transição sólido $\Leftrightarrow$ fluido
- Sólido = compacto, ordenado, baixa difusão. (Cuidado com amorfo e vidro).
- Fluido = flui, desordenado, baixa densidade, grande difusão.
- Diferença entre líquido e gás: densidade e compressibilidade.
- Existem modelos ideais para gases e sólidos, mas não para líquidos.

Classificamos a matéria nos estados:

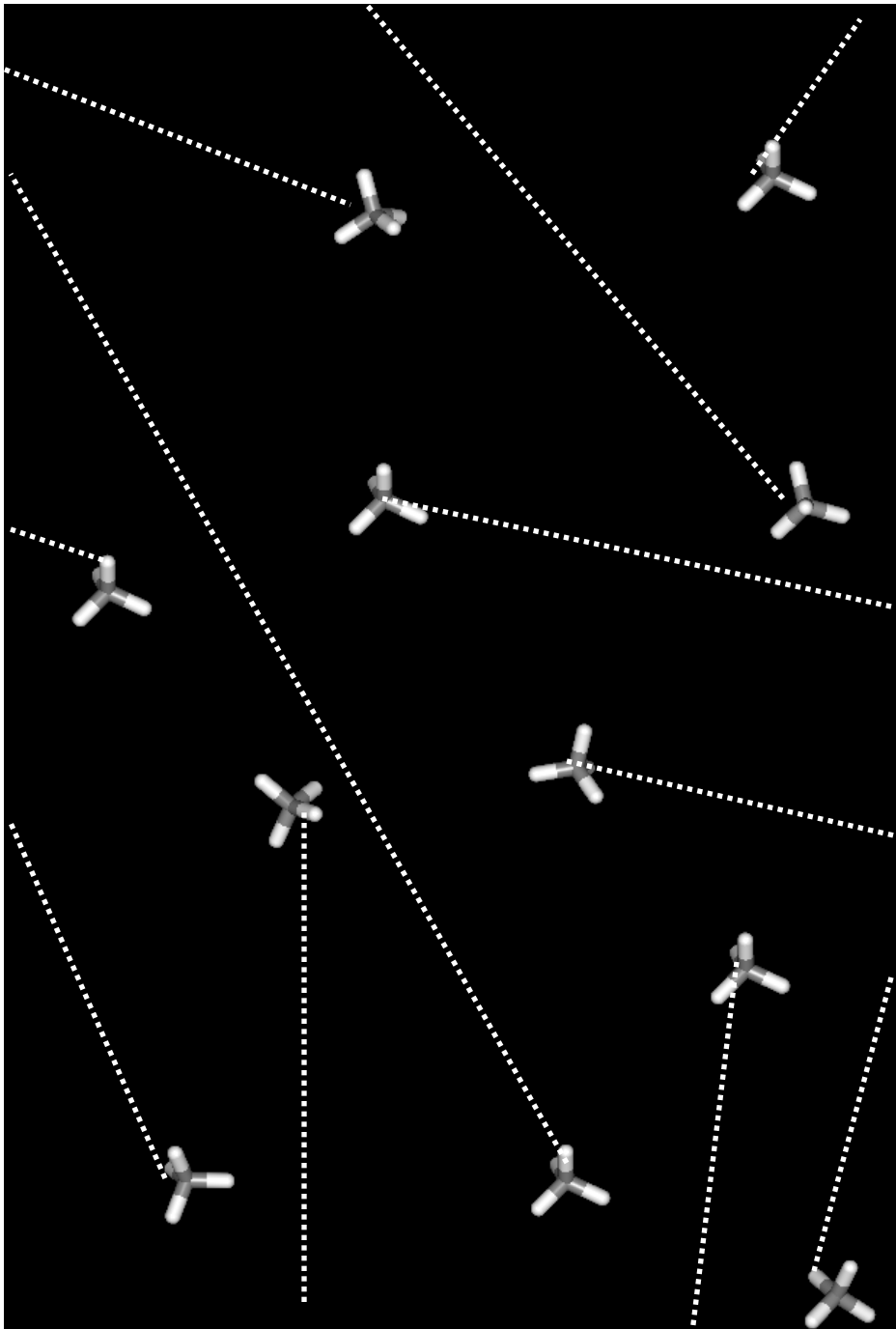
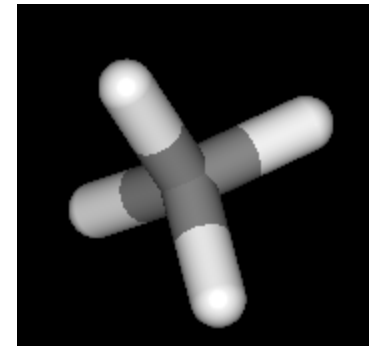
- gasoso (Física Atômica e Molecular)
- sólido (Física de Estado Sólido)
- **líquido** (Multidisciplinar: Mecânica Estatística)
Biofísica
Fisico-químico

E estudamos de forma diferente.

Característica dos Gases

✧ Baixa densidade

Por simplificação, estuda-se o gás com apenas uma molécula isolada.



Cálculos com Mecânica Quântica (MQ)

Início nos anos 30

$$H \Psi = E \Psi$$

Para sistemas em equilíbrio

A equação de Schrödinger só é resolvida exatamente para 2 partículas.

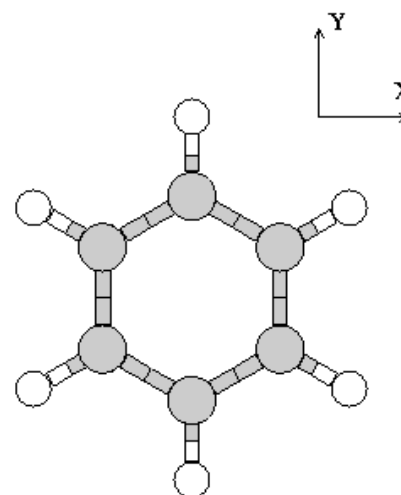
Os pesquisadores da área de Física Atômica e Molecular e Química Quântica tentam resolver essa equação de forma aproximada e buscam se aproximar cada vez mais da solução exata.

Aproximação de Born-Oppenheimer:

Consiste em separar o movimento dos elétrons e núcleos por ocorrerem em escalas de tempo (ou energia) diferentes.

Para uma geometria (posições nucleares) fixa resolve-se a equação de Schrödinger eletrônica e se obtém a estrutura eletrônica da molécula.

$$H_{\text{ele}} \Psi_{\text{ele}} = E_{\text{ele}} \Psi_{\text{ele}}$$



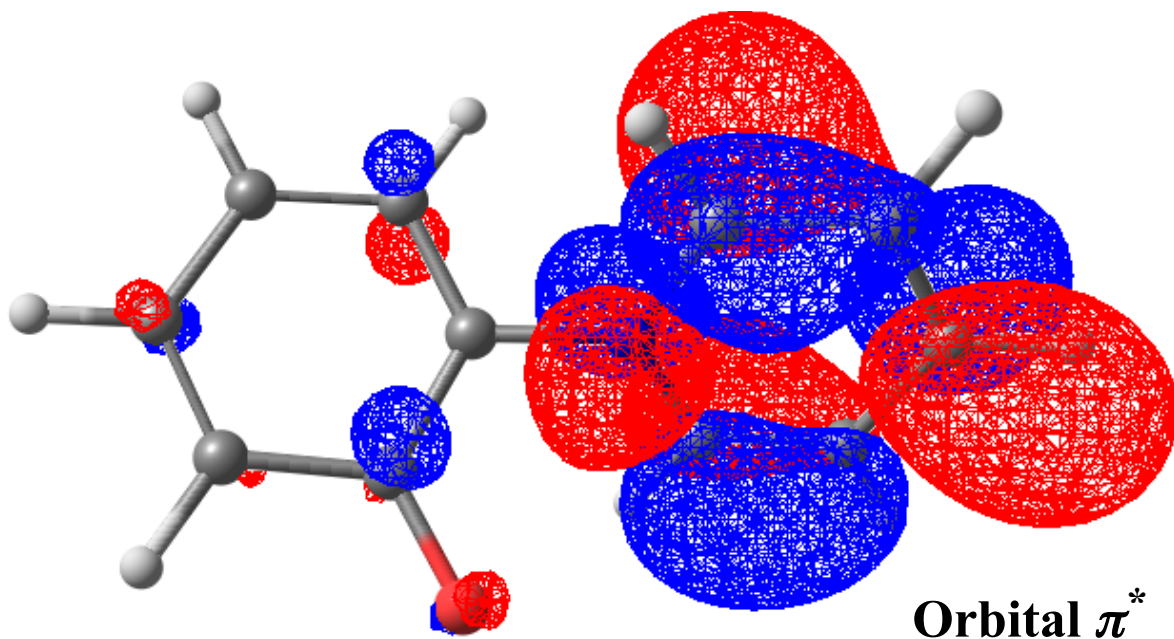
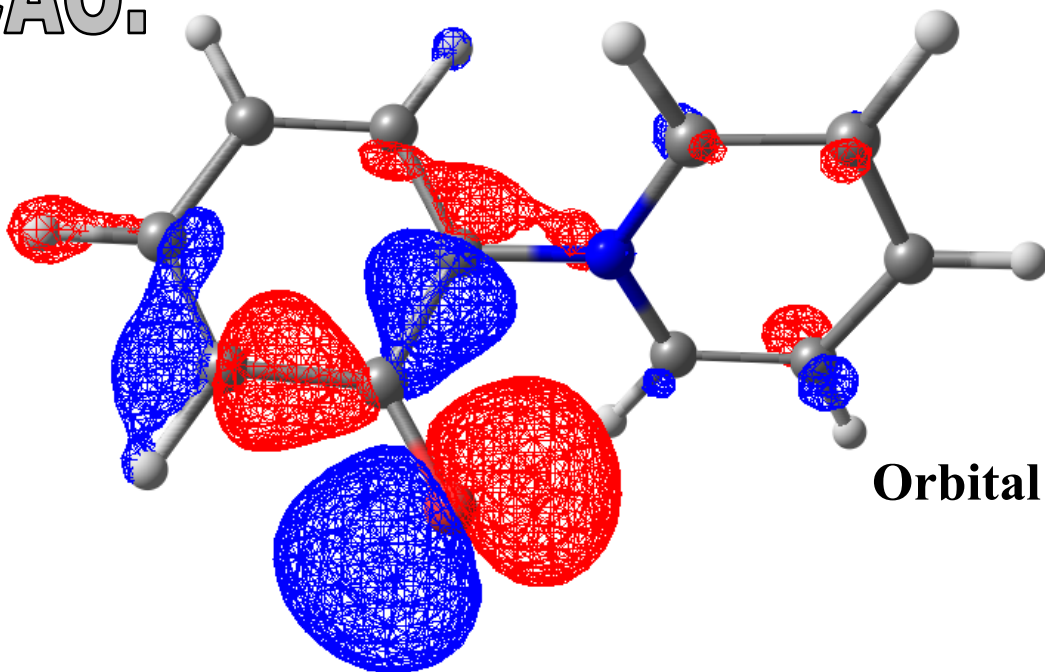
	X	Y	Z
C	0.0000	1.4000	0.0
C	1.2124	0.7000	0.0
C	1.2124	-0.7000	0.0
C	0.0000	-1.4000	0.0
C	-1.2124	-0.7000	0.0
C	-1.2124	0.7000	0.0
H	0.0000	2.4881	0.0
H	2.1547	1.2440	0.0
H	2.1547	-1.2440	0.0
H	0.0000	-2.4881	0.0
H	-2.1547	-1.2440	0.0
H	-2.1547	1.2440	0.0

Com a estrutura eletrônica resolvida é possível obter as forças que atuam sobre os núcleos e com isso realizar um processo de otimização de geometria.

Aproximação LCAO:

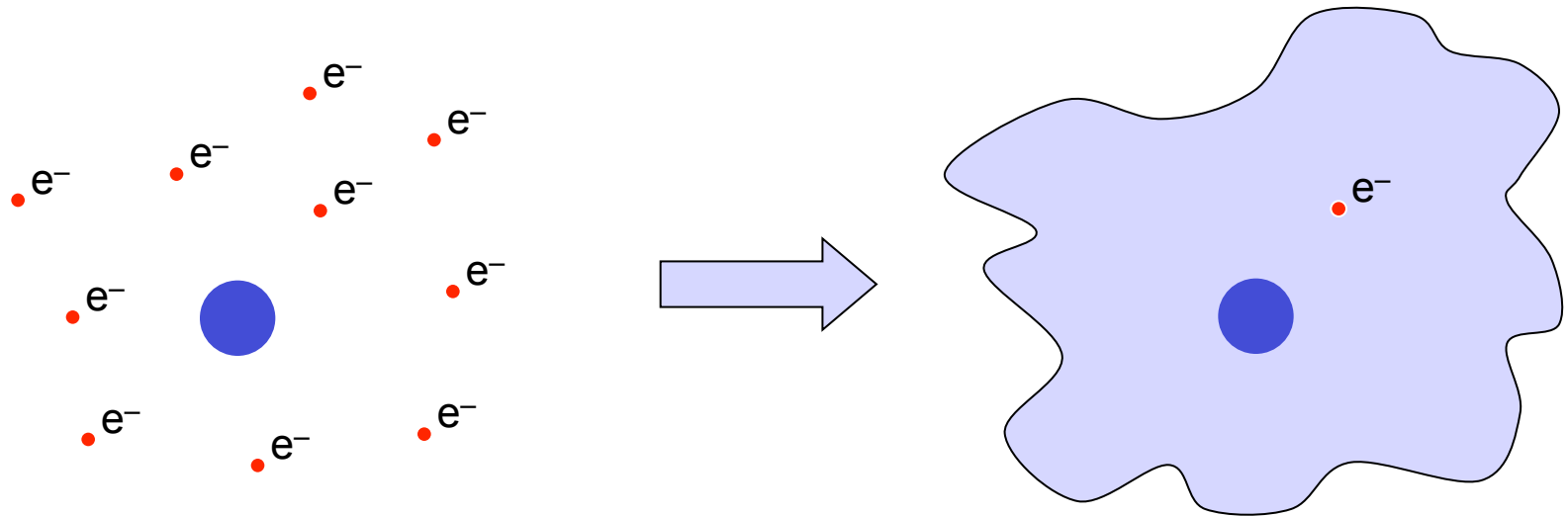
LCAO = Combinação linear dos orbitais atômicos.

Consiste em gerar os orbitais moleculares como uma combinação linear dos orbitais atômicos.



Aproximação de Hartree-Fock (HF):

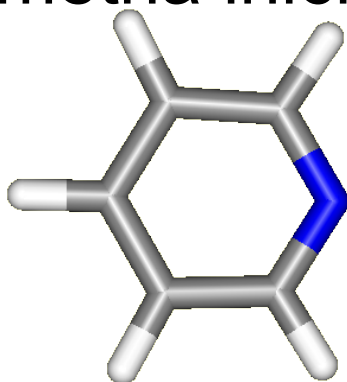
Consiste em uma aproximação de campo médio, ou seja, um elétron interage com um campo médio provocado pelos outros elétrons.



