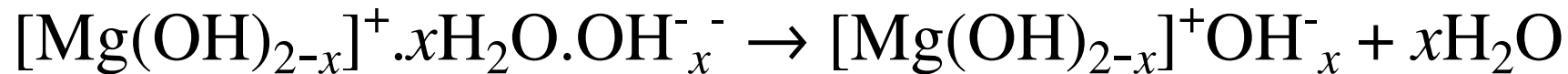
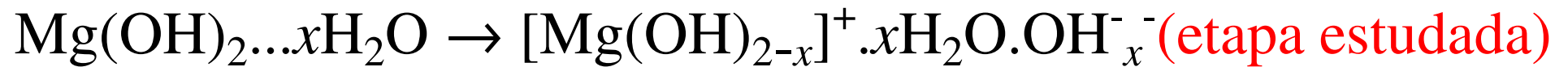
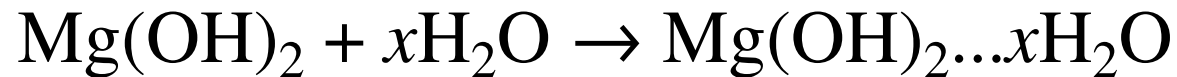


# Aula Prática

Calcular o estado de transição e o caminho de reação da dissociação de uma molécula de  $\text{H}_2\text{O}$  na superfície da brucita

# Mecanismo da reação da molécula de H<sub>2</sub>O com a brucita:



# Roteiro

- Crie o diretório neb no seu home;
- Copie os arquivos para o diretório neb criado;
- Olhe o arquivo bru-H2Odis-neb.inp no Xcrysden;
- Visualize o caminho de reação através da janela do Animation Control Center;
- Abra o arquivo bru-H2Odis-neb.inp no terminal e verifique como é um arquivo neb e as variáveis que são necessárias para rodar o neb
- Faça as devidas modificações em outdir e pseudo\_dir;

- Repare que foram incluídas algumas imagens intermediárias, geralmente só a primeira e a última imagens são necessárias. Estas imagens foram adicionadas para que o cálculo rode rápido. Além disso, as coordenadas deste arquivo já se encontram otimizadas e o caminho também, assim o cálculo será bem rápido. Entretanto, um cálculo neb pode demorar muitos dias, semanas e até meses, isto vai depender da complexidade do sistema.

- Para rodar o neb digite o comando:
- `neb.x -inp bru-H2Odis-neb.inp > bru-H2Odis.out;`
- Verifique os arquivos criados no diretório neb:
- O arquivo `bru-H2Odis-neb.out` contém as etapas de otimização do caminho, as energias de cada imagem, o erro com relação a convergência da força do caminho, as energias de ativação da reação direta e inversa e indica qual imagem é o estado de transição;
- Os arquivos `pw_1.in`, `pw_2.in` ... são arquivos iguais os utilizados para rodar um cálculo relax;

- O arquivo `bru-H2Odis-neb.xyz` possui as coordenadas atuais (etapa na qual o cálculo se encontra) de todos os átomos de todas as imagens;
- O arquivo `bru-H2Odis-neb.dat` possui coordenada de reação, a energia relativa de cada imagem com relação a primeira e o erro (da etapa atual). Pode ser usado para fazer a figura com os pontos do caminho de reação;
- O arquivo `bru-H2Odis-neb-novo.axsf` permite visualizar o caminho de reação atual no Xcrysden;
- O arquivo `bru-H2Odis-neb.path` contém informações para restartar o cálculo como as coordenadas dos átomos de cada imagem, as energias e os gradientes;

- Olhar o diretório outdir:
- Cada diretório bru-H2Odis-neb-novo\_1, ... possui todos os arquivos gerados num cálculo relax inclusive o arquivo bru-H2Odis-neb.out
- Cada arquivo bru-H2Odis-neb.path possui as informações para restartar o cálculo.

- Tarefa:

Fazer a figura do caminho de reação da reação estudada.