

XXII SEMANA DA FÍSICA

08 a 14 de novembro

DA TERRA À LUA:

50 ANOS DE UM
SONHO

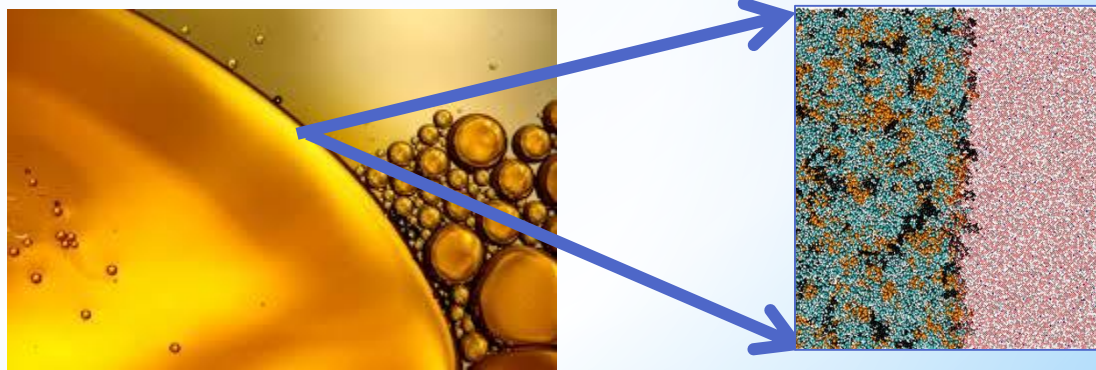
SCAN ME



<https://siseve.apps.uepg.br/semanafisica2019>

Minicurso de Dinâmica Molecular Clássica

Prof. Lucas Stori de Lara
lslara@uepg.br



Princípios de uma simulação clássica

1 - Como os objetos interagem:

$$F_i(r_{i,j}) = G \frac{m_i m_j}{r_{i,j}^2}$$



2 - Posições e velocidades iniciais: 23 de Agosto de 2013, 10h 12m 54s ...

3 - Integração das equações de movimento Newtonianas:

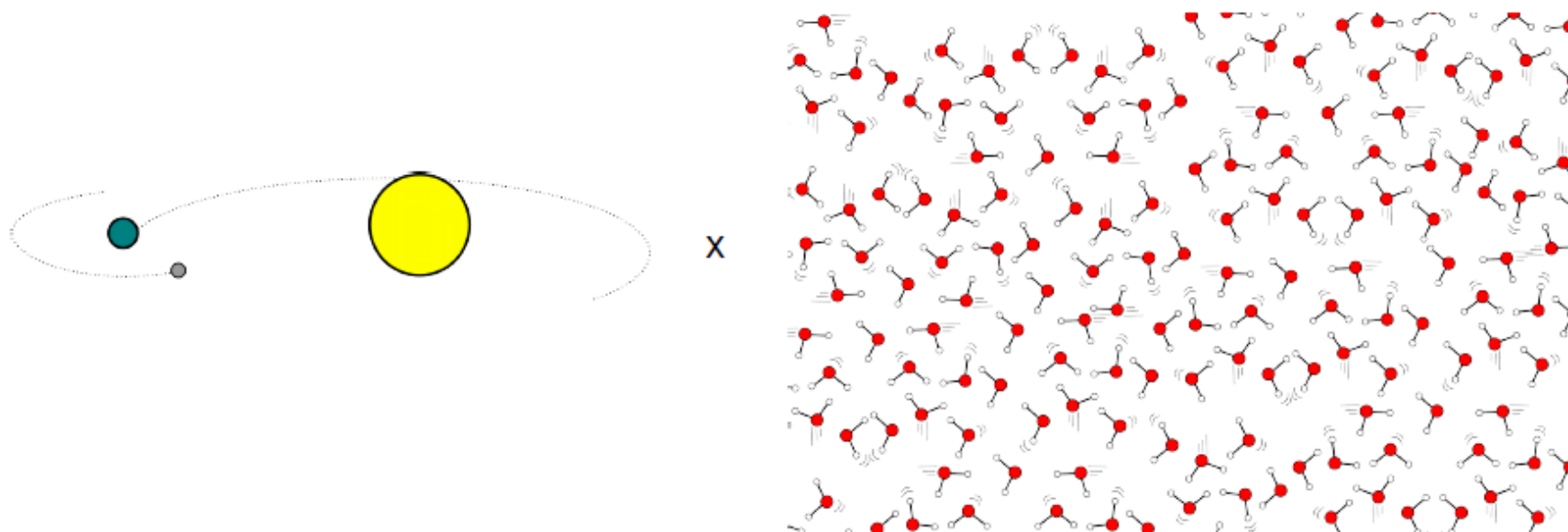
$$\vec{F}(t) = f(\vec{r})$$

$$\vec{a}(t) = \vec{F}(t)/m_i$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)\Delta t$$

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

Princípios de uma simulação: Sistema planetários vs. Sistema molecular



Força gravitacional $\longleftrightarrow$ Interações intra- e inter-moleculares

Trajetórias precisas $\longleftrightarrow$ Propriedades médias

Energia total $\longleftrightarrow$ Temperatura e pressão

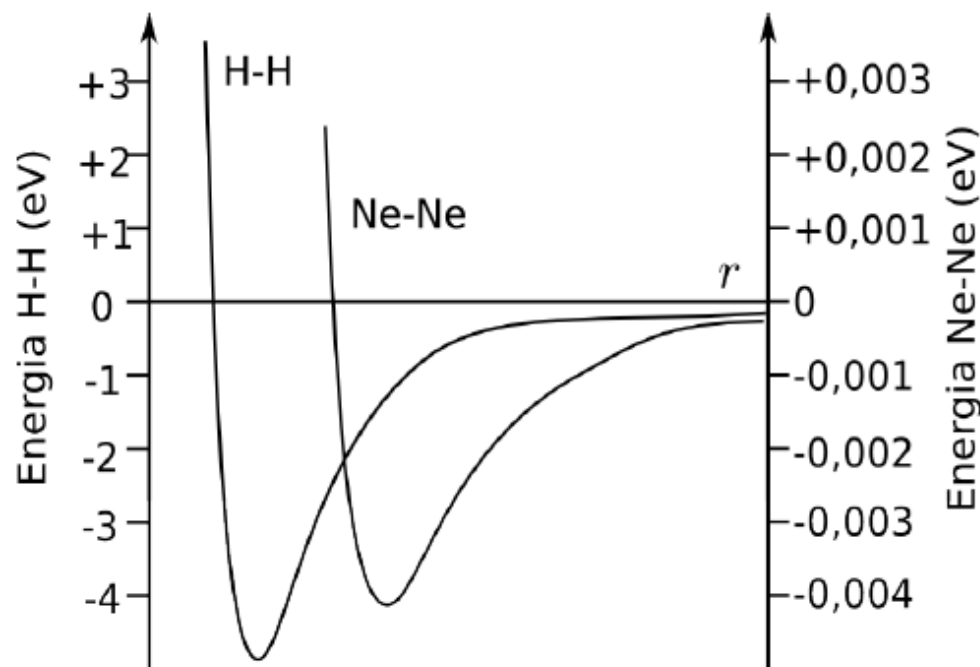
Dias, semanas, anos $\longleftrightarrow$ Nano-segundos

Quântico vs. Clássico

O mundo é quântico...

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Phi(\vec{x},t) + V(\vec{x},t)\Phi(\vec{x},t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\vec{x},t)$$

... mas não tanto assim ...



Boa aproximação para estas curvas:

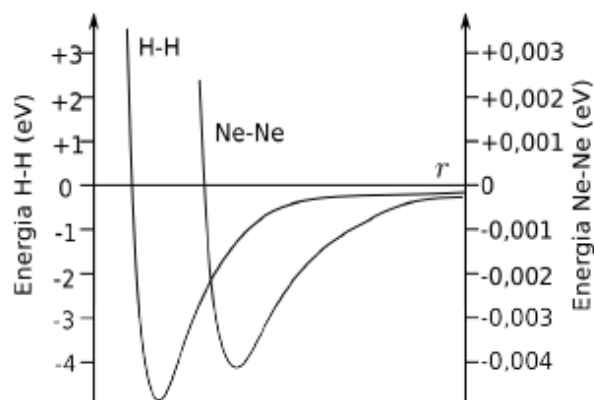
$$V(r) = D_e \left(1 - e^{-a(r-r_{eq})}\right)^2$$

(potencial de Morse)

$$kT \sim 0,026 \text{ eV}$$

(298 K)

Campos de força clássicos



Interações intermoleculares:

Podem ser razoavelmente bem representadas usando potenciais simples, para qualquer distância.

