

Simulação Atomística

Prof. James Moraes de Almeida



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



Apresentação do Curso

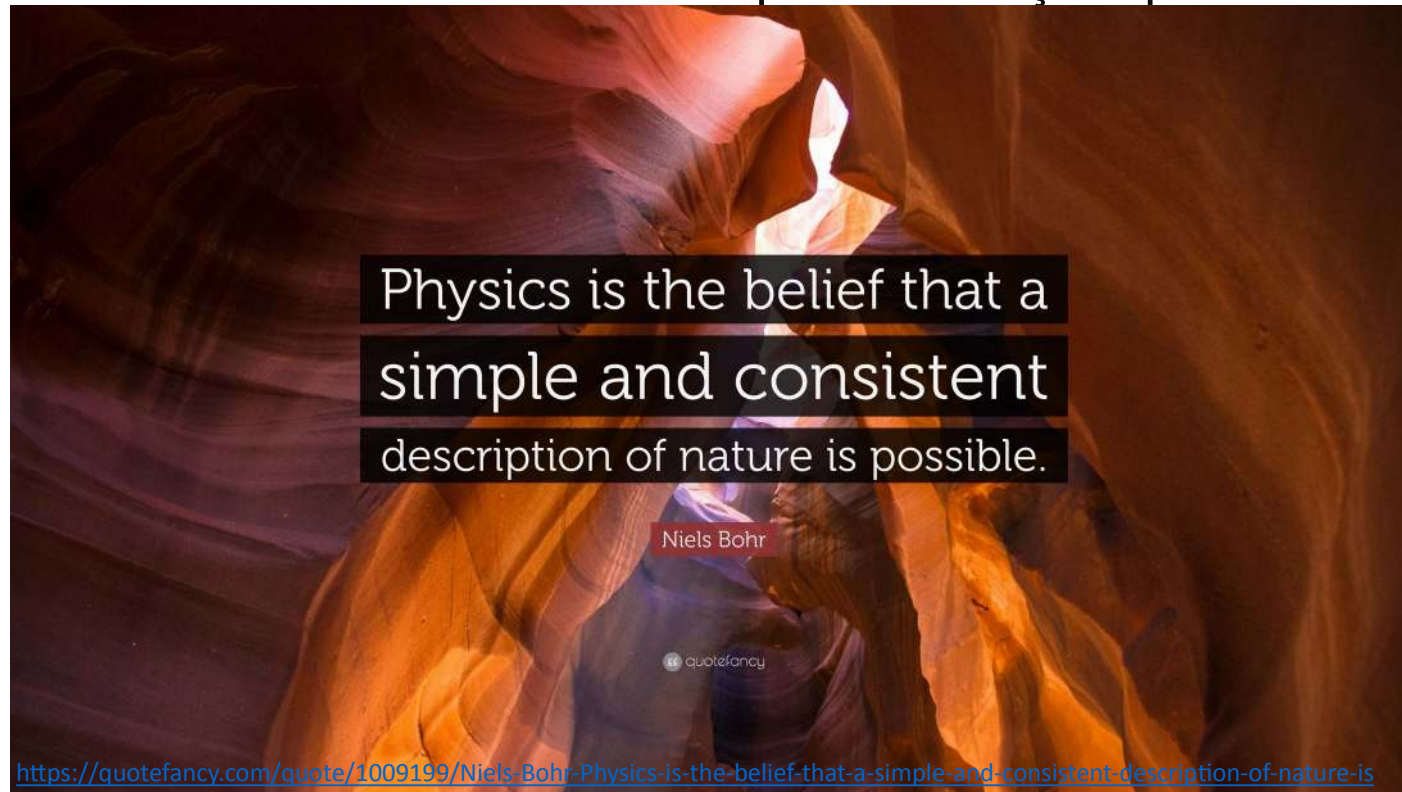
- Simulações atomísticas.
 - Simulações clássicas.
 - Simulações quânticas.

Apresentação do Curso

- Avaliação somativa:
 - Tarefas passadas em aula.
 - Desenvolvimento de projetos.
 - Entregas individuais.
 - Poderão ser avaliações orais, pedido de entrega de resultados parciais ou totais.
- Avaliação formativa:
 - Engajamento nas aulas.
 - Fazer atividades alheias a disciplina pesa negativamente.
 - Progresso na disciplina (derivada positiva ou negativa?).
 - Perguntas (boas) para mim ou para o monitor.
 - Pode ser fora de aula.

Modelos

- Porque estudamos física?
 - Para descrever a natureza!
 - A matemática é a ferramenta para descrição quantitativa.



Modelos

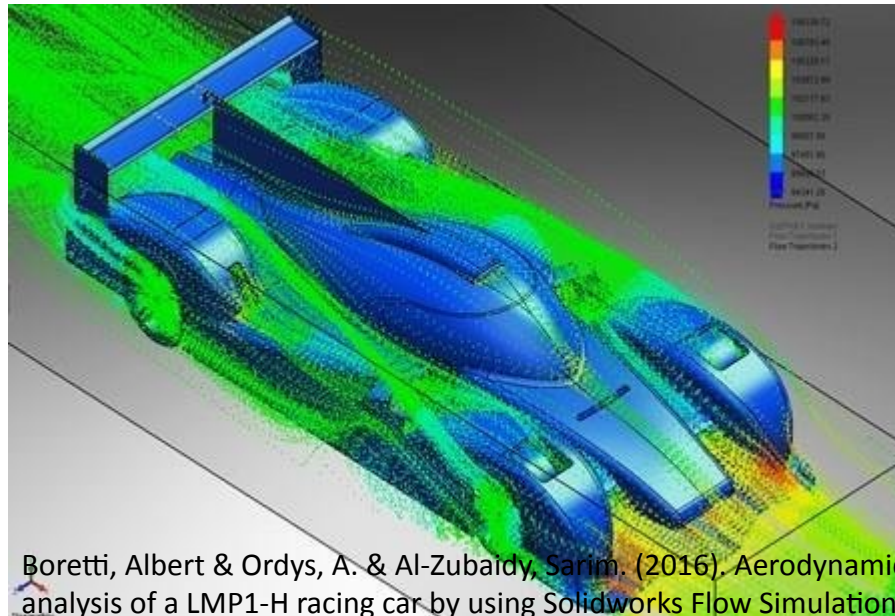
- Como estudamos física?
 - Criar um modelo do problema.
 - O mais simples o possível!



<https://3dexport.com/3dmodel-low-polygon-pine-trees-84175.htm>

Modelos

- Como estudamos física?
 - Criar um modelo do problema.
 - O mais simples o possível!
 - Carro > Partícula.
 - Não podemos simplificar demais!

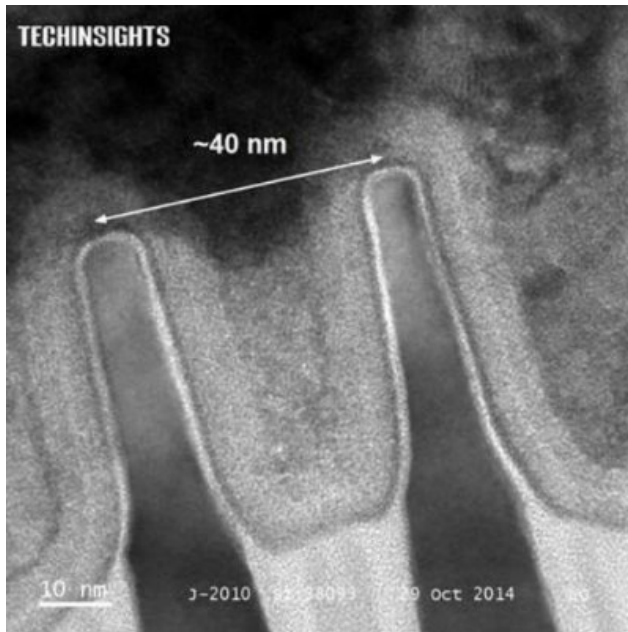
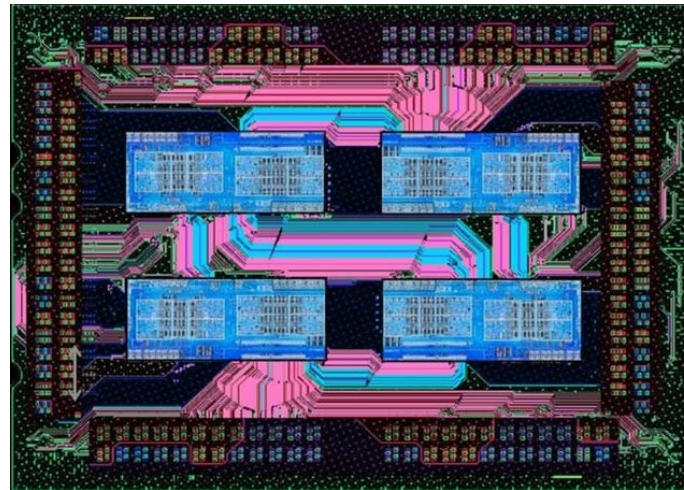


Modelos

- Como estudamos física?
 - Criar um modelo do problema.
 - Descrever o modelo de forma matemática.
 - Existe uma equação que descreva seu movimento?
 - Qual a sua estrutura?
 - Alguém já resolveu um problema semelhante?

