

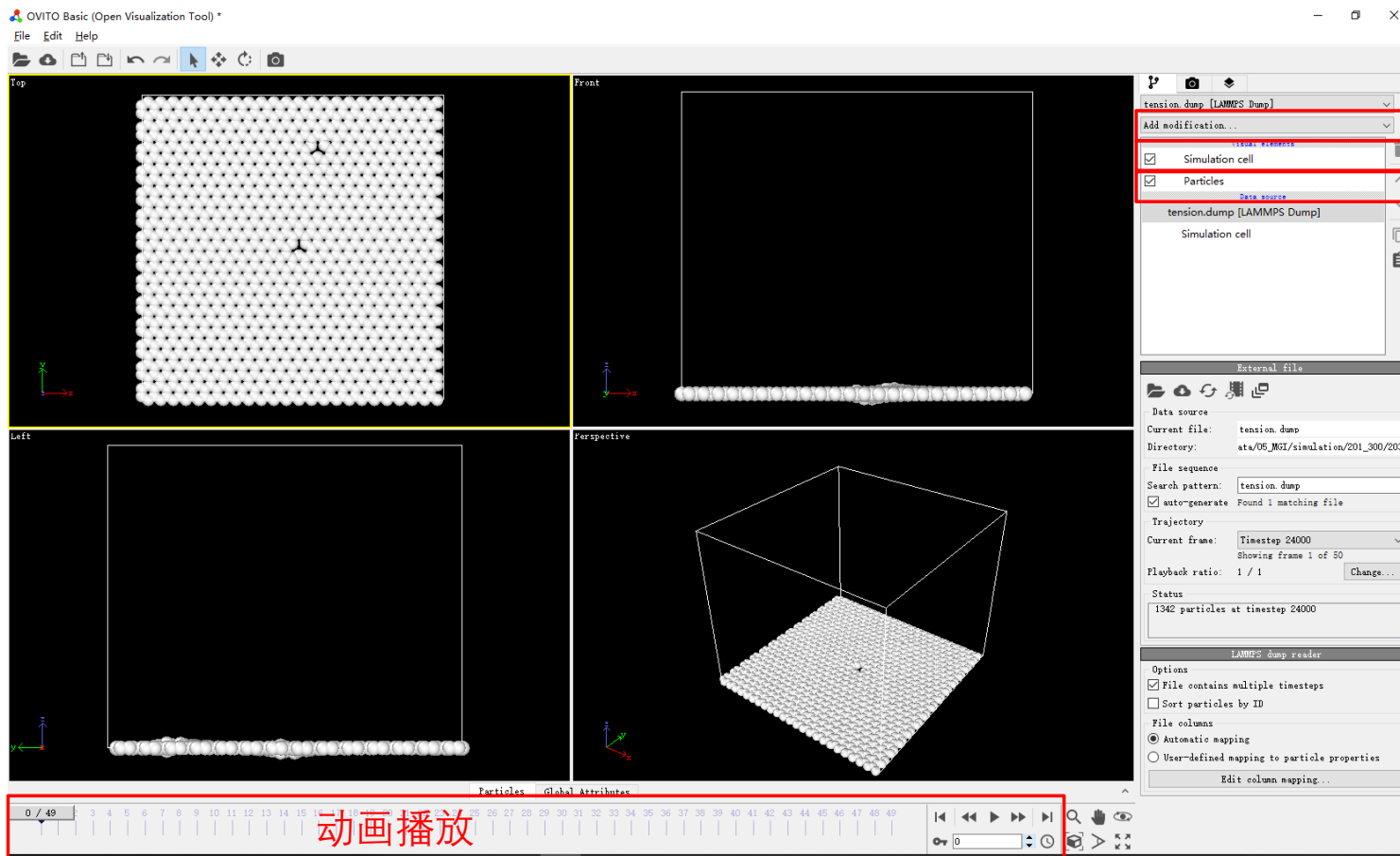
原子模拟结果可视化 相关软件介绍

贾向正
武汉大学土木建筑工程学院

1. OVITO
2. VMD
3. VESTA
4. Materials Studio

OVITO

软件在官网<https://www.ovito.org/>可以免费下载basic版。主要用来可视化模拟结果(.dump文件)，主界面如下(已导入文件)