“Interações não-ligadas”

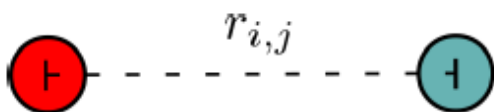
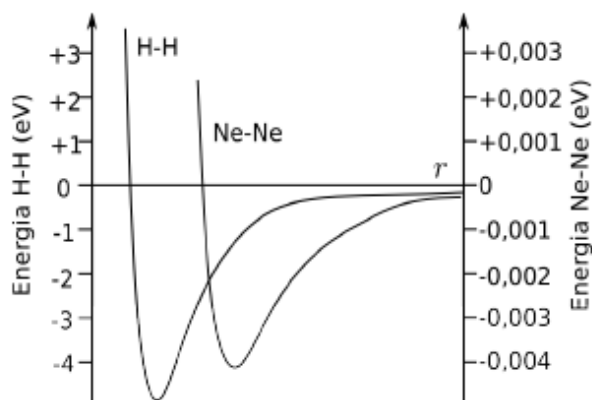
Interações intramoleculares:*

Potenciais específicos que para a representação de deslocamentos intramoleculares, sem ruptura de ligações químicas.

“Interações ligadas”

*Ou entre grupos distantes na mesma molécula.

Interações não-ligadas

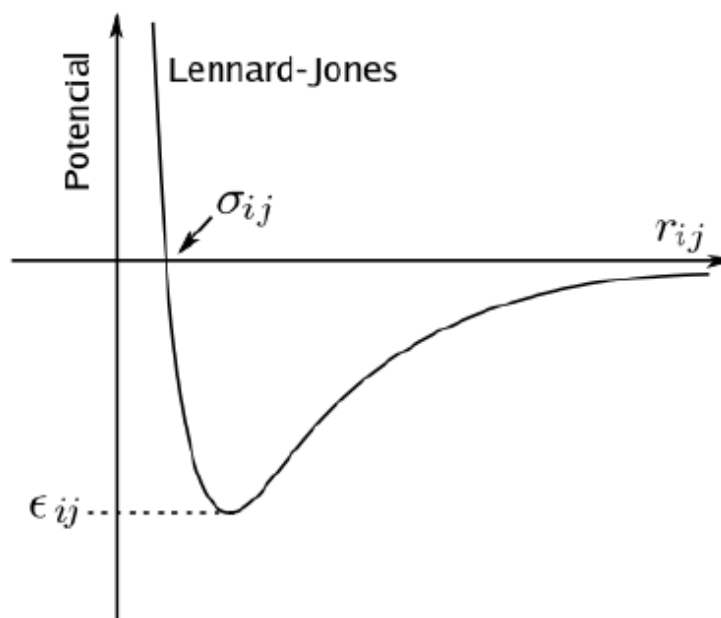


Cada “classe” de átomo possui parâmetros ϵ_i e σ_i que, combinados por pares, determinam os ϵ e σ específicos da interação.

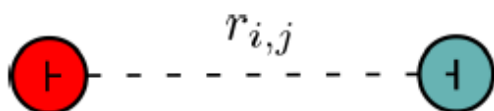
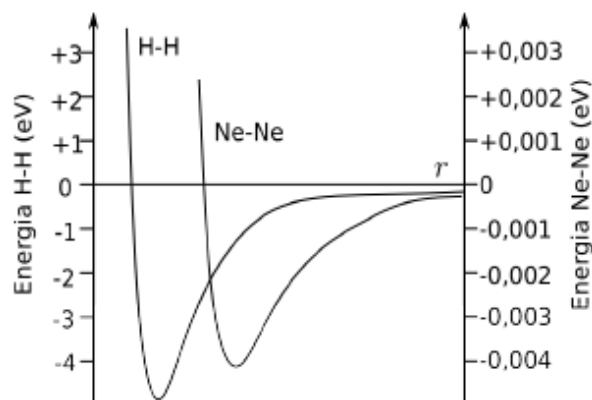
Forças de London, ou de van der Waals:

Interações resultantes das flutuações da densidade eletrônica, presentes em todas as moléculas, e dependentes da polarizabilidade:

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



Interações não-ligadas



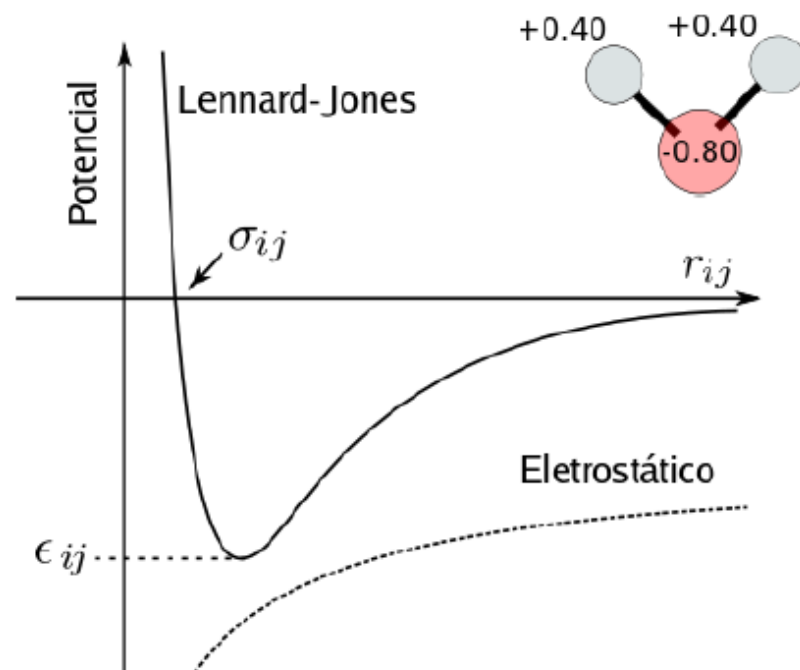
Cada “tipo” de átomo possui uma carga parcial característica.

As cargas são mais sensíveis ao ambiente molecular que a polarizabilidade.

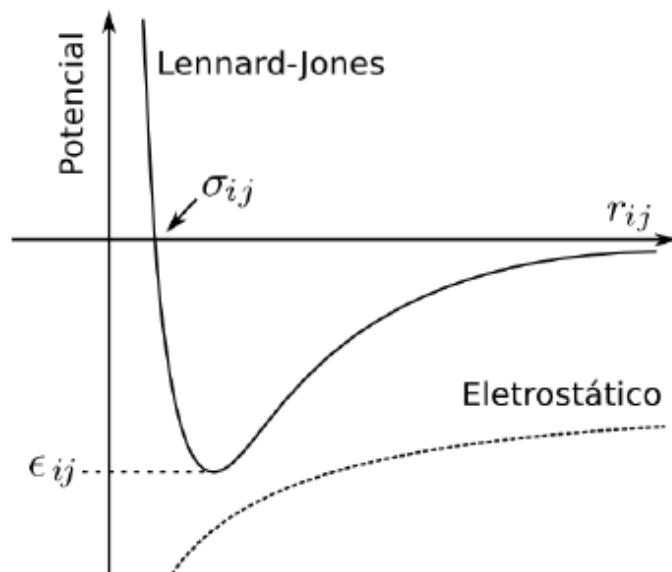
Interações eletrostáticas:

Resultantes diretas das cargas, ou cargas parciais dos átomos:

$$V_e(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$$



Interações não-ligadas



```
SERINA:  ATOM OG   OH1   -0.66
TIROSINA: ATOM OH   OH1   -0.54
OH1      -0.152100  1.770000 ! ALLOW  ALC ARO
```

$$\sigma_{i,j} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$$

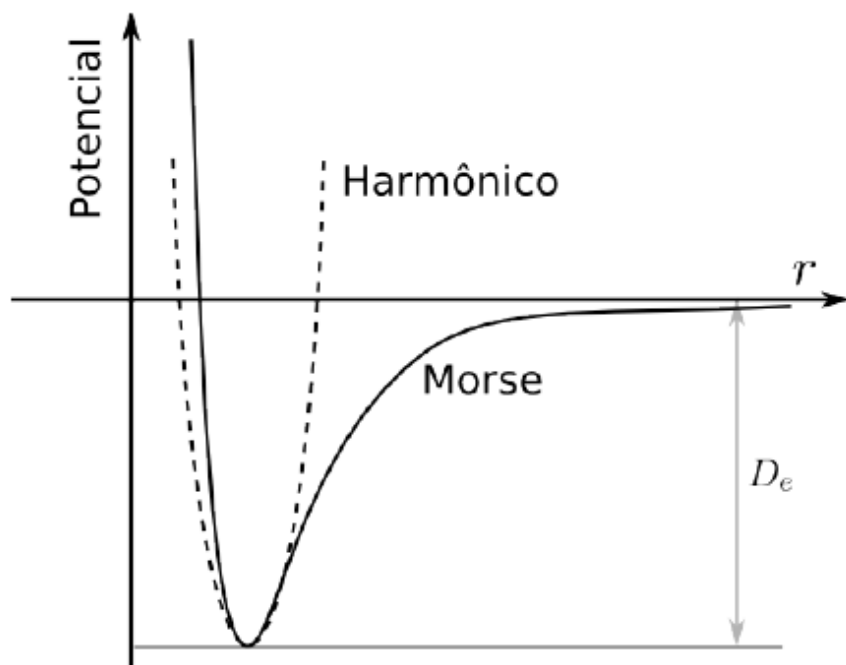
$$V_{\text{nonbonded}} = \sum_{\text{pares}} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Parâmetros σ e ϵ definidos por pares de “classes” de átomos (mais gerais).

Cargas parciais definidas por “tipo” de átomo, geralmente bastante específicas.

Interações ligadas

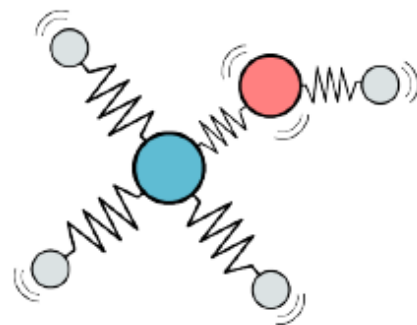
Potenciais não dissociativos - ligações covalentes



Potencial harmônico é uma boa aproximação para a região de mínimo de energia potencial.

Ligações covalentes são raramente rompidas na temperatura ambiente:

$$D_e \gg kT$$

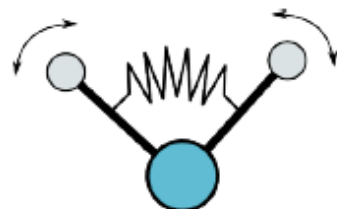


$$V(r_{ij}) = k_f (r - r_0)^2$$

Constante de força da mola

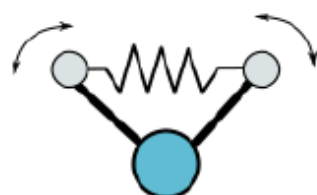
Distância de mínima energia

	k_f	r_0
CT3	230.000	1.4900
CA		
“classe”	“classe”	



Ângulos: $V(\theta) = k_{\theta}(\theta - \theta_0)^2$
 $\theta = \theta(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3)$

Potencial harmônico dependente explicitamente do ângulo.

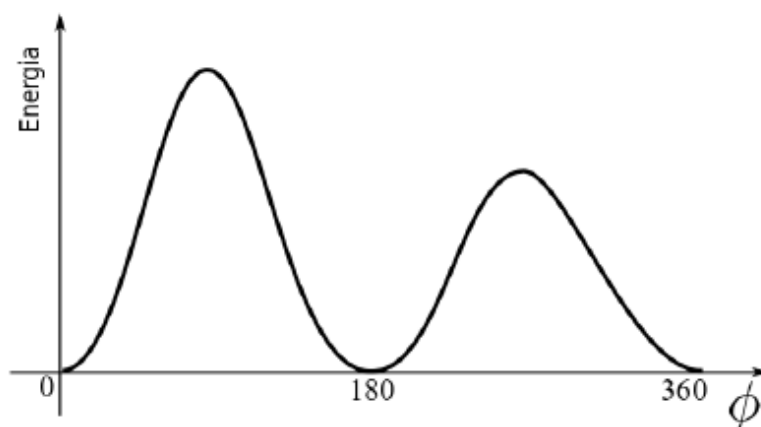
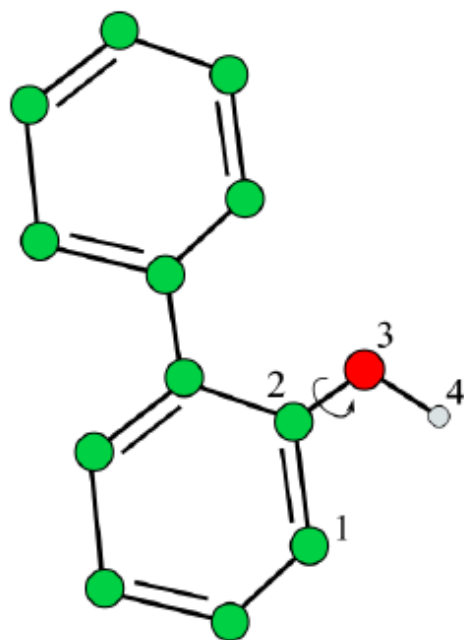


Potencial de Urey-Bradley

$$V(d) = k_{\text{UB}}(d - d_0)^2$$
$$d = d(\vec{r}_1, \vec{r}_3)$$

Ligação entre os átomos 1 e 3 do ângulo. Introduz a correlação entre o comprimento de ligação e o potencial angular - importante para um refinamento da descrição das vibrações. Geralmente não é importante em simulações de biomoléculas.

Diedros:



$$V(\phi) = \sum_i^{N_\phi} K_\phi^i [1 + \cos(n_i \phi - \delta_i)]$$
$$\phi = \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4)$$

Soma de vários termos deste tipo para cada diedro.

Determinantes para o equilíbrio conformacional!

$$\begin{aligned} V = & \sum_{\text{bonds}} K_b (r - r_0)^2 + \sum_{\text{angle}} K_a (\theta - \theta_0)^2 + \\ & + \sum_{\text{UB}} K_{\text{UB}} (S - S_0)^2 + \sum_{\text{dihedrals}} K_{\phi} [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \\ & + \sum_{\text{impropers}} K_i (\psi - \psi_0)^2 + \\ & + \sum_{\text{pares}} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \end{aligned}$$

Parâmetros: $K_b, r_0, K_a, \theta_0, K_{\text{UB}}, S_0, K_{\phi}, n, \delta, K_i, \phi_0, \epsilon, \sigma, q$

Definição do campo de força

$$K_b, r_0, K_a, \theta_0, K_{UB}, S_0, K_\phi, n, \delta, K_i, \phi_0, \epsilon, \sigma, q$$

Topologia:

```
RESI CYS          0.00
GROUP
ATOM N    NH1    -0.47 ! |
ATOM HN   H      0.31 ! HN-N
ATOM CA   CT1    0.07 ! | HB1
ATOM HA   HB     0.09 ! | |
GROUP      ! HA-CA--CB--SG
ATOM CB   CT2    -0.11 ! | | \
ATOM HB1  HA     0.09 ! | HB2 HG1
ATOM HB2  HA     0.09 ! O=C
ATOM SG   S      -0.23 ! |
ATOM HG1  HS     0.16
GROUP
ATOM C    C      0.51
ATOM O    O     -0.51
BOND CB CA SG CB N HN N CA
BOND C CA C +N CA HA CB HB1
BOND CB HB2 SG HG1
DOUBLE O C
IMPR N -C CA HN C CA +N O
```

Parâmetros:

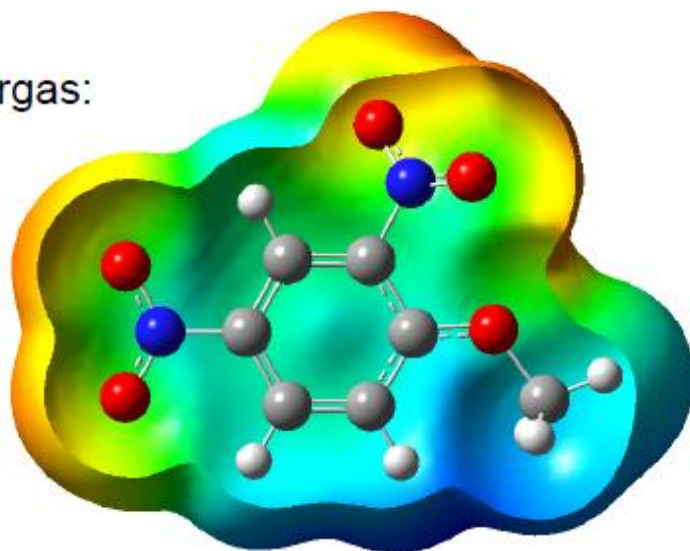
```
BONDS
!
!V(bond) = Kb(b - b0)**2
!
!Kb: kcal/mole/A**2
!b0: A
!
!atom type Kb          b0
!
!Carbon Dioxide
CST OST 937.96        1.1600 ! JES
C  C    600.000        1.3350 ! ALLOW ARO HEM
! Heme vinyl substituent (KK, from propene (JC
CA  CA   305.000        1.3750 ! ALLOW ARO
! benzene, JES 8/25/89
CE1 CE1  440.000        1.3400 !
! for butene; from propene, yin/adm jr., 12/95
CE1 CE2  500.000        1.3420 !
! for propene, yin/adm jr., 12/95
CE1 CT2  365.000        1.5020 !
```

De onde vieram todos esses parâmetros?

Cada classe de átomos tem seus parâmetros, cada tipo suas cargas, cada molécula sua topologia...

Ajuste dos parâmetros usando cálculos ab-initio

Cargas:

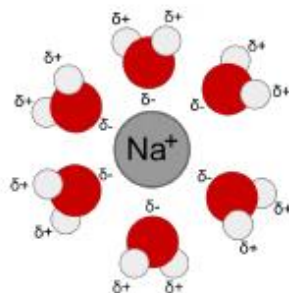
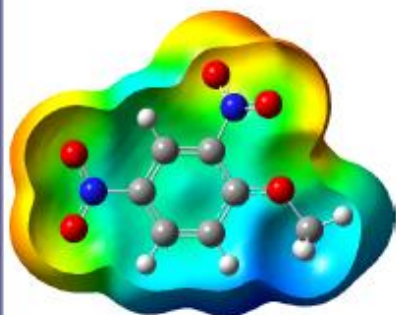


Potencial eletrostático ao redor da estrutura, calculado quanticamente

Quais são as cargas pontuais (cargas parciais) dos átomos, que melhor reproduzem este potencial eletrostático?

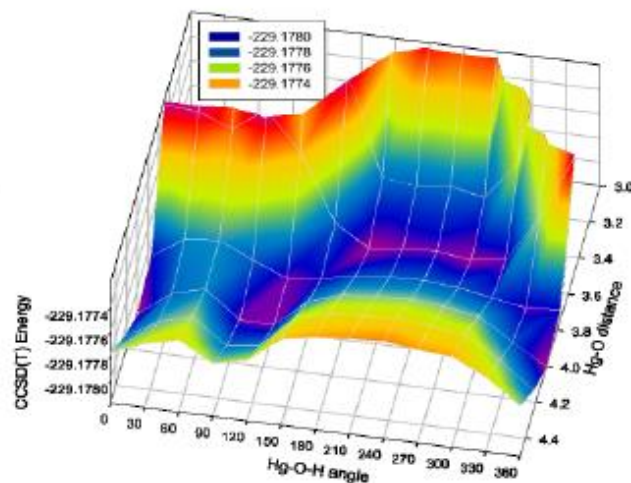
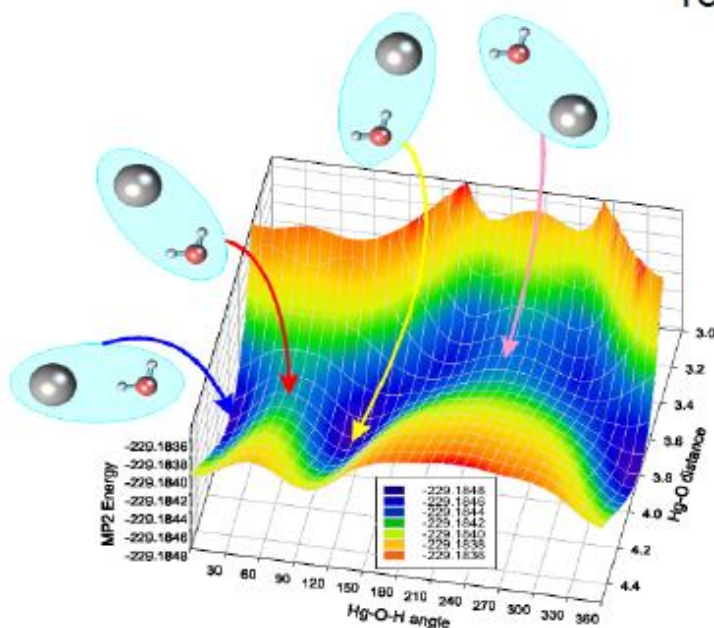
Ajuste do potencial eletrostático quântico: determinação das cargas parciais

Ajuste dos parâmetros usando cálculos ab-initio

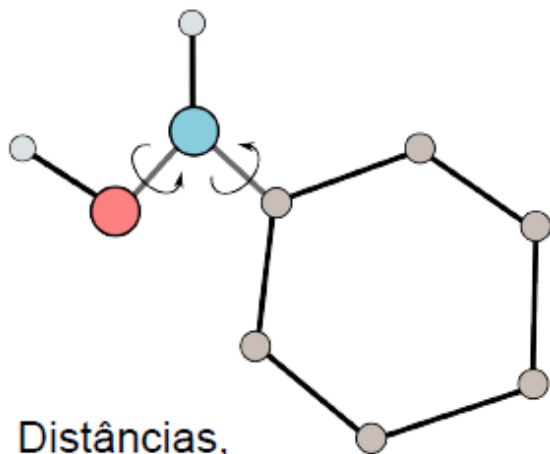


Parâmetros de Lennard-Jones:

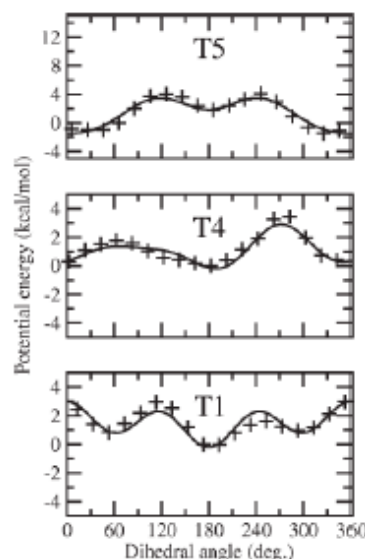
Dadas as cargas, calcular a energia potencial quântica para diferentes distâncias e orientações intermoleculares: ajustar os parâmetros para reproduzir a superfície de energia potencial.



Ajuste dos parâmetros usando cálculos ab-initio:



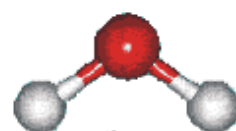
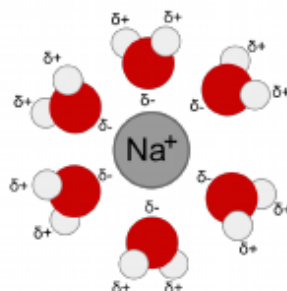
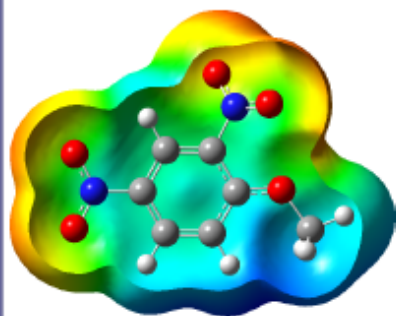
Distâncias,
constantes
de força de
ligações, etc.