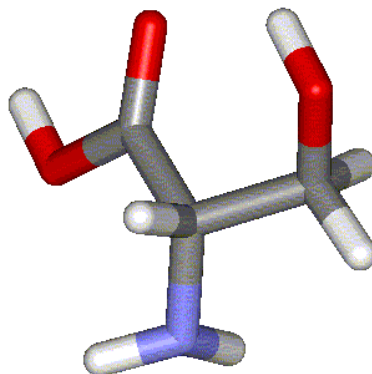
Nesse modelo a correlação eletrônica é desprezada, porém parte dela pode ser incluída com os aproximações pós-HF: CI, MP e CC.

Que informação precisamos para os cálculos MQ?

★ Geometria inicial: Otimização, Raio-X, NMR



11			
piridina			
N	0.00000	0.00000	-2.77598
C	1.13187	0.00000	-2.09318
C	1.19123	0.00000	-0.70717
C	0.00000	0.00000	0.00000
C	-1.19123	0.00000	-0.70717
C	-1.13187	0.00000	-2.09318
H	2.03630	0.00000	-2.67562
H	2.14100	0.00000	-0.20465
H	0.00000	0.00000	1.07562
H	-2.14100	0.00000	-0.20465
H	-2.03630	0.00000	-2.67562



14			
Serina			
N	-0.44456	0.62443	2.37062
H	0.08681	0.15666	1.66345
H	-1.40176	0.33571	2.31397
C	-0.33642	2.05418	2.25062
H	-0.88785	2.51523	3.12960
C	-0.97319	2.68543	1.01727
O	-0.75930	3.80919	0.54970
O	-1.89994	1.92590	0.37251
H	-2.25915	2.41620	-0.38637
C	1.13513	2.54032	2.31719
H	1.67631	2.01216	3.14864
H	1.64735	2.34617	1.33879
O	1.19334	3.90379	2.65740
H	0.81473	4.41105	1.92401

★ Conjunto de funções base:
6-31G*, aug-cc-pVDZ, etc

★ Método de cálculo: HF, MP2, DFT(B3LYP), etc

Cálculos Quânticos

Início nos anos 30

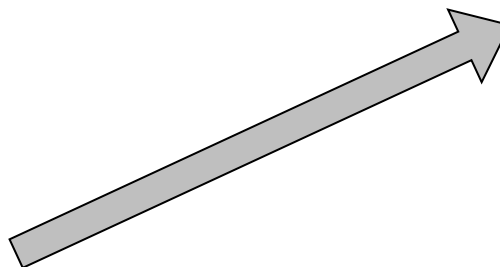
$$\hat{H} \Psi = E \Psi$$

A equação de Schrödinger só é resolvida exatamente para 2 partículas.

Aproximações:

- Born-Oppenheimer
- LCAO
- Hartree-Fock (HF)
- Funcional de Densidade (DFT)

Comando: **B3LYP/6-31G***



Métodos pós-HF:

- CI
- MP
- CC.

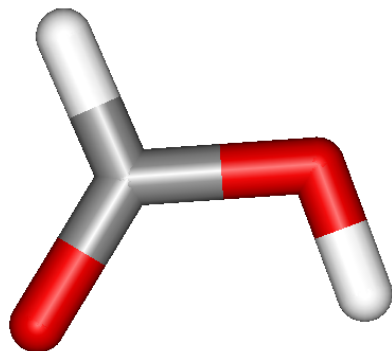
O que se pode calcular?

- Propriedades estruturais, com: estrutura mais estáveis e estados de transição,
- Propriedades elétricas, magnéticas e eletrônicas,
- Espectros: vibracional (infra-vermelho), eletrônico (UV-visível) e rotacional (microondas),
- Entre outras.

Os efeitos térmicos e intermoleculares são desprezados.

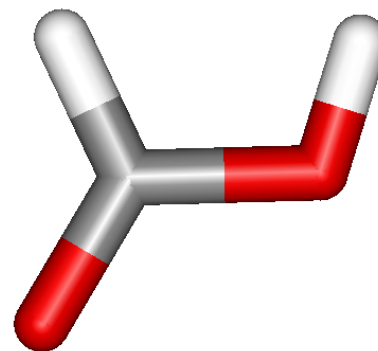
Cuidado: Isômeros rotacionais

Rotâmeros do ácido fórmico:



HO (*trans*)

e



HH (*cis*).

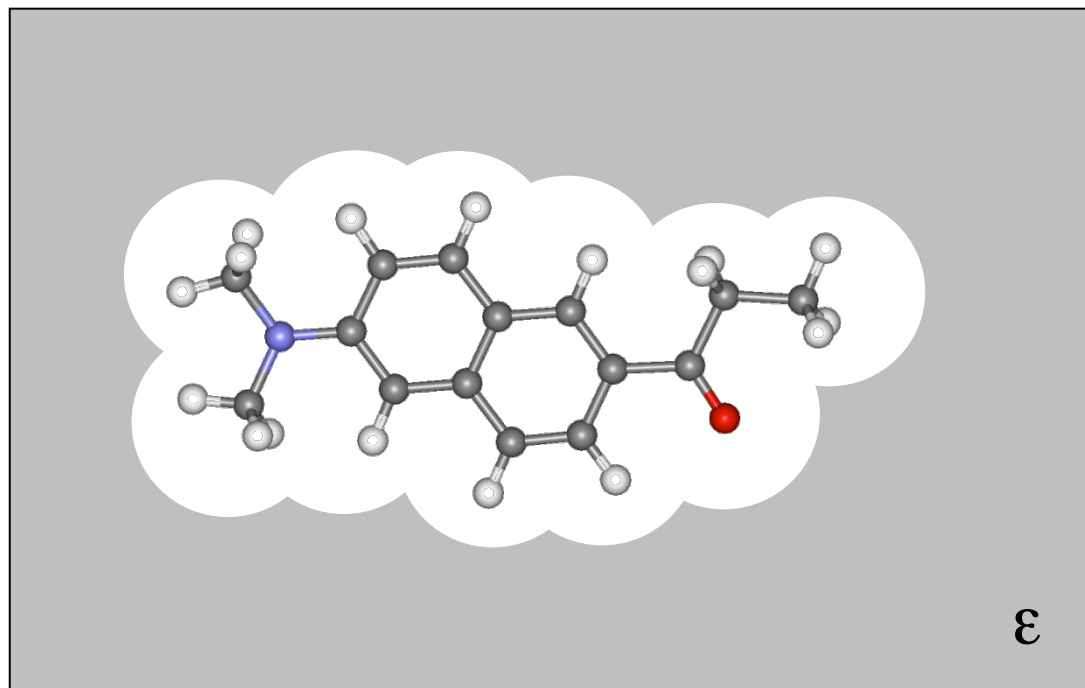
Otimizados com cálculo quântico no nível MP2/aug-cc-pVDZ e com os cálculos de frequências identificamos que ambos isômeros são estáveis e apresentam uma estabilidade relativa de $\Delta G_{\text{gas}}(\text{trans} \rightarrow \text{cis}) = 4.0$ kcal/mol. Os momentos de dipolo calculados são $\mu_{\text{trans}} = 1.74\text{D}$ e $\mu_{\text{cis}} = 4.46\text{D}$. Sendo assim, em solução aquosa a forma *cis*, com maior dipolo, pode ser a mais estável.

O que se pode melhorar?

Os efeitos térmicos e intermoleculares são desprezados.

- ★ Parte dos efeitos térmicos pode ser incluída através das correções vibracionais nos cálculos quânticos.
- ★ Parte dos efeitos do meio (interações intermoleculares) pode ser incluído através do modelo contínuo polarizável (PCM).

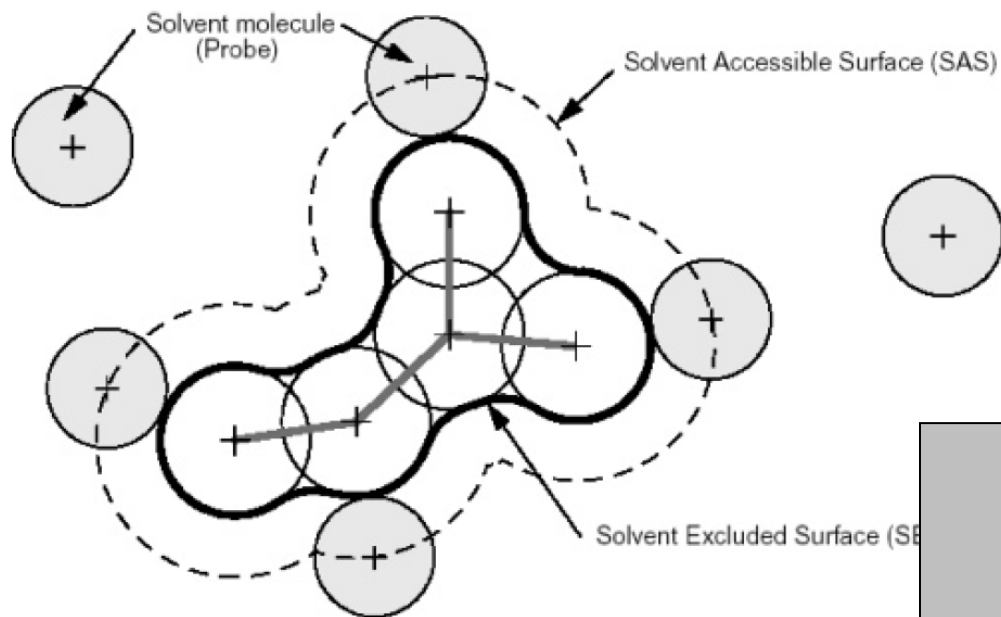
Comando:
B3LYP/6-31G*
SCRF=(PCM,
Solvent=water)



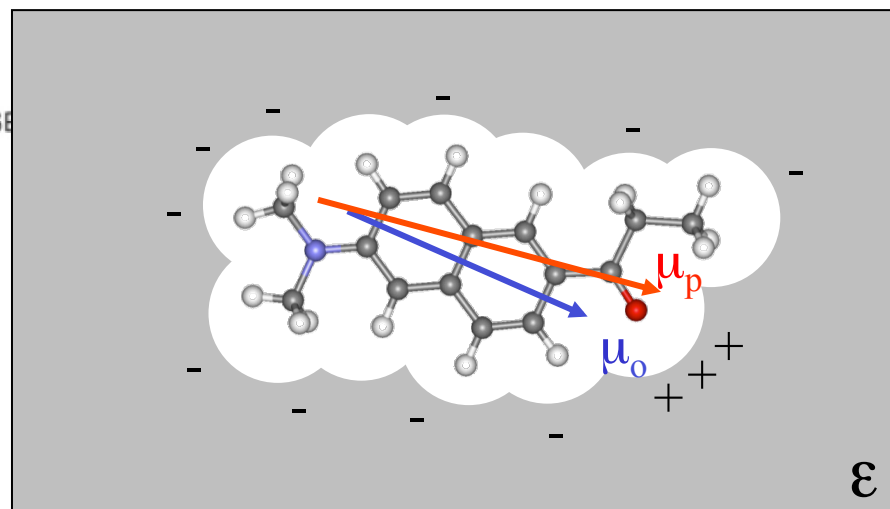
Modelo contínuo polarizável, SCRF=(PCM,solvent=water)

Aspectos importantes:

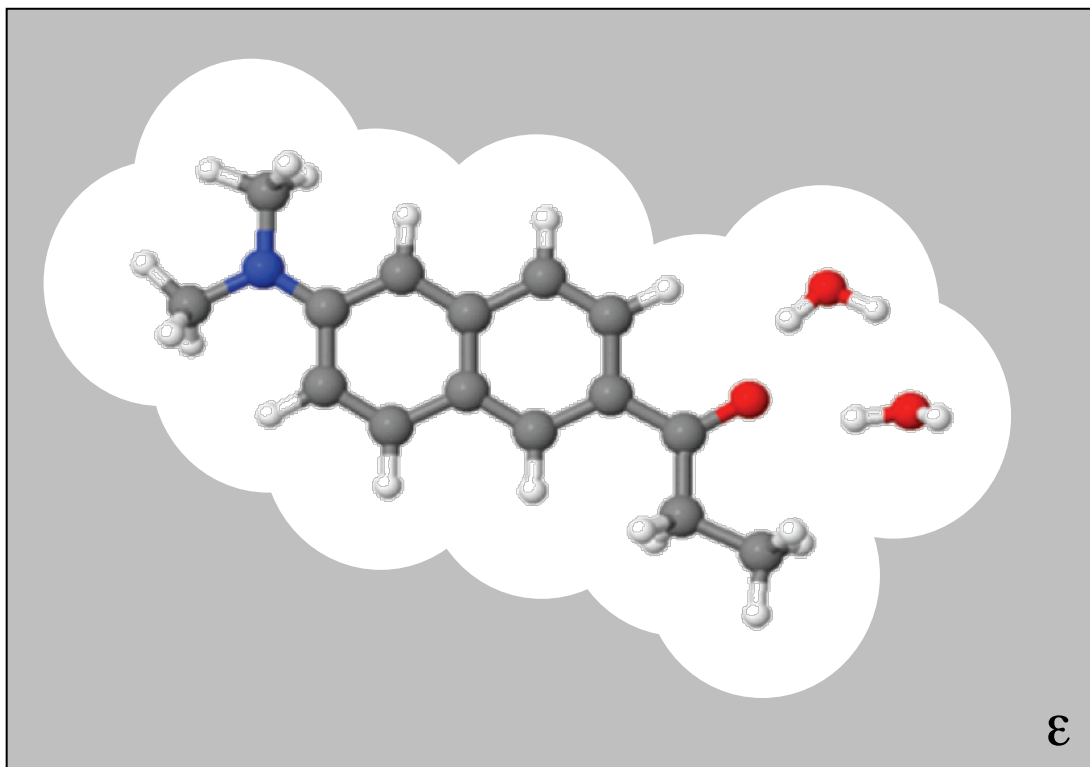
Cavidade (raios de van der Waals dos átomos do soluto e densidade do solvente).



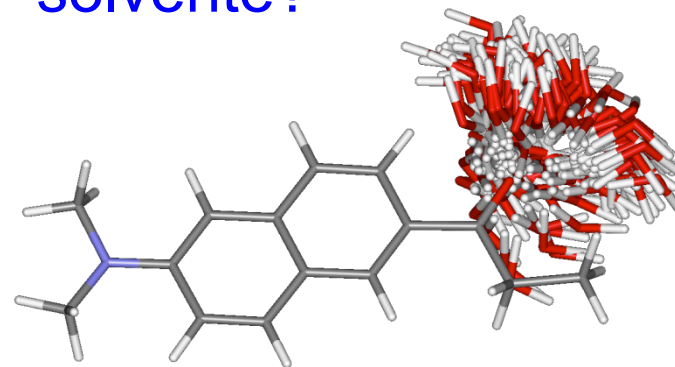
Campo de reação auto consistente (o soluto polariza o meio e o meio polariza o soluto).



Uma forma de melhorar o modelo contínuo é incluir as interações específicas, porque todas as interações quânticas entre soluto-solvente são incluídas.



Como gerar a possível conformação soluto-solvente?



