

Blatt 8

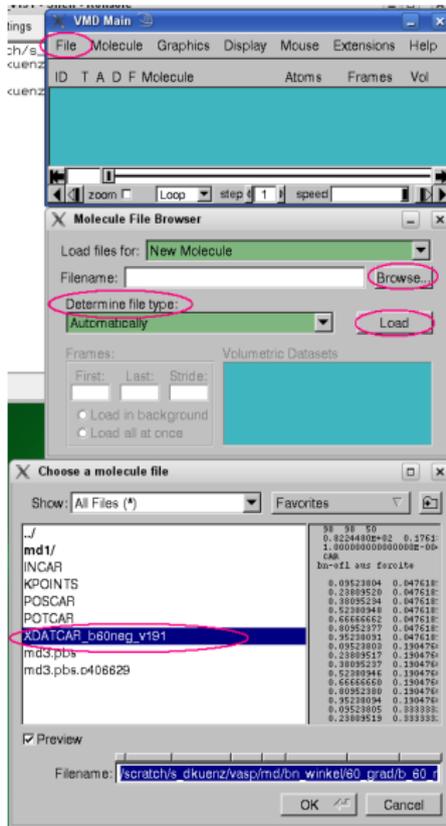
Einführung in vmd

16.06.2010

Dateien vorbereiten und vmd starten:

- POSCAR und XDATCAR.zip herunterladen
- XDATCAR.zip mit `unzip XDATCAR.zip` entpacken
- `module load vis/vmd` startet vmd
(einfacher: im gleichen Ordner wie XDATCAR und POSCAR)
- graphische Oberfläche aufrufen mit `vmd`

Trajektorie laden



- Mit **File** => **New molecule** das Öffnen der Datei beginnen (neues Fenster öffnet sich)
- Den Dateinamen (XDATCAR) bei **Browse** auswählen (neues Fenster). Mit **OK** bestätigen.
- Den Dateityp VASP_XDATCAR bei **Determine File Type** festlegen
- Mit **Load** die Datei laden.

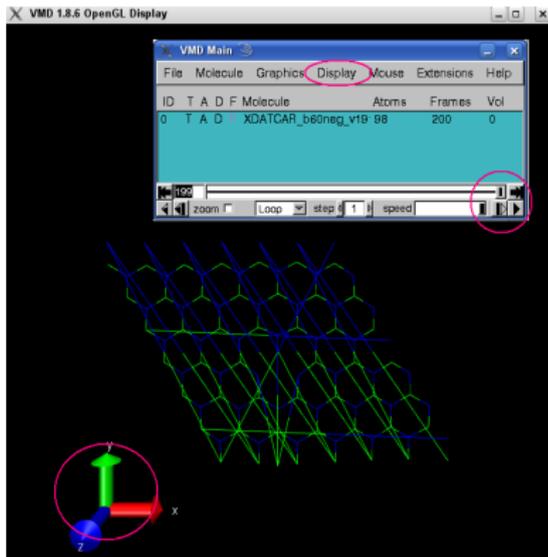
Trajektorie anschauen

Grundlagen

Gestaltung

Beispiel

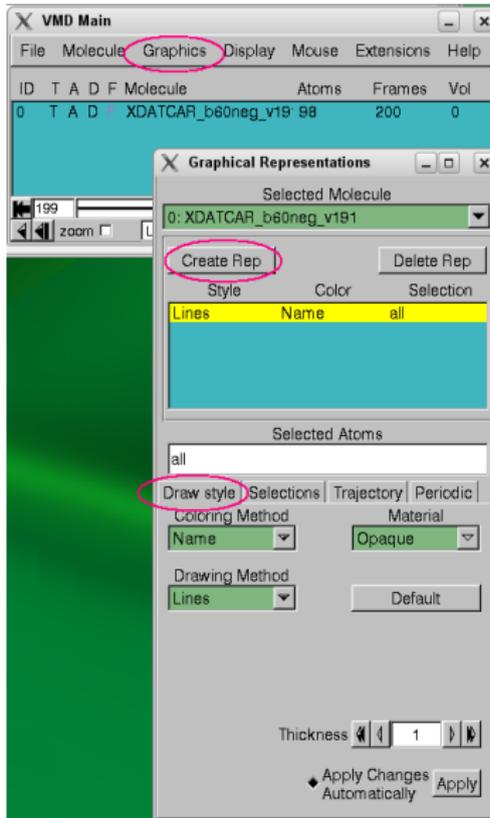
Weitere
Effekte



Die geladene Trajektorie kann zwar mit den Pfeilsymbolen unten im Hauptfenster (**Main**) abgespielt werden, sieht aber unter Umständen noch nicht sehr schön aus.

