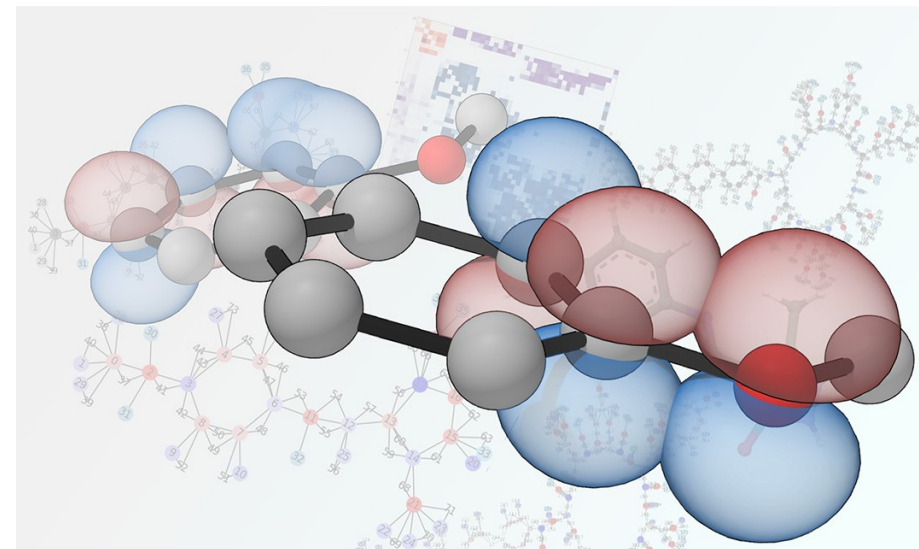


Aula 15 – Modelos de Solvente Explícito

Ref: Artigos Citados

Prof. Elvis Soares
elvis@peq.coppe.ufrj.br

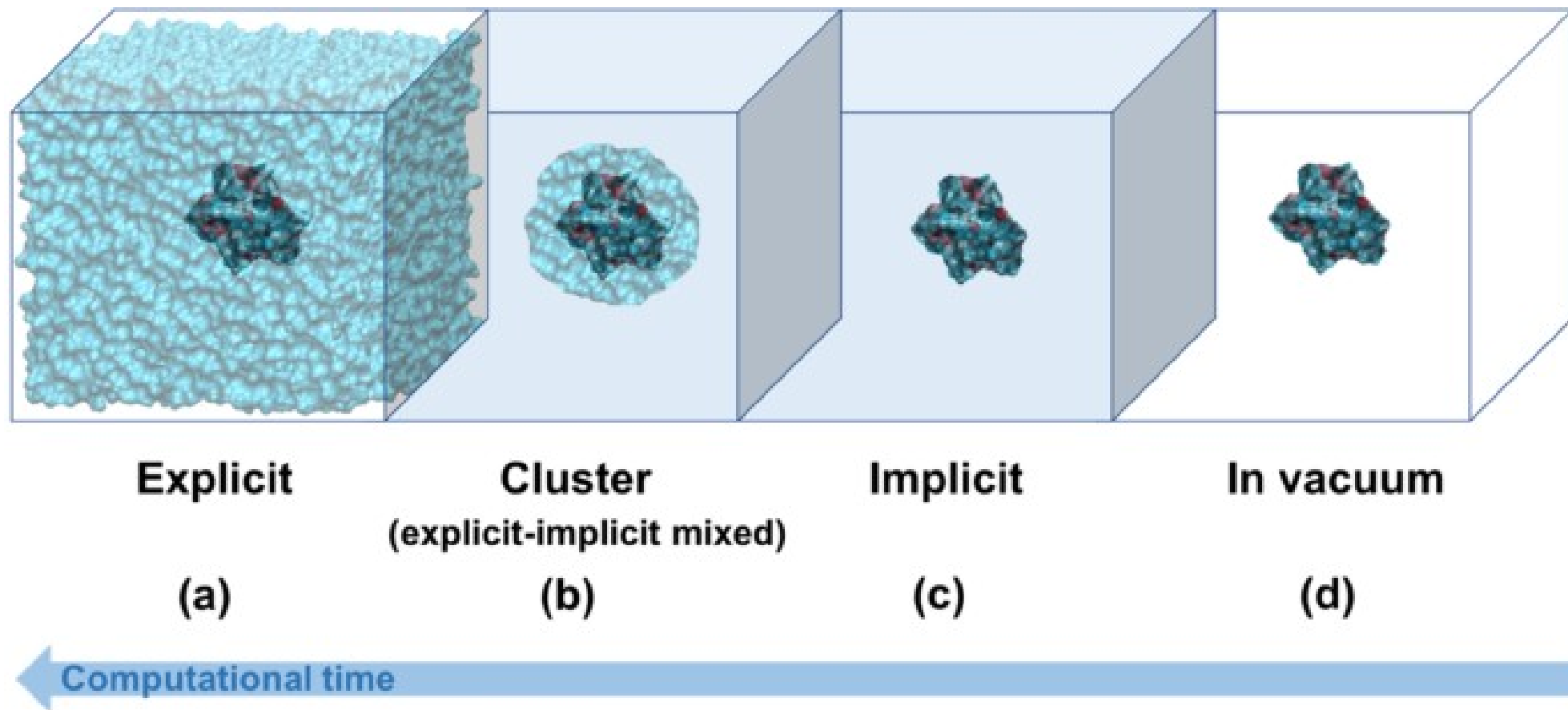


