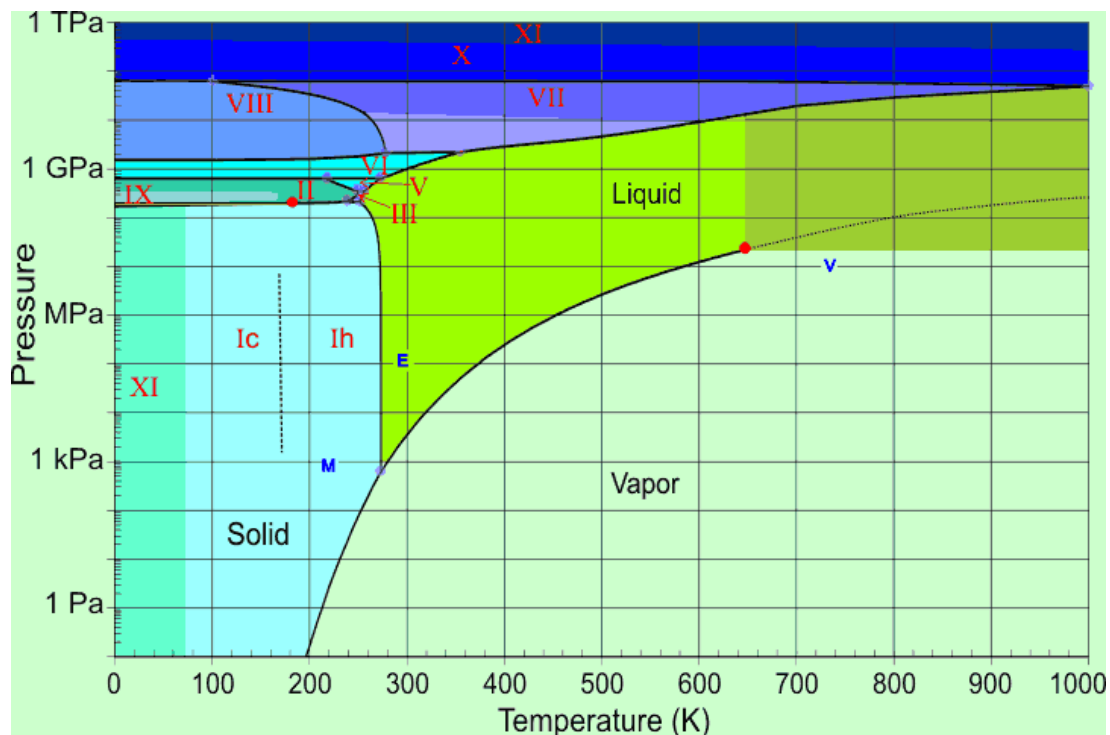
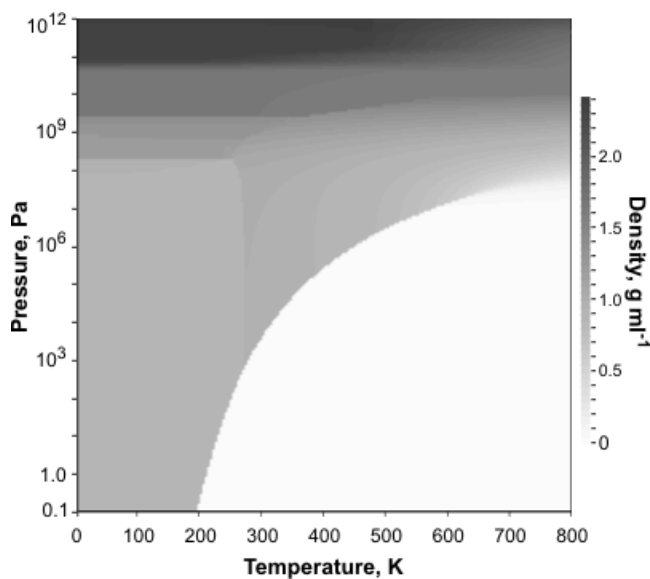
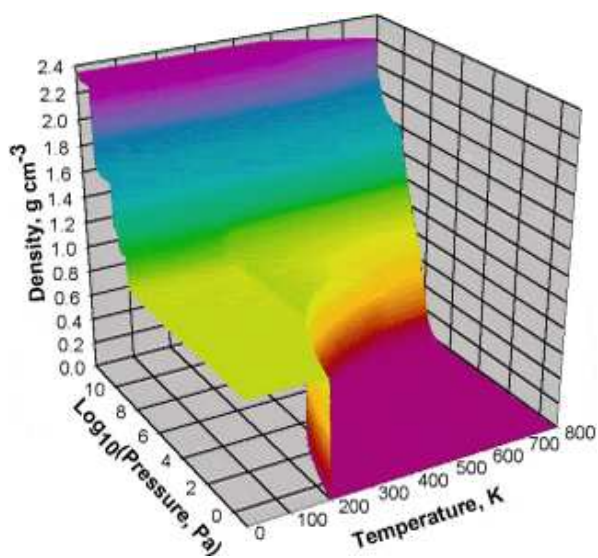