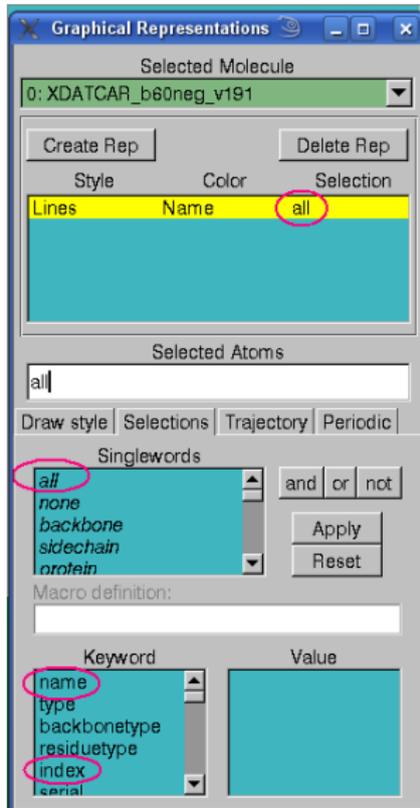
Die bunten Pfeile des Koordinatensystems können über **Display => Axes** modifiziert werden. Mit **Off** werden sie nicht mehr angezeigt.

Draw Style



Mit **Graphics** => **Representations** wird ein Fenster geöffnet, das weitere Darstellungsoptionen erlaubt. Bei **Draw Style** kann die Darstellung und Farbe der Atome gewählt werden. **Create Rep** ermöglicht das Markieren von Atomen/Atomgruppen für andere Darstellungsarten. Die gelb markierte Gruppe ist aktiv, durch einen Doppelklick kann die Ansicht einer Gruppe verborgen werden (Schrift wird rosa).

Selection



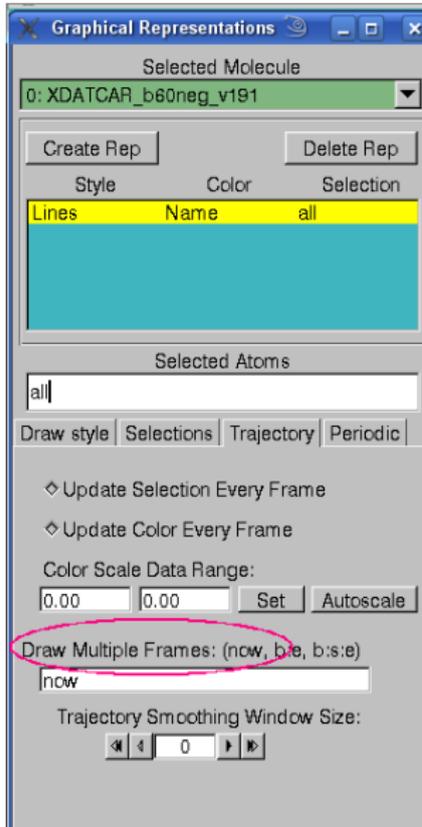
Bei **Selections** können die Zusammensetzungen der **Representations** geändert werden.

Entweder werden nur einzelne Worte (**all**) gewählt, oder zusammengesetzte Begriffe.

Nachdem ein Keyword (**index**, **name**) markiert wurde, wird bei **Value** eine Liste der möglichen Werte angezeigt. Kombinationen sind möglich.

Hier wird mit **Index 24** das Atom gewählt, das sich bei der Trajektorie am stärksten bewegt.