$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

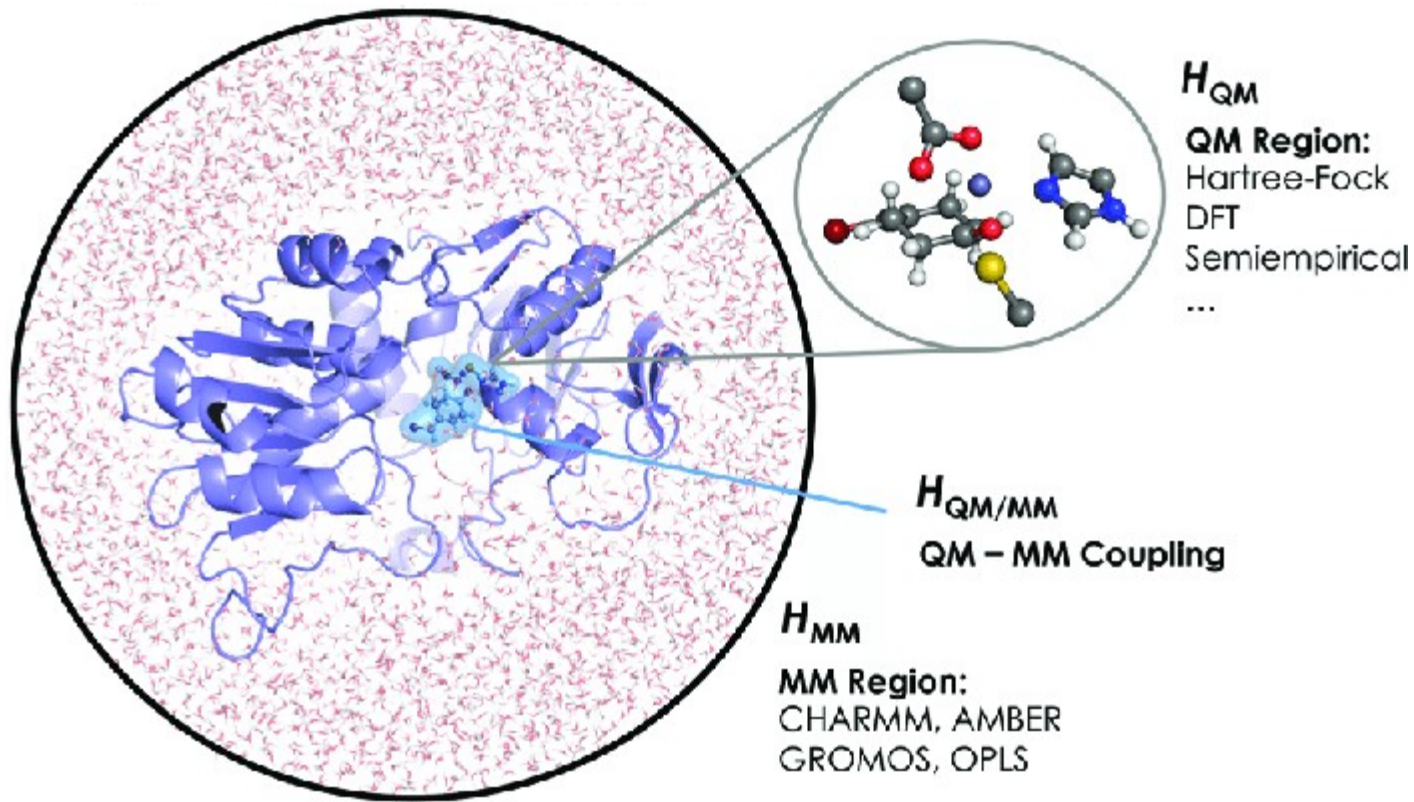
$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Modelos de Solvatação