Diagrama de fases da água



Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.1

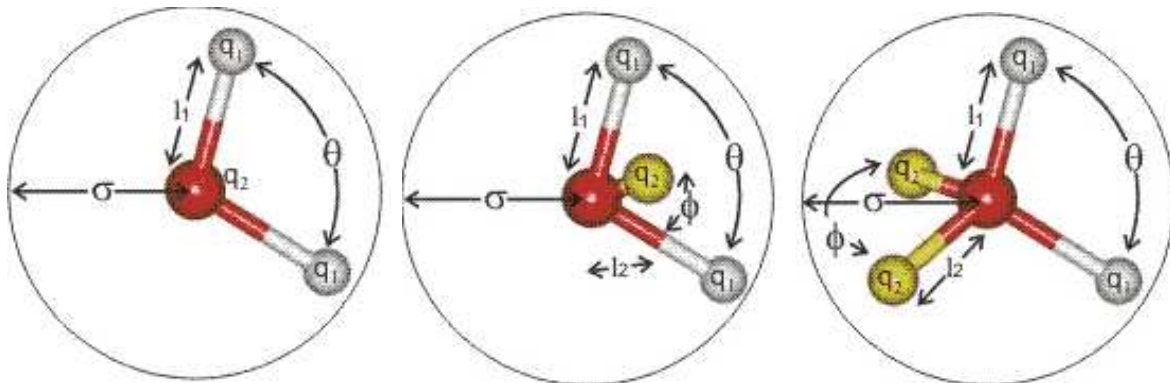
Diagrama de fases da água



T/K	P/atm	d(líquido)/gcm ⁻³	d(gás)/gcm ⁻³
298	0.03127	0.9970	0.000023
573	84.69	0.712	0.046
623	162.98	0.575	0.1135
647	217.7	0.3068	0.3068

Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.2

Modelos da água TIPnP e SPC



Modelos TIP3P, TIP4P e TIP5P nas suas várias versões:

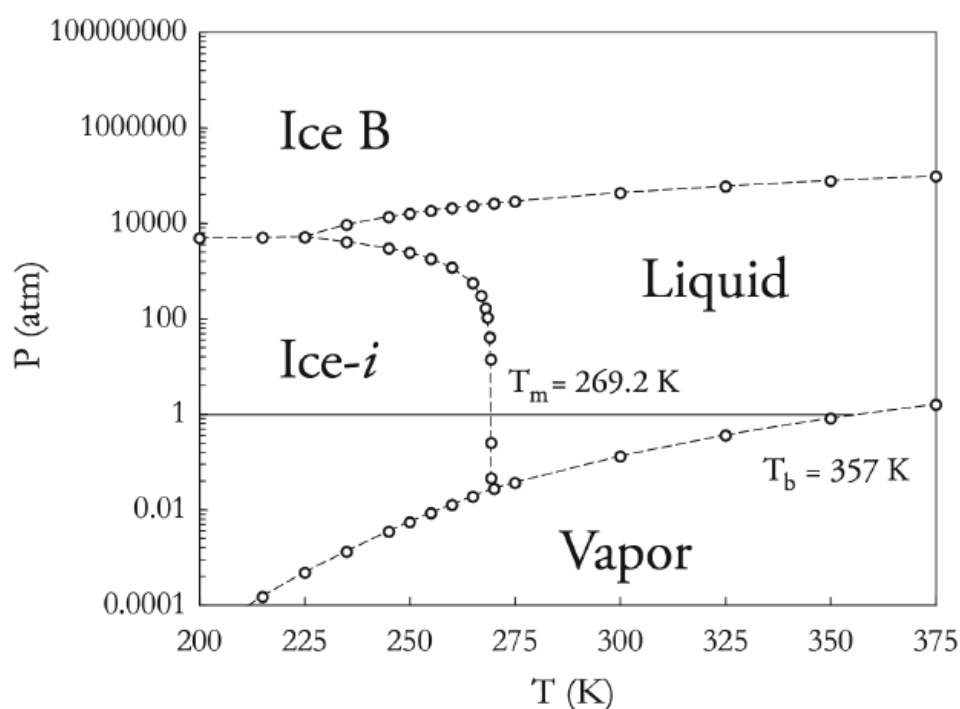
$$E_{ab} = \sum_i \sum_j k_C \frac{Q_i Q_j}{R_{ij}} + 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{OO}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{OO}} \right)^6 \right]$$

Nestes modelos as moléculas de água têm geometria fixa.

Os modelos SPC acrescentam um termo constante de polarização.

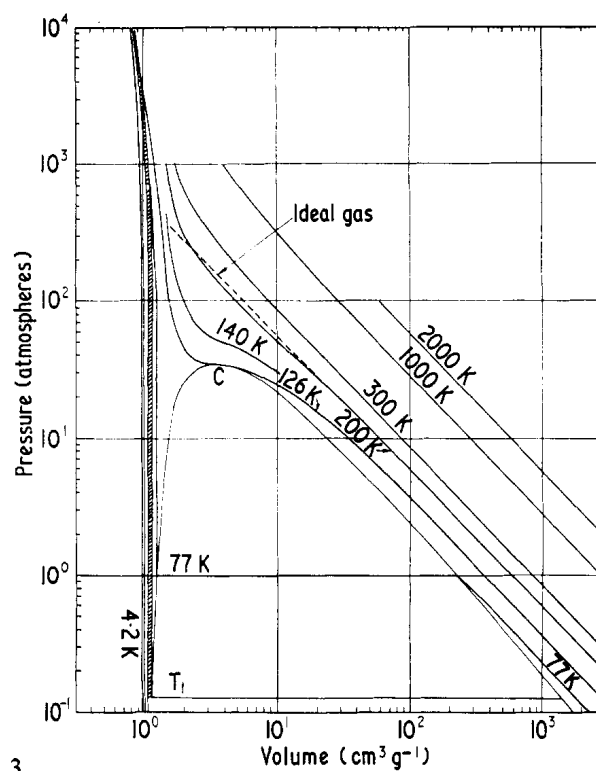
Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.3

Diagrama de fases do modelo TIP3P



Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.4

Diagrama de fases do azoto



Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.5

Resumo e revisão

- ⇒ O que é e para que serve a mecânica molecular?
- ⇒ O que é e para que serve um campo de forças? Quais são os termos de potencial mais comuns nos campos de forças?
- ⇒ Em geral, quais os passos necessários para fazer a modelação teórica ao nível molecular de um sistema com um número muito grande de átomos?
- ⇒ O que é e para que serve a simulação computacional de ensembles termodinâmicos? O que é um ensemble Termodinâmico?
- ⇒ O que é o método da dinâmica molecular? E o método de Monte Carlo?
- ⇒ Quais são os ensembles naturais dos métodos da dinâmica molecular e Monte Carlo?
- ⇒ Quais são as propriedades termodinâmicas que são fixas e que flutuam nos diferentes ensembles?
- ⇒ O que são e para que servem as condições de fronteira periódicas?
- ⇒ Como pode simular o equilíbrio de fases líquido-gás de um sistema sem ter de considerar uma interface?

Química Computacional / Modelação Molecular - Sérgio Rodrigues - 2007/2008 - p.6