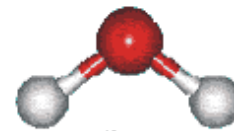
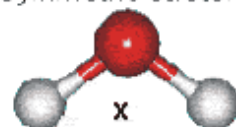
→ Energia ab-initio
inclui todas as interações
(ângulos, diedros, cargas,
vdW, etc)

$$\begin{aligned}
 V = & \sum_{\text{bonds}} K_b (r - r_{0,b})^2 + \sum_{\text{UB}} K_{\text{UB}} (S - S_{0,\text{UB}})^2 \\
 & + \sum_{\text{angle}} K_a (\theta - \theta_{0,a})^2 + \sum_{\text{dihedrals}} K_{d,n} (1 + \cos(n\chi - \delta_{d,n})) \\
 & + \sum_{\text{impropers}} K_i (\psi - \psi_{0,i})^2 \\
 & + \sum_{\text{nonbonded}} \varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{R_{\text{min},ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{\text{min},ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}},
 \end{aligned}$$

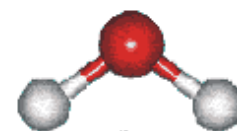
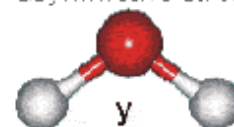
Ou, alternativamente, usando dados experimentais



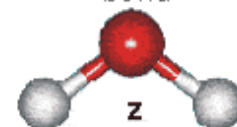
symmetric stretch



asymmetric stretch

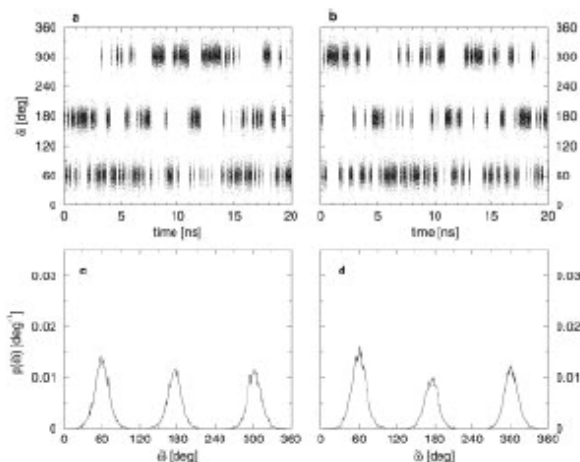


bend



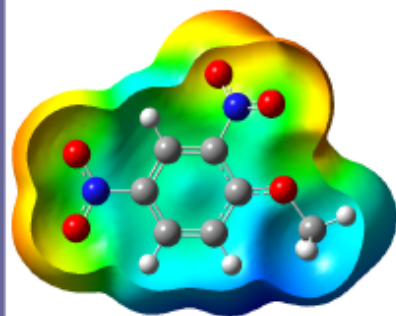
librations

Parâmetros para ligações covalentes e ângulos podem ser obtidos a partir de dados de espectroscopia vibracional.



A parametrização de diedros pode ser validada comparando as populações de conformeros em um simulação com experimentos de RMN (por exemplo).

Ou, alternativamente, usando dados experimentais



$$\Delta H_{\text{vap}} = H_g - H_l$$

$$H_g = U_g + pV_g$$

$$H_l = U_l + pV_l$$

$$\Delta H_{\text{vap}} = U_g - U_l + p(V_g - V_l)$$

$$V_l \ll V_g \quad pV_g = RT/n$$

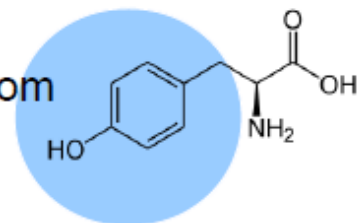
U_g : Energia intramolecular - conformacional

U_l : Energia potencial média do líquido

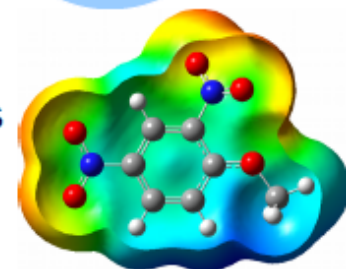
1. Simulação da molécula em fase gasosa; 2. Simulação do líquido

Parametrização de uma nova molécula

1. Obter parâmetros de LJ, ligações, ângulos por analogia de grupos com estruturas já parametrizadas.



2. Geralmente as cargas devem ser recalculadas, usando os protocolos adequados para os campos de força em uso.

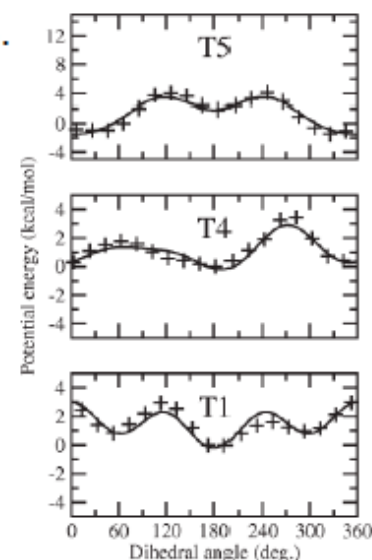


3. Geralmente alguns diedros devem ser reparametrizados.

Muito cuidado com casos especiais!

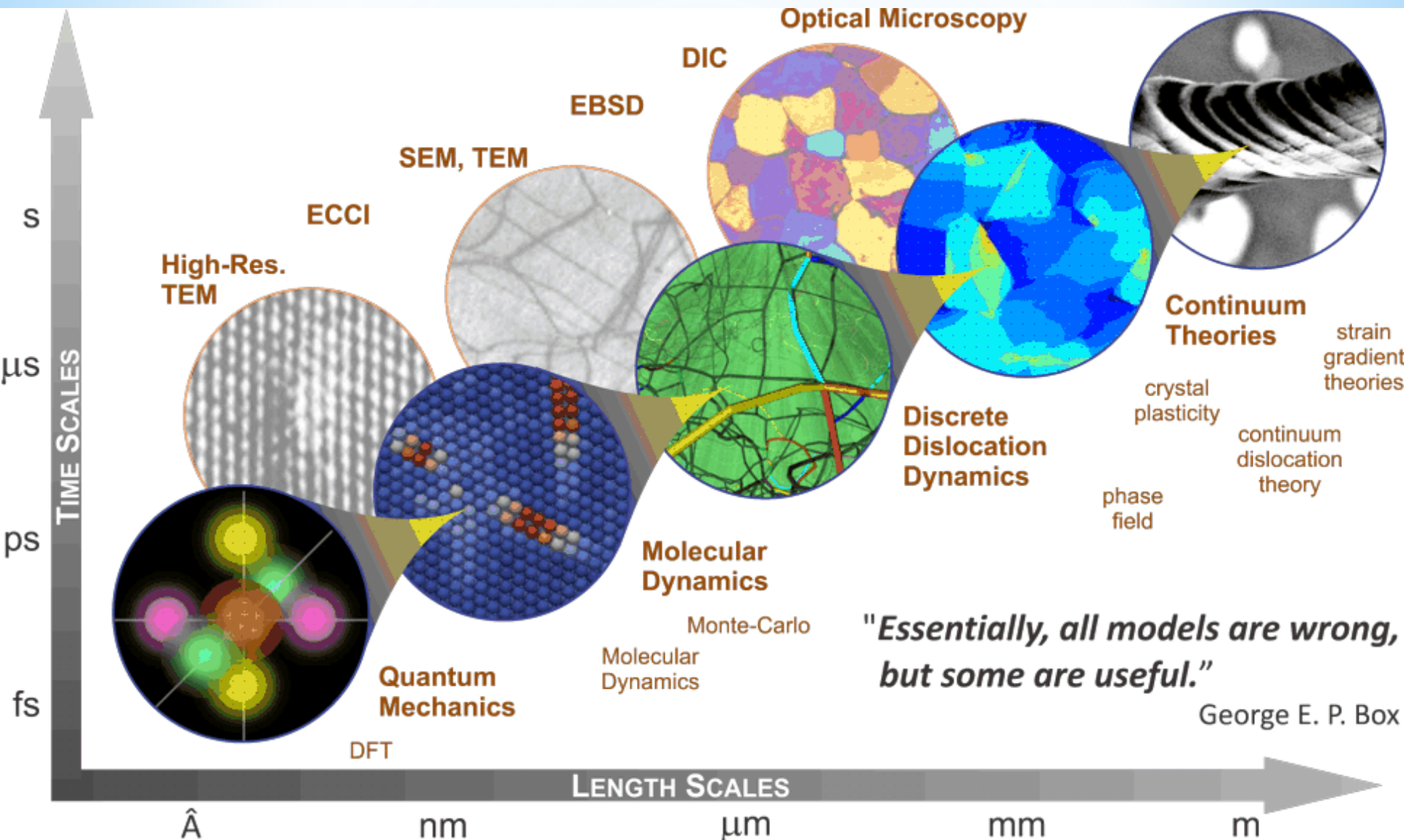
Ex. Carboidratos: parece facilmente transferível, mas não é!