Modelos Explícitos - QM/MM



Esquema QM/MM

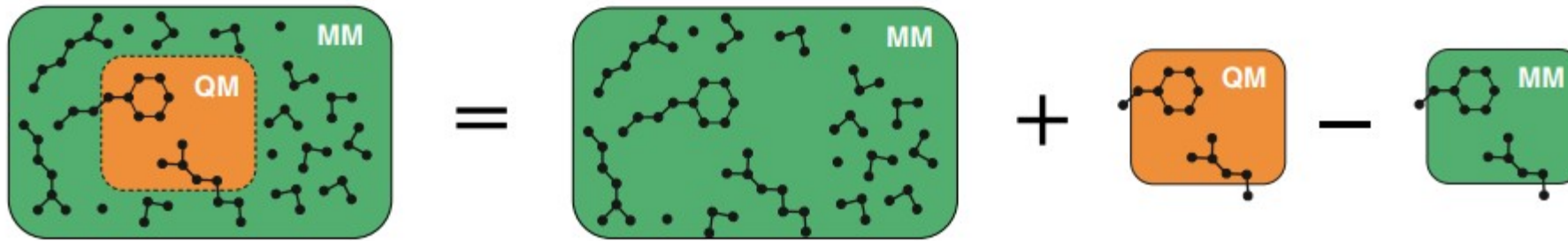
- **Pequena** parte do sistema em nível **quântico** (QM)
- **Resto** do sistema em nível **clássico** (MM)

Hamiltoniano QM/MM Aditivo

$$H = H_{QM} + H_{QM/MM} + H_{MM}$$

Diferentes esquemas para acoplamento QM/MM

QM/MM Subtrativo



Prós

- Sem comunicação entre as regiões QM e MM



Fácil implementação

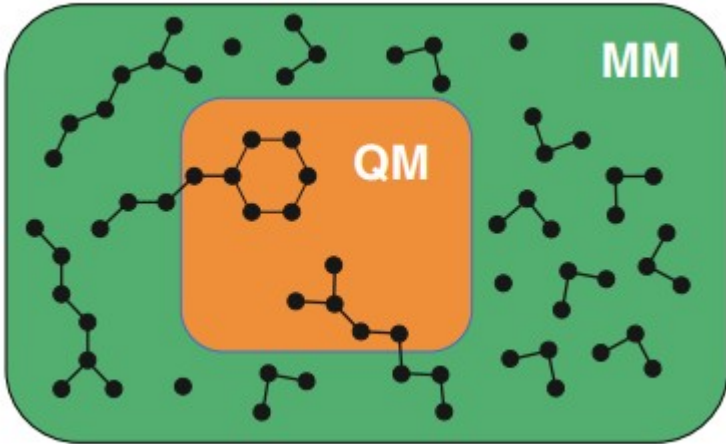
Contras

- Campo de força para parte QM
- Campo de força deve descrever possíveis reações
- Ausência de efeito de polarização em QM devido a MM

Hamiltoniano QM/MM Subtrativo

$$H_{\text{QM/MM}} = -H_{\text{MM}}^{(\text{QM})}$$

QM/MM Aditivo



Termo de acoplamento QM/MM é escrito explicitamente e leva em conta ambas as regiões.

