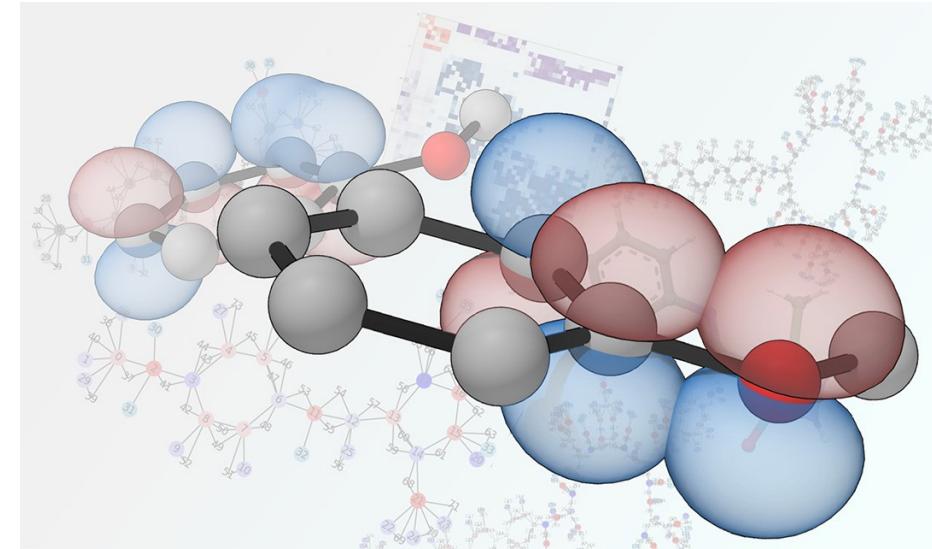


Aula 07 - AIMD para água

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

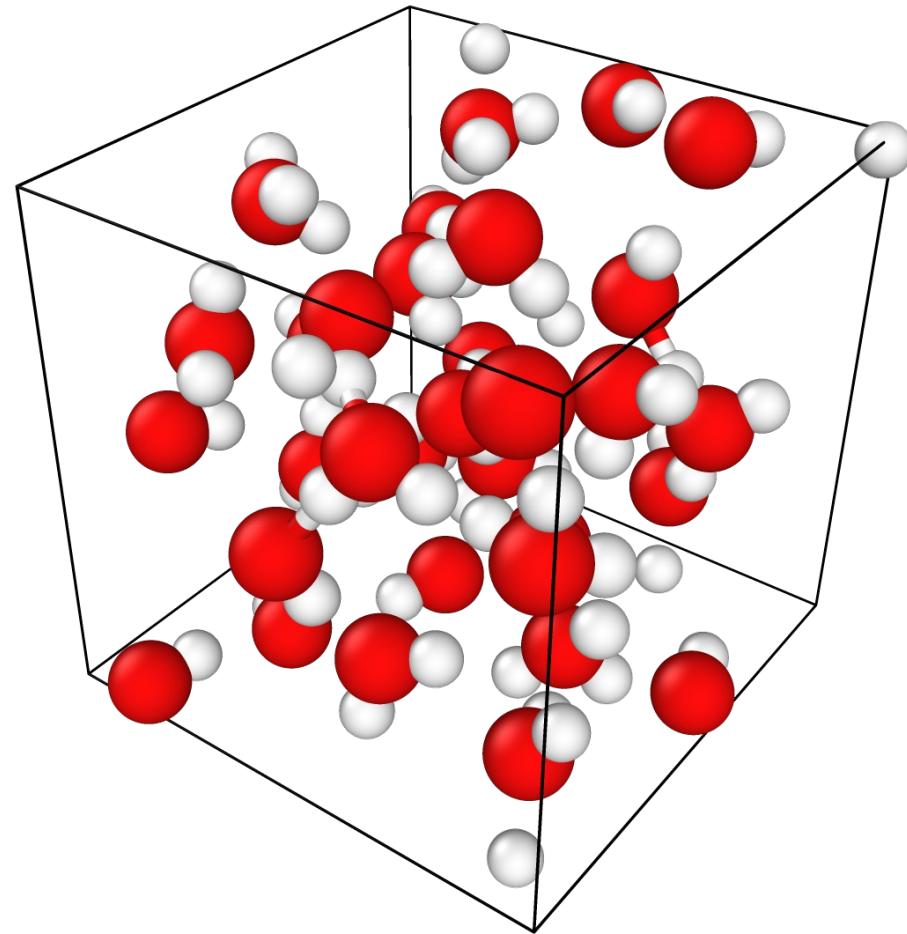


$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

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

AIMD-NVT para 32 H₂O

- **Condição Inicial:** 32 H₂O (FCC)
- **Funcional:** PBE
- **Pseudopotencial:** PAW
- **Amostragem:** Γ -point
- **Temperatura:** 300K
- **Passo de tempo:** 0,5 fs
- **Trajetória:** 10.000 passos