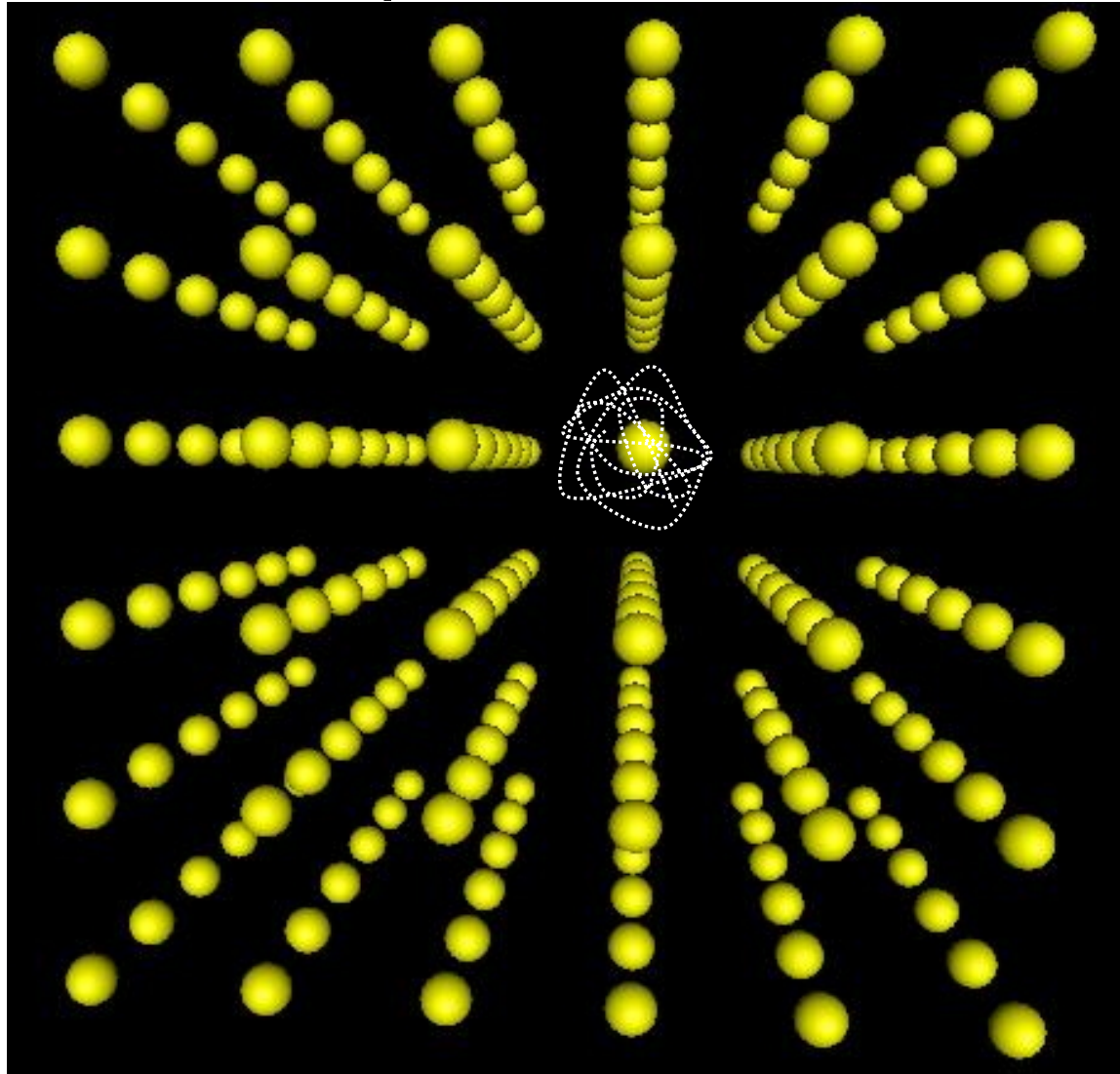
Aglomerados otimizados x **Amostragem de líquidos**

Não são iguais, pois não fornecem as mesmas propriedades.

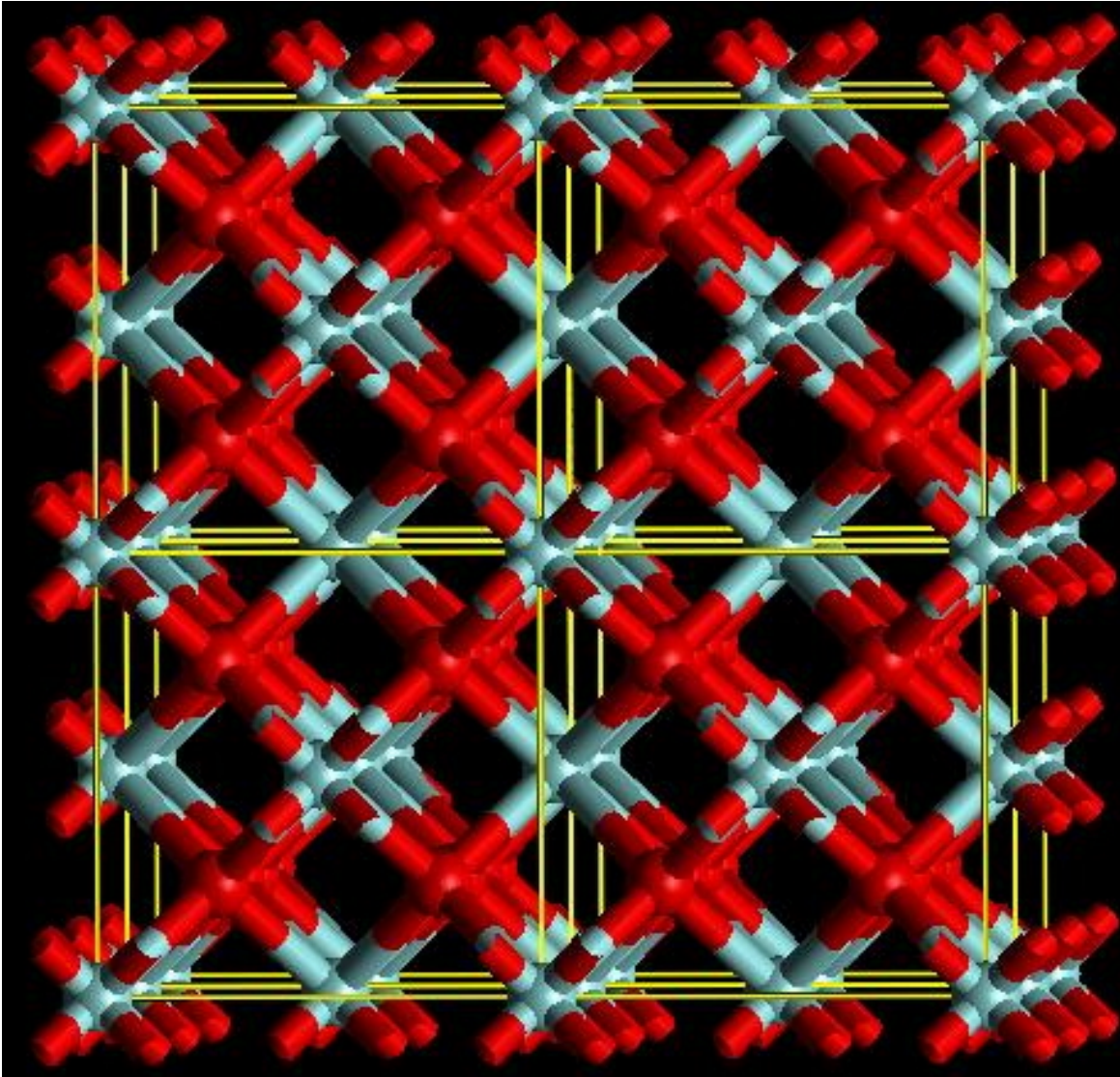
Coutinho, et al. JMS (Theochem) 466, 69 (1999).

Características dos Sólidos

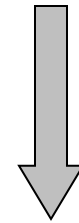
✦ Pequena mobilidade



★ Periodicidade



Por simplificação,
estuda-se o sólido
cristalino com
apenas uma célula
unitária.



Cálculos Quânticos

Só os efeitos térmicos são desprezados.

O que se pode calcular ?

- Estrutura, defeitos, superfícies,
- Propriedades elétricas, eletrônicas, magnéticas,
- Espectros: vibracional (infra-vermelho) e eletrônico (UV-visível),
- Etc.

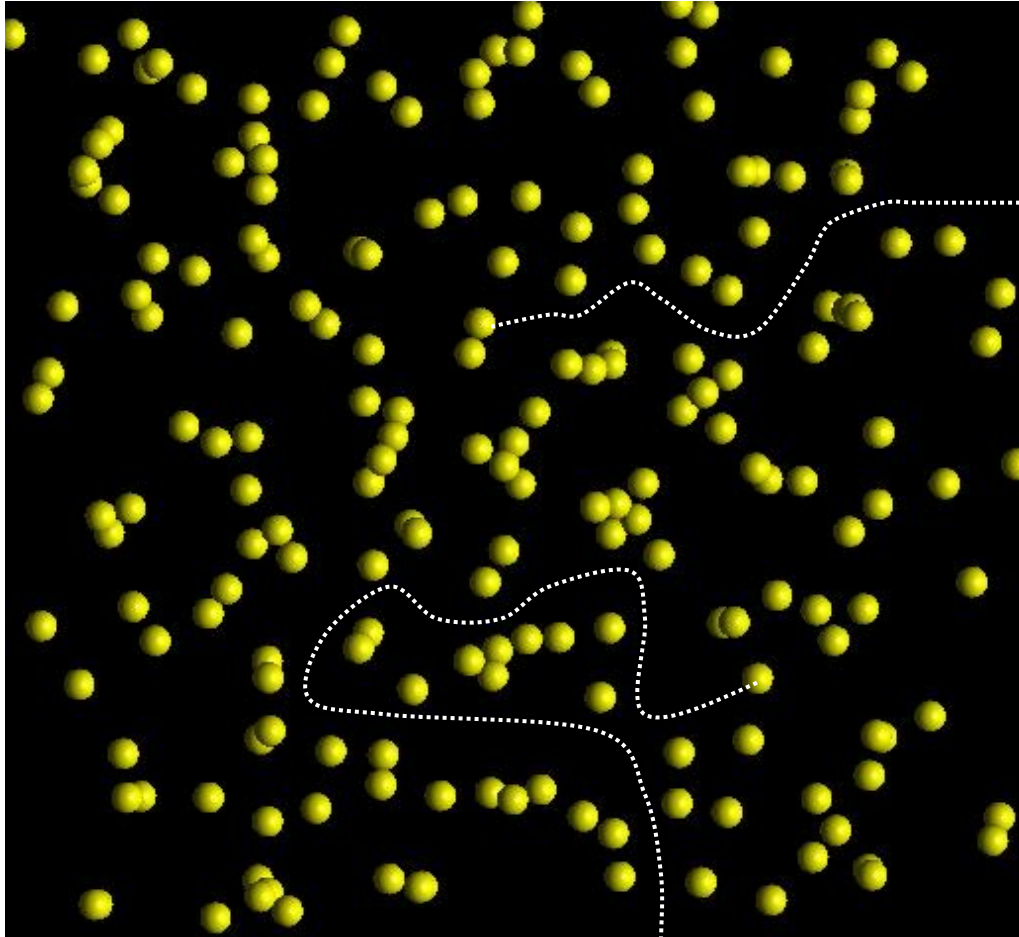
Os efeitos térmicos são desprezados.

Características dos Líquidos

✧ Grande mobilidade

✧ Alta densidade

✧ Não tem periodicidade



Como os efeitos térmicos e intermoleculares **NÃO PODEM SER DESPREZADOS**, os estudos dos líquidos devem se basear em **métodos estatísticos** com grande quantidade de moléculas que descrevem a estrutura do líquido.

Como definir a estrutura de um líquido ?



Mecânica Estatística



Simulação Computacional

Princípios da Mecânica Estatística

As propriedades são médias em trajetórias

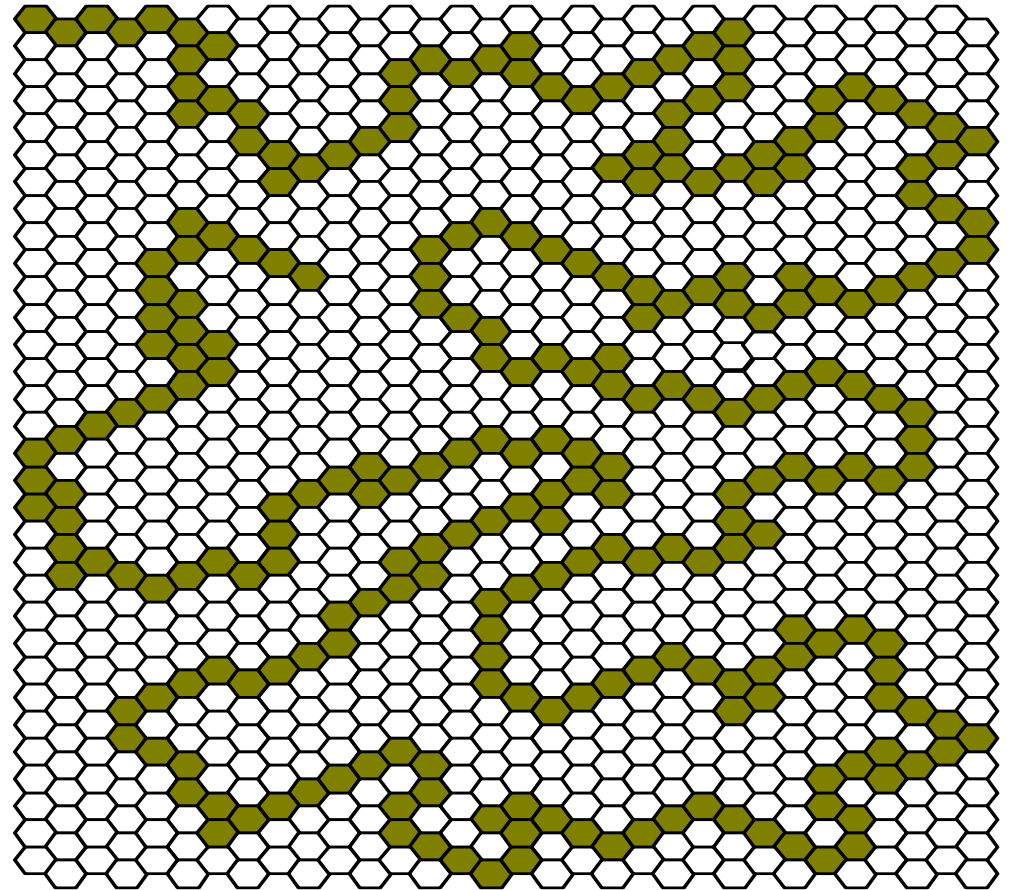
$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U$$

Ilustração do espaço de configurações



Ludwig Boltzmann

Boltzmann (1844-1906)
desenvolveu os
fundamentos da
mecânica estatística
baseado no conceito
atomístico da matéria.