Hamiltoniano QM/MM Aditivo

$$H_{\text{QM/MM}} = H_{\text{QM/MM}}^{(\text{bond})} + H_{\text{QM/MM}}^{(\text{elec})} + H_{\text{QM/MM}}^{(\text{vdW})}$$

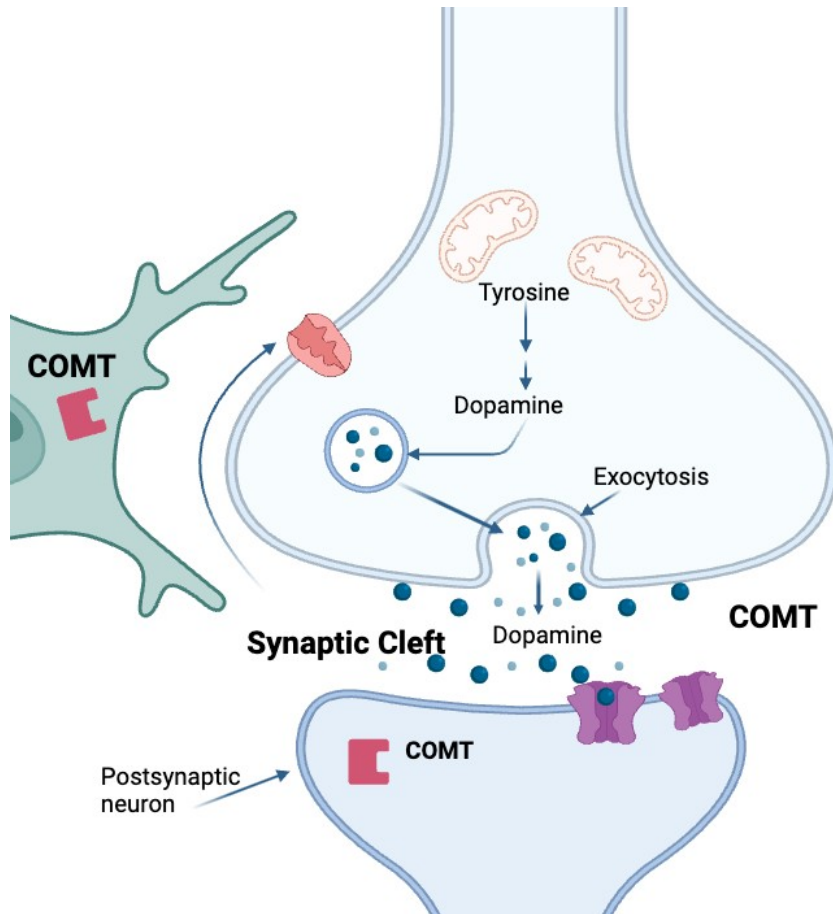
Prós

- Sem campo de força para região QM
- Efeito de polarização na região QM

Contras

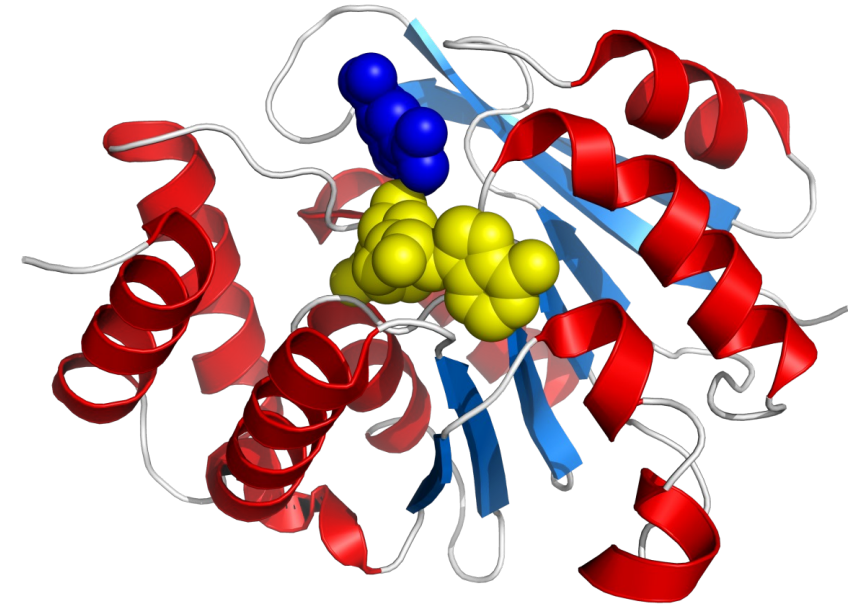
- Acoplamento eletrostático pode ser problemático
- Necessidade de parametrização para átomos na fronteira