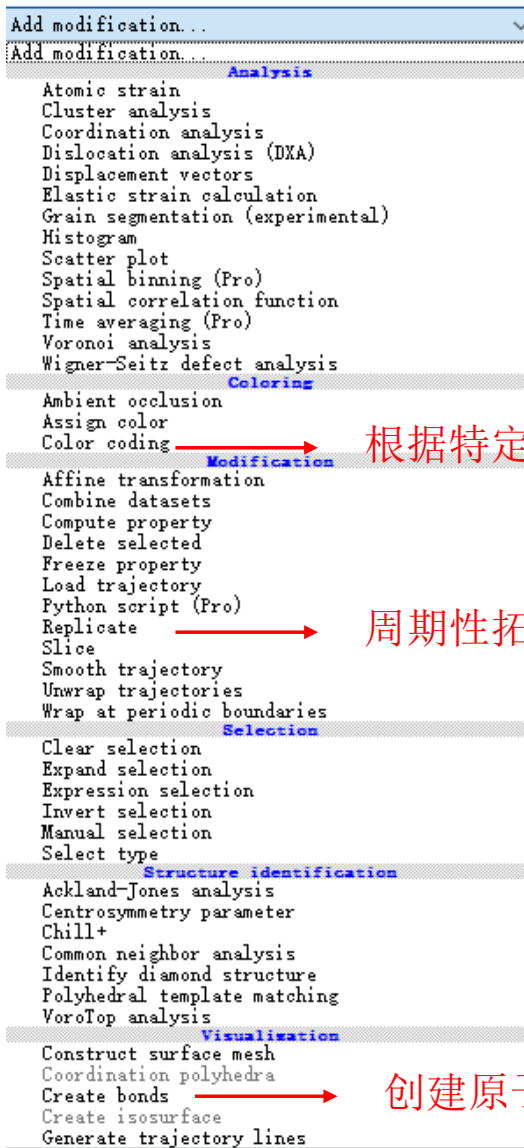


添加modification, 例如周期性、成键、原子染色等

显示盒子, 若要导出图片, 应把simulation cell中的渲染选项取消

改变原子显示半径等

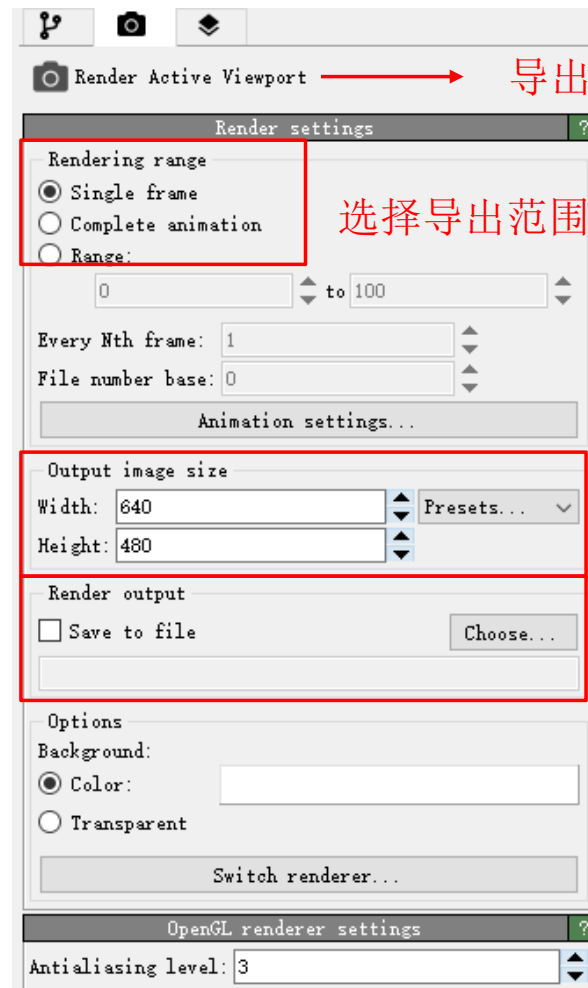
动画播放



根据特定信息对原子染色

周期性拓展结构

创建原子键



导出当前主界面显示内容的图片

选择导出范围

设置分辨率

选择导出格式

若要导出动图，需要导出格式中选择.gif或.mp4，并把Save to file勾选后修改导出地址，导出范围选择Complete或Range。

OVITO可识别的文件格式之一，也是LAMMPS中常用的data文件格式

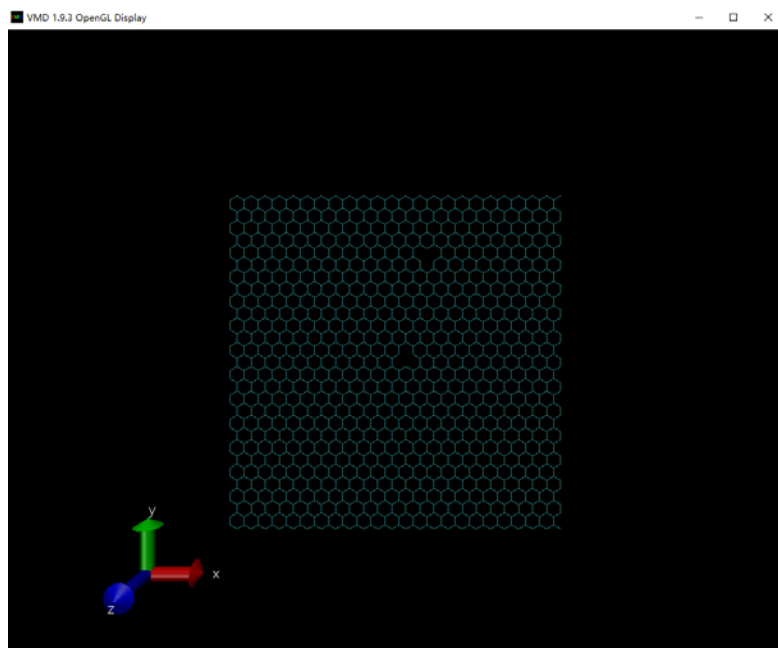
```
1343 atoms      原子总数
      1 atom types  原子类型数
0.0000 59.0282898 xlo xhi
0.0000 59.6399994 ylo yhi
0.0000 50.0000000 zlo zhi
Masses
      1 12.01070  原子质量
Atoms
      1 1 0.0000      1.22976      0.00000      0.00000