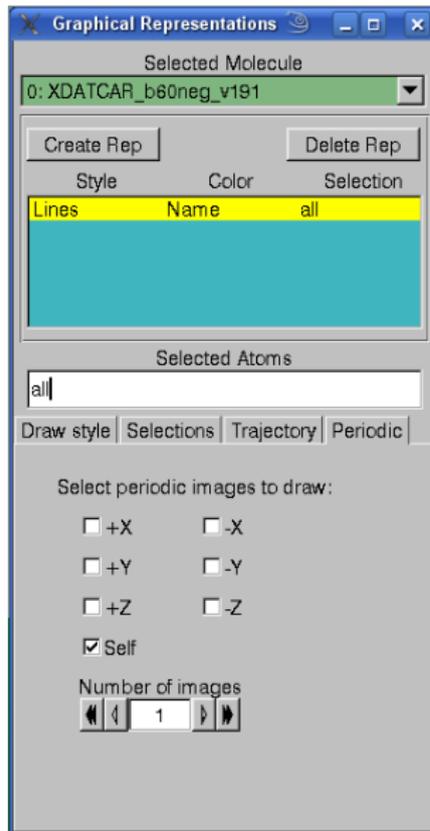
Trajectory



Bei **Trajectory** können die einzelnen Bilder einer Trajektorie überlagert werden. Dazu in die Zeile **Draw Multiple Frames** erstes und letztes Bild und evtl. Schrittgröße eintragen: 1:200 verwendet alle Bilder von 1 bis 200.

Achtung: Je nach Systemgröße und Rechnerleistung kann das sehr aufwändig werden. Deshalb besser nur für einzelne Atome oder Moleküle anwenden.

Periodic



Bei **Periodic** wird eingestellt, wie oft die Einheitszelle in der angegebenen Richtung wiederholt wird. Dazu nur die Richtung(en) markieren und die Zahl der Wiederholungen bei **Number of images** eintragen.

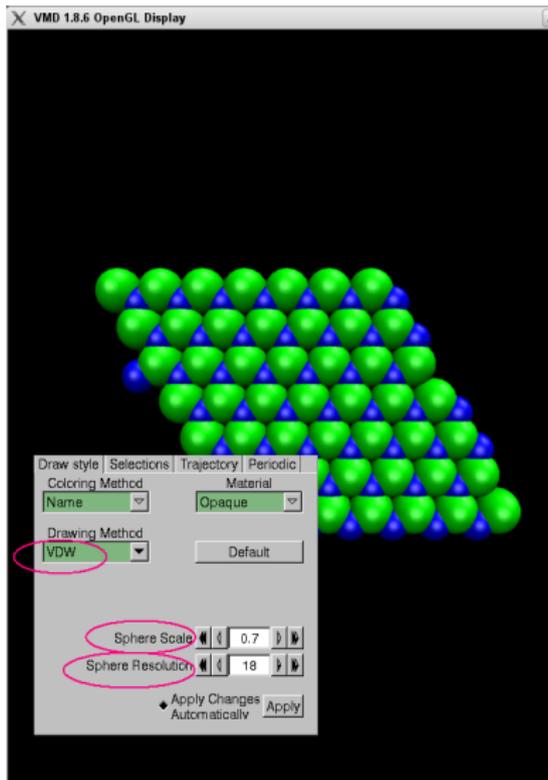
VDW

Grundlagen

Gestaltung

Beispiel

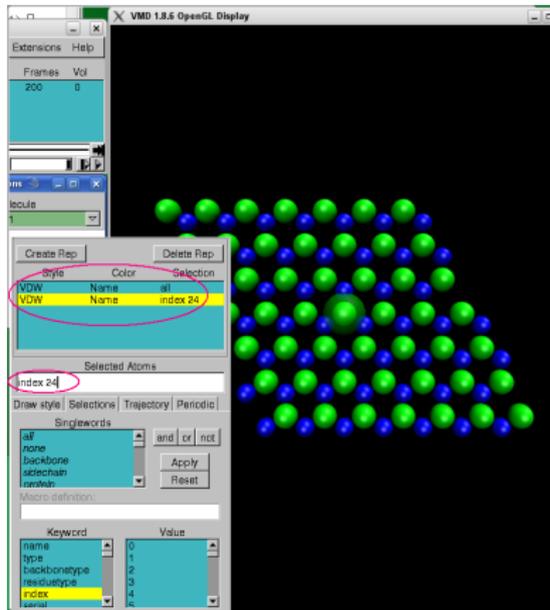
Weitere
Effekte



Hier werden die Atome als Kugeln (VDW) dargestellt. Die Farben sind standardmäßig durch die Elemente vorgegeben (Coloring Method = Name).

Die Kugeln wurden etwas verkleinert (Scale = 0.7), die Auflösung wurde erhöht, damit Kugeln statt Vielecken angezeigt werden.