$\diamond = \Gamma = (r_1, r_2, \dots, r_N)$ coordenadas de todos os átomos

Princípios da Mecânica Estatística

As propriedades são médias em ensemble

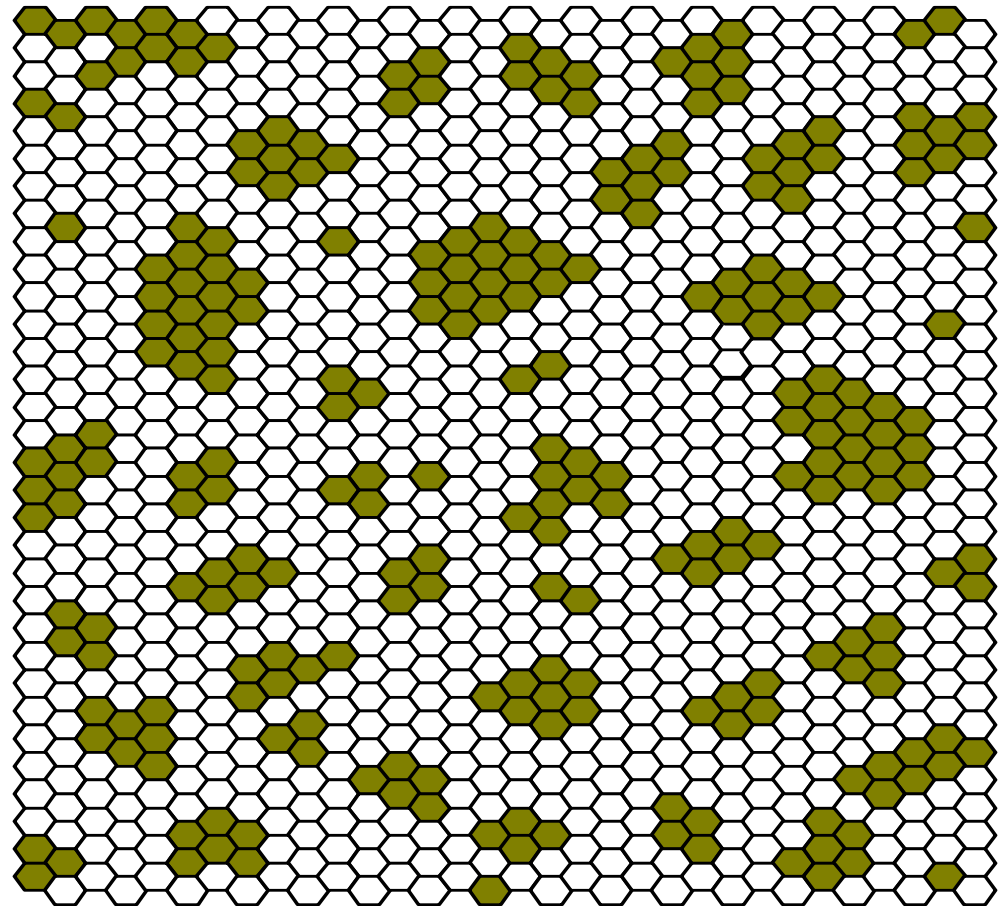


J. William Gibbs

Gibbs (1839-1903)
desenvolveu os
fundamentos da
mecânica estatística
baseado no conceito
de conjuntos
(ensemble).

$$P_{NVT}(U_i) = e^{(-U_i / kT)} / Z$$

Ilustração do espaço de configurações



$\diamond = \Gamma = (r_1, r_2, \dots, r_N)$ coordenadas de todos os átomos

Disciplina: TAFCx

Técnicas de Simulação

Início nos anos 50

Idéias de Boltzmann →

Dinâmica Molecular

Técnica determinística

Se baseia na solução das equações de movimento para N moléculas interagentes através do potencial $U(r)$.

Idéias de Gibbs →

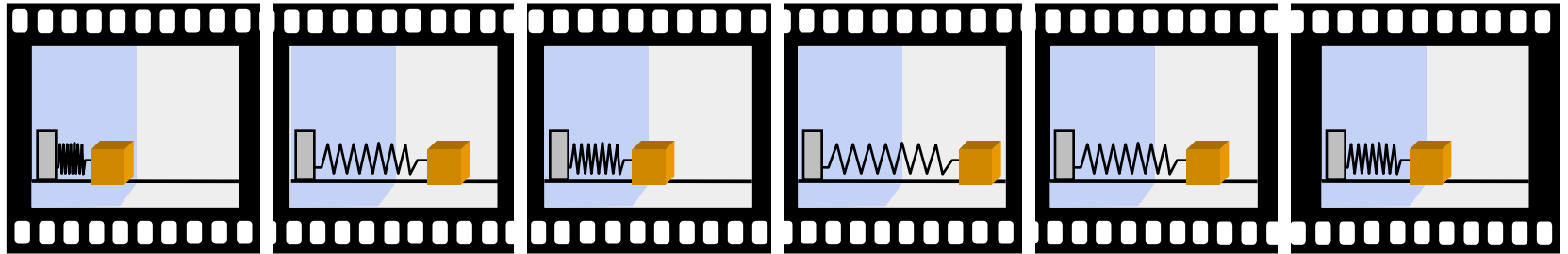
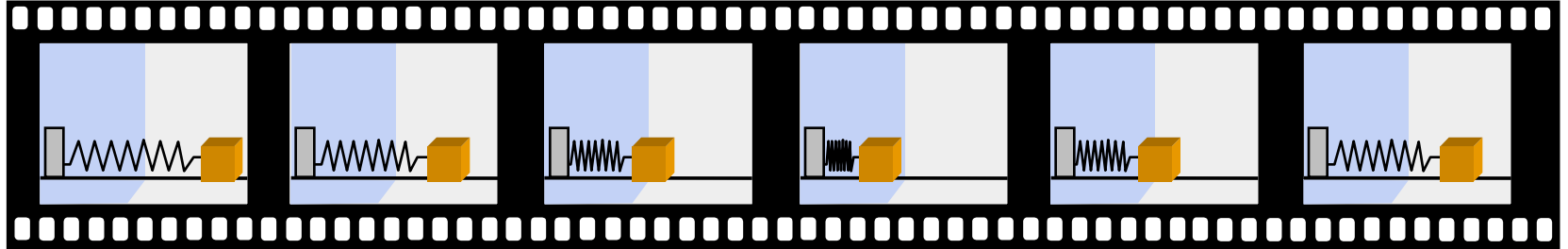
Monte Carlo

Técnica probabilística

Se baseia na distribuição de Boltzmann no equilíbrio termodinâmico para N moléculas interagentes através do potencial $U(r)$.

Ilustração de uma série fotográfica de uma sistema em equilíbrio (massa-mola).

Dinâmica Molecular



Monte Carlo

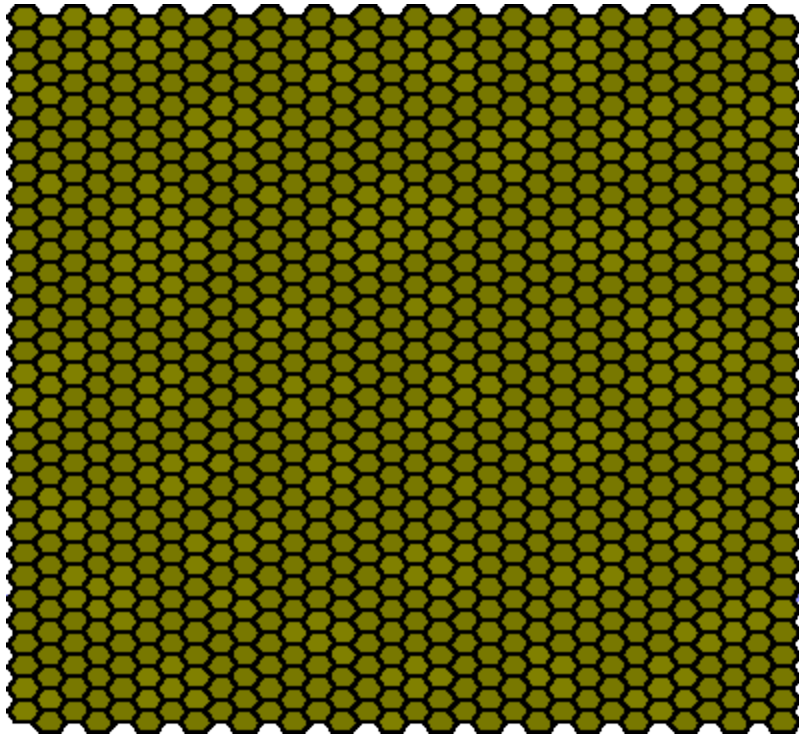
Acima, as fotos são apresentadas seguindo uma ordem temporal (Dinâmica Molecular).

Abaixo, as mesmas fotos são apresentadas seguindo uma ordem aleatória. Neste caso, o conceito de sucessão temporal deixa de existir (Monte Carlo).

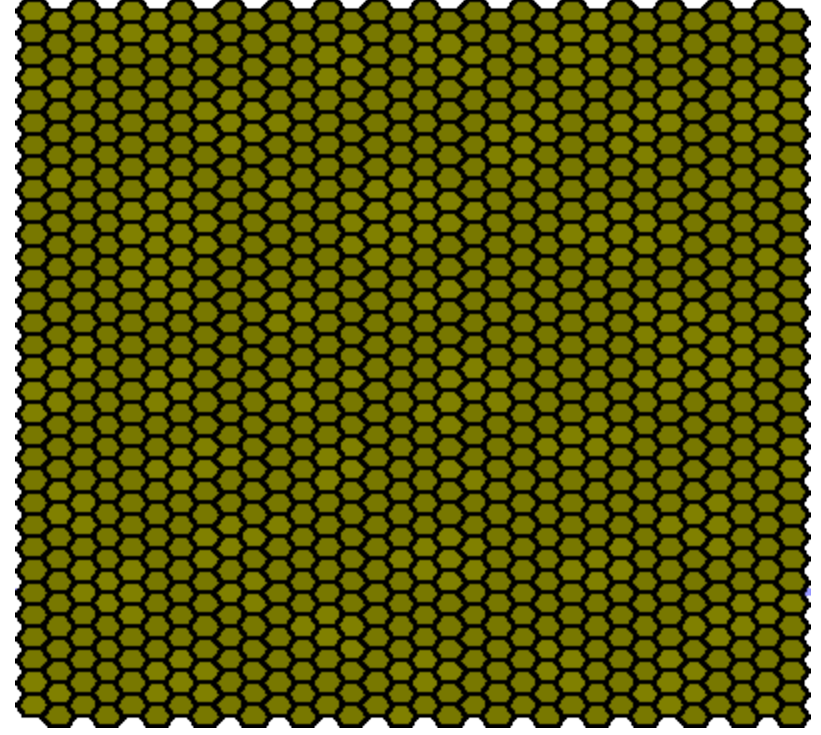
Em simulações infinitas todo o espaço de configurações é visitado. Portanto

Dinâmica Molecular =

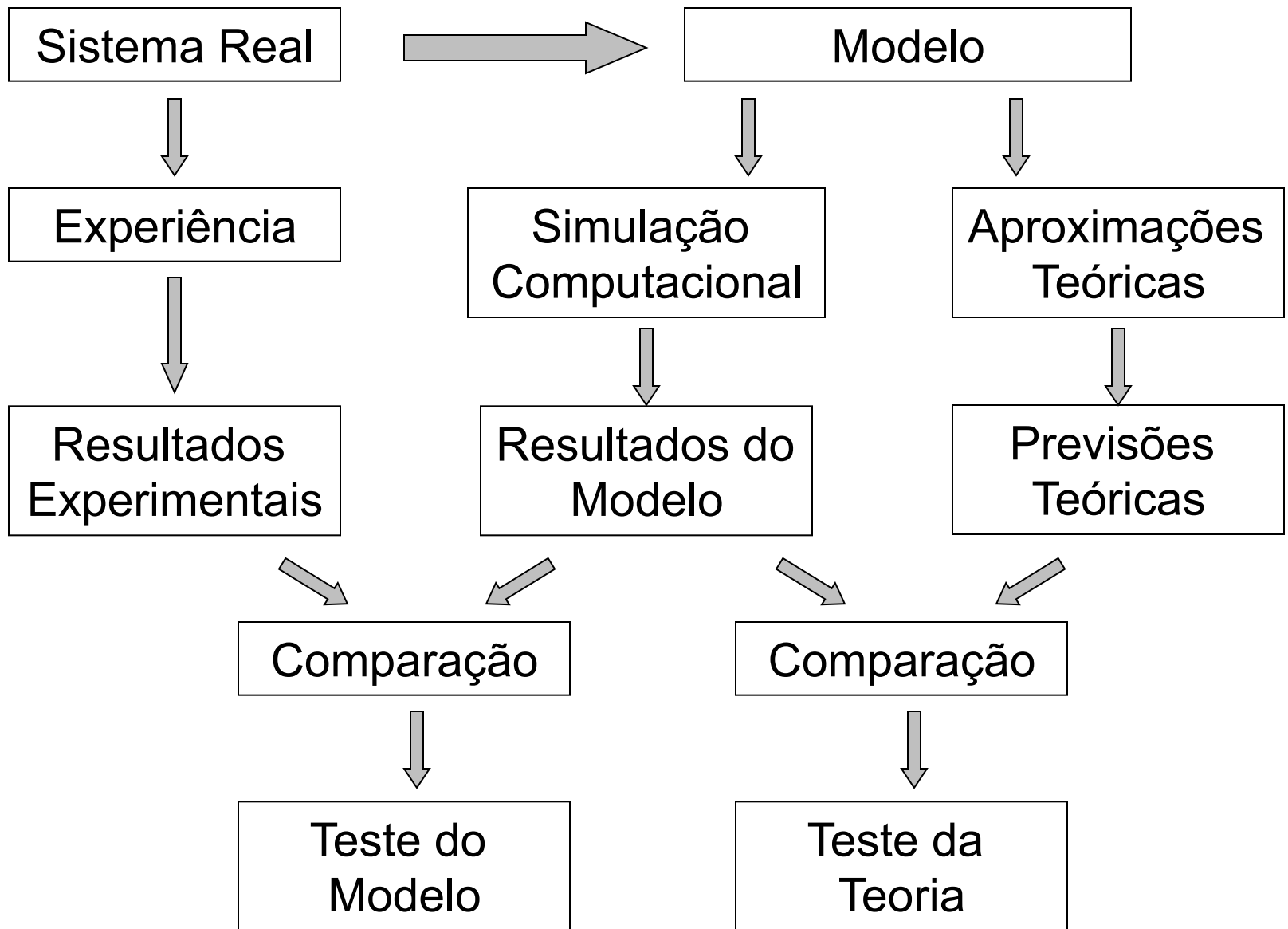
Monte Carlo



Vantagem: permite estudar evolução temporal.
Desvantagem: custo computacional (**1.6 a 4 vezes**)



Vantagem: baixo custo computacional. Desvantagem: **NÃO** permite estudar evolução temporal (**equilíbrio**)



