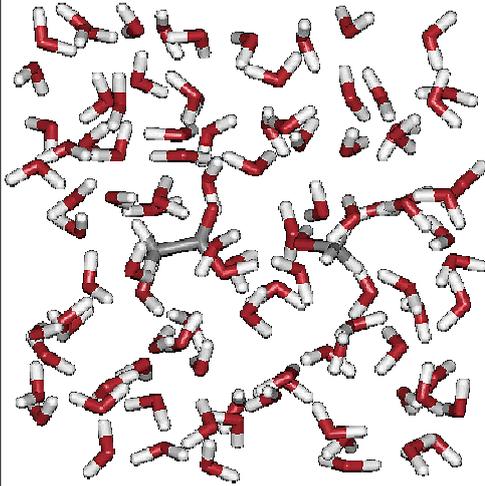


Método Monte Carlo Aplicado ao Estudo de Sistemas Moléculas



Kaline Coutinho

kaline@if.usp.br
<http://fig.if.usp.br/~kaline>

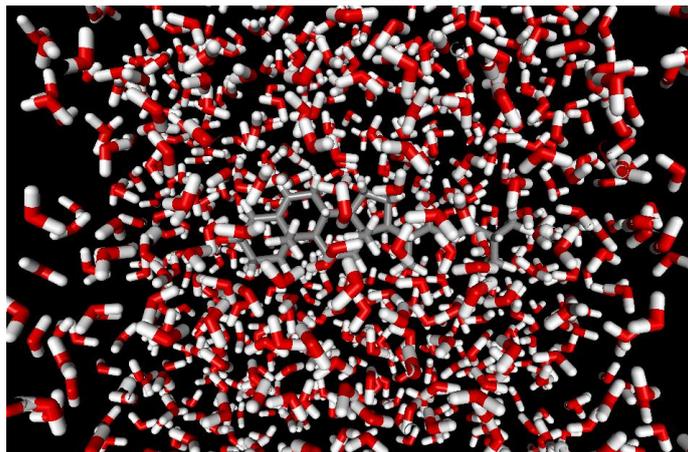
Nesta apresentação:

- Técnicas de simulação computacional de líquidos:
Dinâmica Molecular x Monte Carlo
- Método Monte Carlo

Características dos Líquidos ou Sistemas Densos

- ★ Grande mobilidade
- ★ Alta densidade
- ★ Não tem periodicidade

Os efeitos térmicos e intermoleculares **NÃO PODEM SER DESPREZADOS**. Seus estudos devem se basear em **métodos estatísticos** com grande quantidade de moléculas.



Princípios da Mecânica Estatística

As propriedades são médias em trajetórias

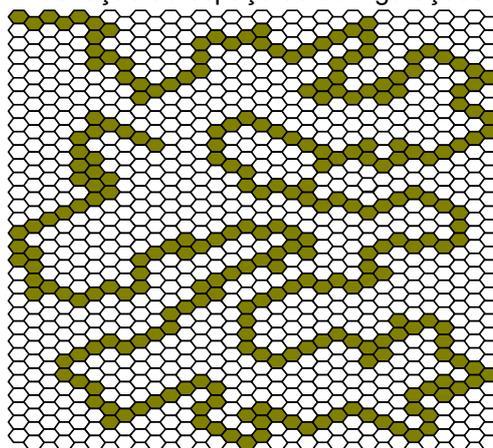
$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U$$

Ilustração do espaço de configurações



Ludwig Boltzmann

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



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

Princípios da Mecânica Estatística

As propriedades são médias em ensemble

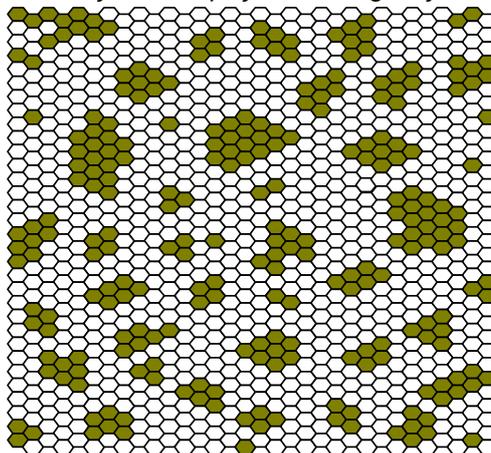


J. Willard Gibbs

Gibbs (1839-1903) desenvolveu os fundamentos da termodinâmica-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

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 $U(r)$.

