



计算流程

建模

图形界面建模

MS

DS

Avogadro

Vipster

文本建模

Packmol

Moltemplate

VMD -> Tcl

结构显示/画图

通用结构

.pdb / .cif / .xyz 等

MS

VMD

Avogadro

Lammps生成
data / dump

Ovito

VMD

Lammps自带
dump命令

图片jpg

视频mpg

结果分析

图形界面分析

VMD

Ovito

Shell

脚本编程分析

Matlab / Python

VMD -> Tcl