      2 1 0.0000      0.00000      0.71000      0.00000
      3 1 0.0000      0.00000      2.13000      0.00000
      4 1 0.0000      1.22976      2.84000      0.00000
      5 1 0.0000      3.68927      0.00000      0.00000
      6 1 0.0000      2.45951      0.71000      0.00000
      7 1 0.0000      2.45951      2.13000      0.00000
      8 1 0.0000      3.68927      2.84000      0.00000
      9 1 0.0000      6.14878      0.00000      0.00000
```

三个方向上盒子的最小值与最大值，即盒子大小

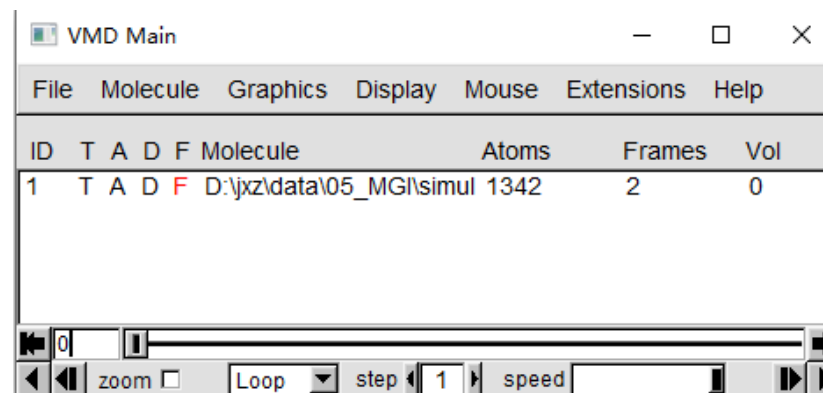
原子序号，原子类型，电荷，原子x方向坐标，y方向坐标，z方向坐标

VMD

软件作用与OVITO类似，主要用来可视化模拟结果(.xyz文件)，主界面如下(已导入文件)