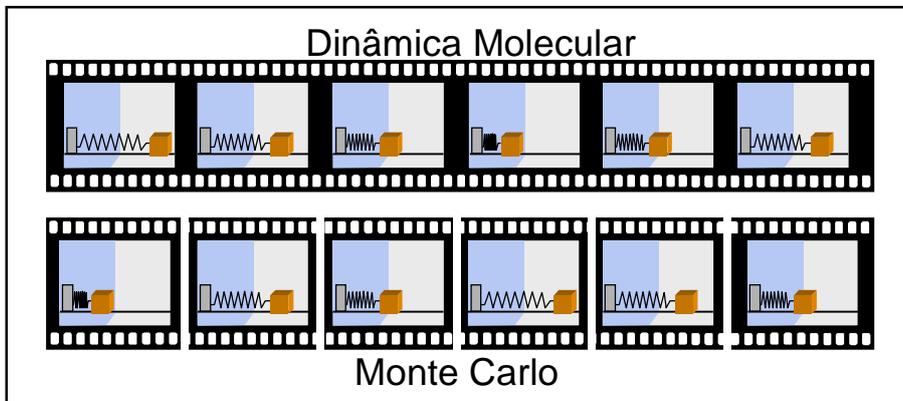
Idéias de Gibbs →

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).

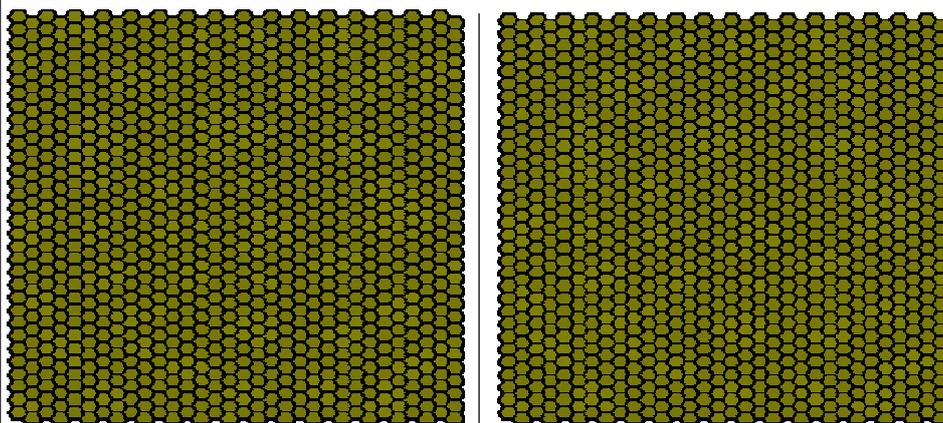


Acima, as fotos são apresentadas seguindo uma ordem temporal (Dinâmica Molecular).

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

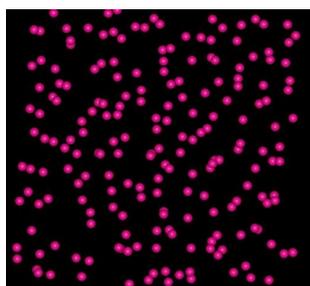


Dinâmica Molecular

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

$$U(s_i) \rightarrow F = \delta \nabla U \rightarrow F = m a \rightarrow a = dv/dt \text{ e } v = ds/dt$$

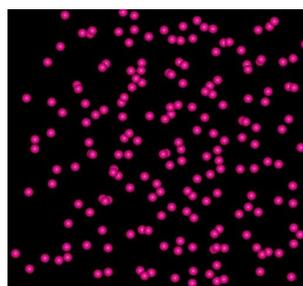
Informações iniciais s_0 e v_0



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

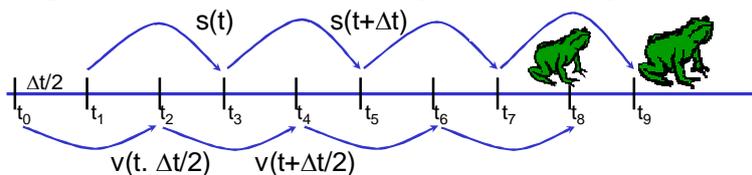


calculamos s_1 e v_1



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

Algoritmo de Leapfrog [Hockney, 1970]



