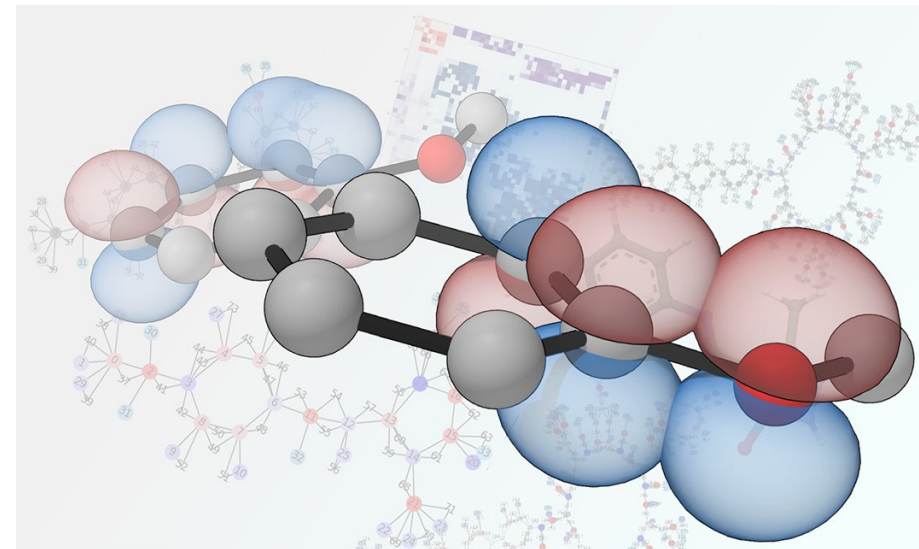


## Aula 07 – AIMD para água

**Prof. Elvis Soares**  
[elvis@peq.coppe.ufrj.br](mailto:elvis@peq.coppe.ufrj.br)



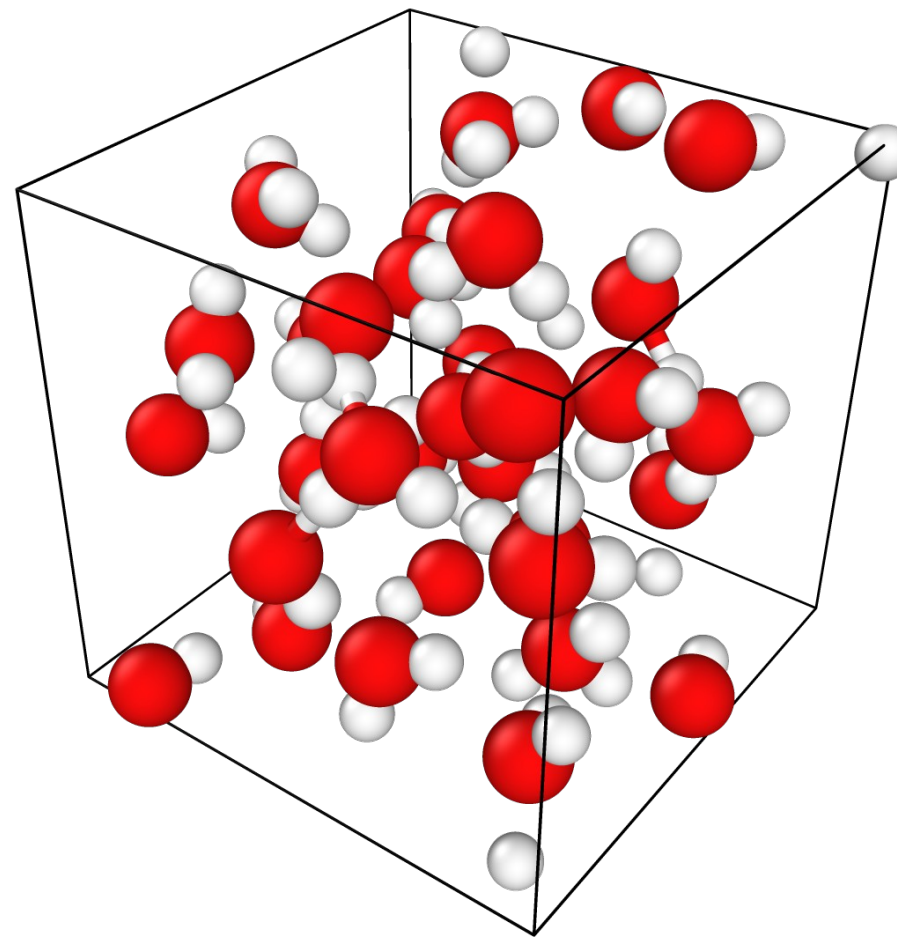
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