Modelos

- Como estudamos física?
 - Criar um modelo do problema.
 - Descrever o modelo de forma matemática.
 - Podemos chegar a resultados fantásticos!



O que é a física?

- Como estudamos física?
 - Criar um modelo do problema.
 - Descrever o modelo de forma matemática.
 - Podemos chegar a resultados fantásticos!
 - Ou não!



Your PC ran into a problem and needs to restart. We're just collecting some error info, and then we'll restart for you.

20% complete



For more information about this issue and possible fixes, visit <https://www.windows.com/stopcode>.

If you call a support person, give them this info:
Stop code: CRITICAL_PROCESS_DIED

A problem has been detected and Windows has been shut down to prevent damage to your computer.

DRIVER_IRQL_NOT_LESS_THAN_OR_EQUAL_TO

If this is the first time you've seen this Stop error screen, restart your computer. If this screen appears again, follow these steps.

Check to make sure any new hardware or software is properly installed. If this is a new installation, ask your hardware or software manufacturer for any Windows updates you might need.

If problems continue, disable or remove any newly installed hardware or software. Disable BIOS memory options such as caching or shadowing. If you need to use Safe Mode to remove or disable components, restart your computer, press F8 to select Advanced Startup options, and then select Safe Mode.

Technical information:

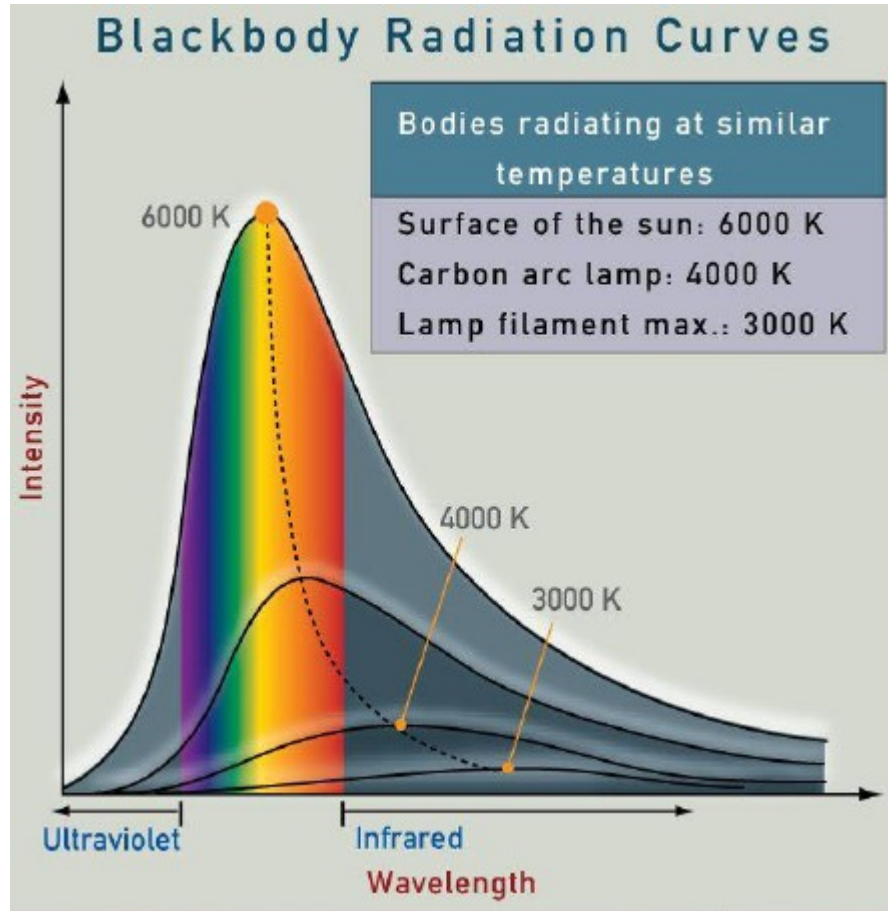
*** STOP: 0x000000D1 (0x00000000, 0x00000000)

```
[ 0.552962] CPU: 3 PID: 1 Conn: swapper/0 Not tainted 4.8.0-44-generic #47~16
.04.1-Ubuntu
[ 0.553012] Hardware name: TOSHIBA Satellite C640/Portable PC, BIOS 2.10 11/0
9/2011
[ 0.553080] 0000000000000000 0000000000000000 ffff9575f4473df ffffffff8a2e
073
[ 0.553280] ffff9575f4473df ffff9575f4473df ffff9575f4473df ffff9575f4473df
6ad
[ 0.553340] ffff9575f4473df ffff9575f4473df ffff9575f4473df ffff9575f4473df
541
[ 0.553482] Call trace:
[ 0.553519] [<ffffffffff8a2e073>] dump_stack+0x63/0x98
[ 0.553562] [<ffffffffff8a2e073>] panic+0xe4/0x226
[ 0.553606] [<ffffffffff8a2e073>] mount_block_root+0x1fb/0x2c2
[ 0.553647] [<ffffffffff8a2e073>] mount_root+0x33/0x35
[ 0.553688] [<ffffffffff8a2e073>] prepare_namespace+0x13e/0x18f
[ 0.553731] [<ffffffffff8a2e073>] kernel_init+0x1b/0x217
[ 0.553775] [<ffffffffff8a2e073>] kernel_init+0x1b/0x217
[ 0.553817] [<ffffffffff8a2e073>] ret_from_fork+0x1b/0x217
[ 0.553858] [<ffffffffff8a2e073>] ? ret_from_fork+0x1b/0x217
[ 0.553932] Kernel Offset: 0x00000000-0xffffffff (relocation ran
ge: 0xffffffff80000000-0xffffffffffffffff)
[ 0.553991] ---[ end Kernel panic - not syncing: VFS: Unable to mount root fs
on unknown-block(0,0)
-
```

Kernel
Panic

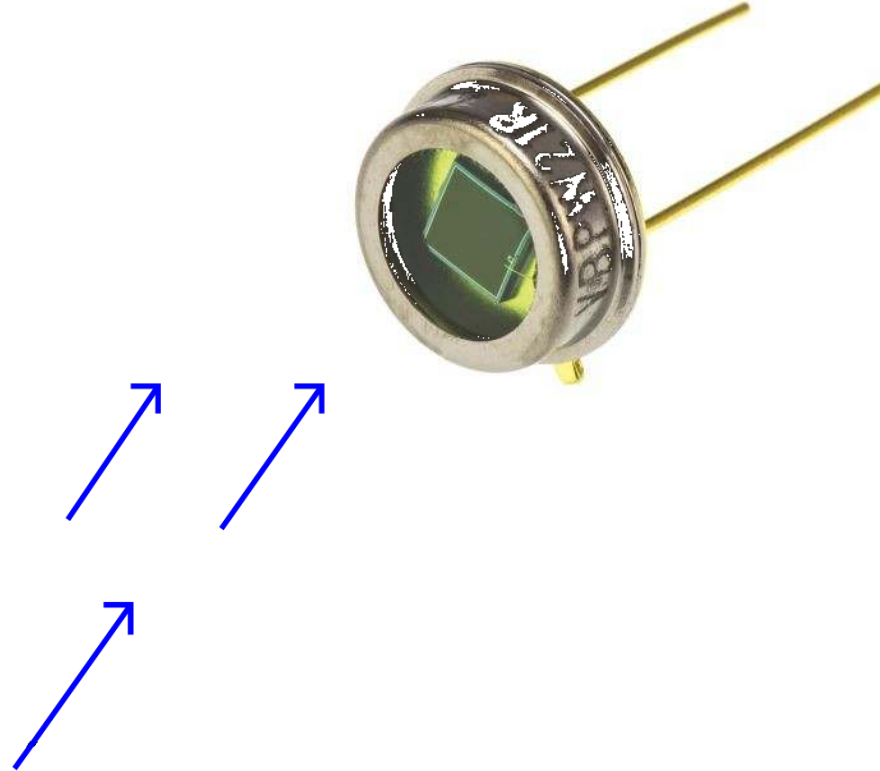
Mecânica Quântica

- Aprenderemos aplicações da mecânica quântica.