Ex. Moléculas inusuais, muito polarizáveis. Muito carregadas. Líquidos iônicos, etc.



A qualidade do resultado depende da qualidade da parametrização.

* A Dinâmica Molecular



Ensemble

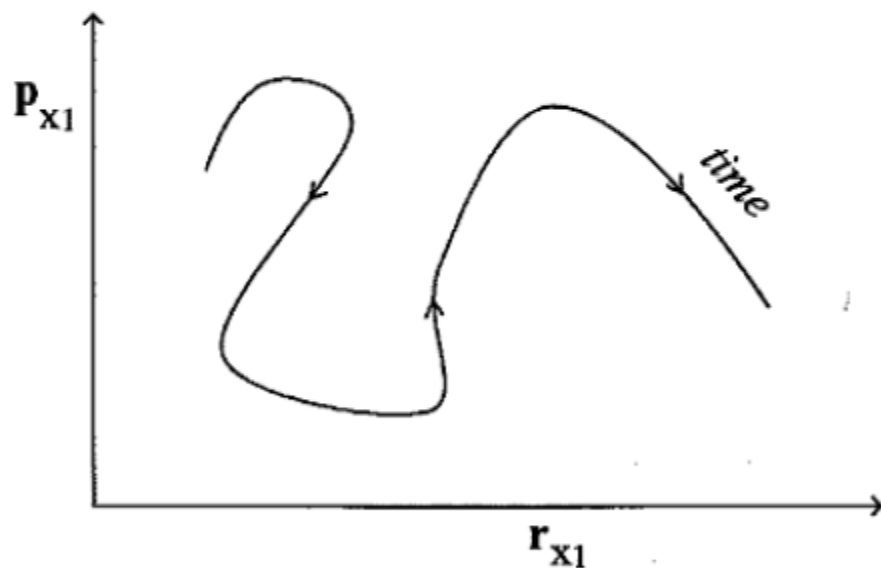


- **Ensemble**: é a coleção de todos os estados possíveis de um sistema são differences microscopicamente MAS, tem o mesmo **IDÊNTICO** estado termodinâmico (macroscópico)
- ◆ Cada estado microscópico tem a mesma distribuição de probabilidade.
- ◆ Função distribuição descreve tudo.

De volta para o futuro

Simulações moleculares provem um maneira de:

- 1) Calcular as médias temporais de um observável*
- 2) Visitar os pontos mais importantes do espaço de*



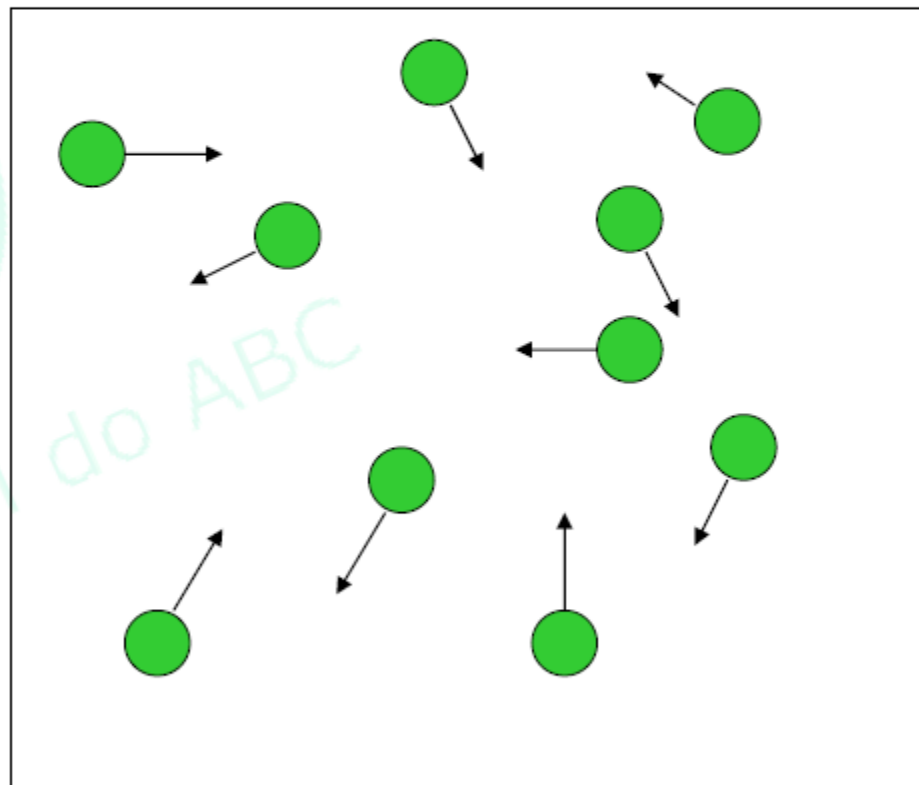
Conhecendo o espaço de fases e as médias temporais, podemos conhecer as propriedades MACROscópicas do sistema.

Figure 5.1: Motion of a point in a two-dimensional phase space. The diagram only maps the temporal evolution of two coordinates, $r_{x1}(t)$ and $p_{x1}(t)$, out of the $6N$ coordinates, $r_{x1}(t), r_{x2}(t), \dots, r_{xN}(t), p_{x1}(t), p_{x2}(t), \dots, p_{xN}(t)$. The arrows indicate the continuous increase of time.

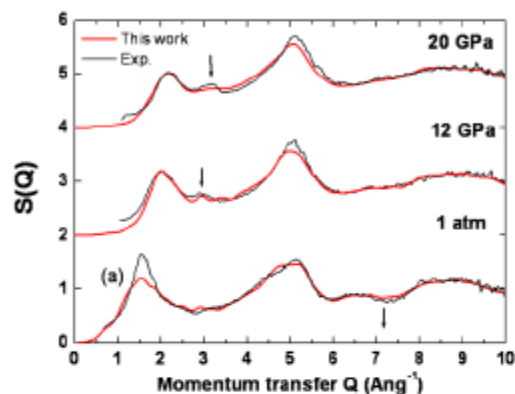
Dinâmica Molecular

Equações de movimento de Newton

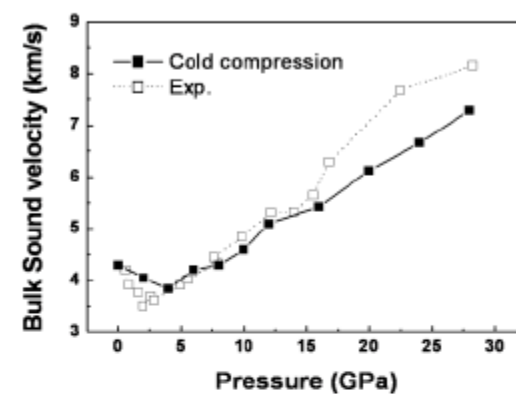
$$m \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\nabla_i V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$



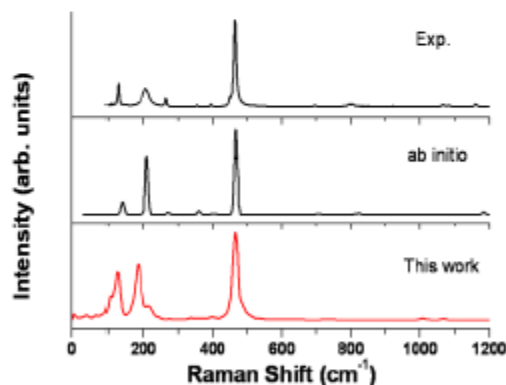
Que tipo de informação podemos obter ?



