

# Simulação Computacional dos Materiais

---

***Caetano Rodrigues Miranda***

***Dra. Elizane Moraes***

***Dra. Michele Salvador***

***AULA 18 – 16/10/2020***

***IFUSP***

*crmiranda@usp.br*



*sampa*

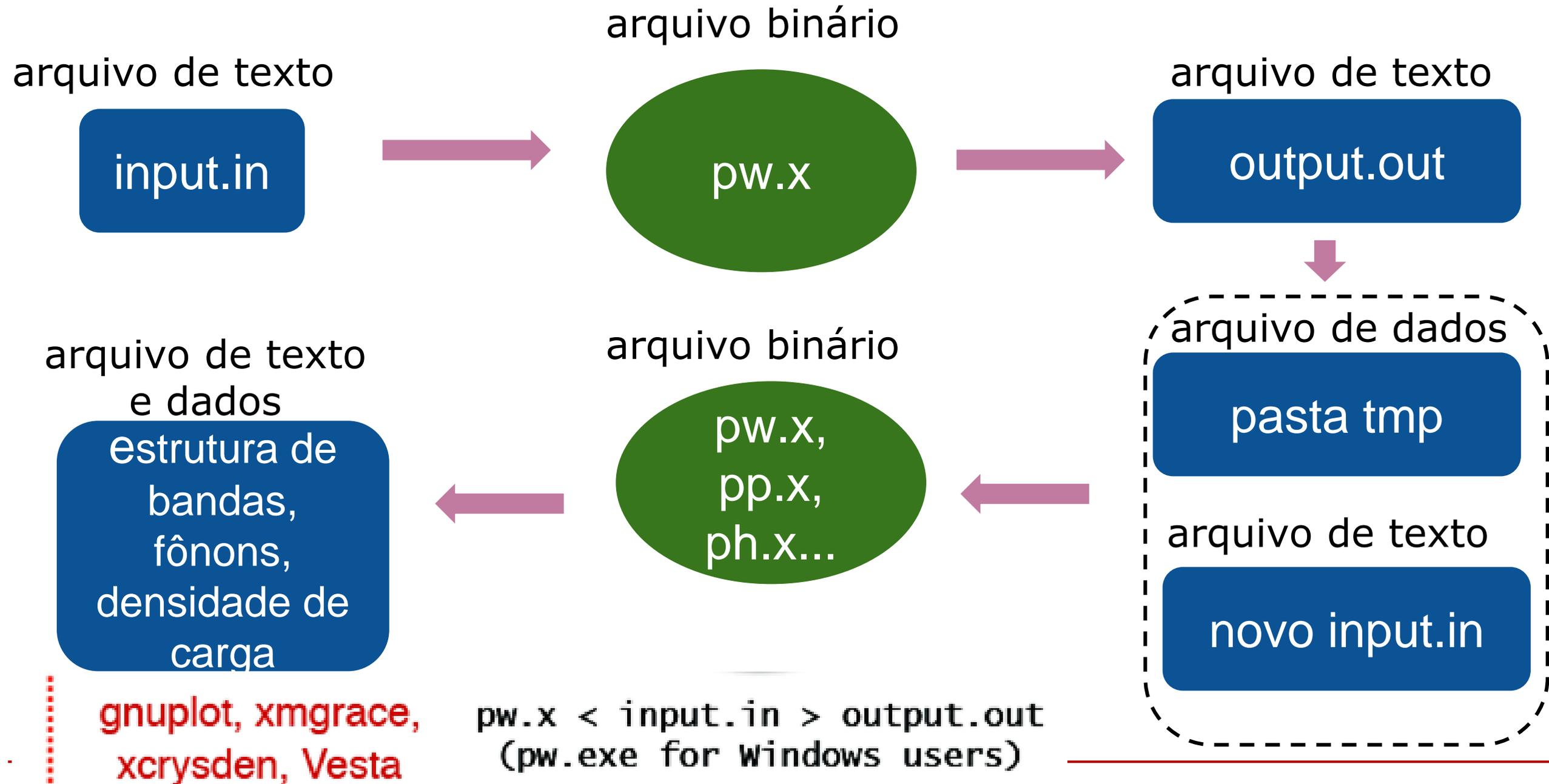




**LABORATÓRIO**  
**CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS**  
**TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)**

---

# Preparação para a prática



# Práticas

---

**Prática 0:** cálculo de relaxação de uma molécula isolada.

Será feito o cálculo de relaxação de uma molécula de metanol em uma caixa. O cálculo de moléculas isoladas é o mais simples e o resultado será utilizado na prática 3.

**Prática 1:** Testes iniciais com o Silício Si; (github)

**Prática 2:** Testes com o Alumínio; (github)

**Prática 3:** Homodímeros de Metanol; (github)

# Prática 0

---

Primeiro passo: entre no diretório Lab6/Metanol/molecula\_isolada e abra com o seu editor de preferência o *input espresso.in*;

- Utilize o software XCRYSDEN para visualizar a estrutura:
  - digite no terminal xcrysdn;
  - Abra o menu File > Open PWscf > Open PWscf input file
  - selecione seu arquivo de input.
  - observe a estrutura, as posições atômicas da molécula. Gire a estrutura, explore o menu do software