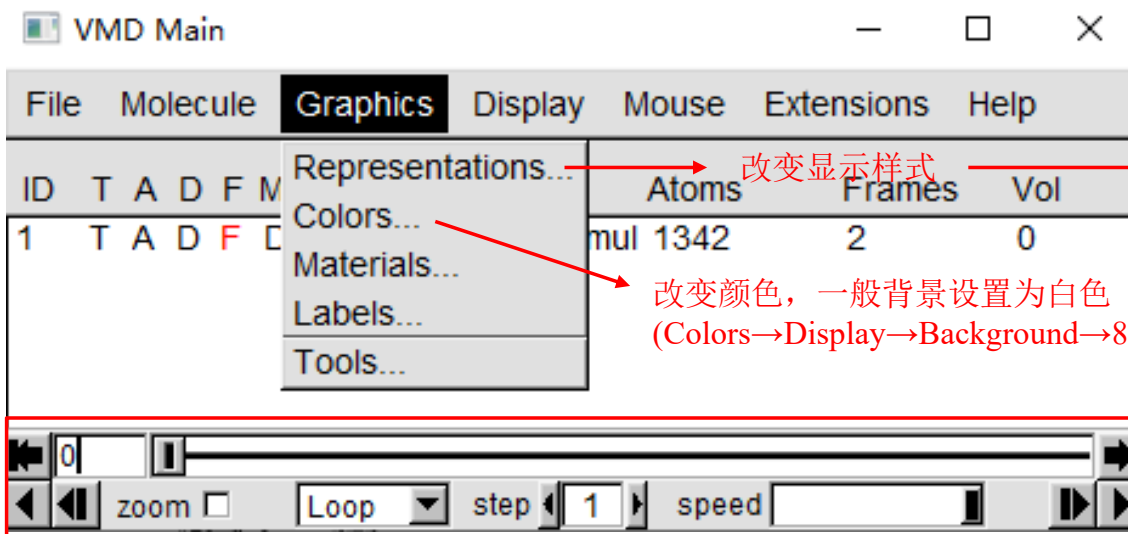


可视化界面



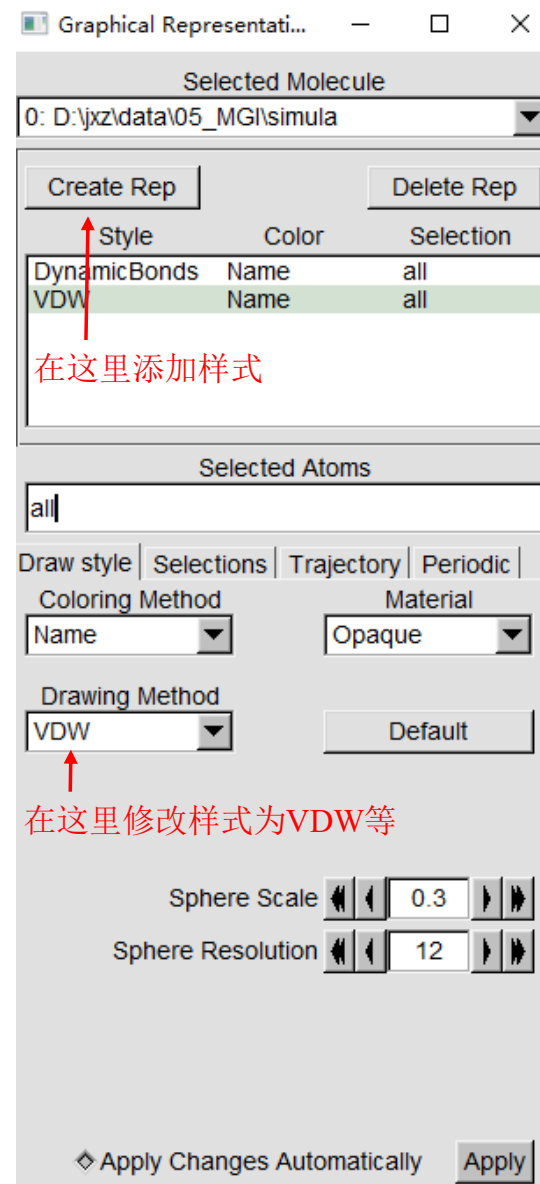
控制界面

这个界面负责调节各种改动，.xyz文件拖到此窗口以打开



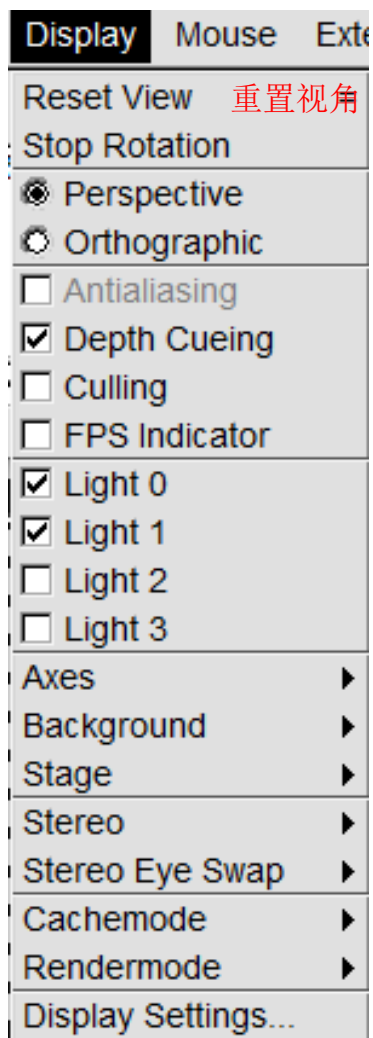
打开的文件包含多组信息时，可以通过这里控制当前显示图像或播放动图

常用显示样式：DynamicBonds + VDW，其中VDW样式需修改原子半径(默认为1，一般用0.2或0.3)



在这里添加样式

在这里修改样式为VDW等



重置视角

选择透视视图或正交视图

是否打开景深 (渲染图片时这里一定要关闭)

调节灯光

常用快捷键:

t: 平移; r: 旋转;

h: 左转; l: 右转;

j: 上转; k: 下转;

=: 回归初始视角;

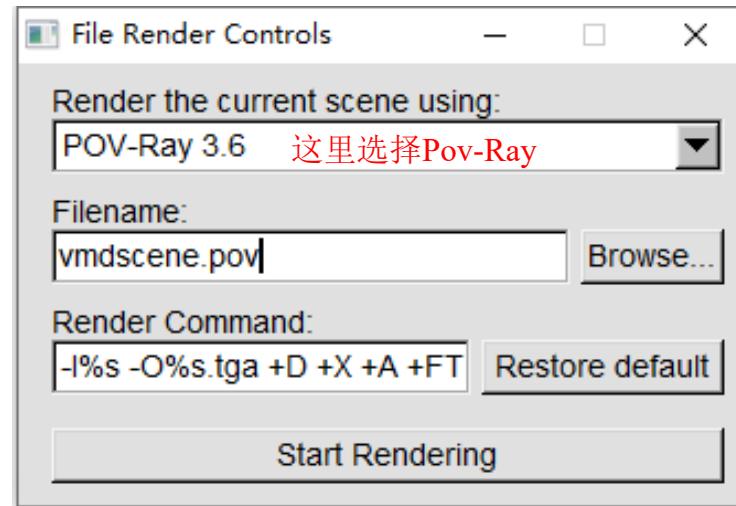