TÉCNICAS de SIMULAÇÃO

Dinâmica Molecular

Método Monte Carlo

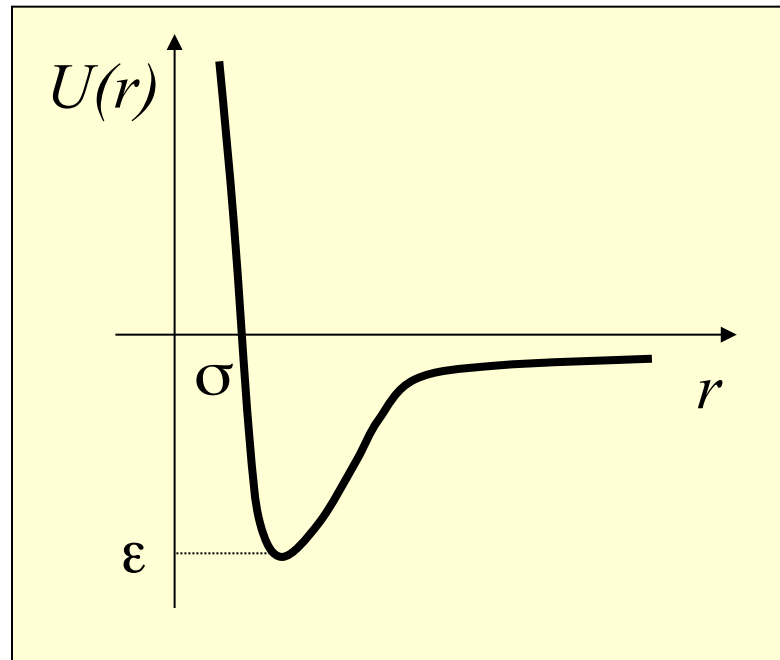
$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U$$

$$v_f = v_i + a_i \Delta t$$

$$s_f = s_i + v_i \Delta t + (1/2) a_i \Delta t^2$$

$$P_i = \frac{e^{(-U_i / kT)}}{Z}$$

no ensemble NVT



Método Monte Carlo para Sistemas Moleculares

$$H(\Pi, \Gamma) = \sum_i^{3N} \left(\vec{p}_i^2 / 2m \right) + U(\Gamma)$$

$$\Pi = \{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N\}$$

$$\Gamma = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}$$

$$Z = \iint \cdots \int e^{-H(\Pi, \Gamma)/kT} d\Gamma d\Pi$$

$$Z = (2m\pi kT)^{3N/2} Q \quad \text{onde}$$

$$Q = \iint \cdots \int e^{-U(\Gamma)/kT} d\Gamma$$

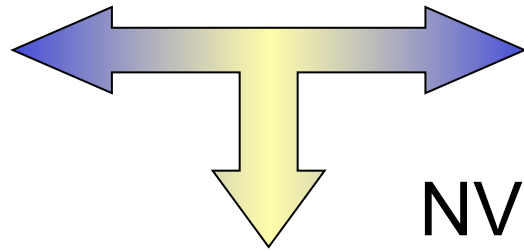
Exemplo:

$$\langle \mathbf{f} \rangle_{NVT} = \langle \mathbf{f} \rangle_{\text{cin.}} + \langle \mathbf{f} \rangle_{\text{conf.}}$$

$$\langle E \rangle = \frac{3N}{2} kT + \langle U \rangle$$

$$C_v = \frac{3N}{2} Nk + \frac{\langle \delta U^2 \rangle}{kT^2}$$

Equilíbrio



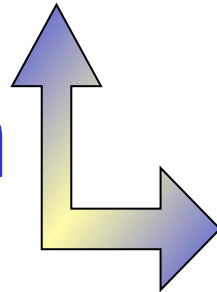
Ensemble $\{\Gamma\}$

NVT ensemble canônico

$$\langle \mathbf{f} \rangle_{\text{conf.}} = \iint \cdots \int \frac{\mathbf{f}(\Gamma) e^{-U(\Gamma)/kT}}{Q} d\Gamma$$

$$\langle \mathbf{f} \rangle_{\text{conf.}} = \frac{1}{\ell} \sum_i^{\ell} \mathbf{f}(\Gamma_i) \frac{e^{-U(\Gamma_i)/kT}}{Q}$$

Amostragem preferencial



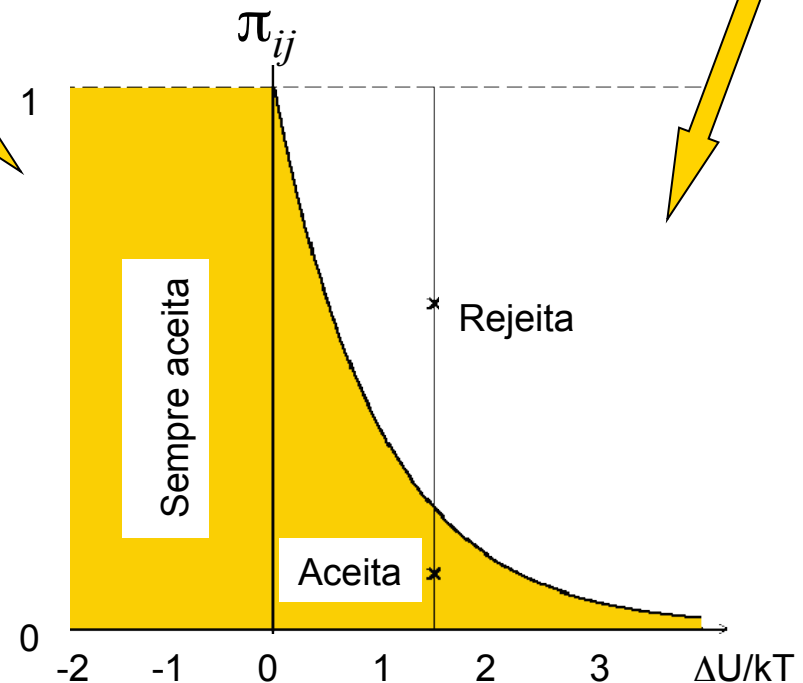
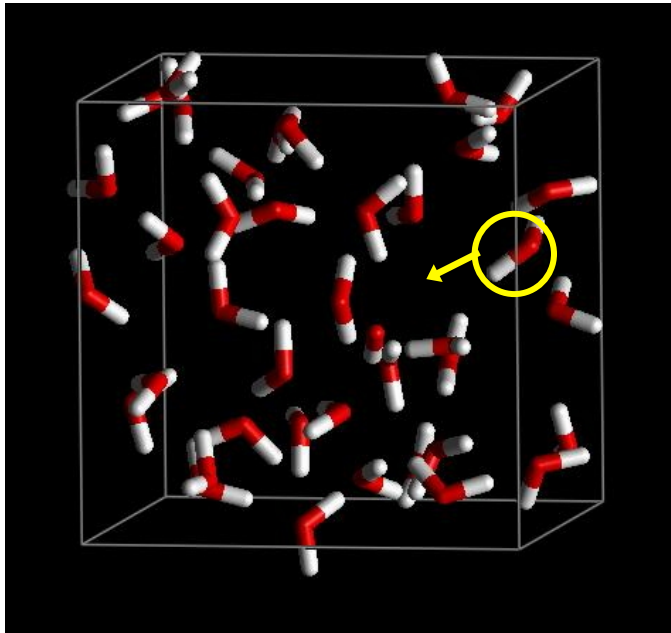
$$\langle f \rangle = \frac{1}{\ell} \sum_i^{\ell} f(\xi_i)$$

Amostragem de Metropolis (translação)

Metropolis e co-autores [1953]

Algoritmo: Escolhe-se uma partícula i e realiza-se um descolamento aleatório δr em cada eixo, então a probabilidade de aceitar essa nova configuração é:

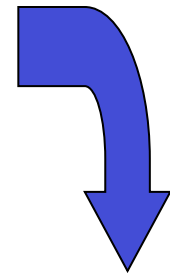
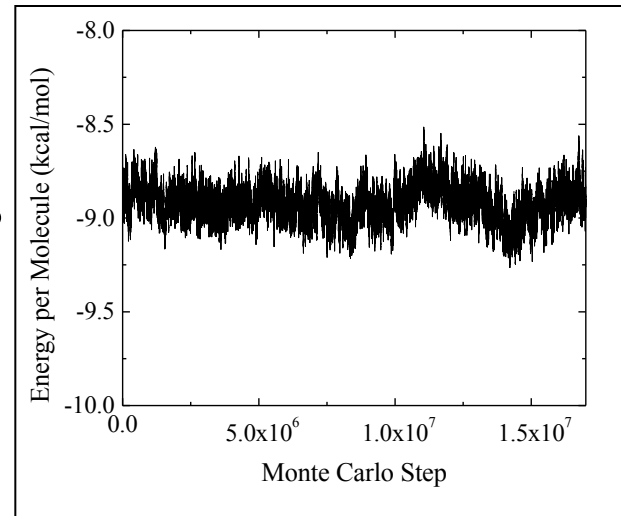
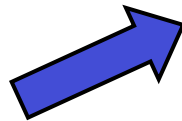
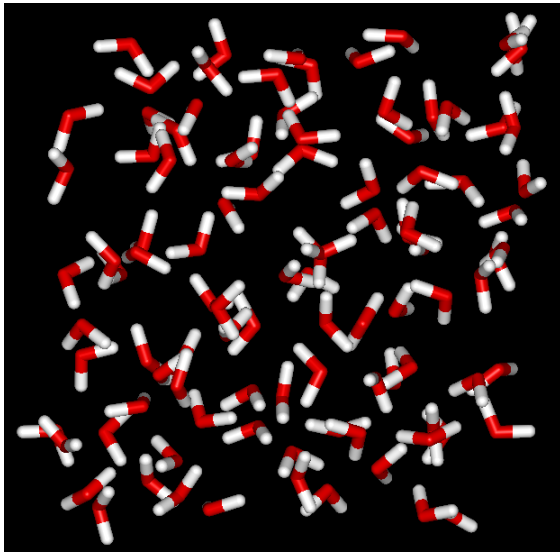
$$\pi_{ij} = 1 \quad \text{ou} \quad \pi_{ij} = \frac{\rho_j}{\rho_i} = \frac{e^{(-U_i/kT)} / Z}{e^{(-U_j/kT)} / Z} = e^{(-\Delta U_{ij} / kT)}$$



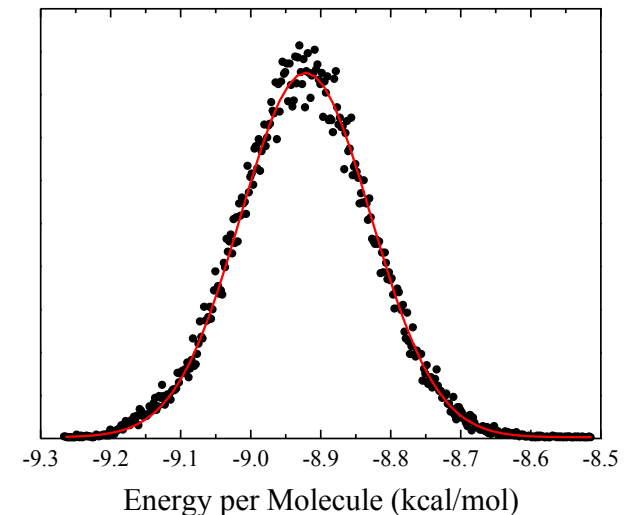
Amostragem de Metropolis

Probabilidade $i \rightarrow j$: $\Pi_{ij} = \rho_j / \rho_i = e^{-\Delta U/kT}$

O Deslocamento máximo é ajustado de forma a manter 50% de aceitação das novas configurações.



$E_0 = -8.92$ and $\delta = 0.186$



- Deslocamentos: $0.01 \text{ \AA} \leq \delta r_{\max} \leq 2.0 \text{ \AA}$
- U pode ser contínuo ou descontínuo

Outros ensembles:

NVT

$$\rho_{NVT}^{conf.} = \frac{\exp(-U(\Gamma)/kT)}{Q} \quad \pi_{ij} = 1 \text{ ou } e^{-\Delta U_{ij}/kT}$$

NpT

$$\rho_{NpT}^{conf.} = \frac{\exp(-(U(\Gamma) + pV)/kT)}{Q}$$

$$\pi_{ij} = 1 \text{ ou } e^{-(\Delta U_{ij} + p\Delta V_{ij} - NkT \ln(V_j/V_i))/kT}$$

μ VT

$$\rho_{\mu VT}^{conf.} = \frac{(\Lambda^{3N}/N!) \exp(-(U(\Gamma) - \mu N)/kT)}{Q}$$

$$\pi_{ij} = \frac{V}{(N+1)\Lambda^3} e^{-(\Delta U_{ij} - \mu)/kT} \quad \Lambda = \sqrt{h^2/2\pi mkT} \quad \text{criação ou}$$

$$\frac{N\Lambda^3}{V} e^{-(\Delta U_{ij} - \mu)/kT} \quad \text{destruição}$$

Dinâmica Molecular

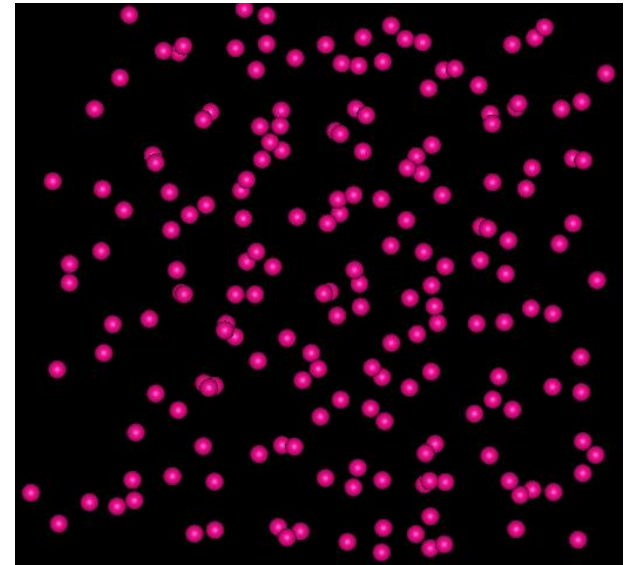
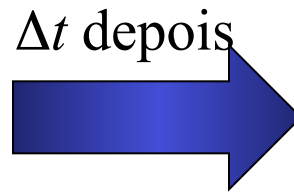
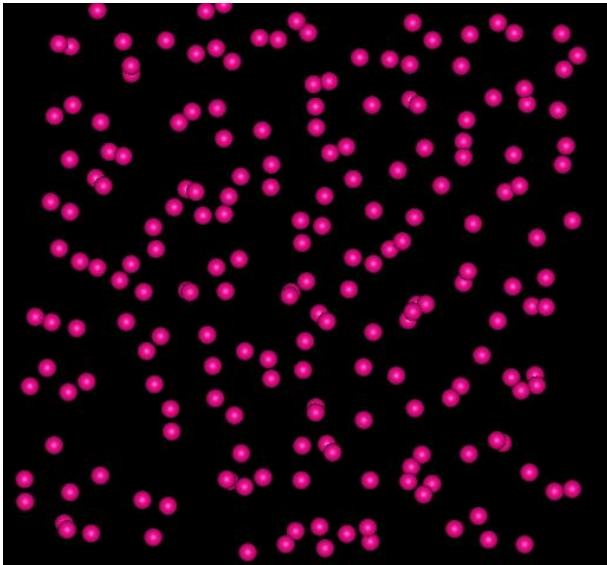
Técnica que calcula as equações de movimento de Newton para cada molécula e gera uma nova configuração molecular partindo de uma anterior.

$$U_i(\vec{s}) = U(\vec{s}_i(t)) \Rightarrow \vec{F}_i(\vec{s}) = -\vec{\nabla} U_i(\vec{s}) \Rightarrow \vec{a}_i(\vec{s}) = \vec{F}_i(\vec{s}) / m_i$$

$$\Rightarrow \vec{v}_i^2(s + \Delta s) = \vec{v}_i^2(s) + 2 \int_s^{s+\Delta s} \vec{a}_i(s) ds \Rightarrow \vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{a}_i(t) dt$$

Informações iniciais s_0 e v_0

calculamos s_1 e v_1



$s(t)$ e $v(t)$

$s(t+\Delta t)$ e $v(t+\Delta t)$

Origem da Interação entre Moléculas

- Século XIX buscou-se leis universais.
- Século XX $\Rightarrow$ Mecânica Quântica
 $\Rightarrow$ Interações essencialmente eletrostática

$$H(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}) = K(\vec{\mathbf{v}}) + U(\vec{\mathbf{r}})$$

Até hoje, simulações quânticas (QM) ainda são inviáveis para muitos sistemas.

