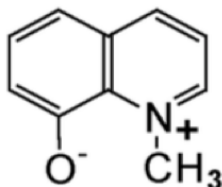


Exercício para a próxima semana (levar na sala em um pendrive para apresentação e mandar por e-mail): dia 10/09

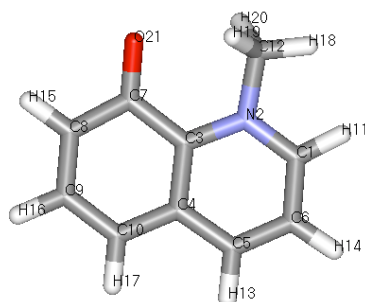
- 1) Desenhar a estrutura química (2D) da molécula do seu projeto com todos os átomos explícitos. Exemplo:



- 2) Gerar a estrutura 3D da molécula e salvar nos formatos xyz e pdb. Exemplo de formato xyz:

```
21
Quinoline Betaine
C 2.3560 -0.1210 0.0000
N 1.2840 0.6840 -0.0000
C -0.0070 0.1890 -0.0000
C -0.1820 -1.2490 -0.0000
C 0.9760 -2.0640 0.0000
C 2.2320 -1.5110 0.0000
C -1.1710 1.1010 0.0000
C -2.4350 0.4280 0.0000
C -2.5710 -0.9500 -0.0000
C -1.4690 -1.8010 -0.0000
H 3.3200 0.3660 0.0000
C 1.5640 2.1480 -0.0010
H 0.8510 -3.1420 0.0000
H 3.1270 -2.1190 0.0010
H -3.3070 1.0710 0.0000
H -3.5690 -1.3770 -0.0000
H -1.5860 -2.8780 -0.0000
H 2.6470 2.2660 -0.0030
H 1.1210 2.6090 0.8760
H 1.1170 2.6090 -0.8750
O -1.0570 2.3490 0.0010
```

- 3) Gerar imagem 3D da molécula com os rótulos para visualizar a ordem dos átomos. Exemplo:



- 4) Gerar arquivos da molécula com o campo de força usando o servidor LigParGen (<http://zarbi.chem.yale.edu/ligpargen/>). Para isto fazer: (i) Step 1: upload do arquivo pdb no servidor; (ii) Step 2: selecionar número de passos de otimização da geometria e o modelo de cálculo de cargas atômicas nas opções de molécula neutra ou carregada indicando o valor; (iii) Submeter a molécula para o cálculo e fazer o download do arquivo ZIP (download_lpg.zip).