

Projeto 4. Iões adsorvidos

Descrição geral do formato de ficheiro:

O ficheiro fornecido é um ficheiro de output de um programa de simulação de dinâmica molecular, neste caso, Gromacs. Os ficheiros de output do Gromacs são em formato .gro e são utilizados para armazenar informações sobre a configuração molecular da simulação.

O formato do ficheiro .gro inclui:

- A primeira linha do ficheiro é a linha do título, geralmente contém uma descrição da configuração.
- A segunda linha contém o número total de átomos no sistema.
- As linhas subsequentes representam informações para cada átomo. Cada linha é estruturada da seguinte forma:
 - Número de identificação do grupo (geralmente uma molécula);
 - Nome do átomo;
 - Nome do grupo;
 - Número de identificação do átomo;
 - Coordenadas x, y e z (em nanómetros) do átomo no sistema;
 - Velocidades x, y e z (em nanómetros por picossegundo), quando aplicável.
- A última linha do ficheiro representa as dimensões da caixa de simulação.

Geralmente, o ficheiro .gro é usado para representar a configuração inicial da simulação e também pode ser gerado em diferentes etapas da simulação. É um formato comum para a entrada e saída de dados no Gromacs, e as informações contidas nele incluem as coordenadas tridimensionais das partículas que compõem o sistema molecular, tornando-o essencial para a análise e visualização dos resultados das simulações. Mais sobre formato .gro: <https://manual.gromacs.org/archive/5.0.3/online/gro.html>

Requisitos básicos:

Neste projeto, deve ser desenvolvido um programa para:

- Identificar iões adsorvidos com base no critério geométrico estabelecido (neste caso, a distância entre átomo P3 da molécula FPa e a superfície de ouro (Au) do lado esquerdo da caixa (moléculas Aul, que representam um eléctrodo) deve ser menor que 0.6 nm)).
- Extrair e armazenar as coordenadas destes iões e os átomos de ouro (o eléctrodo todo) em ficheiro .gro separado para possibilitar a visualização posterior da camada de iões adsorvidos no programa VMD.

O objetivo é automatizar a identificação de iões adsorvidos num eléctrodo com base em critérios geométricos e extrair suas coordenadas para posterior análise visual, simplificando o processo de análise de sistemas moleculares.

O programa deve ser entregue acompanhado pelo relatório. O relatório deverá identificar o grupo de trabalho, o nome de projecto, o pseudo-código (vide Aula 4) e as observações que acharem pertinentes. O código deve conter todos os comentários necessários.

Possíveis melhoramentos:

Desenvolver um programa versátil e universal que permita ao utilizador extrair dados de partículas com base em critérios geométricos. O programa irá solicitar ao utilizador os nomes dos átomos e moléculas de interesse, nome da superfície, bem como a distância entre os átomos e a superfície. Em seguida, o utilizador especificará o nome do ficheiro a ser analisado, e o programa extrairá as estruturas correspondentes, armazenando em ficheiros .gro separados para posterior análise. Pode ser implementado um número livre de melhoramentos.