	$t-\Delta t$	t	$t+\Delta t$
r	t_1	t_3	t_5
v		t_2	t_4
a	t_1	t_3	t_5

$$s(t_3) \Rightarrow U_3 \Rightarrow F(t_3) = -\nabla U_3$$

$$a(t_3) = F(t_3) / m$$

r	t_1	t_3	t_5
v		t_2	t_4
a	t_1	t_3	t_5

$$a(t) = dv/dt = \lim(\Delta t \rightarrow 0) [v(t+\Delta t/2) - v(t-\Delta t/2)] / \Delta t$$

$$v(t_4) = v(t_2) + a(t_3) \Delta t$$

r	t_1	t_3	t_5
v		t_2	t_4
a	t_1	t_3	t_5

$$v(t, \Delta t/2) = ds/dt = \lim(\Delta t \rightarrow 0) [s(t) - s(t-\Delta t)] / \Delta t$$

$$s(t_5) = s(t_3) + v(t_2) \Delta t$$

Nas simulações computacionais tipicamente $\Delta t \approx 10^{-16}$ a 10^{-14} s = 0.1 a 10fs

Método Monte Carlo

Baseado nos fundamentos da mecânica estatística

$$H(\Pi, \Gamma) = \sum_i^{3N} \left(\frac{p_i^2}{2m} \right) + U(\Gamma) \quad \text{NVT ensemble canônico}$$

$$Z = \iint \dots \int e^{-H(\Pi, \Gamma)/kT} d\Gamma d\Pi \quad \begin{array}{l} \Pi = \{\bar{p}_1, \bar{p}_2, \dots, \bar{p}_N\} \\ \Gamma = \{\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N\} \end{array}$$

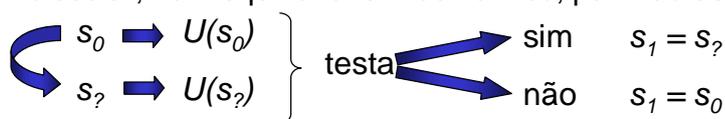
$$Z = (2m\pi kT)^{3N/2} Q \quad \text{onde}$$

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

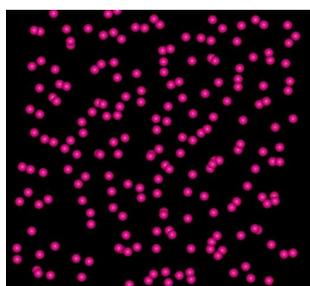
$$\langle f \rangle_{\text{NVT}} = \langle f \rangle_{\text{cin.}} + \langle f \rangle_{\text{conf.}}$$

Método Monte Carlo

Técnica que gera, de forma aleatória, uma nova configuração molecular, num equilíbrio termodinâmico, partindo de uma anterior.



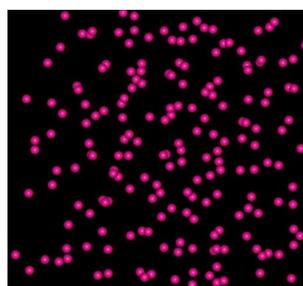
Informações iniciais s_0



$s(t_0)$



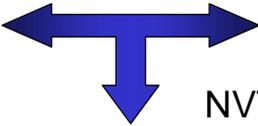
calculamos s_1



$s(?)$

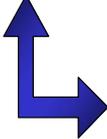
Método Monte Carlo

Baseado nos fundamentos da mecânica estatística

Equilíbrio

Ensemble $\{\Gamma\}$

NVT ensemble canônico

$$\langle f \rangle_{NVT} = \iiint \dots \int f(\Gamma) \frac{e^{-U(\Gamma)/kT}}{Q} d\Gamma$$

Metropolis


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

Amostragem preferencial

Como gerar números aleatórios que satisfazem uma distribuição gerada por ρ_{NVT} ?