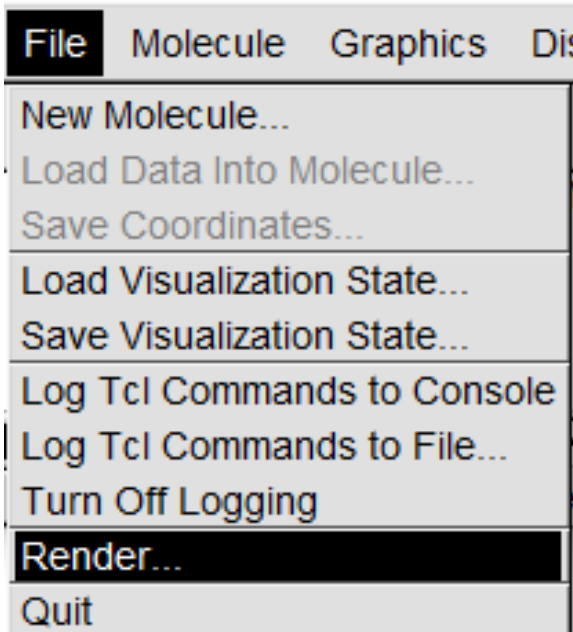
2: 测量两原子间距离



建立常见模型

打开命令控制器

渲染图片，一般结合POV-Ray使用



这里选择保存路径及文件名，
后缀为.pov

POV-Ray在官网可免费下载，将生成的pov文件拖入软件，即可渲染得到png文件。
注意，在用VMD渲染前，一定要把可视化窗口最大化，否则渲染得到的图片比例不均匀。

制作动图，参考：https://blog.csdn.net/weixin_30732487/article/details/99338977

VESTA

参考晶体结构可视化软件VESTA入门教程:<http://www.cailiaoniu.com/201129.html>

Materials Studio

参考培训教程:

链接: <https://pan.baidu.com/s/1P6QFZ1z65LpQ8bR9JOZU4A>

提取码: tv31