A solução é simulação clássica (MM)
ou métodos híbridos (QM/MM)

$\Rightarrow$ Buscou-se leis empíricas
 $\Rightarrow$ Não há solução única, portanto não esclarece a natureza das forças.

Aproximações

- Devido a escala de energia e tempo, pode-se desacoplar os movimentos nucleares e eletrônicos.

Vamos estudar os movimentos dos núcleos.

- Líquidos têm comportamento clássico (única propriedade quântica $\Rightarrow$ superfluidez)

Justificativa:

λ de de Broglie $\ll$ separação entre as partículas

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}kT \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{3mkT}}$$

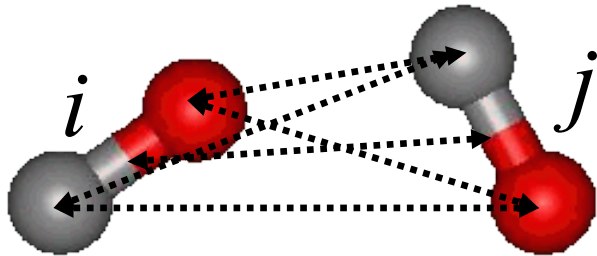
Exemplo: Ar líquido
($T = 130\text{K}$; $P = 1\text{atm}$)
 $d \approx 4\text{\AA}$ e $\lambda \approx 1\text{\AA}$

Aproximações para um sistema de N átomos ou moléculas rígidas

- O potencial de interação será descrito por um potencial de pares efetivo.

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N U_2^{ef}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N U_2^{ef}(\vec{r}_{ij})$$

Pode
depender de
 T , ρ , etc.



$$U_2^{ef}(\vec{r}_{ij}) = \sum_a^{\text{em } i} \sum_b^{\text{em } j} U(\vec{r}_{ab})$$

Potencial real:

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N U_1(\vec{r}_i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \underbrace{\sum_{i=1}^{N-2} \sum_{j>i}^{N-1} \sum_{k>j}^N U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots}_{\sim 10\%}$$

Raramente incluído

Característica Fundamental do Potencial

Atrativo:

$$U_{ij} = c r_{ij}^{-n}$$

Repulsivo:

$$\left\{ \begin{array}{l} U_{ij} = \infty \quad \text{para} \quad r \leq \sigma \\ U_{ij} = a r_{ij}^{-m} \\ U_{ij} = b e^{-r_{ij} / \sigma_{ij}} \end{array} \right.$$

Fluido real

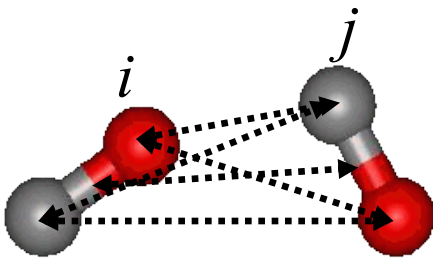
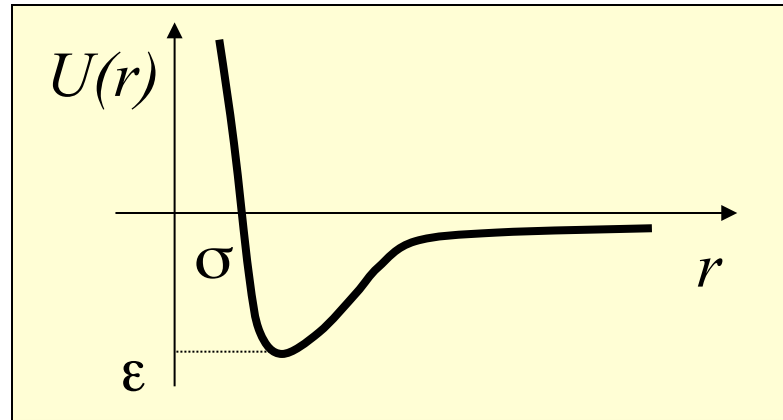
Em 1873, van der Waals $\Rightarrow (P + a/V^2)(V - b) = NkT$

$$\left. \begin{array}{ll} U_{ij} = \infty & \text{para } r_{ij} \leq \sigma \\ U_{ij} = c r_{ij}^{-n} & \text{para } r_{ij} > \sigma \end{array} \right\} a = \frac{2\pi c}{(n-3)\sigma^{n-3}} \quad , \quad b = \frac{2\pi\sigma^3}{3} \quad \text{e} \quad n > 3$$

Potencial mais usado entre átomos não ligados

- Lennard-Jones (1931) + Coulomb

$$U(r_{ij}) = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$



$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}$$

$$\sigma_{ij} = \sqrt{\sigma_i \sigma_j} \quad \text{ou} \quad \sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$$

Origem do Potencial de Lennard-Jones

Atrativo: $U_{ij} = c r^{-n}$

Repulsivo: $U_{ij} = a r^{-m}$

De 1924 a 1937, Lennard-Jones testou os potenciais com

$n = 5, 6$ e 7 e

Origem quântica

Origem do termo atrativo do potencial Lennard-Jones

Eletrostática: interação de Keesom

Θ_i representa a parte angular

$$U_{ij}(r) = \frac{q_i q_j}{r} - \frac{q_i \mu_j}{r^2} \Theta_1 - \frac{q_i Q_j}{4r^3} \Theta_2 - \frac{\mu_i \mu_j}{r^3} \Theta_3 - \frac{3\mu_i Q_j}{4r^4} \Theta_4 - \frac{3Q_i Q_j}{16r^5} \Theta_5 - \dots$$

$$U_{ij}(r) = \frac{q_i q_j}{r} - \frac{1}{kT} \left[\frac{q_i^2 \mu_j^2}{3r^4} + \frac{q_i^2 Q_j^2}{20r^6} + \frac{2\mu_i^2 \mu_j^2}{3r^6} + \frac{\mu_i^2 Q_j^2}{r^8} + \frac{7Q_i^2 Q_j^2}{40r^{10}} + \dots \right]$$

Indução: interação de Debye

$$U_{ij}(r) = -\frac{1}{2} \alpha_i \left[\frac{q_j^2}{r^4} + \frac{2\mu_j^2}{r^6} + \frac{3Q_j^2}{r^8} + \dots \right] - \frac{1}{2} \alpha_j \left[\frac{q_i^2}{r^4} + \frac{2\mu_i^2}{r^6} + \frac{3Q_i^2}{r^8} + \dots \right]$$

Dispersão: dispersão de London

$$U_{ij}(r) = -\frac{3}{2} \frac{\alpha_i \alpha_j}{r^6} \frac{\hbar \omega_i \omega_j}{(\omega_i + \omega_j)}$$

O termo de r^6 inclui a interação de Keesom, de Debye e a dispersão de London

$$-\frac{C}{r^6} = -\frac{1}{r^6} \left[\frac{2\mu_i^2 \mu_j^2}{3kT} + (\alpha_i \mu_j^2 + \alpha_j \mu_i^2) + \frac{3}{2} \alpha_i \alpha_j \frac{\hbar \omega_i \omega_j}{(\omega_i + \omega_j)} \right]$$

Origem do Potencial de Lennard-Jones

Atrativo: $U_{ij} = c r_{ij}^{-n}$

Repulsivo: $U_{ij} = a r_{ij}^{-m}$

De 1924 a 1937, Lennard-Jones testou os potenciais com

$$n = 5, 6 \text{ e } 7$$

Origem quântica

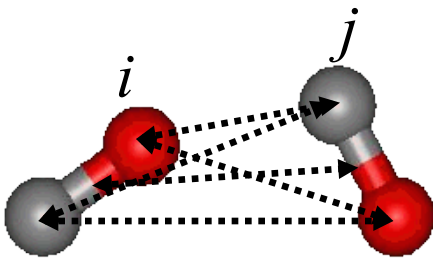
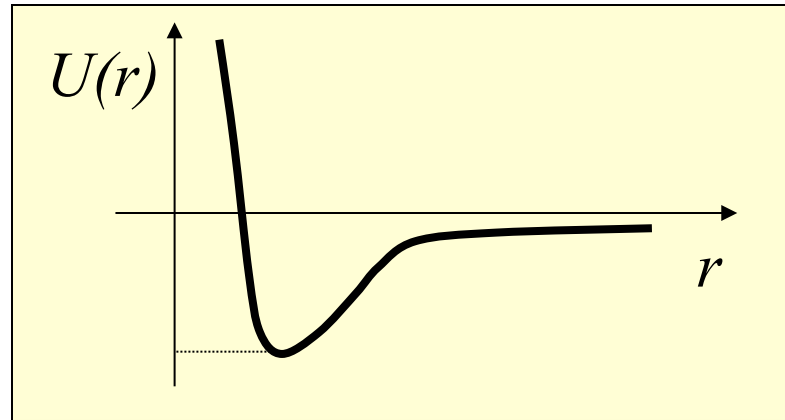
$$m = 5, 5.5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14.5, 15, 21, 25, 35 \text{ e } \infty$$

Em 1937, Lennard-Jones confirmou sua preferência pelo potencial $U(r) = ar^{-12} - cr^{-6}$ pois obteve os melhores resultados de propriedades observáveis como: viscosidade, propriedades cinéticas de gases, propriedades estruturais de sólidos, calor de sublimação, espaçamento de rede cristalina, temperatura de Boyle, temperatura crítica, etc, adicionalmente considerou uma função com propriedades simples e elegantes, e as constantes podem ser facilmente expressas em função da distância de equilíbrio e do valor da energia de ligação entre dois átomos.

Outro potencial entre átomos não ligados

- Buckingham + Coulomb

$$U(r_{ij}) = \sum_{i,j} \left[A_{ij} \exp(-B_{ij} r_{ij}) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$



$$A_{ij} = \sqrt{A_i A_j}$$

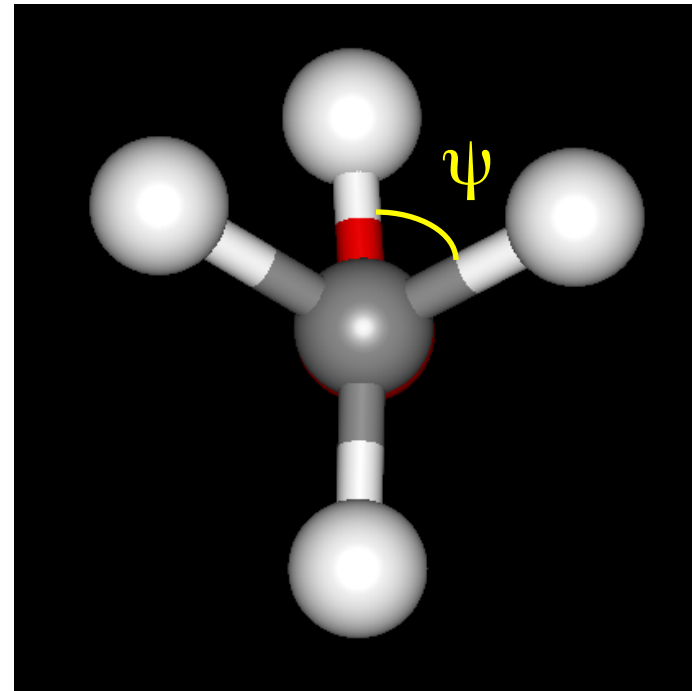
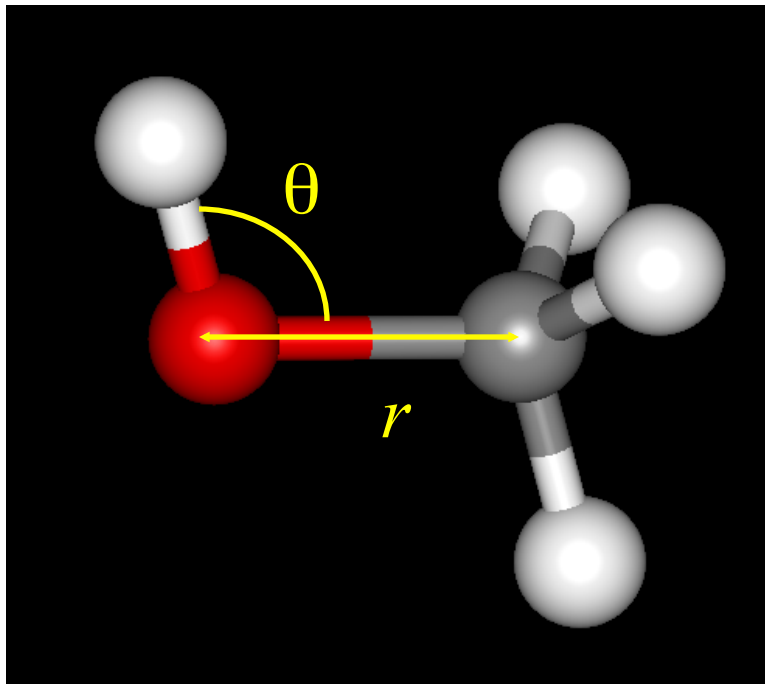
$$C_{ij} = \sqrt{C_i C_j}$$

$$B_{ij} = \frac{B_i + B_j}{2}$$

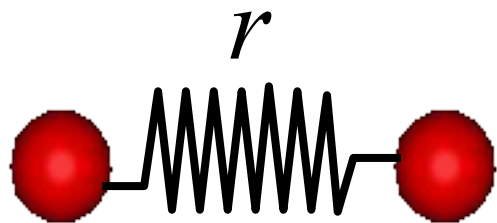
Aproximações para um sistema de N moléculas flexíveis

- Devido a escala de energia, pode-se desacoplar as interações de átomos “ligados” e não-ligados.