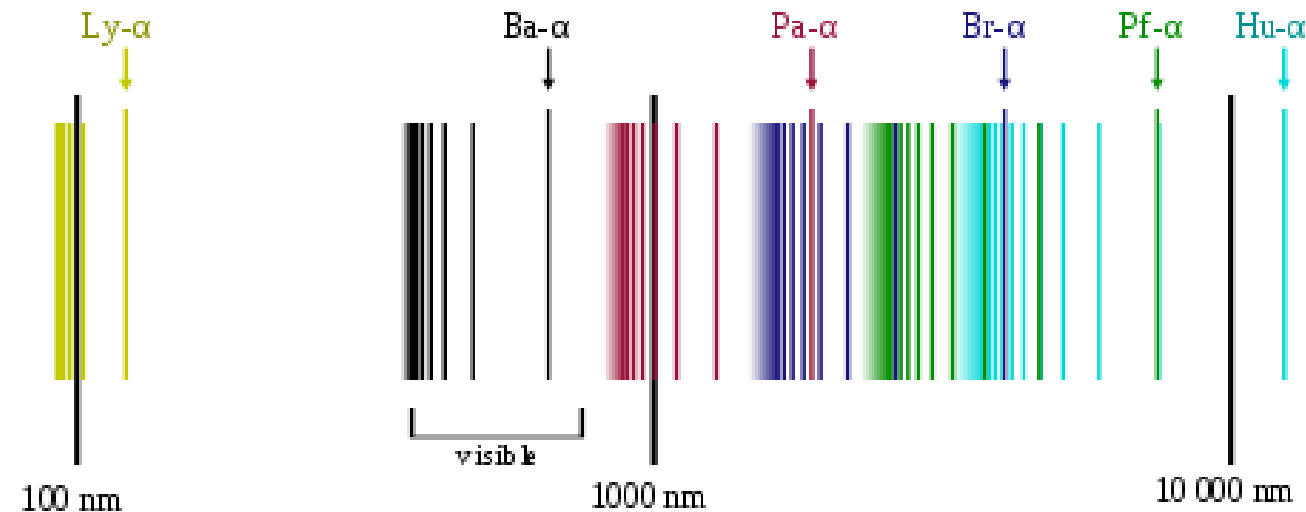
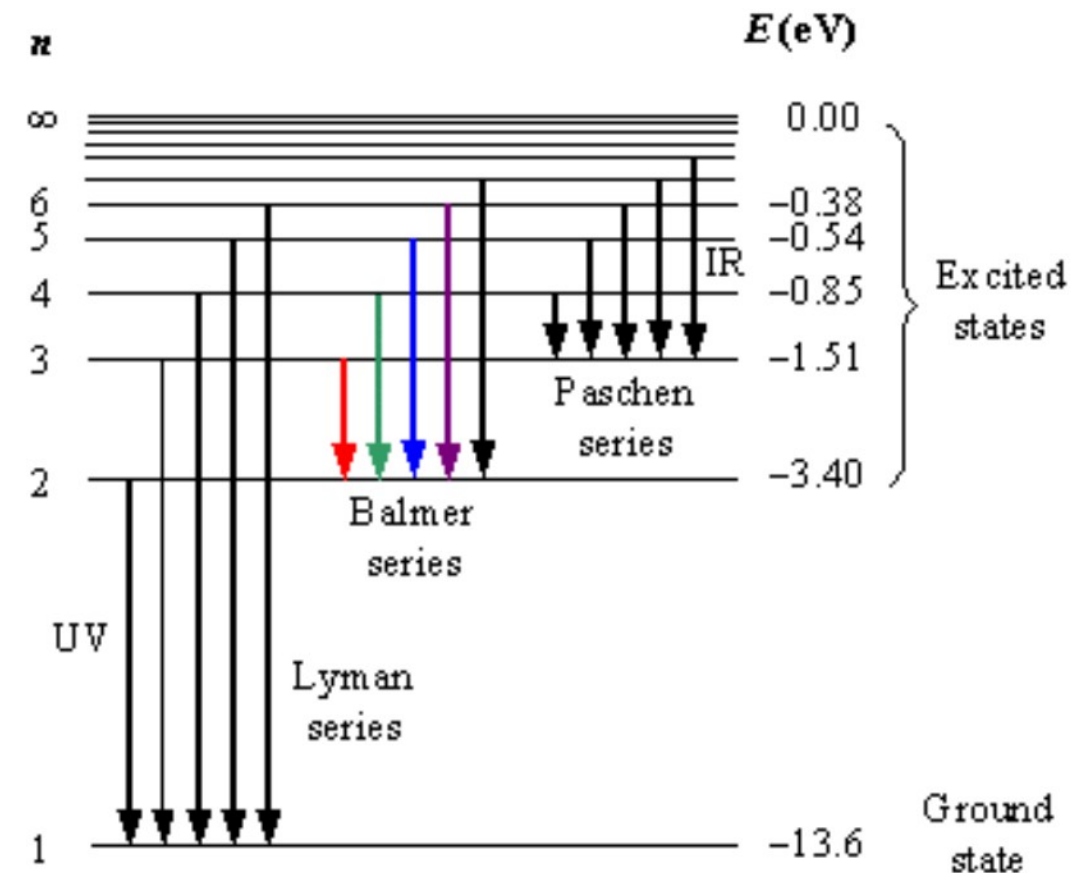
Mecânica Quântica

- Aprenderemos aplicações da mecânica quântica.



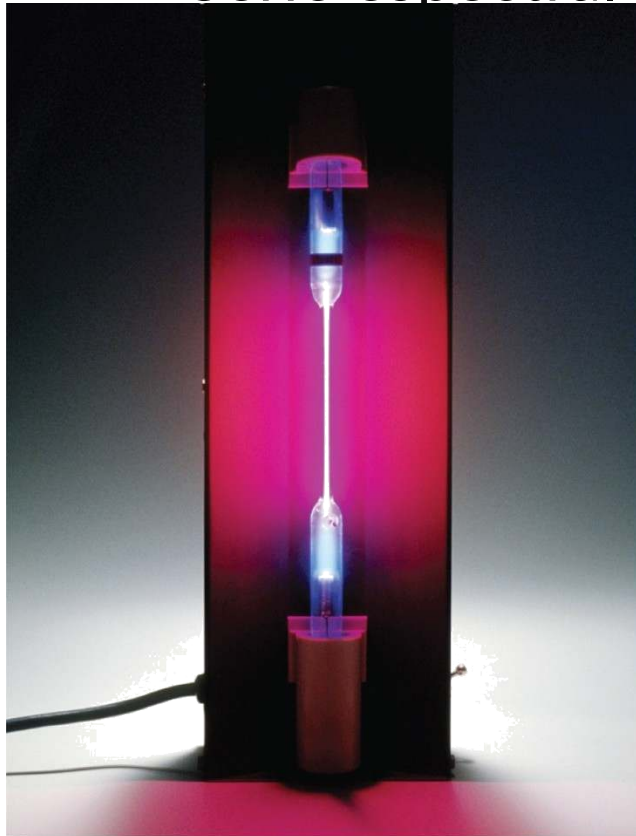
Quantização da Energia

- Níveis de energia de um átomo de hidrogênio.
 - Série espectral do hidrogênio:

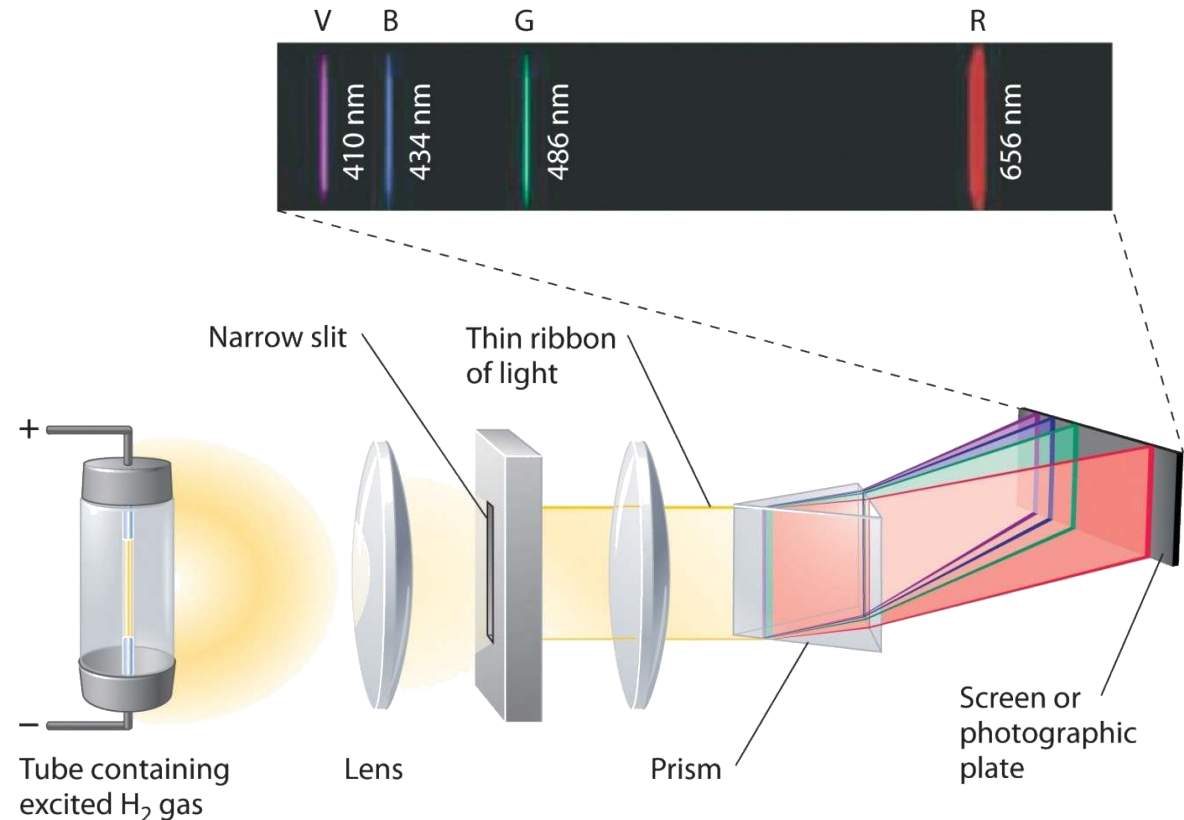


Quantização da Energia

- Níveis de energia de um átomo de hidrogênio.
- Série espectral do hidrogênio:



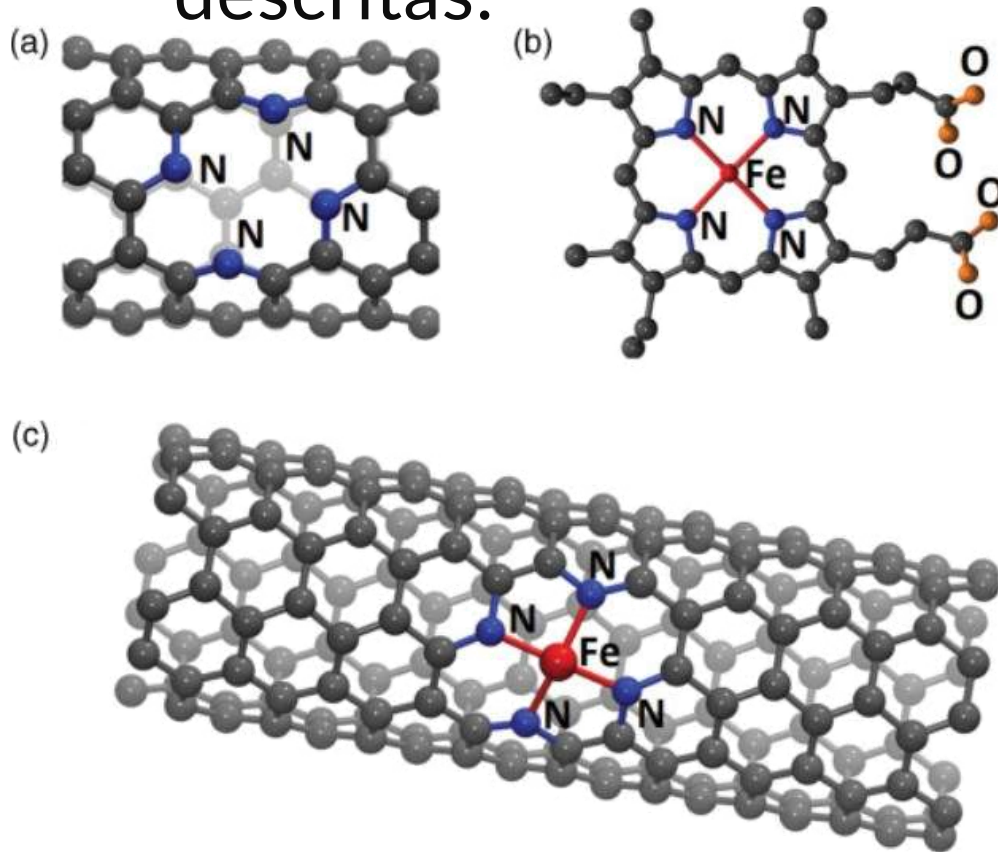
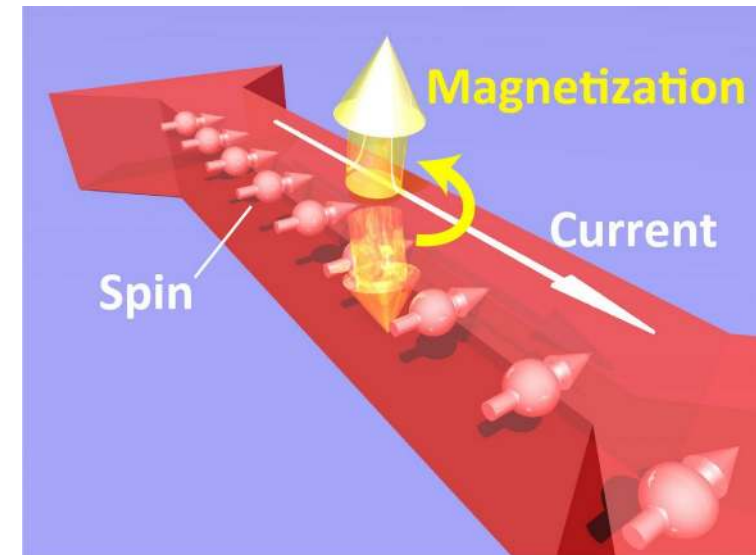
(a)



(b)

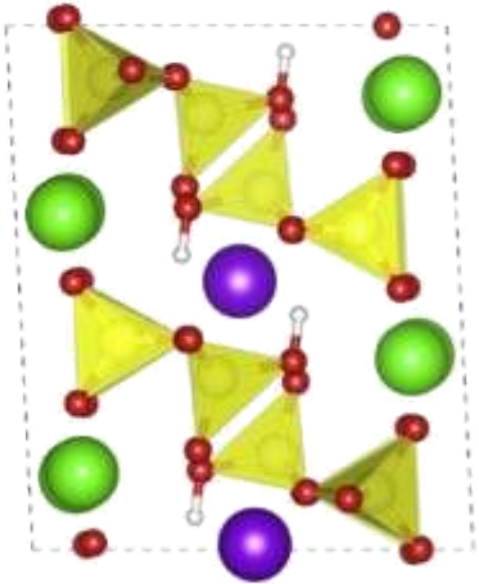
Ligações Químicas

- Interações entre átomos também podem ser descritas:



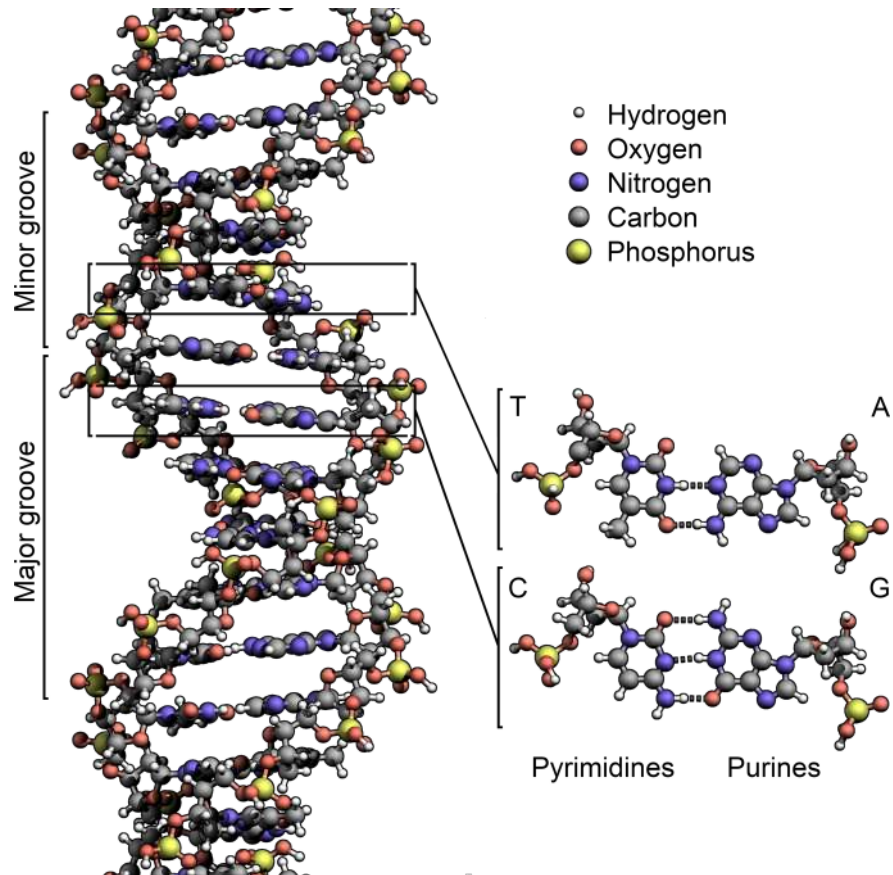
Ligações Químicas

- A matéria pode ser explicada a partir dos átomos:

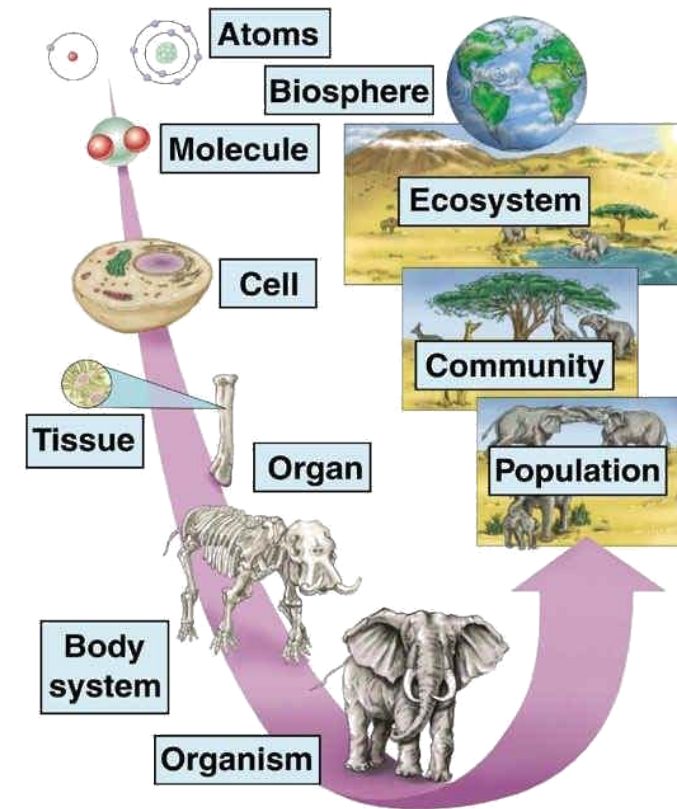


Ligações Químicas

- Organismos são máquinas químicas:

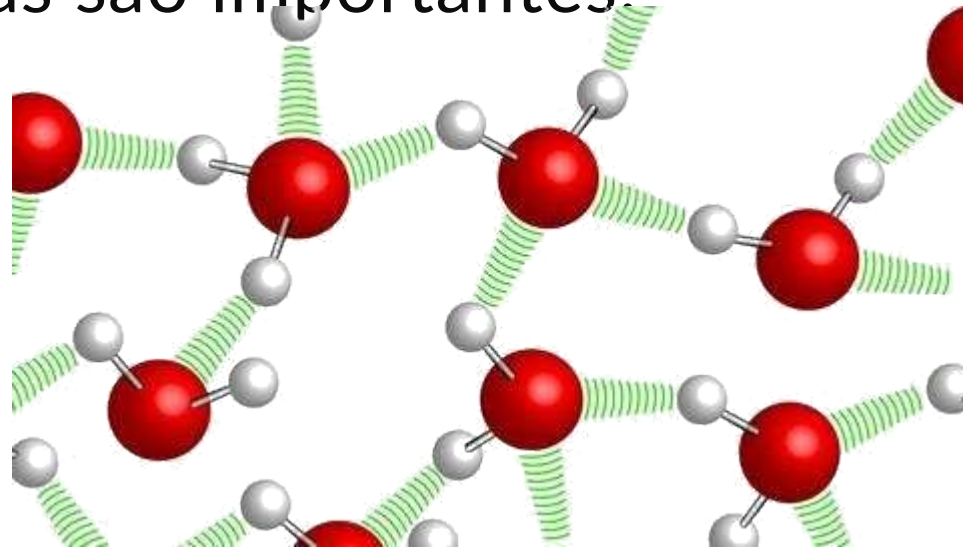


Raven/Berg, Environment, 3/e
Figure 4.1



Interações intermoleculares

- Mesmo interações fracas são importantes:
 - Ligações de hidrogênio.