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

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

# AIMD-NVT para 32 H<sub>2</sub>O

- **Condição Inicial:** 32 H<sub>2</sub>O (FCC)
- **Funcional:** PBE
- **Pseudopotencial:** PAW
- **Amostragem:**  $\Gamma$ -point
- **Temperatura:** 300K
- **Passo de tempo:** 0,5 fs
- **Trajeto ria:** 10.000 passos

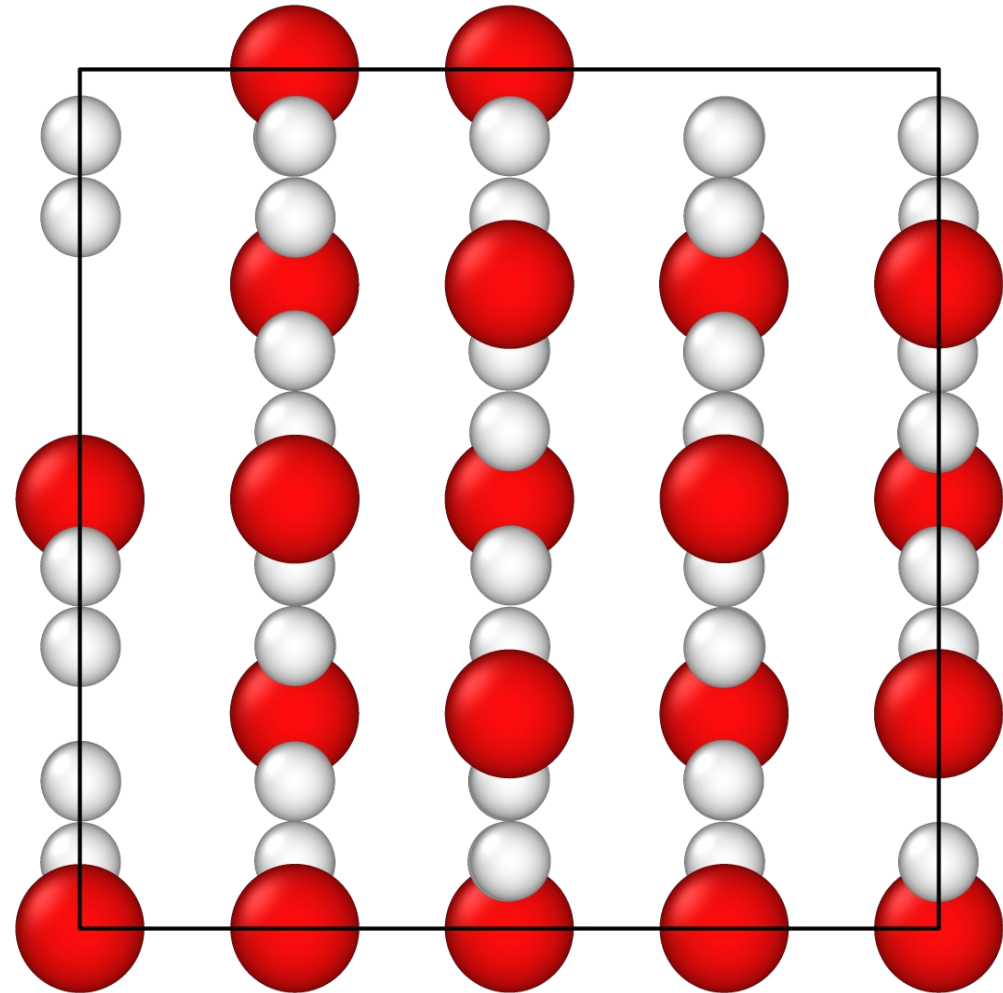


# Calculadora do VASP

```
calc_aimd = Vasp(  
    directory='aimd_32h2o_300K_5ps',  
    xc='PBE',  
    encut=450,  
    ismear=0, sigma=0.05,          # Gaussian smearing  
    prec = 'Normal',              # Normal precision  
    algo = 'Fast',                # Fast electronic minimization  
    ibrion=0,                      # Molecular Dynamics  
    isym=0,                       # Symmetry off (strongly recommended for MD)  
    potim=0.5,                    # timestep 0.5 fs  
    nsw=10000, isif=2,            # Number of MD steps  
    mdalgo=4, setups='recommended', # Nosé-Hoover-Chain thermostat  
    istart=0, lreal = 'Auto', lwave=False, lcharg=False,  
    tebeg=300, teend=300,         # Start and Final temperature (300 K)  
    ivdw=12,                      # D3(BJ) van der Waals correction  
    atoms=atoms  
)
```