Solução: Gerar uma **Cadeia de Markov** de configurações $\{\Gamma_j\}$ que satisfaz uma distribuição gerada por ρ_{NVT} .

Formalismo: Gerar uma matriz de probabilidade de transição π , onde o elemento π_{ij} representa a probabilidade de passar de Γ_i para Γ_j .

Condições:

(a) Existe uma densidade de probabilidade limite

(b) Atingindo esse limite todas as configurações geradas irão satisfazer uma distribuição de ρ_{NVT} , onde $\rho_i = \rho_{NVT}(\Gamma_i)$.

(c) Todos os estados são acessíveis (**ergodicidade**)

ou seja: $\sum_i \pi_{ij} = \rho_j$ e $\sum_j \pi_{ij} = \rho_i$

$${}_{NVT} \pi = \lim_{n \rightarrow \infty} {}^{(0)} \pi^n$$

$$\left\{ \begin{array}{l} {}_{NVT} \pi = {}_{NVT} \rho \\ \sum_i \pi_{ij} = \rho_j \\ \sum_i \pi_{ij} = \rho_i \end{array} \right.$$

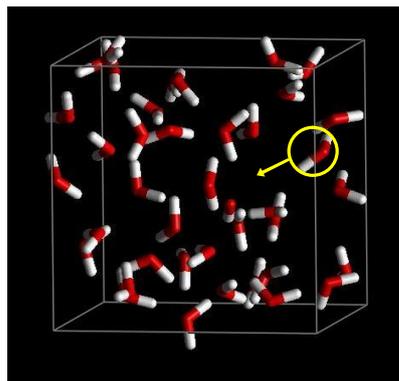
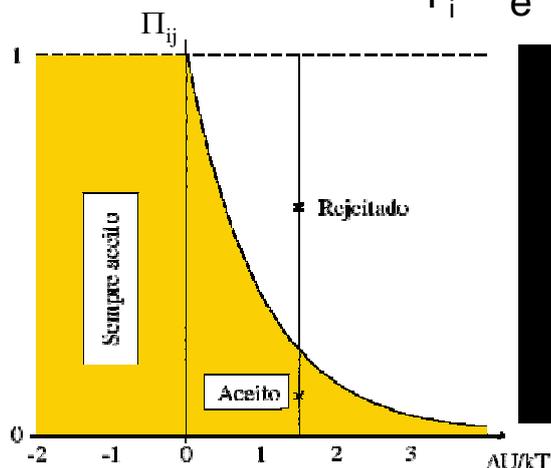
Truque: $\pi_{ij} = \pi_{ji}$ \implies Ou seja a probabilidade de estar em i e mudar para j é a mesma que estar em j e mudar para i .

Balanceamento detalhado

Técnica de Amostragem de Metropolis

Probabilidade $\Gamma_i \leftrightarrow \Gamma_j$

$$\Pi_{ij} = \frac{P_j}{P_i} = \frac{e^{(-U_i/kT)} / Q}{e^{(-U_j/kT)} / Q} = e^{(-\Delta U/kT)}$$



Amostragem de Metropolis (translação)

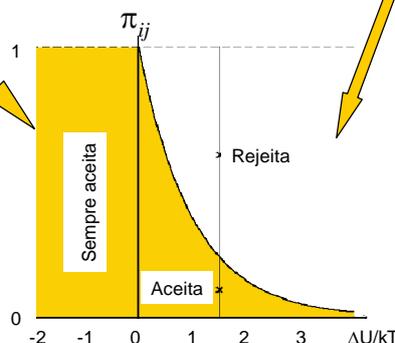
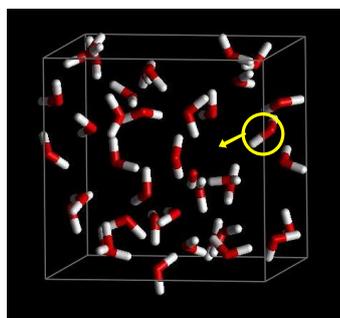
Metropolis e co-autores [1953] propuseram

$$\pi_{ij} = \alpha_{ij}(1) \text{ se } j \geq i \text{ e } \pi_{ij} = \alpha_{ij} \left(\frac{j}{i} \right) \text{ se } j < i$$