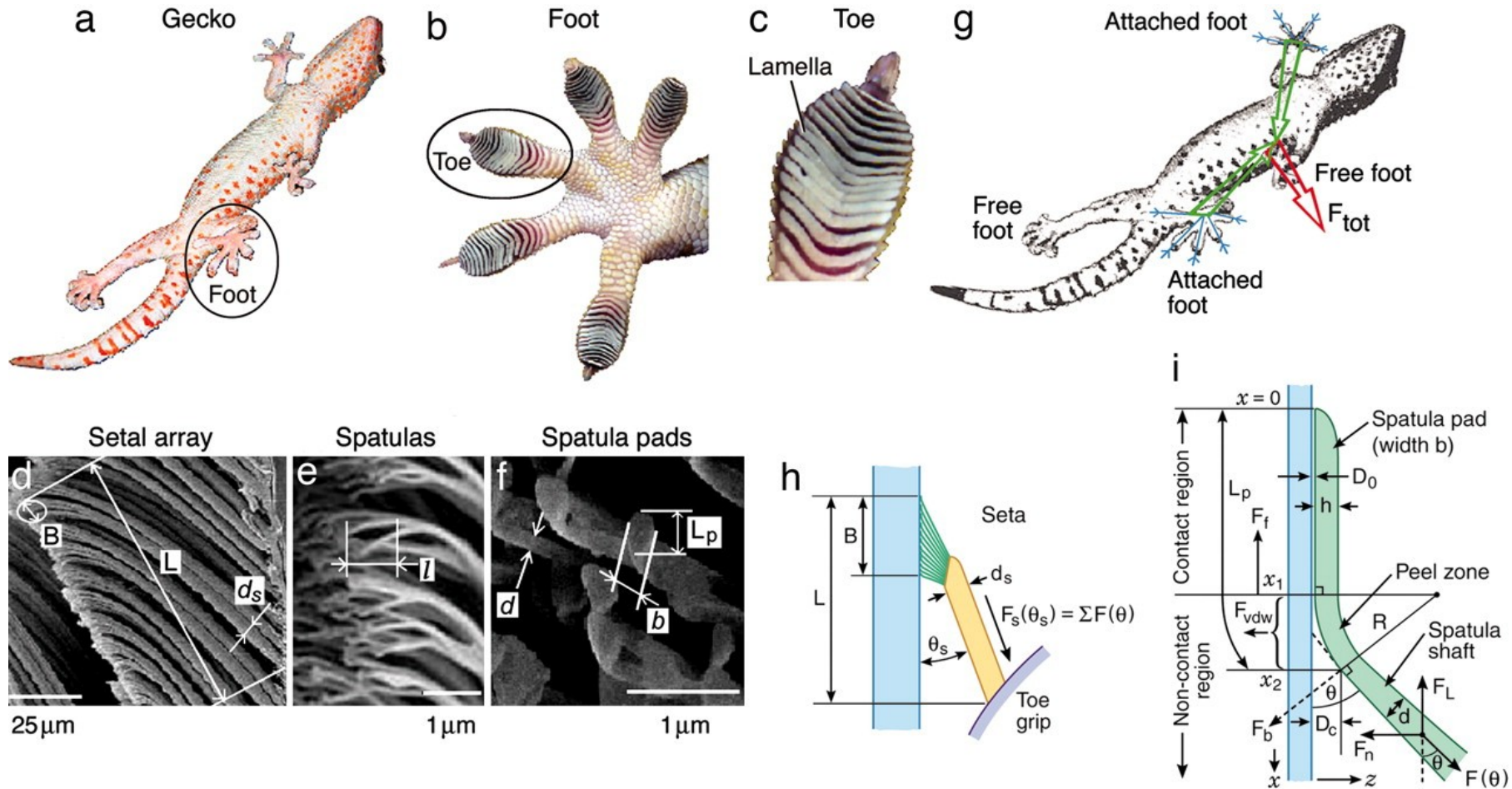


Energia da ligação de hidrogênio	Consequência
Não existencia das ligações de hidrogênio	Não existiria vida
Ligações de hidrogênio pouco mais fracas	Vida a temperaturas mais baixas
Como conhecemos	Vida como conhecemos
Ligações de hidrogênio pouco mais fortes	Vida a temperaturas mais altas
Ligações de hidrogênio muito mais fortes	Não existiria vida

Interações intermoleculares

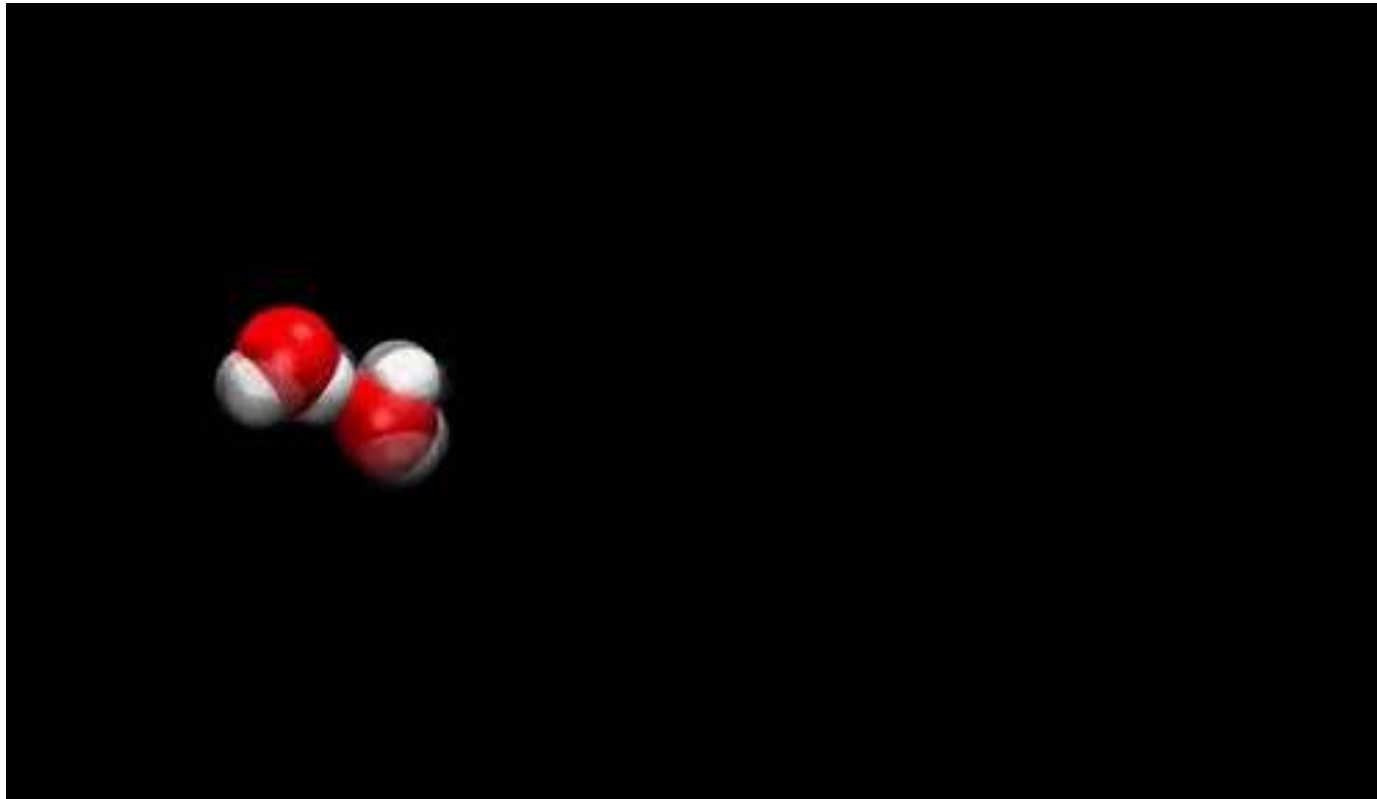
- Mesmo interações fracas são importantes:

- Van der Waals:



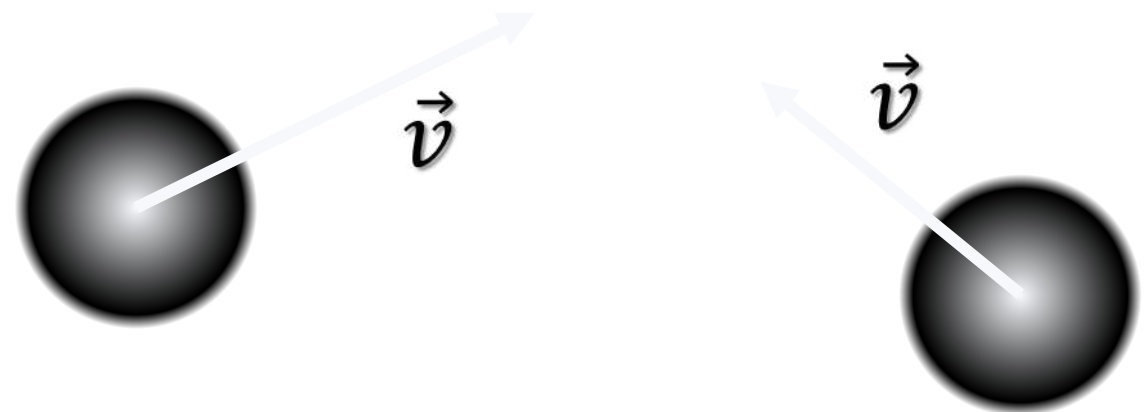
Dinâmica Molecular

- O que é a dinâmica molecular?
 - Obviamente, trata da dinâmica das moléculas.



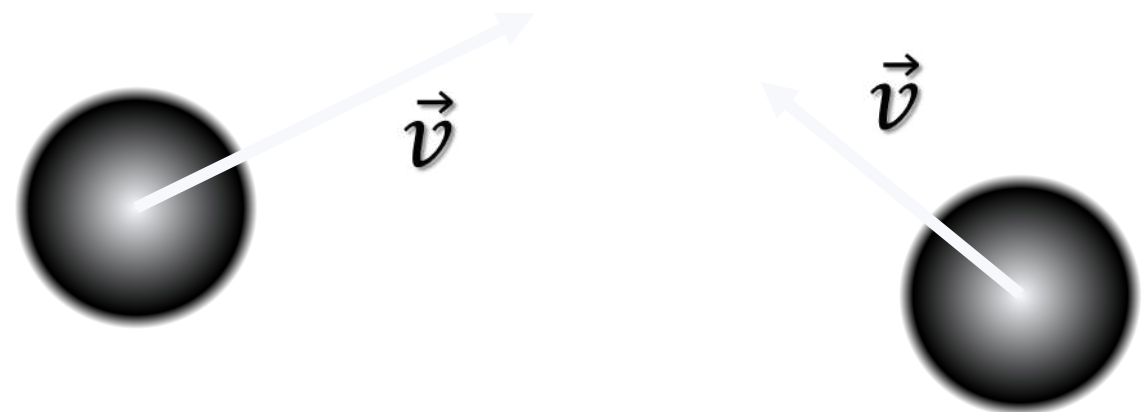
Dinâmica Molecular

- O que é a dinâmica molecular?
 - Obviamente, trata da dinâmica das moléculas.
 - Precisa descrever a interação entre os átomos.
 - Caso simples, colisão de duas partículas não interagentes.
 - Só é necessário descrever a colisão entre as duas partículas.