# Condição Inicial

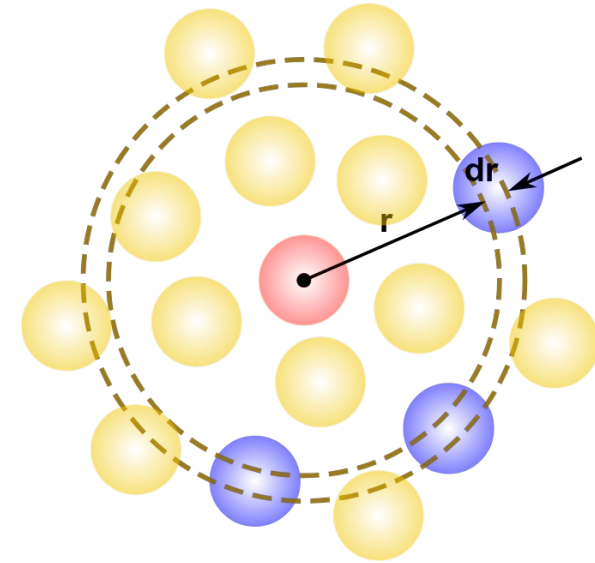
- **Condição Inicial:** 32 H<sub>2</sub>O (FCC)
- **Temperatura:** 300K
- **Densidade:**  $\sim 1\text{g/cm}^3$
- **Caixa:** 9.86 Angstroms



# Função de Distribuição Radial

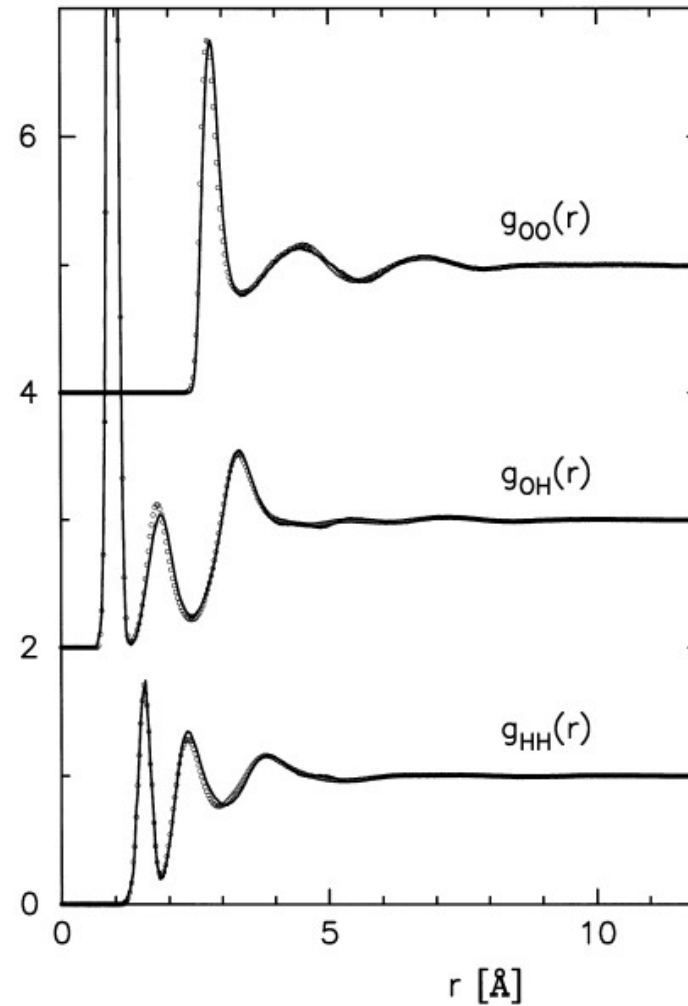
Em uma simulação molecular (MD ou Monte Carlo), o cálculo numérico é feito por histograma:

- Escolhe um intervalo de distâncias  $[0, r_{\max}]$ , dividido em pequenos incrementos  $\Delta r$
- Para cada configuração (frame) da simulação:
  - calcula todas as distâncias entre pares de partículas  $r_{ij}$  usando condições periódicas de contorno (PBC);
  - incrementa o histograma no bin correspondente a  $r_{ij}$
- Normaliza o histograma dividindo:
  - Pela densidade média de pares  $\rho_{\text{pares}}$
  - pelo volume da casca esférica  $4\pi r^2 dr$ ,
  - e pelo número de configurações amostradas.  $N_{\text{frames}}$



$$g(r) = \frac{n_{\text{pares}}(r)}{N_{\text{frames}} \rho_{\text{pares}} 4\pi r^2 dr}$$

# Função de Distribuição Radial



Soper, A. K. (2000). The radial distribution functions of water and ice from 220 to 673 K and at pressures up to 400 MPa. *Chemical Physics*, 258(2-3), 121-137.