$$U = U_{\text{bond}}(r, \theta, \psi) + U_{\text{nbond}}(r_{ij})$$

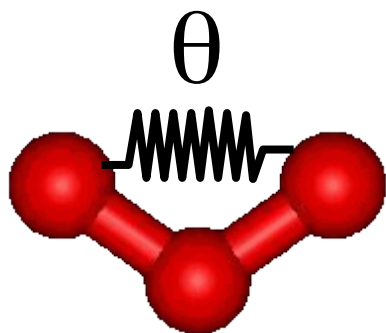


Potencial Intramolecular mais usado



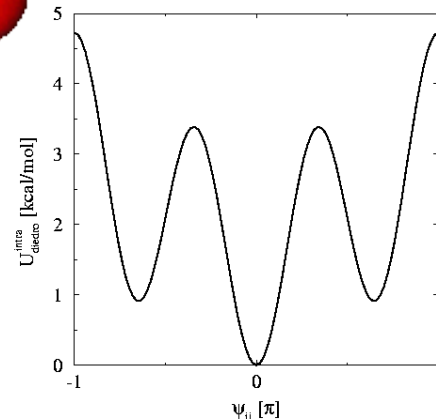
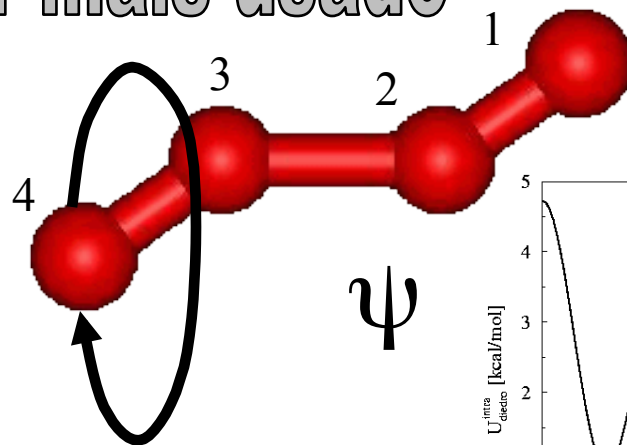
$$U_r = k_r (r - r_o)^2$$

$$U_r = D[1 - \exp(-\beta(r - r_o))]^2$$

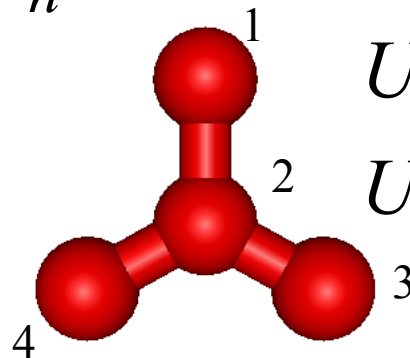


$$U_\theta = k_\theta (\theta - \theta_o)^2$$

$$U_\theta = k_\theta (\cos \theta - \cos \theta_o)^2$$

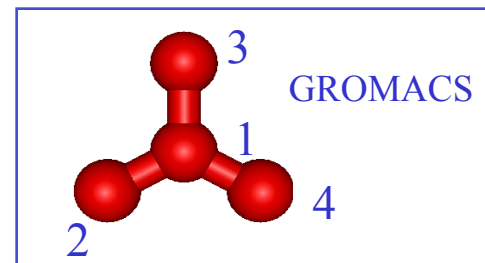


$$\sum_n V_n \left(1 + (\pm 1)^n \cos(n\psi + \delta_n) \right)$$



$$U_\psi = V_2 \cos(2\psi)$$

$$U_\psi = k_\psi (\psi - 180)^2$$



Campos de força clássicos: AMBER, OPLS, MM+, GROMOS, etc.

AMBER, CHARMM e GROMOS → nucleotídeos, aminoácidos e polissacarídeos

OPLS → moléculas em geral, nucleotídeos e aminoácidos

MM2 → moléculas em geral

CUIDADO: Cada campo de força tem uma filosofia para determinação dos parâmetros.

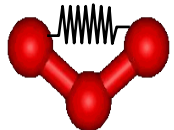
	U(str)	U(bend)	U(tor)	U(imp)	U(vdw)	U(Hb)	U(el)
MM2	P2+P3	P2+P6	F123	P2	Exp-6	-	dd
AMBER	P2	P2	F1-6	F1	12-6	12-10	qq
OPLS	P2	P2	F1-6	F1	12-6	-	qq
GROMOS	P2/(P2+P3)/Exp	P2/cos2	F1-6	P2	12-6/Exp-6		qq

Campos de força: Função de energia típica

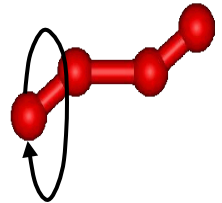
$$U = \sum_{bonds} \frac{1}{2} k_r (r - r_o)^2$$

Estiramento da ligação 

$$+ \sum_{angles} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_o)^2$$

Abertura de ângulo 

$$+ \sum_{torsions} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\varphi - \delta)]$$

Rotação torcional 

$$+ \sum_{improper} \frac{V}{2} [1 + \cos(2\varphi - 180)]$$

Torção imprópria (planares e tetraedrico)

$$+ \sum_{elec} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Interação eletrostática

$$+ \sum_{LJ} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{B_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

Interação Lennard-Jones

W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives, J. Am. Chem. Soc. 118, 11225-11236 (1996).
W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, Theochem 424, 145-155 (1998).
W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, J. Phys. Chem. B 102, 8049-8059 (1998).
R. C. Rizzo and W. L. Jorgensen, J. Am. Chem. Soc. 121, 4827-4836 (1999).
M. L. Price, D. Ostrovsky, and W. L. Jorgensen, J. Comp. Chem. (2001).
E. K. Watkins and W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. A 105, 4118-4125 (2001).

Supporting Information

Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids

William L. Jorgensen,* David S. Maxwell, and Julian Tirado-Rives

Department of Chemistry, Yale University, New Haven, Connecticut 06520-8118

The following tables contain the available non-bonded and torsional parameters for the OPLS-AA force field. These and the bond-stretching and angle-bending parameters are available by ftp after contacting W. L. Jorgensen by email at bill@adrik.chem.yale.edu.

Form of the Force Field

Bond stretching:

$$E_{bond} = \sum_{bonds} K_r (r - r_{eq})^2$$

Angle bending:

$$E_{angle} = \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2$$

Torsion:
$$E(\phi) = \frac{V_1}{2} [1 + \cos(\phi + f_1)] + \frac{V_2}{2} [1 - \cos(2\phi + f_2)] + \frac{V_3}{2} [1 + \cos(3\phi + f_3)]$$

Non-bonded:
$$E_{ab} = \sum_i^{on a} \sum_j^{on b} [q_i q_j e^2 / r_{ij} + 4\epsilon_{ij} (\sigma_{ij}^{12} / r_{ij}^{12} - \sigma_{ij}^6 / r_{ij}^6)] f_{ij}$$

$$f_{ij} = 0.5 \text{ if } i, j \text{ are } 1,4; \text{ otherwise, } f_{ij} = 1.0$$

Table 1. OPLS-AA Non-Bonded Parameters for Hydrocarbons and Alcohols

atom or group	q, e ⁻	σ , Å	ϵ , kcal mol ⁻¹
C, CH ₄	-0.240	3.500	0.066
C, RCH ₃	-0.180	3.500	0.066
C, R ₂ CH ₂	-0.120	3.500	0.066
C, R ₃ CH	-0.060	3.500	0.066
C, R ₄ C	0.000	3.500	0.066
H, RH, alkanes	0.060	2.500	0.030
C, Benzene	-0.115	3.550	0.070
H, Benzene	0.115	2.420	0.030
C, CH ₃ of toluene	-0.065	3.500	0.066
C, CH ₂ of ethyl benzene	-0.005	3.500	0.066
C, R ₂ C=	0.000	3.550	0.076
C, RHC=	-0.115	3.550	0.076
C, H ₂ C=	-0.230	3.550	0.076
H, HC=	0.115	2.420	0.030
O, ROH	-0.683	3.120	0.170
H(O), ROH	0.418	0.000	0.000
H(C), CH ₃ OH	0.040	2.500	0.030
C, CH ₃ OH and RCH ₂ OH	0.145	3.500	0.066

Table 6. Bond Stretching and Angle Bending Parameters

Type ^a	AMBER		CHARMM/22	
	r_{eq} or θ_{eq}	K	r_{eq} or θ_{eq}	K
CT-CT	1.526	310.0	1.529	268.0
HC-CT	1.090	331.0	1.090	340.0
HC-CT-HC	109.5	35.00	107.8	33.00
HC-CT-CT	109.5	35.00	110.7	37.50
CT-CT-CT	109.5	40.00	112.7	58.35

^a The AMBER atom types are from reference 3.

Table 7. OPLS-AA Fourier Coefficients (kcal/mol) for Torsional Energy Functions^a

System	Dihedral	V ₁	V ₂	V ₃
alkane	H-C-C-H	0.000	0.000	0.318
	H-C-C-C	0.000	0.000	0.366
	C-C-C-C	1.740	-0.157	0.279
alkene	H-C-C=C	0.000	0.000	-0.372
ethylbenzene	H-C-C _{ar} -C _{ar}	0.000	0.000	0.000
	C-C-C _{ar} -C _{ar}	0.000	0.000	0.000
	H-C-C-C _{ar}	0.000	0.000	0.462
alcohol	H-C-O-H	0.000	0.000	0.450
	C-C-O-H	-0.356	-0.174	0.492
	H-C-C-O	0.000	0.000	0.468
	C-C-C-O	1.711	-0.500	0.663
phenol	H-O-C _{ar} -C _{ar}	0.000	1.682	0.000
thiol	H-C-S-H	0.000	0.000	0.451
	C-C-S-H	-0.759	-0.282	0.603
	H-C-C-S	0.000	0.000	0.452
	C-C-C-S	1.876	0.000	0.000
sulfide	H-C-S-C	0.000	0.000	0.647
	C-C-C-S	2.619	-0.620	0.258

Table 5.3: The topology (*.top) file.

Intramolecular interaction definitions

interaction type	directive	# at.	f. tp	parameters	F. E.
bond	bonds ^(excl,com)	2	1	b_0 (nm); k_b (kJ mol ⁻¹ nm ⁻²)	all
G96 bond	bonds ^(excl,com)	2	2	b_0 (nm); k_b (kJ mol ⁻¹ nm ⁻⁴)	all
morse	bonds ^(excl,com)	2	3	b_0 (nm); D (kJ mol ⁻¹); β (nm ⁻¹)	
cubic bond	bonds ^(excl,com)	2	4	b_0 (nm); $C_{i=2,3}$ (kJ mol ⁻¹ nm ⁻ⁱ);	
connection	bonds ^(excl)	2	5		
harmonic pot.	bonds	2	6	b_0 (nm); k_b (kJ mol ⁻¹ nm ⁻²)	all
FENE bond	bonds ^(excl)	2	7	b_m (nm); k_b (kJ mol ⁻¹ nm ⁻²)	
tab. bond	bonds ^(excl)	2	8	table number (≥ 0); k (kJ mol ⁻¹)	k
tab. bond n.c.	bonds	2	9	table number (≥ 0); k (kJ mol ⁻¹)	k
LJ/Coul. 1-4	pairs	2	1	$V^{(cr)}$; $W^{(cr)}$	all
LJ/Coul. 1-4	pairs	2	2	fudge QQ (); q_i, q_j (e); $V^{(cr)}$; $W^{(cr)}$	
LJ/C. pair NB	pairs_nb	2	1	q_i, q_j (e); $V^{(cr)}$; $W^{(cr)}$	
angle	angles ^(com)	3	1	θ_0 (deg); k_θ (kJ mol ⁻¹ rad ⁻²)	all
G96 angle	angles ^(com)	3	2	θ_0 (deg); k_θ (kJ mol ⁻¹)	all
Cross bond-bond	angles	3	3	r_{1e}, r_{2e} (nm); $k_{rr'}$ (kJ mol ⁻¹ nm ⁻²)	
Cross bond-angle	angles	3	4	r_{1e}, r_{2e}, r_{3e} (nm); $k_{r\theta}$ (kJ mol ⁻¹ nm ⁻²)	
Urey-Bradley	angles ^(com)	3	5	θ_0 (deg); k_θ (kJ mol ⁻¹); r_{13} (nm); k_{UB} (kJ mol ⁻¹)	
quartic angle	angles ^(com)	3	6	θ_0 (deg); $C_{i=0,1,2,3,4}$ (kJ mol ⁻¹ rad ⁻ⁱ)	
tab. angle	angles	3	8	table number (≥ 0); k (kJ mol ⁻¹)	k
proper dih.	dihedrals	4	1	ϕ_s (deg); k_ϕ (kJ mol ⁻¹); multiplicity	ϕ, k
improper dih.	dihedrals	4	2	ξ_0 (deg); k_ξ (kJ mol ⁻¹ rad ⁻²)	all
RB dihedral	dihedrals	4	3	$C_0, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5$ (kJ mol ⁻¹)	all
Fourier dih.	dihedrals	4	5	C_1, C_2, C_3, C_4 (kJ mol ⁻¹)	all
tab. dihedral	dihedrals	4	8	table number (≥ 0); k (kJ mol ⁻¹)	k
exclusions	exclusions	1		one or more atom indices	

'# at' is the number of atom indices

'f. tp' is function type

'F. E.' indicates which parameters can be interpolated during free energy calculations

^(cr) the combination rule determines the type of LJ parameters, see 5.3.3

^(excl) used by grompp for generating exclusions

^(com) can be converted to constraints by grompp

For free energy calculations, all or no parameters for topology 'B' ($\lambda = 1$) should be added on the same line, after the normal parameters, in the same order as the normal parameters.