Catálise Enzimática



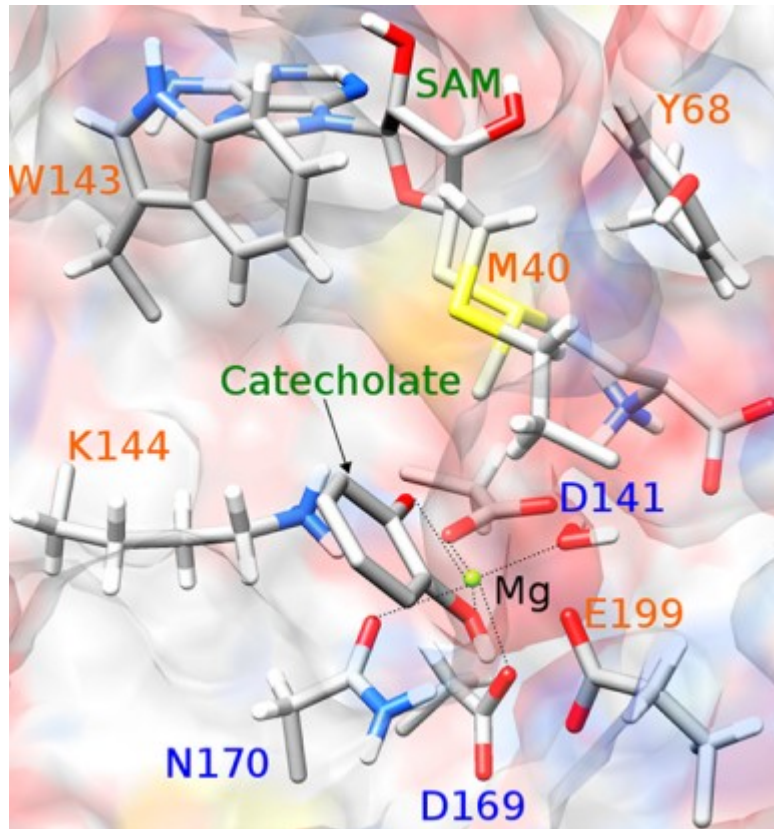
COMT breaks down catecholamines - dopamine, epinephrine and norepinephrine -

COMT gene variants impact neurotransmitter availability in the synaptic cleft



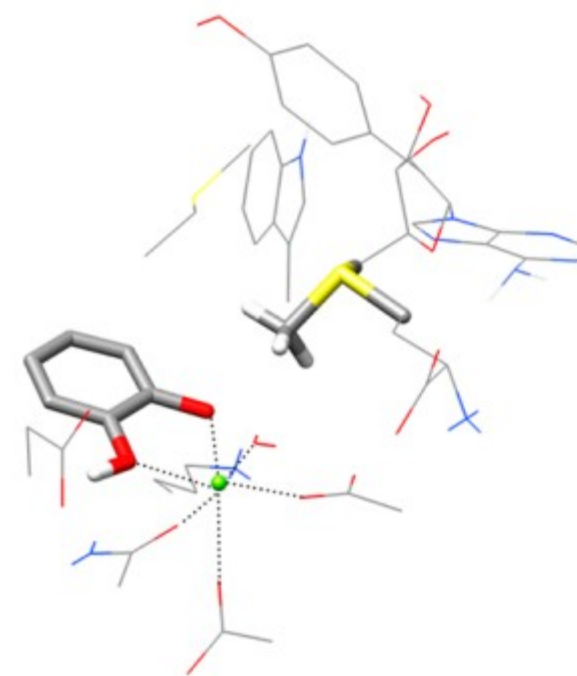
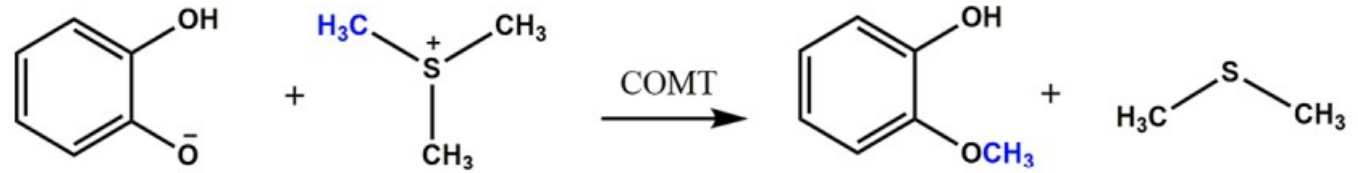
COMT
(Catechol-O-Metiltransferase)