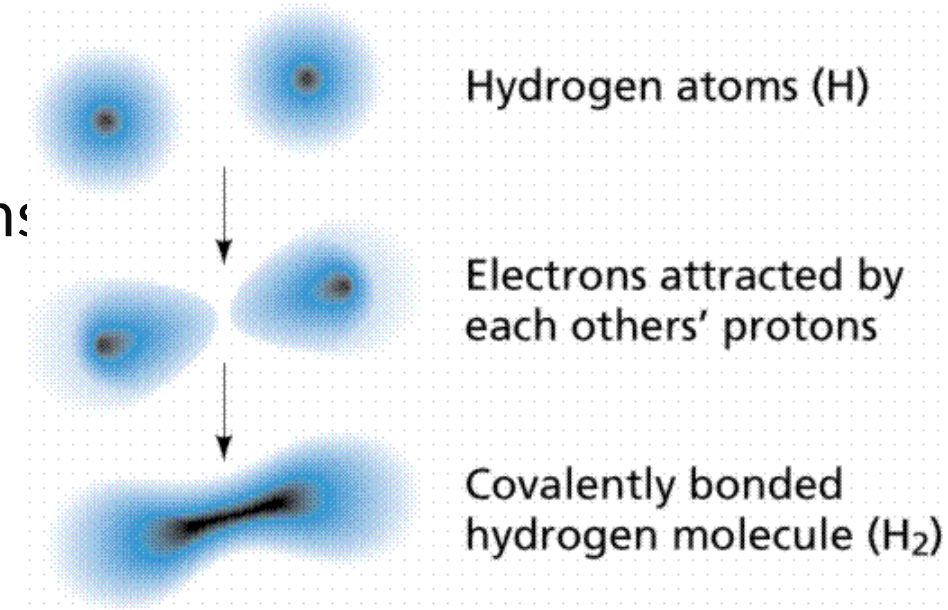
Dinâmica Molecular

- O que é a dinâmica molecular?
 - Obviamente, trata da dinâmica das moléculas.
 - Precisa descrever a interação entre os átomos.
 - Conservação de momento.
 - Conservação de energia (colisões elásticas).



Dinâmica Molecular

- Mas e se as partículas interagem?
 - Haverá uma força atraindo ou repelindo as partículas.
 - Como tal força é obtida?
 - Qual a interação entre dois átomos.
 - Somente a mecânica quântica descreve elétrons
 - Cálculos quânticos são caros.
 - Podemos aproximar???



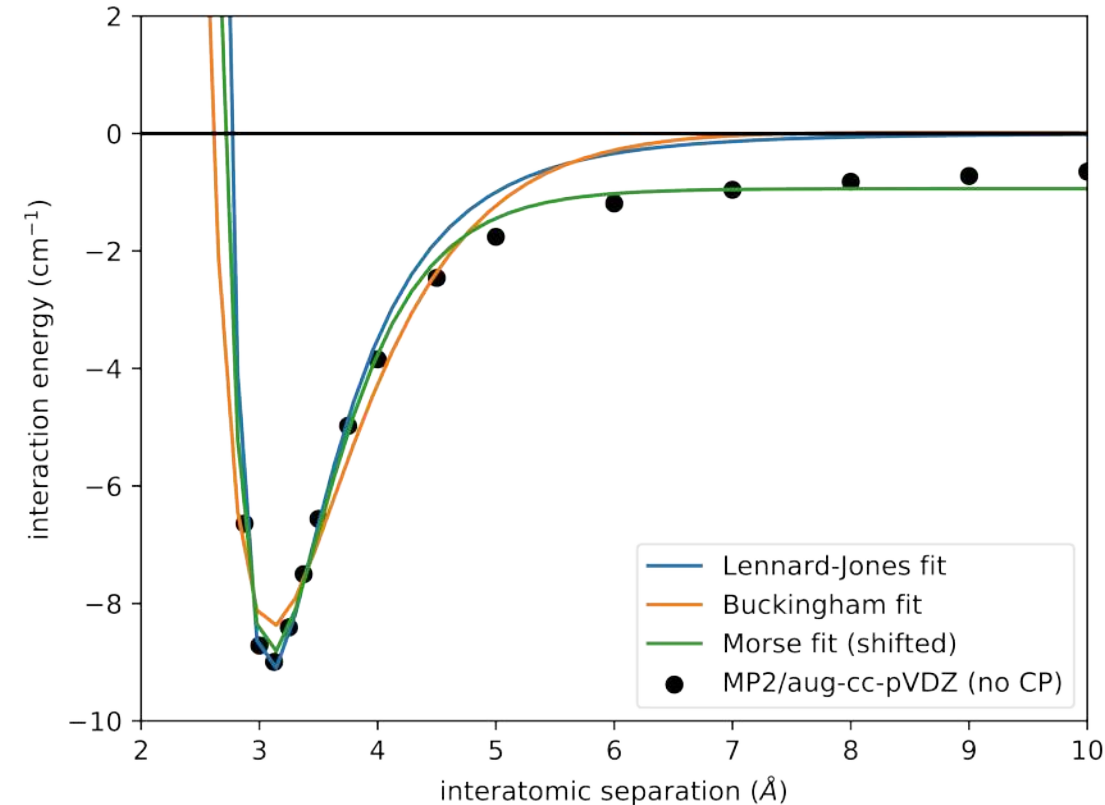
Dinâmica Molecular

- Vamos olhar para um gás nobre.
 - Não há ligações químicas para descrevermos.
 - As interações serão:
 - Repulsão núcleo-núcleo: $\propto e^{-Br}$
 - Pode ser aproximada para: $\propto \frac{1}{r^{12}}$
 - Interação de van der Waals: $\propto -\frac{1}{r^6}$

Dinâmica Molecular

- Funções podem ser propostas para descrever tal interação:

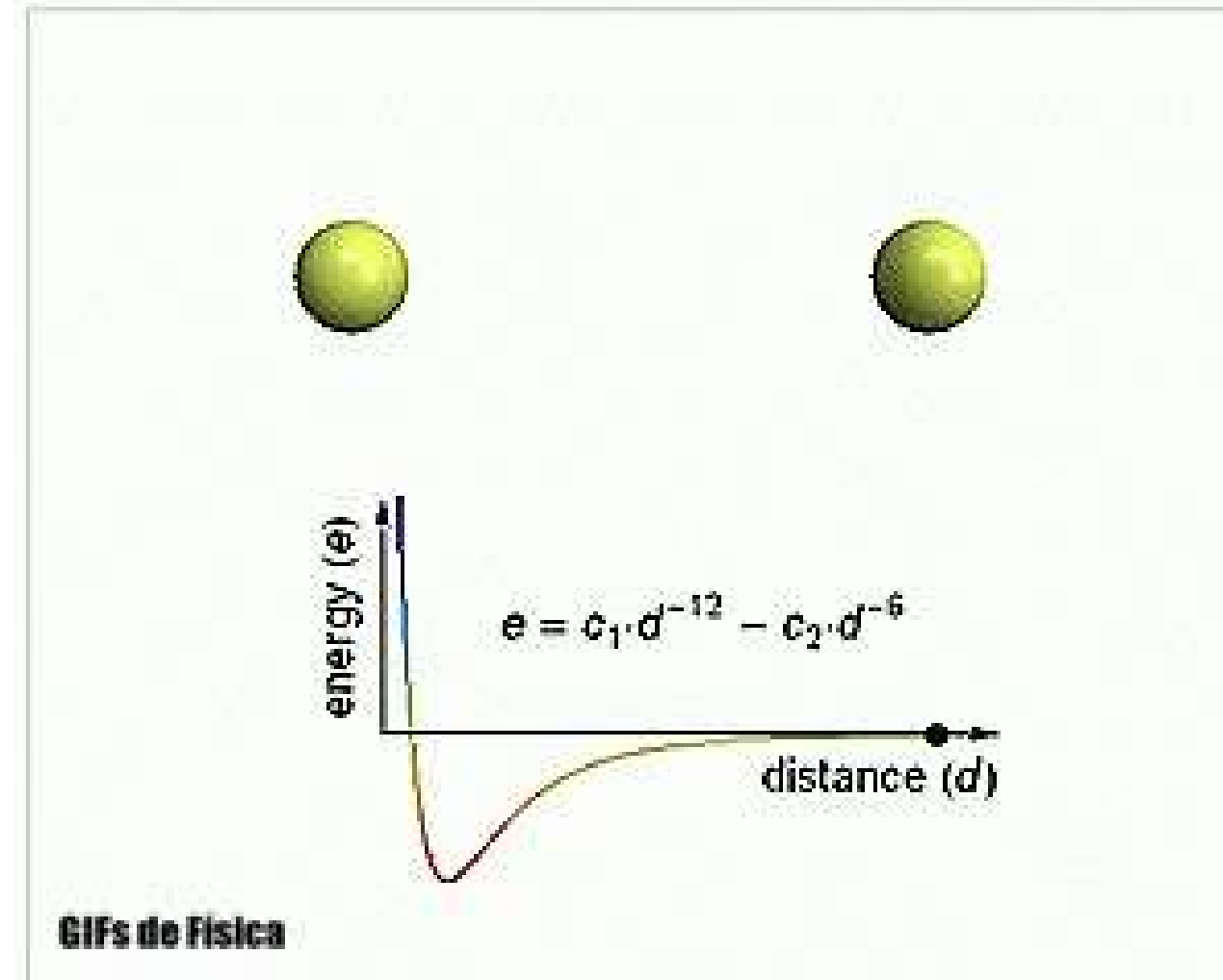
- Buckingham: $V_{Buck} = Ae^{-Br} - \frac{C}{r^6}$
- Lennard-Jones: $V_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$
- Morse: $V_M = D_e (1 - e^{-a(r-r_e)})^2$



Dinâmica Molecular

- Vamos focar no potencial de Lennard-Jones.

- $$V_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

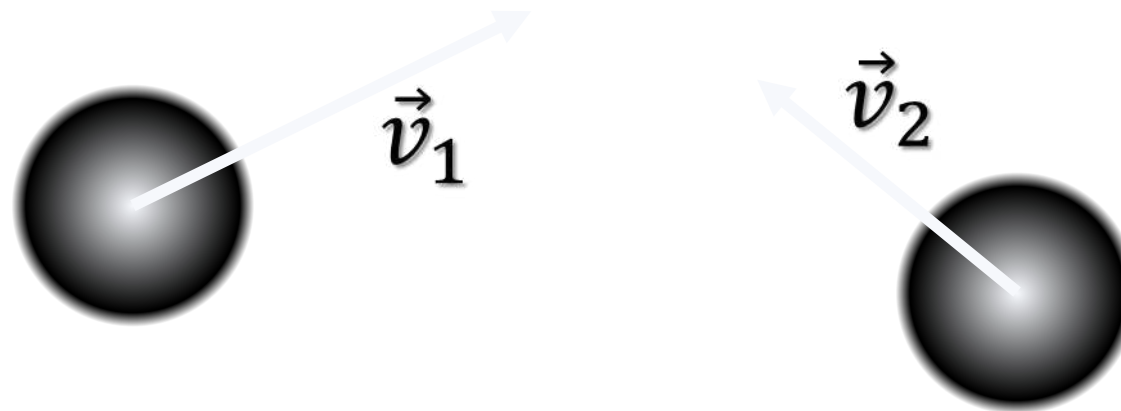


Dinâmica Molecular

- Vamos focar no potencial de Lennard-Jones.
 - $V_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$
 - Podemos determinar a força entre os átomos:
 - $\vec{F} = -\nabla V_{LJ}$
 - Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.

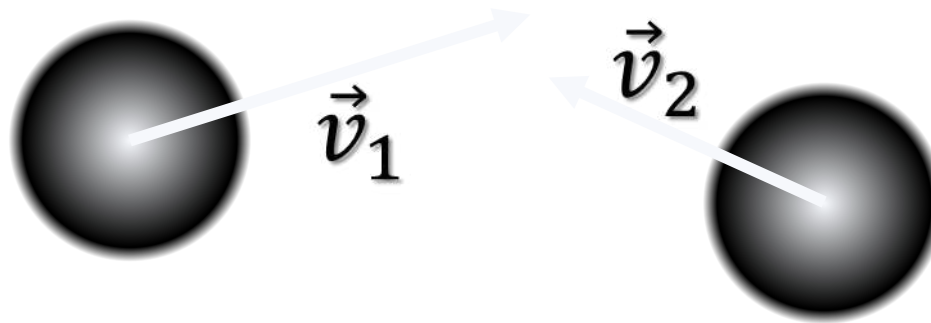
Dinâmica Molecular

- Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.
 - $t=0$



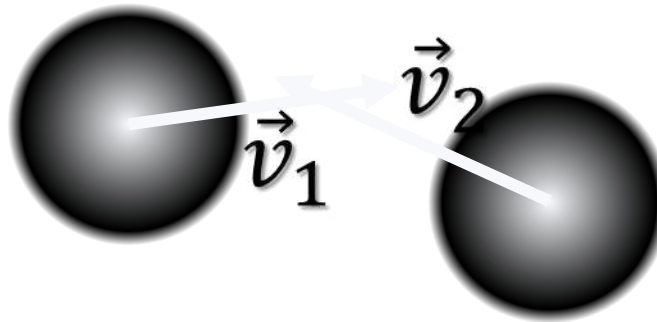
Dinâmica Molecular

- Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.
 - $t = 1 \text{ fs}$



Dinâmica Molecular

- Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.
 - $t=2$ fs



Dinâmica Molecular

- Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.
 - Mas como exatamente isso é feito?
 - $\vec{F} = m\vec{a}$
 - A aceleração é a taxa de variação da velocidade:
 - $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt}$
 - A velocidade é a taxa de variação da posição:
 - $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$

Dinâmica Molecular

- Com as forças, podemos determinar a posição das partículas em função do tempo.
 - Mas como exatamente isso é feito?
 - $\vec{F} = m\vec{a} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2}$
 - Então:
 - $m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = -\nabla V_{LJ}$
 - No entanto essa expressão não é conveniente de resolvermos numericamente.

Dinâmica Molecular

- O método de Verlet é um dos mais utilizados.
- Queremos determinar a posição em um tempo $t + \Delta t$:
 - $\vec{r}(t + \Delta t)$
 - Vamos escrever em uma expansão polinomial (série de Taylor):
 - $$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \frac{d\vec{x}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{x}(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + \dots$$
 - Também podemos expandir $\vec{r}(t - \Delta t)$:
 - $$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \frac{d\vec{x}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{x}(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + \dots$$

Dinâmica Molecular

- Integração de Verlet.

- Agora, temos essas duas expressões:

- $\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \frac{d\vec{x}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{x}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4)$

- $\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \frac{d\vec{x}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} \Delta t^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{x}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4)$

- Somando:

- $\vec{r}(t + \Delta t) + \vec{r}(t - \Delta t) = 2\vec{r}(t) + \frac{d^2\vec{x}(t)}{dt^2} \Delta t^2 + O(\Delta t^4)$

- $\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2$

Dinâmica Molecular

- Integração de Verlet.

- $\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2$

- Com $\vec{r}(t)$ e $\vec{r}(t - \Delta t)$, podemos determinar $\vec{r}(t + \Delta t)$.

- Mas, nós temos $\vec{r}(t - \Delta t)$?

- Obtemos assim:

- $\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\frac{d^3\vec{x}(t)}{dt^3}\Delta t^3 + O(\Delta t^4)$

- $\vec{r}(t - \Delta t) \approx \vec{r}(t) - \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2$

Dinâmica Molecular

- Agora vamos fazer a dinâmica molecular.
- Tutorial de WinSCP:
 - https://www.youtube.com/watch?v=2_rJNkslYjk
- Tutorial do Amber:
 - https://youtu.be/KJrVB4q_pII

OBRIGADO

James Moraes de Almeida

ilum.cnpem.br



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO