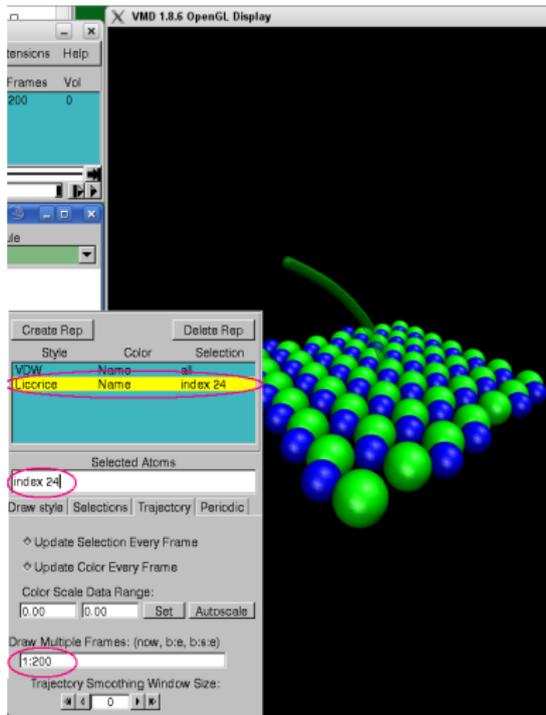
Representations



Atom 24 ist jetzt in 2 **Representations** enthalten, einmal als kleine Kugel zusammen mit allen anderen Atomen, einmal alleine. Diese wird als größere transparente Kugel dargestellt.

Neue **Representations** werden mit **Create Rep** erzeugt.

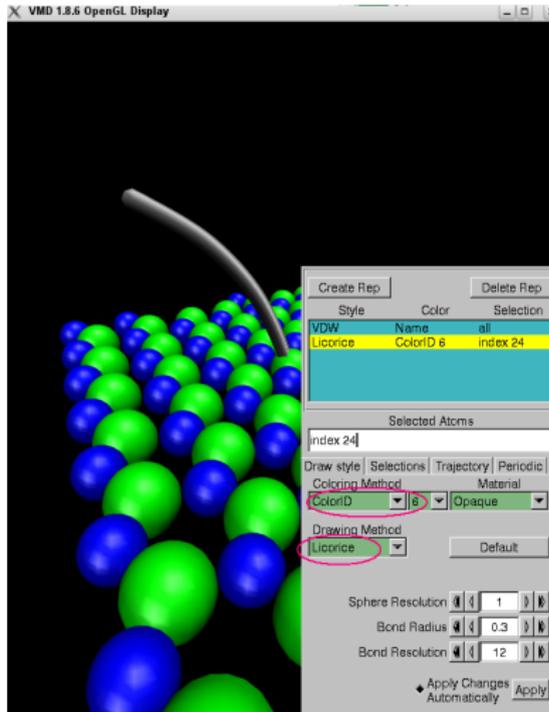
Trajektorie



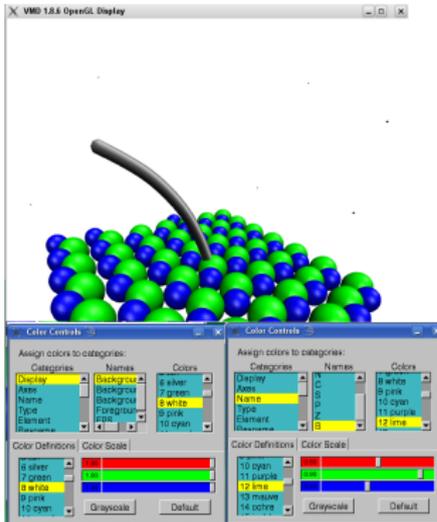
Die einzelnen Bilder der Trajektorie werden nun für das einzelne Atom 24 überlagert (gelbe Markierung dieser Gruppe).

Die Kugeln sind transparent, miteinander verbunden und etwas kleiner, so dass die Trajektorie als Linie erscheint.

Farben



Zur besseren Visualisierung wird die Darstellung der Trajektorie verändert. Als Methode wird hier **Licorice** gewählt. Die Farbe wird jetzt auch nicht mehr nach dem Element festgelegt, sondern nach Farbnummer (**ColorID = 6**).



Farben definieren

Farben können bei **Graphics**
=> **Colors** angepasst werden.
Bei **Categories** und **Names** wird
die zu ändernde Größe
festgelegt, bei **Colors** wird die
Farbe dazu gewählt.
Änderungen werden direkt
angezeigt. Im unteren Bereich
des Fensters werden die
Farbdefinitionen modifiziert.