Catálise Enzimática

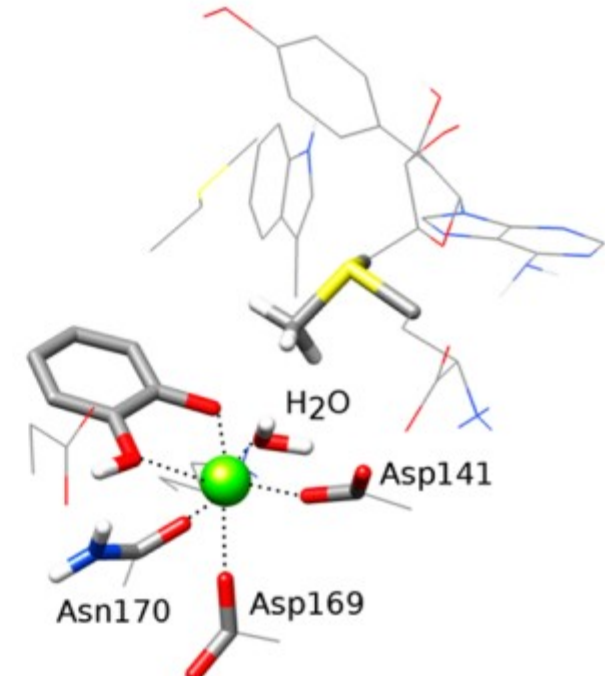


Sítio ativo da **COMT**

SN2 type reaction

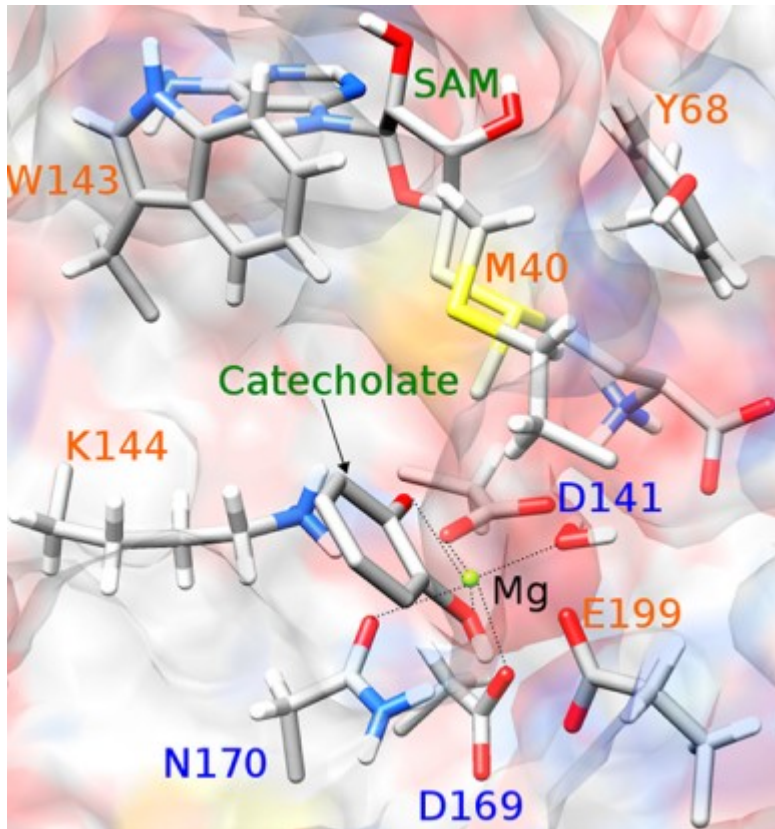


System I



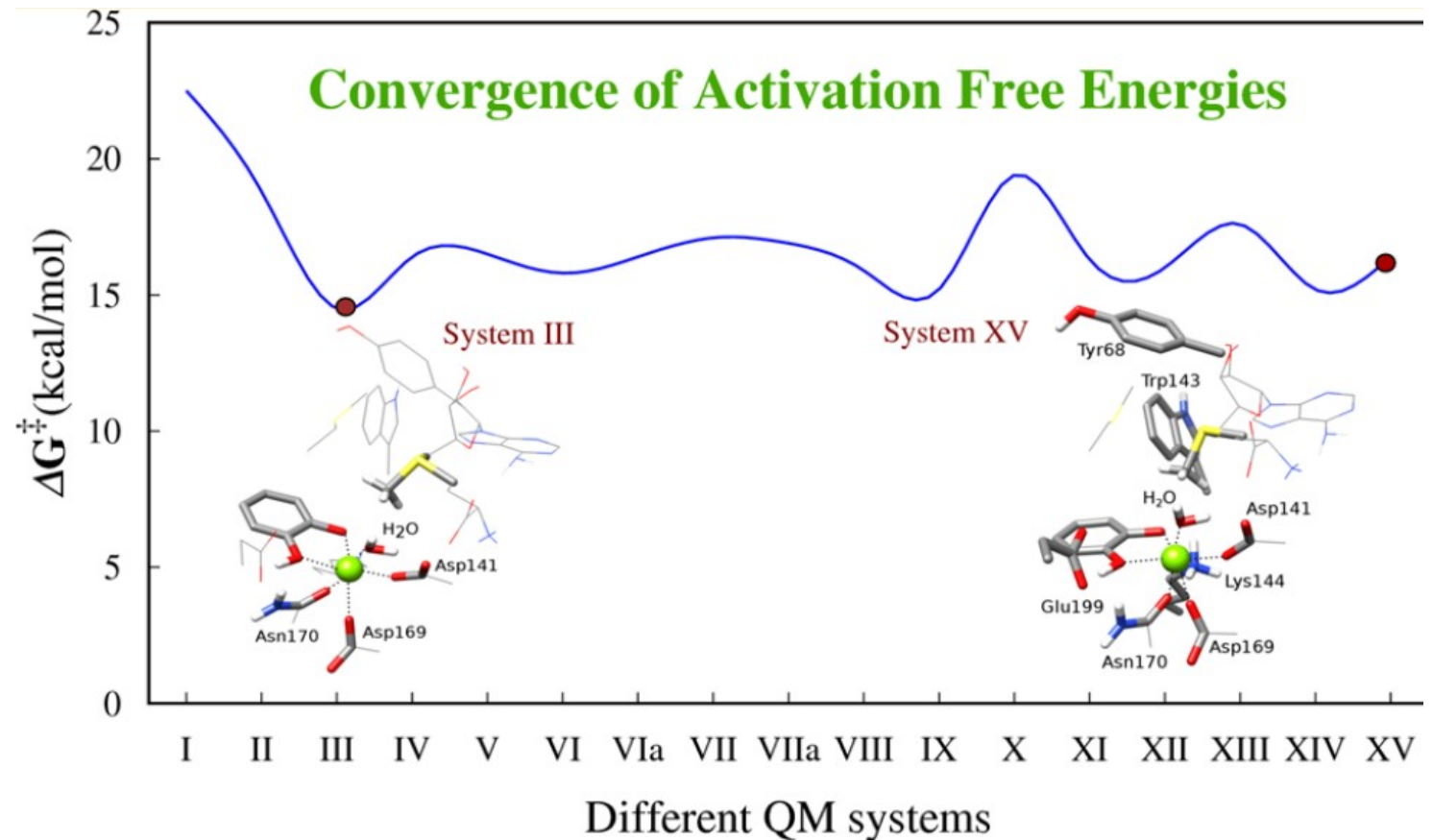
System III

Catálise Enzimática



Sítio ativo da **COMT**

Dependência do resultado como função do tamanho da região QM.



Programas disponíveis

- **PySCF**: somente acoplamento eletrostático
- **CP2K+GROMACS**: completo como as funcionalidades de ambos
- **ASE**: acoplamento entre calculadoras

