

FÍSICA COMPUTACIONAL II

INTRODUÇÃO RÁPIDA AO VMD

O VMD pode ser encontrado no link: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>. Para importar a trajetória de dinâmica molecular e ajustar a visualização, basta seguir os seguintes passos:

- Após iniciar o VMD, importe a trajetória na aba **file** → **new molecule**
- Ajuste em seguida a visualização dos átomos: **graphics** → **representations**
- Na janela que abrir, clique na caixa abaixo de **drawing method**, e escolha a opção **VDW**
- Reduza o **Sphere Scale** para 0.6 e, se quiser, aumente a resolução. Existem também opções nesta aba para alterar a cor e o material das esferas
- Clique agora na aba **Display**, marque a opção **ortographic** e, se preferir, nesta mesma aba retire os eixos na opção **Axes**. Tente também desmarcar a opção **Depth Cueing**
- Para desenhar a caixa periódica, vá na aba **Extensions** e selecione a opção **Tk Console**
- Certifique-se que o script que foi colocado no SIGAA chamado **set_boundary.tcl** está na pasta que o terminal está acessando. Com o comando 'ls' você pode verificar quais os arquivos disponíveis, e com o comando 'pwd' você pode verificar qual a pasta atual
- Carregue o script: **source set_boundary.tcl**
- Note que se você alterar o tamanho da caixa L no programa 'MD.py', você deve editar este tamanho no script. Na linha **pbc set "10.0 10.0 10.0"** os valores numéricos correspondem ao tamanho da caixa no x, no y e no z.
- Na janela principal do VMD (VMD main), aperte o botão de play para rodar a animação
- A seguir veremos alguns comandos opcionais
- Para mudar a cor do background, vá na aba **Graphics** e clique em **Colors**. Escolha a categoria 'Display', nome 'Background' e escolha a nova cor.
- Se você clicar na janela em que é mostrada a estrutura, você pode aumentar ou reduzir o zoom com a botão de rolagem do mouse. Se você segurar o botão esquerdo ou o direito pode rotacionar a estrutura. Apertando '=' você reseta a visão. Se você apertar 't', o botão esquerdo agora permite transladar a estrutura. Se você apertar 'r', pode novamente rotacionar a molécula
- Se quiser gerar uma figura contendo o estado atual da visualização, vá na aba **file**, opção **render**. Tente renderizar trocando a opção 'Snapshot' por 'Tachyon (internal...)'
- Para gerar um vídeo, vá na aba **Extensions** → **Visualization** → **Movie Maker**