Bsp.:

Display => Background =>
White

Name => B => Lime

Perspektive und Bewegung

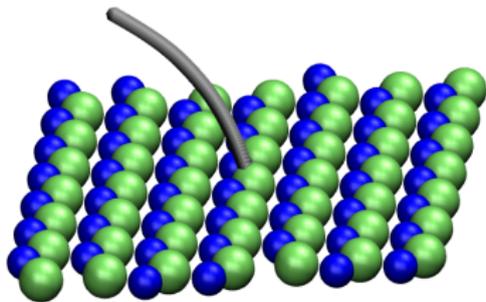
Grundlagen

Gestaltung

Beispiel

Weitere
Effekte

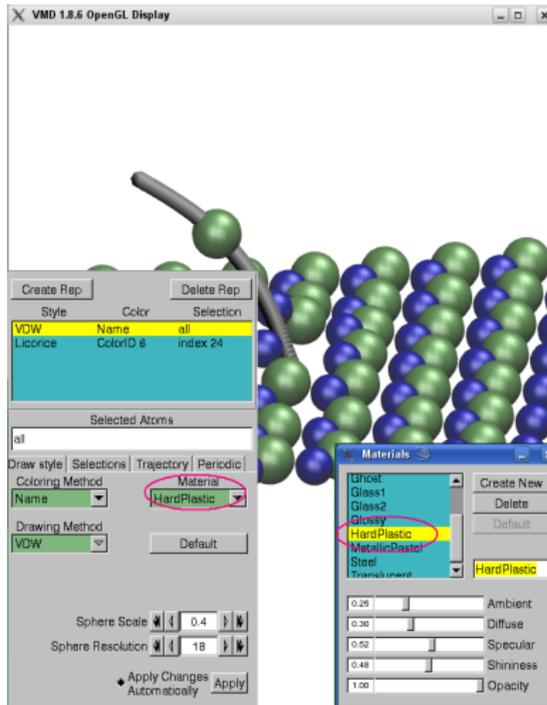
Wird die Darstellung bei **Display** von **Perspective** auf **Orthographic** geändert, wirken die Atom-Kugeln weniger verzerrt.



Das angezeigte System kann auch bewegt werden. Dazu in die Anzeigefläche klicken und auf eine der Tasten r, t oder s drücken. Die Anzeige kann dann mit der linken Maustaste gedreht, verschoben oder skaliert werden. Mit der Taste = wird die ursprüngliche Ansicht wiederhergestellt.

Diese Optionen können auch im Mouse-Menue gefunden werden.

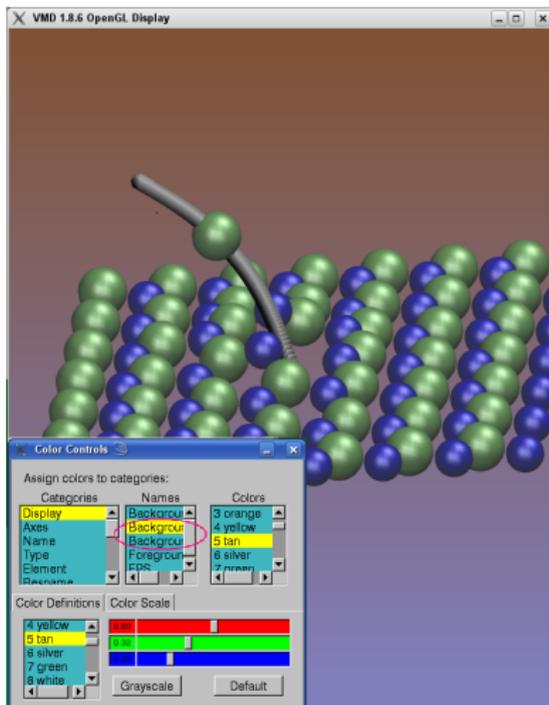
Lichter und Material



Die Zahl der Lichtquellen kann bei **Display => Light** eingestellt werden. Ihre Position wird bei **Mouse => Move Light** geändert.

Die Eigenschaften des bei **Draw Style** ausgewählten Materials kann unter **Graphics => Materials** verändert werden. Damit wird hauptsächlich die Lichtreflektion und Transparenz beeinflusst.

Hintergrund



Bei **Display** => **Background** => **Gradient** kann auch ein Farbverlauf für den Hintergrund eingestellt werden. Die einzelnen Farben werden dann wieder bei **Graphics** => **Colors** geändert. Der 2. und 3. Eintrag für Background beziehen sich auf den Farbverlauf im Hintergrund.

Diese Einführung umfasst nur einige Möglichkeiten, Daten mit VMD zu visualisieren.