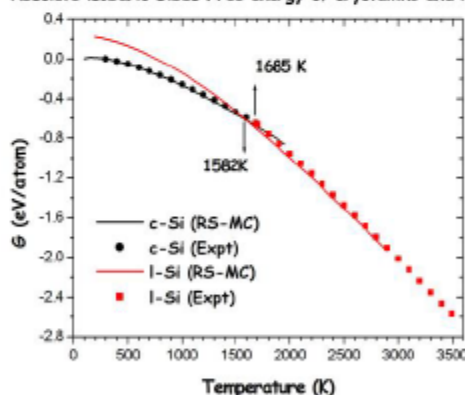
Simulações Atomísticas



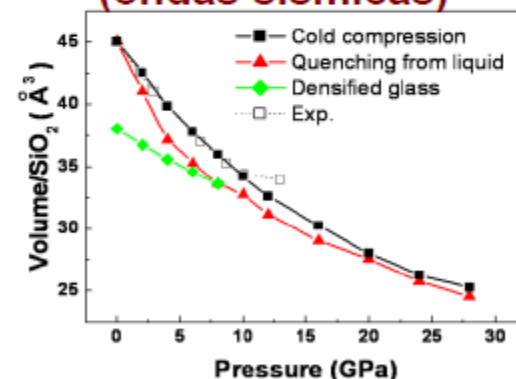
Propriedades estruturais (Raio-X e neutron)



Absolute isobaric Gibbs Free energy of crystalline and liquid Si.



Propriedades elásticas (ondas sísmicas)



Espectr scopia (Infrared, Raman & NMR)

Termodin mica (calorimetria)

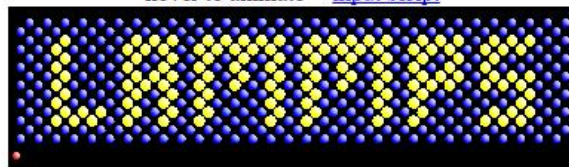
Estabilidade de fases (Experimentos em altas press es)

* LAMMPS e outros

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

lamp: a device that generates light, heat, or therapeutic radiation; something that illumines the mind or soul -- www.dictionary.com

hover to animate -- [input script](#)

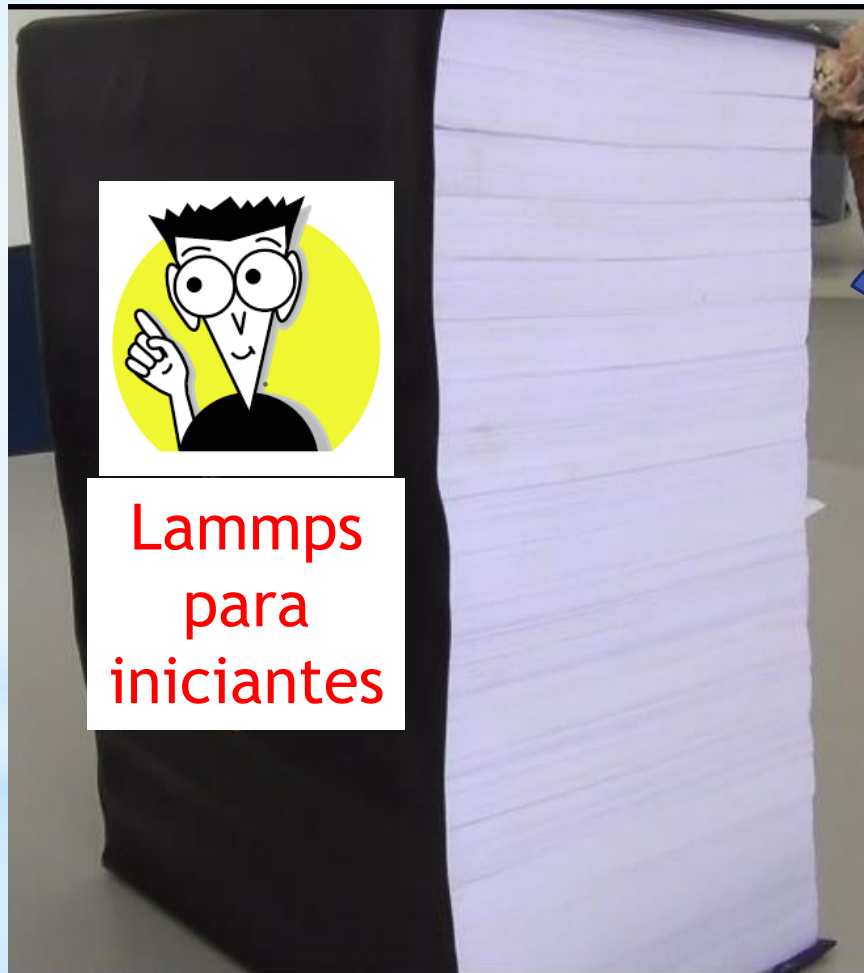


[physical analog \(start at 3:25\)](#) & [explanation](#)

Big Picture	Code	Documentation	Results	Related Tools	Context	User Support
Features	Download	Manual	Publications	Pre/Post processing	Authors	Mail list
Non-features	SourceForge	Developer guide	Pictures	Pizza.py Toolkit	History	Workshops
FAQ	Latest features & bug fixes	Tutorials	Movies	Offsite LAMMPS packages & tools	Funding	User scripts and HowTos
Wish list	Unfixed bugs	MD to LAMMPS glossary	Benchmarks	Visualization	Open source	Contribute to LAMMPS
	Pull requests	Commands	Citing LAMMPS	Related modeling codes		



*Tranquilo...com o básico posso seguir o manual



Vamos ver o que interessa!!!



De acordo com nosso
objetivos.

* Etapas de uma DM

- * *Gerar configuração inicial das moléculas.*
- * *Cálculo das forças exercidas sobre cada partícula devido às interações intermoleculares.*
- * *Movimentação das partículas.*
- * *Condições (Ensembles) e controle da simulação.*
- * *Armazenamento das configurações obtidas (trajetória).*
- * *Análise da trajetória atômica.*

*Etapas de uma RM

*Gerar configuração inicial das moléculas.

Com todo o conhecimento possível do sistema, gera-se um arquivo de topologia com todas as informações físicas provenientes da interação entre as partículas.



- Tamanho do sistema.
- Potenciais.
- Posições atômicas.
- Descrição das ligações



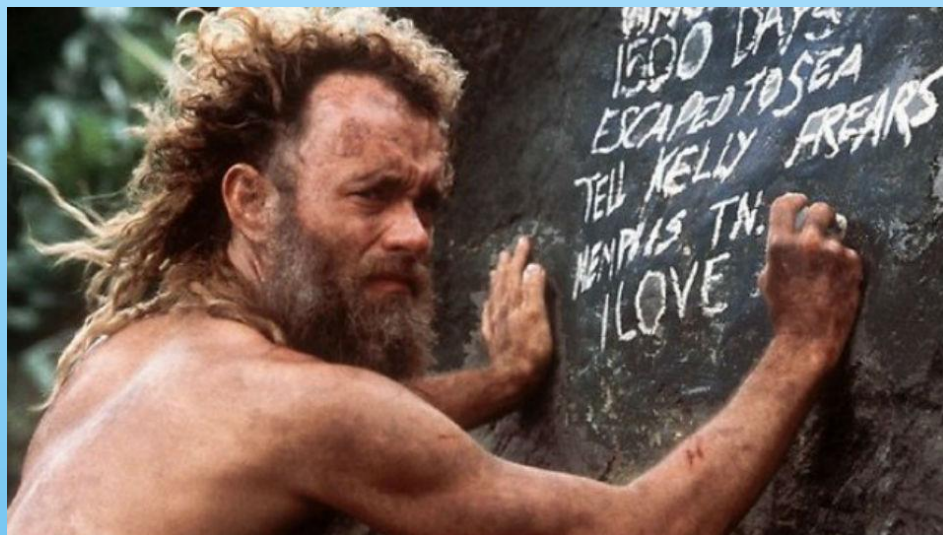
Pode ser uma coisa fácil

ou

Um inferno.....