Algoritmos: Escolher uma partícula i e realizar um deslocamento aleatório δr em cada eixo, então a probabilidade de transição dentro de uma fração α de configurações acessíveis é:

$$\alpha_{ij} = \alpha = \frac{1}{N} \frac{V}{\delta V_{\max}}$$

$$\pi_{ij} = 1 \text{ ou } \pi_{ij} = \frac{j}{i} = \frac{e^{(-U_i/kT)} / Q}{e^{(-U_j/kT)} / Q} = e^{(-\Delta U_{ij}/kT)}$$



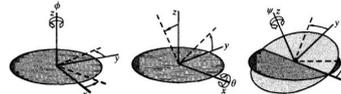
Amostragem de Metropolis (rotação)

É aplicado o deslocamento aleatório no centro de massa e/ou uma rotação aleatória.

Como aplicar a rotação?

$$\langle f \rangle_{NVT}^{conf} = \frac{\iint f(\vec{r}) e^{-U(\vec{r})/kT} d\vec{r} d\Omega}{\iint e^{-U(\vec{r})/kT} d\vec{r} d\Omega}$$

Com ângulos de Euler ($\delta\phi, \delta\theta, \delta\psi$)



$$\pi_{ij} = e^{(-\Delta U_{ij}/kT)} \frac{\text{sen } \theta_j}{\text{sen } \theta_i}$$

Jacobiano

$$d\Omega = \frac{\text{sen } \theta d\theta d\phi d\psi}{8\pi^2}$$

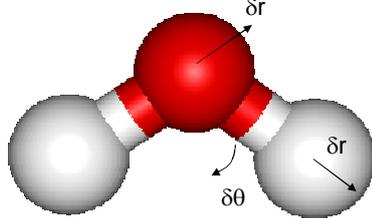
Seleção aleatória de um eixo e a rotação de um ângulo θ , onde $\theta_{\min} \leq \theta < \theta_{\max}$. (Recomendo que $15^\circ \leq \theta < 15^\circ$)

$$\pi_{ij} = e^{(-\Delta U_{ij}/kT)}$$

Amostragem de Metropolis (deformação)

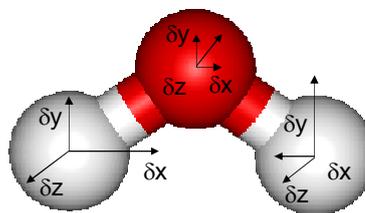
$$\pi_{NVT}^{conf.} = \frac{\exp(-(U_{int,er} + U_{int,ra})/kT)}{Q}$$

$$U(r_{12}, r_{23}, \theta) = K_{r_{12}}(r_{12} - r_{12}^{eq})^2 + K_{r_{23}}(r_{23} - r_{23}^{eq})^2 + K_{\theta}(\theta - \theta^{eq})^2$$



$$d\vec{r}_{12} d\vec{r}_{23} d\theta$$

Necessita de Jacobiano



$$d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3$$

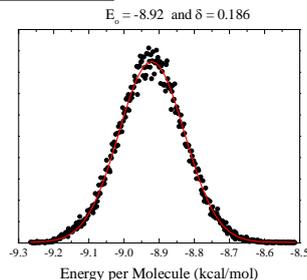
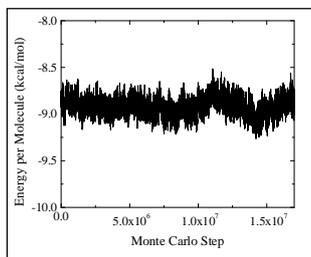
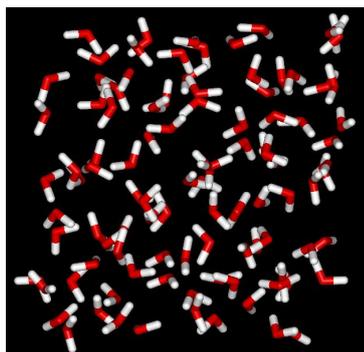
Não necessita de Jacobiano

Técnica de Amostragem de Metropolis

$$\text{Probabilidade } i \leftrightarrow j \Rightarrow \Pi_{ij} = p_j / p_i = e^{-\Delta U/kT}$$

O máximo deslocamento é ajustado para dar uma taxa de aceitação de 50%.

$$0.01 \text{ \AA} \leq \delta r_{\max} \leq 2.0 \text{ \AA}$$



Sumário do algoritmo:

Separando os termos cinético e configuracional, realizamos simulação com Monte Carlo apenas para a parte configuracional e depois somamos *a posteriori* a parte cinética.

Canônico (NVT)

⇒ A condição inicial estabelece a densidade. Em cada passo \mathbf{r} muda aleatoriamente e um novo $U(\mathbf{r})$ é obtido.

$$\Pi_{ij} = e^{-(\Delta U)/kT}$$

Isotérmico-isobárico (NPT) ⇒

A condição inicial estabelece uma densidade inicial que muda durante a simulação. Em cada passo \mathbf{r} e V mudam.

$$\Pi_{ij} = e^{-(\Delta U + P\Delta V - NkT \ln(V_j/V_i))/kT}$$

TÉCNICAS de SIMULAÇÃO

Dinâmica Molecular

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

$$s(t) \Rightarrow a(t)$$

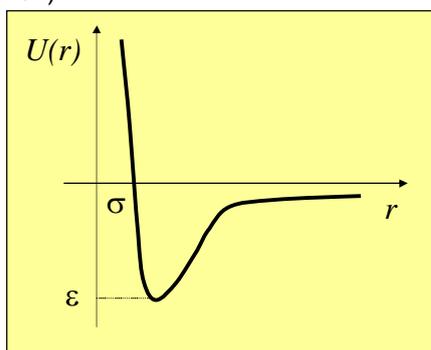
$$v(t + \Delta t/2) = v(t - \Delta t/2) + a(t) \Delta t$$

$$s(t + \Delta t) = s(t) + v(t + \Delta t/2) \Delta t$$

Método Monte Carlo

$$\Pi_{i \rightarrow j} = e^{(-\Delta U / kT)}$$

no ensemble NVT



Campos de força: Função de energia típica

$$U = \sum_{bonds} \frac{1}{2} K_r (r - r_{eq})^2$$

Estiramento da ligação 

$$+ \sum_{angles} \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2$$

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)

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

Interação eletrostática

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

Interação Lennard-Jones

Tipos de átomos (AMBER)

Table 1. List of Atom Types^a

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

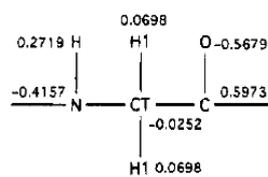
Parâmetros dos ângulos

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

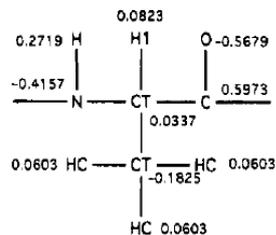
Parâmetros Lennard-Jones

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 ^j	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*

Mecânica Molecular

A escolha dos parâmetros é crucial.

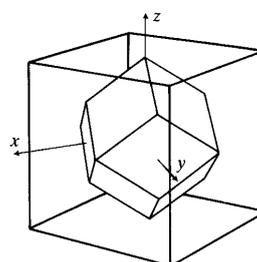
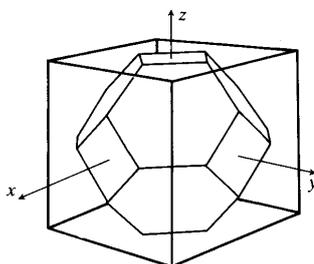
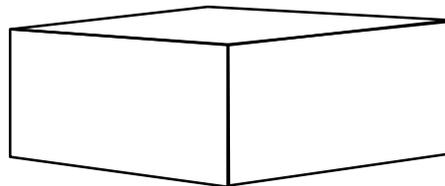
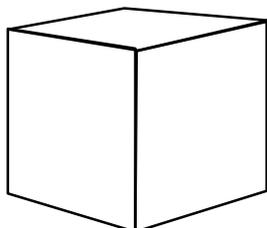
~ Usualmente os parâmetros de solventes, aminoácidos e ácidos nucleicos, açúcares e carboidratos são muito bons devido a grande quantidade de resultados experimentais.