Bond

Harmonic= 1;

$$V(r) = \frac{k_b}{2} (r - b)^2$$

Fourth power = 2;

$$V(r) = \frac{k_b}{4} (r^2 - b^2)^2$$

$$V(r) = D \left[1 - \exp(-\beta(r - b)) \right]^2$$

$$V(r) = k_b (r - b)^2 + k_b k_3 (r - b)^3$$

Tipos de átomos (AMBER)

Table 1. List of Atom Types^a

JACS, 117, 5179 (1995)

atom	type	description			
carbon	CT	any sp^3 carbon	oxygen	OW	sp^3 oxygen in TIP3P water
	C	any carbonyl sp^2 carbon		OH	sp^3 oxygen in alcohols, tyrosine, and protonated carboxylic acids
	CA	any aromatic sp^2 carbon and (C ϵ of Arg)		OS	sp^3 oxygen in ethers
	CM	any sp^2 carbon, double bonded		O	sp^2 oxygen in amides
	CC	sp^2 aromatic in 5-membered ring with one substituent + next to nitrogen (C γ in His)		O2	sp^2 oxygen in anionic acids
	CV	sp^2 aromatic in 5-membered ring next to carbon and lone pair nitrogen (e.g. C δ in His (δ))	sulfur	S	sulfur in methionine and cysteine
	CW	sp^2 aromatic in 5-membered ring next to carbon and NH (e.g. C δ in His (ϵ) and in Trp)		SH	sulfur in cysteine
	CR	sp^2 aromatic in 5-membered ring next to two nitrogens (C γ and C ϵ in His)	phosphorus	P	phosphorus in phosphates
	CB	sp^2 aromatic at junction of 5- and 6-membered rings (C δ in Trp) and both junction atoms in Ade and Gua		H	H attached to N
	C*	sp^2 aromatic in 5-membered ring next to two carbons (e.g. C γ in Trp)	hydrogen	HW	H in TIP3P water
	CN	sp^2 junction between 5- and 6-membered rings and bonded to CH and NH (C ϵ in Trp)		HO	H in alcohols and acids
	CK	sp^2 carbon in 5-membered aromatic between N and N-R (C8 in purines)		HS	H attached to sulfur
	CQ	sp^2 carbon in 6-membered ring between lone pair nitrogens (e.g. C2 in purines)		HA	H attached to aromatic carbon
nitrogen	N	sp^2 nitrogen in amides		HC	H attached to aliphatic carbon with no electron-withdrawing substituents
	NA	sp^2 nitrogen in aromatic rings with hydrogen attached (e.g. protonated His, Gua, Trp)		H1	H attached to aliphatic carbon with one electron-withdrawing substituent
	NB	sp^2 nitrogen in 5-membered ring with lone pair (e.g. N7 in purines)		H2	H attached to aliphatic carbon with two electron-withdrawing substituents
	NC	sp^2 nitrogen in 6-membered ring with lone pair (e.g. N3 in purines)		H3	H attached to aliphatic carbon with three electron-withdrawing substituents
	N*	sp^2 nitrogen in 5-membered ring with carbon substituent (in purine nucleosides)		HP	H attached to carbon directly bonded to formally positive atoms (e.g. C next to NH ₃ ⁺ of lysine)
	N2	sp^2 nitrogen of aromatic amines and guanidinium ions		H4	H attached to aromatic carbon with one electronegative neighbor (e.g. hydrogen on C5 of Trp, C6 of Thy)
	N3	sp^3 nitrogen		H5	H attached to aromatic carbon with two electronegative neighbors (e.g. H8 of Ade and Gua and H2 of Ade)

Parâmetros das ligações

Bond Parameters

bond	K_r^b	r_{eq}^c	bond	K_r^b	r_{eq}^c	bond	K_r^b	r_{eq}^c	bond	K_r^b	r_{eq}^c
C-CA	469.0	1.409	CA-HA	367.0	1.080	CM-HA	367.0	1.080	CT-S	227.0	1.810
C-CB	447.0	1.419	CA-N2	481.0	1.340	CM-N*	448.0	1.365	CT-SH	237.0	1.810
C-CM	410.0	1.444	CA-NA	427.0	1.381	CN-NA	428.0	1.380	CV-H4	367.0	1.080
C-CT	317.0	1.522	CA-NC	483.0	1.339	CQ-H5	367.0	1.080	CV-NB	410.0	1.394
C-N	490.0	1.335	CB-CB	520.0	1.370	CQ-NC	502.0	1.324	CW-H4	367.0	1.080
C-N*	424.0	1.383	CB-CN	447.0	1.419	CR-H5	367.0	1.080	CW-NA	427.0	1.381
C-NA	418.0	1.388	CB-N*	436.0	1.374	CR-NA	477.0	1.343	H-N	434.0	1.010
C-NC	457.0	1.358	CB-NB	414.0	1.391	CR-NB	488.0	1.335	H-N*	434.0	1.010
C-O	570.0	1.229	CB-NC	461.0	1.354	CT-CT	310.0	1.526	H-N2	434.0	1.010
C-O2	656.0	1.250	CC-CT	317.0	1.504	CT-F	367.0	1.380	H-N3	434.0	1.010
C-OH	450.0	1.364	CC-CV	512.0	1.375	CT-H1	340.0	1.090	H-NA	434.0	1.010
C*-CB	388.0	1.459	CC-CW	518.0	1.371	CT-H2	340.0	1.090	HO-OH	553.0	0.960

Parâmetros dos ângulos

Angle Parameters

angle	K_θ^d	θ_{eq}^e	angle	K_θ^d	θ_{eq}^e	angle	K_θ^d	θ_{eq}^e	angle	K_θ^d	θ_{eq}^e
C-CA-CA	63.0	120.00	CA-CT-HC	50.0	109.50	CN-NA-H	30.0	123.10	H1-CT-N2	50.0	109.50
C-CA-HA	35.0	120.00	CA-N2-CT	50.0	123.20	CR-NA-CW	70.0	120.00	H1-CT-OH	50.0	109.50
C-CB-CB	63.0	119.20	CA-N2-H	35.0	120.00	CR-NA-H	30.0	120.00	H1-CT-OS	50.0	109.50
C-CB-NB	70.0	130.00	CA-NA-H	30.0	118.00	CR-NB-CV	70.0	117.00	H1-CT-S	50.0	109.50
C-CM-CM	63.0	120.70	CA-NC-CB	70.0	112.20	CT-C-N	70.0	116.60	H1-CT-SH	50.0	109.50
C-CM-CT	70.0	119.70	CA-NC-CQ	70.0	118.60	CT-C-O	80.0	120.40	H2-CT-H2	35.0	109.50
C-CM-H4	35.0	119.70	CB-C-NA	70.0	111.30	CT-C-O2	70.0	117.00	H2-CT-N*	50.0	109.50
C-CM-HA	35.0	119.70	CB-C-O	80.0	128.80	CT-C*-CW	70.0	125.00	H2-CT-OS	50.0	109.50
C-CT-CT	63.0	111.10	CB-C*-CT	70.0	128.60	CT-CC-CV	70.0	120.00	H4-CM-N*	35.0	119.10
C-CT-H1	50.0	109.50	CB-C*-CW	63.0	106.40	CT-CC-CW	70.0	120.00	H4-CV-NB	35.0	120.00
C-CT-HC	50.0	109.50	CB-CA-H4	35.0	120.00	CT-CC-NA	70.0	120.00	H4-CW-NA	35.0	120.00
C-CT-HP	50.0	109.50	CB-CA-HA	35.0	120.00	CT-CC-NB	70.0	120.00	H5-CK-N*	35.0	123.05
C-CT-N	63.0	110.10	CB-CA-N2	70.0	123.50	CT-CT-CT	40.0	109.50	H5-CK-NB	35.0	123.05
C-CT-N3	80.0	111.20	CB-CA-NC	70.0	117.30	CT-CT-H1	50.0	109.50	H5-CQ-NC	35.0	115.45
C-N-CT	50.0	121.00	CB-CB-N*	70.0	106.20	CT-CT-H2	50.0	109.50	H5-CR-NA	35.0	120.00

Parâmetros das torções

Torsional Parameters

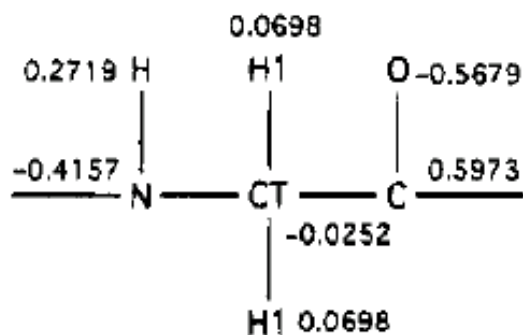
torsion	no. of paths ^f	$V_n/2^g$	γ^h	n^i	torsion	no. of paths ^f	$V_n/2^g$	γ^h	n^i
X-C-CA-X	4	14.50	180.0	2.0	X-CT-OH-X	3	0.50	0.0	3.0
X-C-CB-X	4	12.00	180.0	2.0	X-CT-OS-X	3	1.15	0.0	3.0
X-C-CM-X	4	8.70	80.0	2.0	X-CT-S-X	3	1.00	0.0	3.0
X-C-CT-X	4	0.00	0.0	2.0	X-CT-SH-X	3	0.75	0.0	3.0
X-C-N-X	4	10.00	180.0	2.0	X-CV-NB-X	2	4.80	180.0	2.0
X-C-N*-X	4	5.80	180.0	2.0	X-CW-NA-X	4	6.00	180.0	2.0
X-C-NA-X	4	5.40	180.0	2.0	X-OH-P-X	3	0.75	0.0	3.0
X-C-NC-X	2	8.00	180.0	2.0	X-OS-P-X	3	0.75	0.0	3.0
X-C-OH-X	2	1.80	180.0	2.0	C-N-CT-C	1	0.0	0.0	-4.0
X-C*-CB-X	4	6.70	180.0	2.0	C-N-CT-C	1	0.0	180.0	-3.0
X-C*-CT-X	6	0.00	0.0	2.0	C-N-CT-C	1	0.20	180.0	-2.0
X-C*-CW-X	4	26.10	180.0	2.0	C-N-CT-C	1	0.00	180.0	1.0
X-CA-CA-X	4	14.50	180.0	2.0	CT-CT-C-N	1	0.100	0.0	-4.0
X-CA-CB-X	4	14.00	180.0	2.0	CT-CT-C-N	1	0.000	0.0	-3.0
X-CA-CM-X	4	10.20	180.0	2.0	CT-CT-C-N	1	0.07	0.0	-2.0
X-CA-CN-X	4	14.50	180.0	2.0	CT-CT-C-N	1	0.000	180.0	1.0
X-CA-CT-X	6	0.00	0.0	2.0	CT-CT-N-C	1	0.50	180.0	-4.0
X-CA-N2-X	4	9.60	180.0	2.0	CT-CT-N-C	1	0.15	180.0	-3.0
X-CA-NA-X	4	6.00	180.0	2.0	CT-CT-N-C	1	0.00	180.0	-2.0
X-CA-NC-X	2	9.60	180.0	2.0	CT-CT-N-C	1	0.53	0.0	1.0
X-CB-CB-X	4	21.80	180.0	2.0	CT-CT-OS-CT	1	0.383	0.0	-3.0
X-CB-CN-X	4	12.00	180.0	2.0	CT-CT-OS-CT	1	0.1	180.0	2.0
X-CB-N*-X	4	6.60	180.0	2.0	CT-S-S-CT	1	0.60	0.0	3.0
X-CB-NB-X	2	5.10	180.0	2.0	CT-S-S-CT	1	3.50	0.0	-2.0
X-CB-NC-X	2	8.30	180.0	2.0	H-N-C-O	1	2.50	180.0	-2.0
X-CC-CT-X	6	0.00	0.0	2.0	H-N-C-O	1	2.00	0.0	1.0
X-CC-CV-X	4	20.60	180.0	2.0	N-CT-C-N	1	0.40	180.0	-4.0
X-CC-CW-X	4	21.50	180.0	2.0	N-CT-C-N	1	0.0	0.0	-3.0
X-CC-NA-X	4	5.60	180.0	2.0	N-CT-C-N	1	1.35	180.0	-2.0
X-CC-NB-X	2	4.80	180.0	2.0	N-CT-C-N	1	0.75	180.0	1.0
X-CK-N*-X	4	6.80	180.0	2.0	OH-CT-CT-OH	1	0.144	0.0	-3.0
X-CK-NB-X	2	20.00	180.0	2.0	OH-CT-CT-OH	1	1.00	0.0	2.0

Parâmetros Lennard-Jones

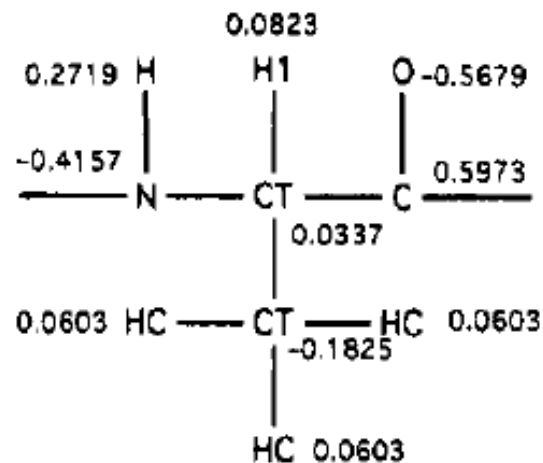
Van der Waals Parameters

atom type	R^{*j}	ϵ^k	atom type	R^{*j}	ϵ^k	atom type	R^{*j}	ϵ^k	atom type	R^{*j}	ϵ^k
C ^l	1.9080	0.0860	H2	1.2870	0.0157	HS	0.6000	0.0157	O2	1.6612	0.2100
CA	1.9080	0.0860	H3	1.1870	0.0157	HW	0.0000	0.0000	OH	1.7210	0.2104
CM	1.9080	0.0860	H4	1.4090	0.0150	IP	1.8680	0.00277	OS	1.6837	0.1700
Cs	3.3950	0.0000806	H5	1.3590	0.0150	K	2.6580	0.000328	OW	1.7683	0.1520
CT	1.9080	0.1094	HA	1.4590	0.0150	Li	1.1370	0.0183	P	2.1000	0.2000
F	1.75	0.061	HC	1.4870	0.0157	N ^m	1.8240	0.1700	Rb	2.9560	0.00017
H	0.6000	0.0157	HO	0.0000	0.0000	N3 ⁿ	1.875	0.1700	S	2.0000	0.2500
H1	1.3870	0.0157	HP	1.1000	0.0157	O	1.6612	0.2100	SH	2.0000	0.2500

Cargas atômicas (ajuste do potencial eletrostático)



GLY



ALA

Amber e OPLS recomendam obter as cargas com HF/6-31G*

Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular

**Nelson H. Morgon e
Kaline Coutinho (Eds)**



Lançamento em novembro/

2007 - 1.ª EDIÇÃO

Capítulo 1 - O MÉTODO DE HARTREE-FOCK

Autores: Marcos A. Castro e Sylvio Canuto

Capítulo 2 - MÉTODOS SEMI-EMPÍRICOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA EM QUÍMICA QUÂNTICA

Autores: Alfredo Mayall Simas e Gerd Bruno Rocha

Capítulo 3 - TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE

Autores: Hélio Anderson Duarte e Willian Ricardo Rocha

Capítulo 4 - MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA CORRELAÇÃO ELETRÔNICA

Autores: Marcos A. Castro e Sylvio Canuto

Capítulo 5 - O MÉTODO INTERAÇÃO DE CONFIGURAÇÕES

Autores: Fernando R. Ornellas

Capítulo 6 - MÉTODOS MULTICONFIGURACIONAIS PARA O ESTUDO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA

Autores: Antonio Carlos Borin

Capítulo 7 - A FUNÇÃO DE ONDA *GENERALIZED VALENCE BOND* (GVB) E A NATUREZA DA LIGAÇÃO QUÍMICA

Autores: Marco Antonio Chaer Nascimento

Capítulo 8 - MÉTODOS ALÉM DA APROXIMAÇÃO BORN-OPPENHEIMER

Autores: José Rachid Mohallem e Frederico Vasconcellos Prudente

Capítulo 9 - MÉTODOS *COMPLETE BASIS SET* (CBS)

Autores: Eduardo Fischli Laschuk e Paolo Roberto Livotto

Capítulo 10 - ELEMENTOS DO MÉTODO MONTE CARLO QUÂNTICO NO ESTUDO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA

Autores: Rogério Custodio e José Roberto dos Santos Politi

Capítulo 11 - O MÉTODO DE MONTE CARLO: APLICAÇÕES NO ESTUDO DE LÍQUIDOS E SOLUÇÕES

Autores: Luiz Carlos Gomide Freitas, André Farias de Moura e Vania Elisabeth Barlette

Capítulo 12 - FUNDAMENTOS DE SIMULAÇÃO POR DINÂMICA MOLECULAR

Autores: Ivana A. Borin, Leandro Martínez e Munir S. Skaf

Capítulo 13 - MÉTODOS HÍBRIDOS PARA MODELAGEM DO AMBIENTE MOLECULAR

Autores: Herbert C. Georg e Sylvio Canuto

Capítulo 14 - MÉTODOS DE *DOCKING* RECEPTOR-LIGANTE PARA O DESENHO RACIONAL DE COMPOSTOS BIOATIVOS

Autores: Camila S. de Magalhães, Hélio J. C. Barbosa e Laurent E. Dardenne