Great success



*Arquivo de topologia

Já pensar nas
unidades à
serem
utilizadas

LAMMPS Description

3 atoms
2 bonds
1 angles

2 atom types
1 bond types
1 angle types

0.0 4.900 xlo xhi
0.0 4.900 ylo yhi
0.0 4.900 zlo zhi

Masses

1 12.01100
2 15.99900

Pair Coeffs

1 5.5899E-002 2.752
2 0.1599 3.0329

Bond Coeffs

1 1284.6 1.149000

Angle Coeffs

1 147.840 180.00

Atoms

1	1	1	0.65120	1.14900	0.00000	0.00000
2	2	2	-0.3256	2.29800	0.00000	0.00000
3	3	2	-0.3256	0.00000	0.00000	0.00000

Bonds

1	1	1	2
2	1	1	3

Angles

1	1	3	1	2
---	---	---	---	---

*Arquivo de InPUT

Já pensar nas
unidades à
serem
utilizadas

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5

*Arquivo de InPUT

CO2

```
units                real
atom_style full
boundary p p p
```



Unidades no modelo do Lammmps
Todo tipo de átomos
Assumir condições periódicas de contorno

```
pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0
```

```
bond_style    harmonic
angle_style    harmonic
```

```
kspace_style    pppm 0.0001
```

```
read_data CO2.top
restart 5000 CO2.restar
```

```
replicate 6 6 6
```

```
pair_modify mix arithmetic
neighbor 2.0 bin
neigh_modify      delay 10
```

```
variable    dens equal 7.308e-23*atoms*1e24/vol
```

```
timestep 0.5
```

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic



Potenciais - intermoleculares e intramoleculares

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5



Uma vez assumido as condições periódicas de contorno, pensar que a sua caixa é uma parte de um todo macroscópico.

Como é definido um volume, as partículas nas fronteiras do volume, devem interagir com seu exterior como se tivesse uma imagem sua fora da caixa.

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5



Leitura do arquivo de topologia
Gravar arquivo de topologias após
unidades de tempo: Ex: CO2.restar.5000

Com a leitura do arquivo de topologia,
você pode aumentar o sistema
replicando nas direções xyz

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5

Interação entre as partículas
envolvendo um acoplamento aritmético

Lista de correção - vizinhos

Verificação da lista de vizinhos após
uma unidade de tempo.

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308 \times 10^{-23} \times \text{atoms} \times 10^{24} / \text{vol}$

timestep 0.5



Comando variable - pode-se definir equações à serem calculadas durante as simulações - Ex: densidade do CO2

*Arquivo de InPUT

CO2

units real

atom_style full

boundary p p p

pair_style lj/cut/coul/long 8.0 10.0

bond_style harmonic

angle_style harmonic

kspace_style pppm 0.0001

read_data CO2.top

restart 5000 CO2.restar

replicate 6 6 6

pair_modify mix arithmetic

neighbor 2.0 bin

neigh_modify delay 10

variable dens equal $7.308e-23 \cdot \text{atoms} \cdot 1e24 / \text{vol}$

timestep 0.5



Intervalo de tempo para cada cálculo de integração por parte do programa, respeitando a unidade utilizada.

*Arquivo de InPUT

```
thermo 100  
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens
```

```
minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000
```

```
velocity all create 300 4928459 dist gaussian
```

```
fix 1 all nve
```

```
dump e_data all custom 1000 conf_nve.lammpstrj id type x y z
```

```
run 20000
```



Dados à serem gravados em um arquivo de saída assumindo intervalos de tempo no tempo total de simulação - Ex: a cada 100 unidades de tempo grava-se os parâmetros solicitados no thermo_style.

*Arquivo de InPUT

```
thermo 100  
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens
```

```
minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000  
velocity all create 300 4928459 dist gaussian
```

```
fix 1 all nve
```

```
dump e_data all custom 1000 conf_nve.lammpstrj id type x y z
```

```
run 20000
```



Minimização dos parâmetros de energia do sistema e determinação de uma velocidade inicial para cada partícula através da distribuição de Boltzmann, em termos de temperatura.

*Arquivo de InPUT

```
thermo 100  
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens
```

```
minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000
```

```
velocity all create 300 4928459 dist gaussian
```

```
fix 1 all nve
```



Fixar um ensemble para o sistema
- Ex: NVE

```
dump e_data all custom 1000 conf_nve.lammpstrj id type x y z
```

```
run 20000
```

*Arquivo de InPUT

```
thermo 100
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens

minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000

velocity all create 300 4928459 dist gaussian

fix 1 all nve

dump e_data all custom 1000 conf_nve.lammpstrj id type x y z

run 20000
```



Arquivo com as trajetórias cartesianas utilizadas para visualização do sistema.

*Arquivo de InPUT

```
thermo 100  
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens  
  
minimize 1.0e-4 1.0e-6 100 1000  
  
velocity all create 300 4928459 dist gaussian  
  
fix 1 all nve  
  
dump e_data all custom 1000 conf_nve.lammpstrj id type x y z  
  
run 20000
```



Tempo total de simulação.

*Arquivo de saída

Step	Temp	TotEng	PotEng	KinEng	E_bond	E_angle	Press	Volume	v_dens
2	300	1099.9287	521.35351	578.57523	19.546266	0	14160.182	25412.184	1.8635093
100	364.32784	1105.3075	402.67064	702.63687	43.884595	48.543904	9475.9097	25412.184	1.8635093
200	541.11842	1106.9155	63.323141	1043.5924	79.671446	129.28817	25.153675	25412.184	1.8635093
300	600.94232	1106.3617	-52.606092	1158.9678	115.06944	43.447013	289.61082	25412.184	1.8635093
400	590.82721	1106.426	-33.033933	1139.46	125.84383	18.26945	1370.2393	25412.184	1.8635093
500	559.1327	1106.9748	28.64037	1078.3344	109.67254	119.39529	480.11513	25412.184	1.8635093
600	600.67084	1106.6317	-51.812499	1158.4442	75.941437	76.436475	1133.6214	25412.184	1.8635093
700	649.39398	1106.1833	-146.22764	1252.4109	45.251918	6.8880839	2030.7006	25412.184	1.8635093
800	607.84795	1106.1146	-66.171269	1172.2859	31.775719	93.563937	1494.3472	25412.184	1.8635093
900	603.2007	1105.8544	-57.468928	1163.3233	37.747321	104.07287	1391.5938	25412.184	1.8635093
1000	640.42334	1105.6592	-129.45112	1235.1103	52.409176	14.031207	2353.6641	25412.184	1.8635093
1100	602.95379	1106.065	-56.782081	1162.8471	64.520977	65.384904	2047.3738	25412.184	1.8635093
1200	604.98176	1105.9253	-60.832915	1166.7582	65.156266	116.94787	600.55422	25412.184	1.8635093
1300	626.53188	1105.6933	-102.62609	1208.3194	55.55901	34.183434	2217.4731	25412.184	1.8635093
1400	633.74082	1105.8899	-116.33258	1222.2225	47.704278	38.249437	2188.0105	25412.184	1.8635093
1500	604.19653	1106.5068	-58.737064	1165.2438	53.771152	113.53774	1220.889	25412.184	1.8635093
1600	617.04271	1106.5035	-83.515249	1190.0188	75.132872	64.307941	1937.1621	25412.184	1.8635093
1700	609.43672	1106.4883	-68.861624	1175.35	103.38225	21.651168	2786.8554	25412.184	1.8635093
1800	567.85993	1106.7618	11.596171	1095.1656	116.67	96.049344	2080.7581	25412.184	1.8635093
1900	575.84347	1106.5227	-4.0398223	1110.5626	108.36885	90.751321	2106.9832	25412.184	1.8635093
2000	637.5378	1105.9573	-123.58798	1229.5453	79.066906	21.282744	2424.2602	25412.184	1.8635093
2100	632.25545	1105.8235	-113.53426	1219.3578	39.927938	71.736026	2218.4966	25412.184	1.8635093
2200	618.19261	1105.5832	-86.653223	1192.2364	14.033739	105.66463	2232.0267	25412.184	1.8635093
2300	665.83843	1105.6547	-178.47067	1284.1254	11.380303	36.534567	2479.6211	25412.184	1.8635093
2400	645.5099	1105.5435	-139.37665	1244.9201	32.13201	48.619126	2379.5617	25412.184	1.8635093

* A partir seguir o
roteiro e as
explicações do
professor