~ Mas e os solutos (inibidores, sensores, anestésicos, etc.) ?

Em geral, quando os resultados experimentais não estão disponíveis: para o potencial intramolecular e intermolecular (parâmetros Lennard-Jones) são considerados transferíveis, entretanto as cargas atômicas são calculadas usando mecânica quântica (QM \Rightarrow HF/6-31G* Pop=MK ou ChelpG).

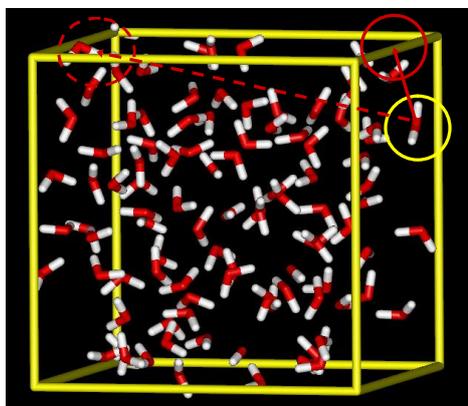
Detalhes de Implementação

É Formato da caixa: qualquer forma que preencha todo o espaço
(mais usado: cubo ou paralelepípedo)



Detalhes de Implementação

“ Condição de contorno: vácuo, imagens, estocástica, fixa
(mais usada: imagens moleculares)



Método das imagens

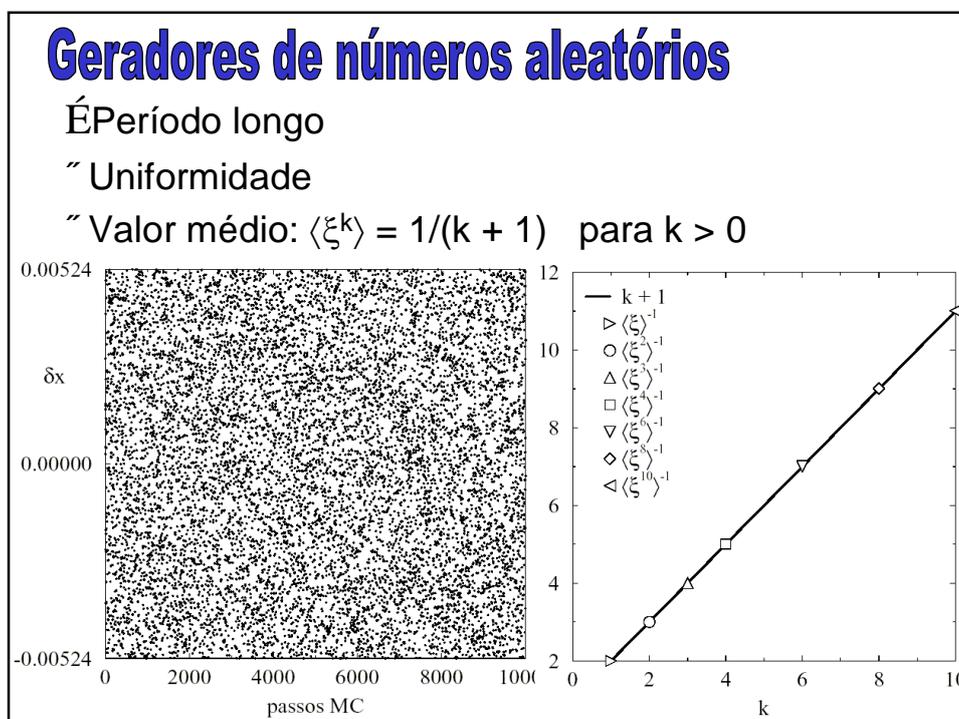
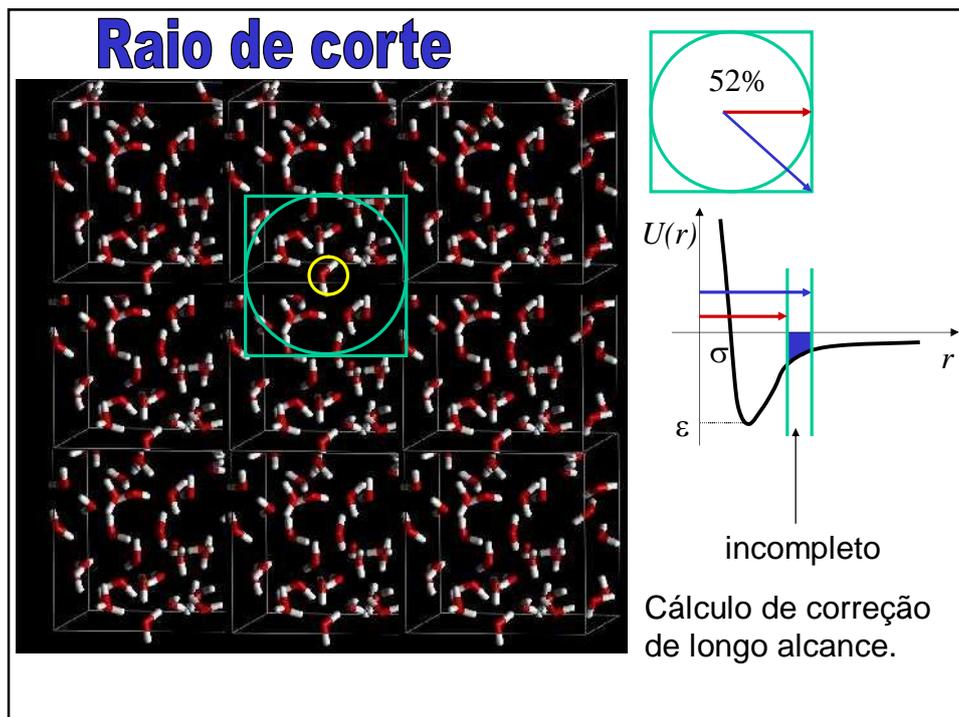
Ciclo sobre todas as moléculas:

$$\text{Se } X_{ij} > L/2 \rightarrow X_{ij} = X_{ij} - L/2$$

$$\text{Se } Y_{ij} > L/2 \rightarrow Y_{ij} = Y_{ij} - L/2$$

$$\text{Se } Z_{ij} > L/2 \rightarrow Z_{ij} = Z_{ij} - L/2$$

A condição é aplicada ao CM.



Geradores de números aleatórios

“Correlação estatística:

$$C(t) = \frac{\langle \xi_i \xi_{i+t} \rangle - \langle \xi_i \rangle \langle \xi_{i+t} \rangle}{\langle \xi^2 \rangle - \langle \xi \rangle^2}$$

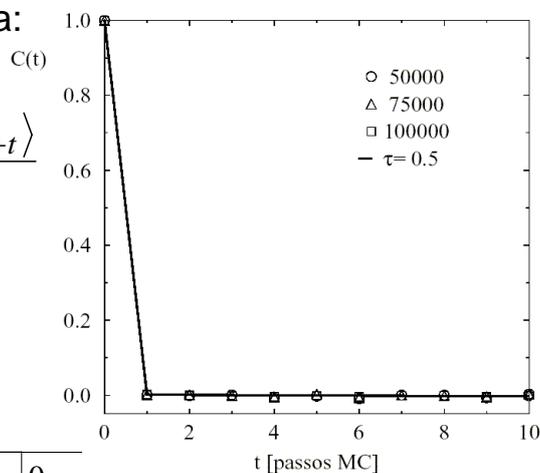
MAIS USADO RAN2

$$\xi_i = \text{XOR}(\xi_{i-1}, \xi_{i-2})$$

$$\xi_{i-1} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}$$

XOR

$$\xi_{i-2} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}$$



Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular

Nelson H. Morgon e Kaline Coutinho (Eds)



Nov/2007- Editora Livraria da Física

- 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