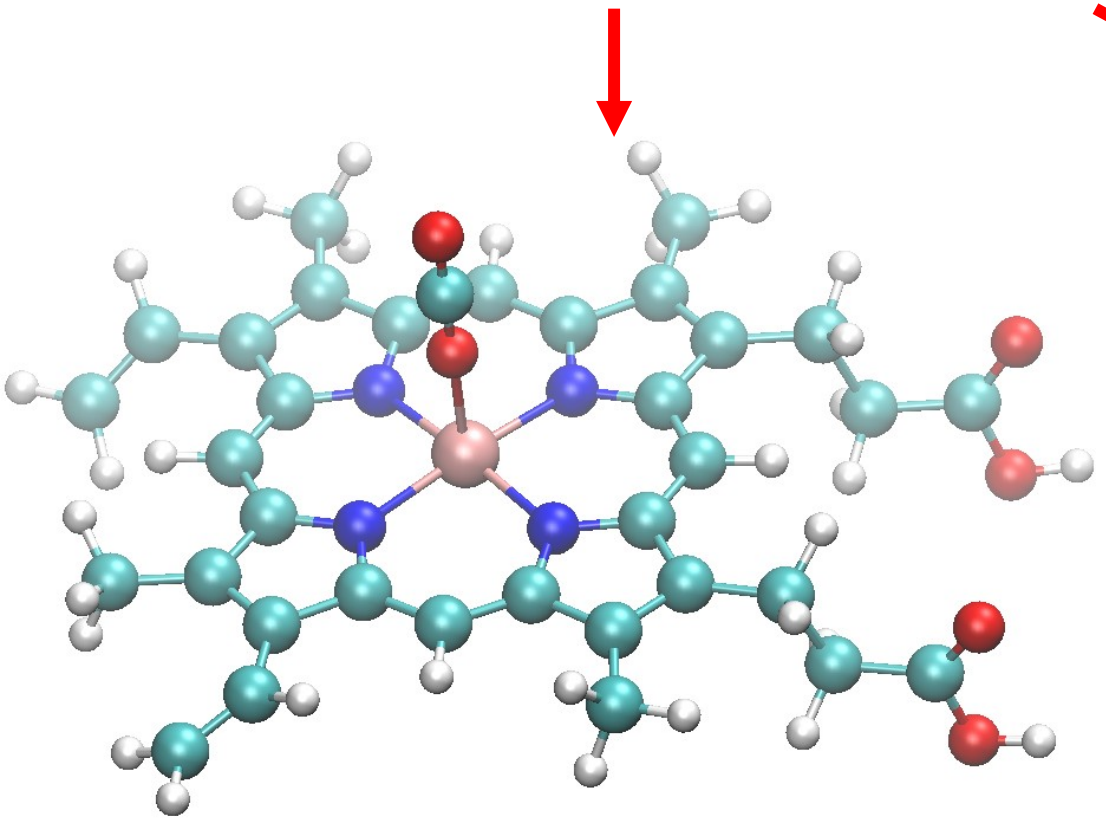
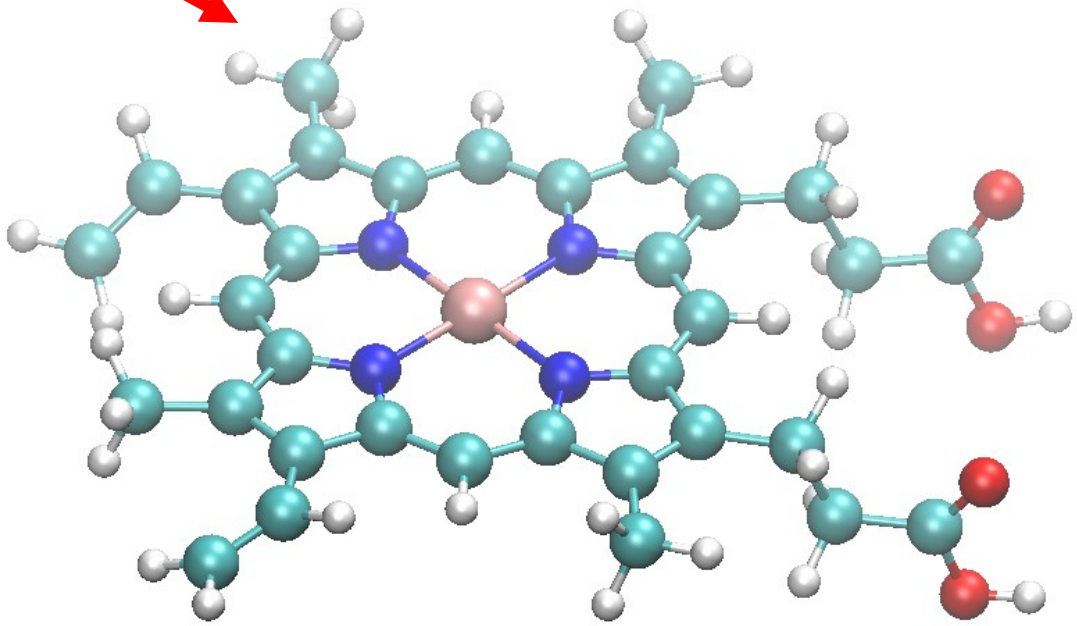
Simulação Atomística

Prof. James Moraes de Almeida

Simulações de DFT

- Como calcular as energias de adsorção?
  - Devemos comparar as energias totais dos sistemas.
    - $E_{ads} = E_{adsorvente+adsorbato} - E_{adsorvente} - E_{adsorbato}$





Simulações de DFT

- Escrevam o diário de bordo.
  - Discutam as energias de adsorção obtidas.
  - Contextualize com a respiração.

Simulações de DFT

- Porque essas moléculas ligem no ferro e não em outros locais?
  - Vamos fazer uma análise das funções de Fukui.
    - Assim entendemos as regiões de maior reatividade.
  - Sigam esse tutorial do ORCA:
    - https://www.faccts.de/docs/orca/5.0/tutorials/react/FUKUI.html
    - Porém, façam os cálculos para a Heme-B Fe.
    - Provavelmente nessa aula, vocês vão só conseguir submeter os cálculos.

OBRIGADO

James Moraes de Almeida

ilum.cnpem.br

ilum

CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO

GOVERNO FEDERAL
BRASIL
UNIÃO E RECONSTRUÇÃO