

Визуализация результатов моделирования наноструктур с помощью программы RasMol

Маркевич М. И.¹, Щербакова Е. Н.²

¹ ГНУ «Физико-технический институт НАН Беларуси»,

² Белорусский национальный технический университет

Одной из целей дисциплины «Информационные технологии нано- и микросистемной технике» является обучение методам визуализации атомных систем, полученных в результате моделирования, а также способам манипуляции данными изображениями.

Основной принцип визуализации заключается в том, что если имеется некоторая система (кристалл или сложная молекула), состоящая из одного или нескольких типов атомов, координаты которых известны, то эту систему можно отобразить на экране, изображая атомы в виде определенных геометрических тел (как правило, в виде сфер) в соответствии с их относительным расположением. При этом каждому типу атомов можно присвоить определенный цвет, можно изобразить связи между ними и т.д. Программа RasMol считывает с определенным образом записанного файла координаты атомов и создает их графическое изображение. Программа функционирует в режиме двух окон – графического и текстового. В графическом окне происходит визуализация структур макромолекул, в текстовое окно вводится управляющая информация, которая позволяет изменять масштаб рисунка, цвет, представление молекул, выделять группы атомов, Управляющие данные вводятся в виде текстовых команд, описание которых приведено на странице помощи. Наиболее используемыми при визуализации кристаллов являются команды «Ван-дер-Ваальсов радиус» и «Атомы и связи». Первая команда заполняет окно атомами в соответствии с их радиусами. При использовании второй команды атомы представляются в виде сфер небольшого диаметра, с пустым пространством между ними. При этом если расстояние между двумя атомами меньше некоторого значения, между ними рисуется связь в виде прямолинейного отрезка.

Размеры и расстояния в RasMol могут быть заданы в ангстремах или единицах RasMol. Если значение какой-либо величины содержит десятичную точку, то оно считается заданным в ангстремах. Например, координаты, введенные в PDB файле с использованием десятичной точки, имеют автоматически размерность ангстрема. Единица RasMol составляет 1/250-ю часть ангстрема. Любая величина, заданная в виде целых чисел, воспринимается в этих единицах.