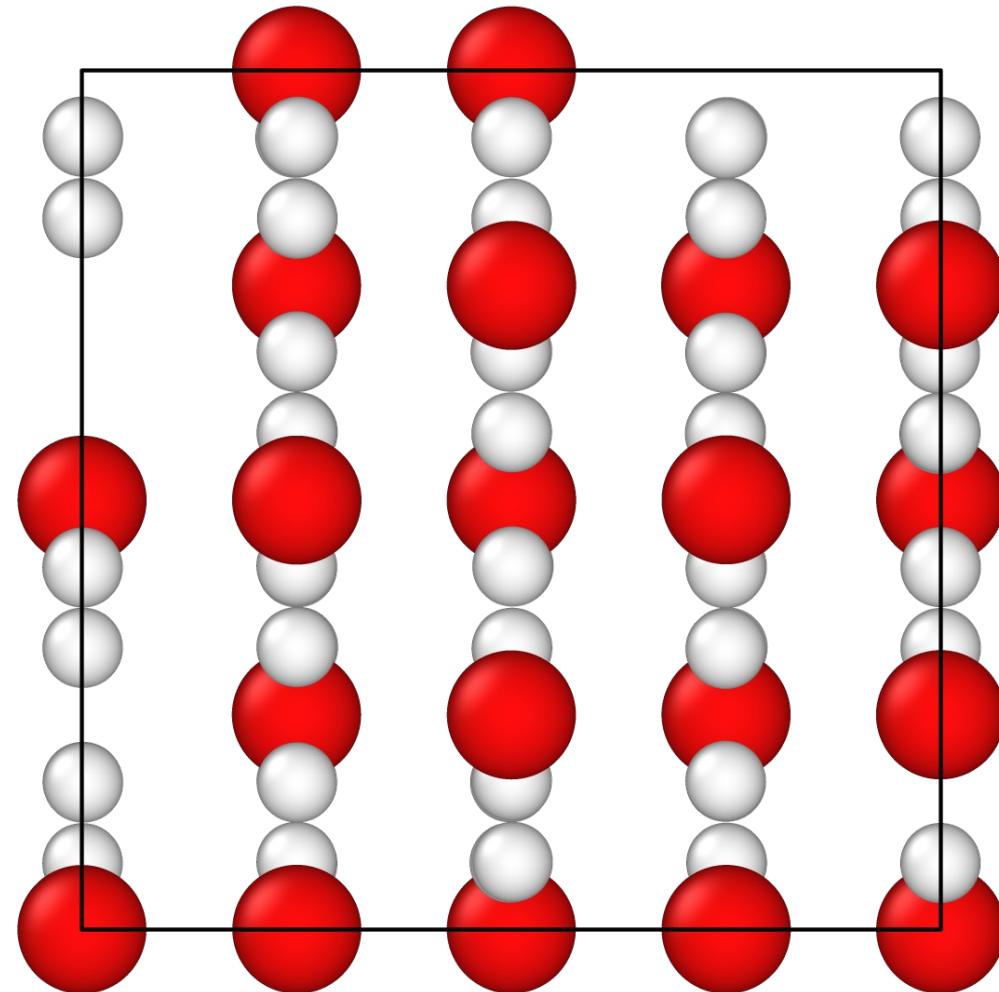


Calculadora do VASP

```
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

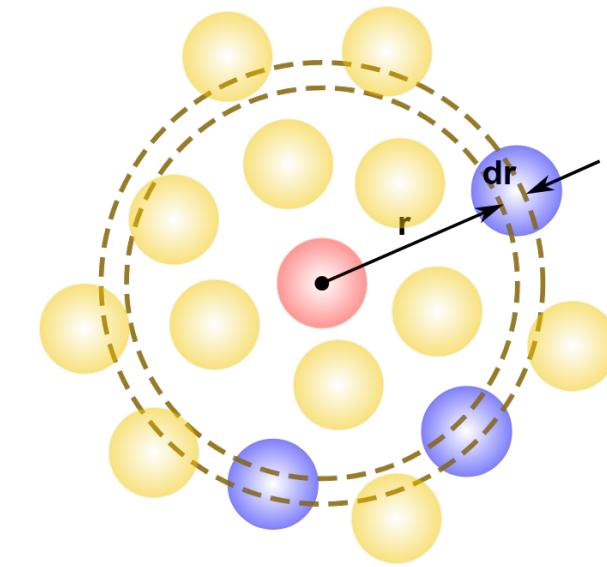
- **Condição Inicial:** 32 H₂O (FCC)
- **Temperatura:** 300K
- **Densidade:** ~1g/cm³
- **Caixa:** 9.86 Angstroms



Função de Distribuição Radial

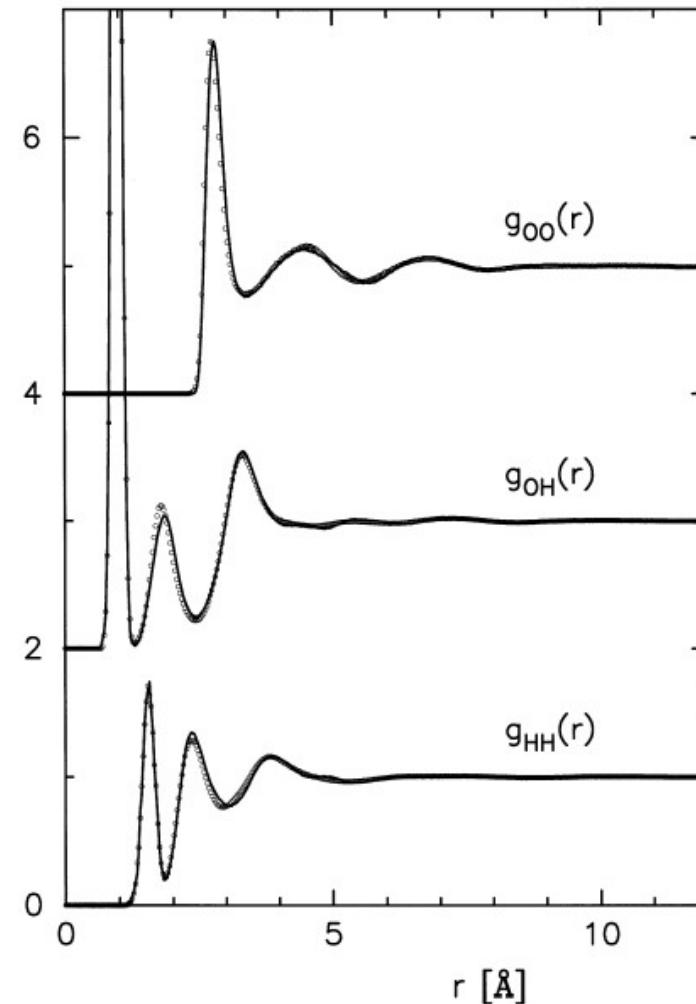
Em uma simulação molecular (MD ou Monte Carlo), o cálculo numérico é feito por histograma:

- Escolhe um intervalo de distâncias $[0, r_{\max}]$, dividido em pequenos incrementos Δr
- 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 ρ_{pares}
 - pelo volume da casca esférica $4\pi r^2 dr$,
 - e pelo número de configurações amostradas. N_{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.