

CQ8987: Sesión Práctica N°7

Contexto:

Con la finalidad de aplicar simulaciones moleculares empleando QM/MM, iniciaremos esta sesión práctica aprendiendo a generar inputs para mecánica cuántica empleando ORCA. Teniendo en cuenta que se usará Open Babel para la generación de la estructura inicial. Luego trabajaremos una serie de ejercicios con el programa XTB.

Parte 1: SMILES

Instalamos open babel y desde la terminal generamos la estructura de agua, etanol, entre otros.

Ejercicio: ¿Cómo generamos la estructura 3D de pirazinamida?

Parte 2: ORCA

Elaboramos el input para los cálculos con mecánica cuántica para:

1. SINGLE POINT
2. OPTIMIZATION
3. FREQUENCIES

Parte 3: XTB

Instalamos XTB en GOOGLE COLAB y elaboramos los inputs de acuerdo a las indicaciones en:
<https://github.com/inefable12/qmmm/blob/main/XTB.ipynb>

Parte 4: Actividad

Realizar el cálculo de frecuencias de la molécula asignada (previamente optimizada) y obtener sus orbitales HOMO y LUMO.

Fecha de entrega: 16/06/2024.

Enlaces de interés

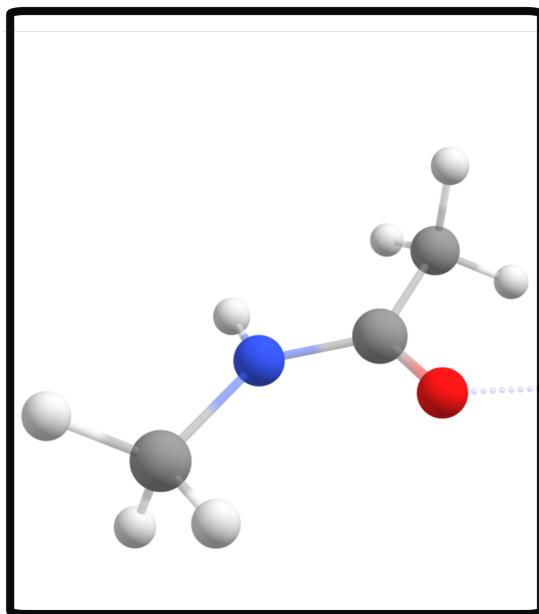
Open Babel: <https://sites.google.com/site/alloucheat/Download/gabedit/download/openbabel-via-gabedit>

XTB: <https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/setup.html>

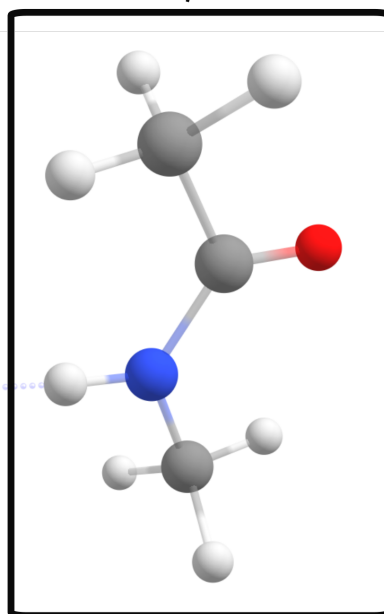
ORCA: https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/multi/basics-otheronion.html
#example-1-mix-of-hybrid-and-non-hybrid-dft

https://www.orcasoftware.de/tutorials_orca/multi/basics.html

XTB2



revPBE/DEF2-TZVP



XTB2

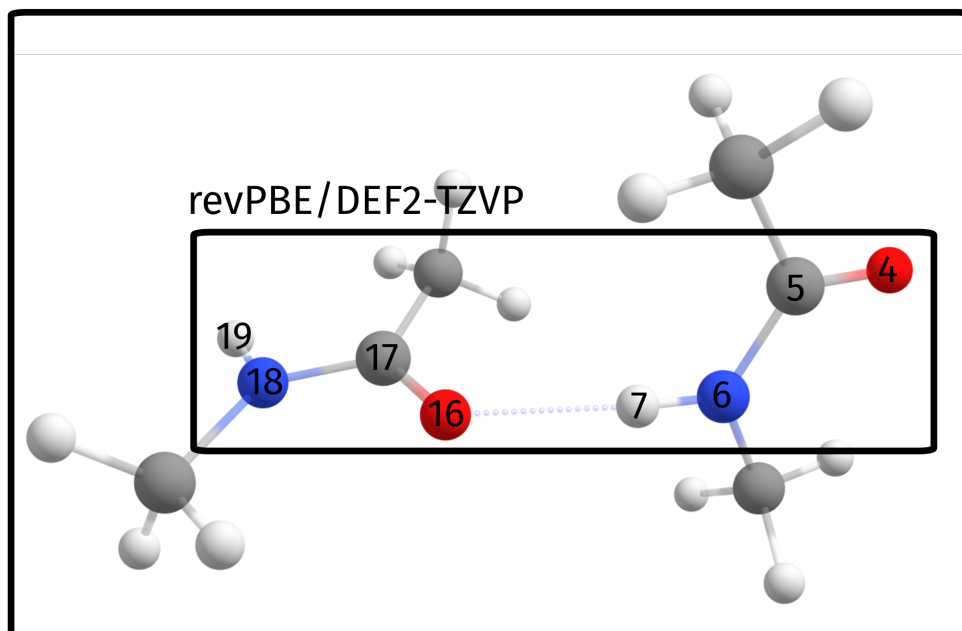


Figura 1: Definición de región para QM/MM