

# Mini-guida a VMD

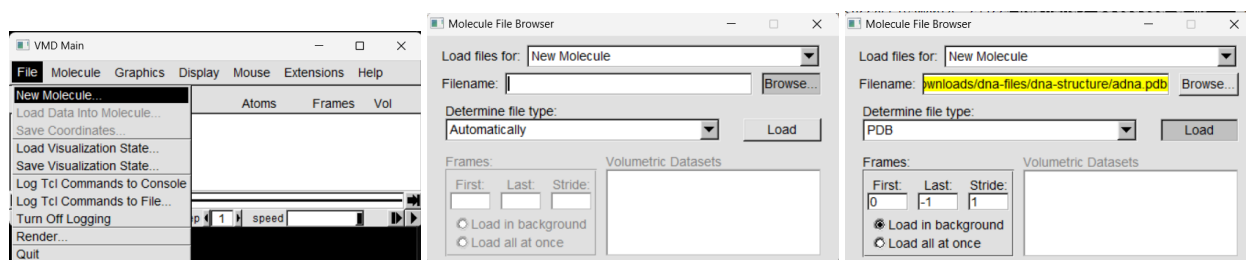
Biologia Molecolare A.A. 2022-2023

25 apr 2023

## Caricare la molecola (mol.pdb)

Aperto il programma VMD, cliccare su **File > New Molecule**, quindi **Browse** e selezionare il file .pdb contenente le coordinate della molecola.

Successivamente, cliccare su **Load** e visualizzare la molecola.



## Muovere la molecola

Cliccando il tasto sinistro e muovendo il cursore si ruota la molecola, premendo **t** si attiva la modalità “Traslazione”, **s** per attivare la modalità “Scaling” (avvicinare e allontanare la molecola), **r** per tornare alla modalità “Rotazione”.

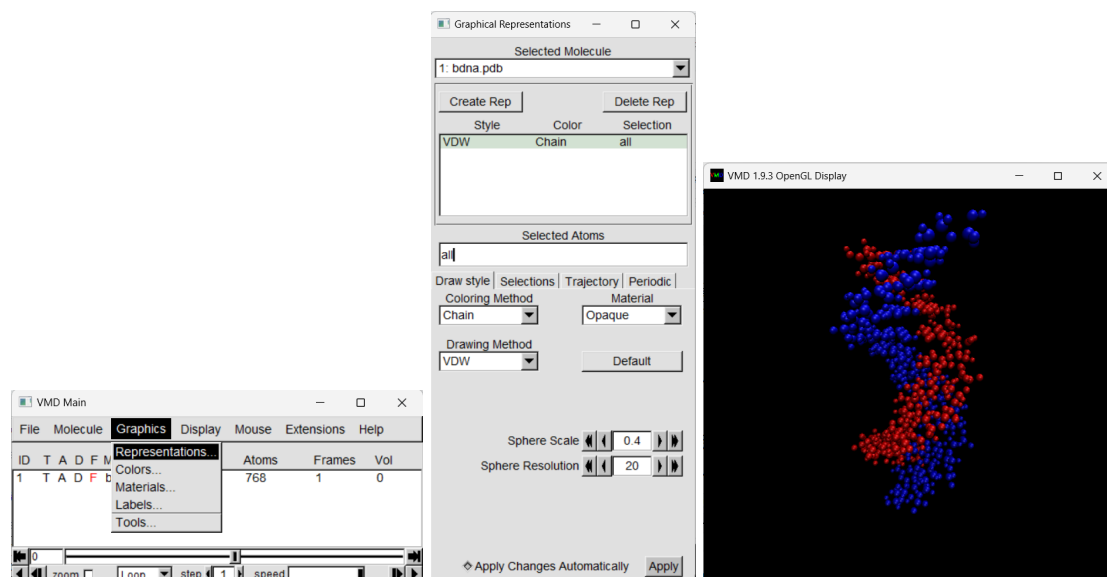
Se in modalità di rotazione si preme il tasto destro del mouse e si muove il cursore, si può muovere la molecola in senso orario e antiorario.

## Coloring, Drawing e Material

Su **Graphics > Representations** si possono modificare il “Coloring Method”, il “Drawing Method” e il “Material” di una molecola.

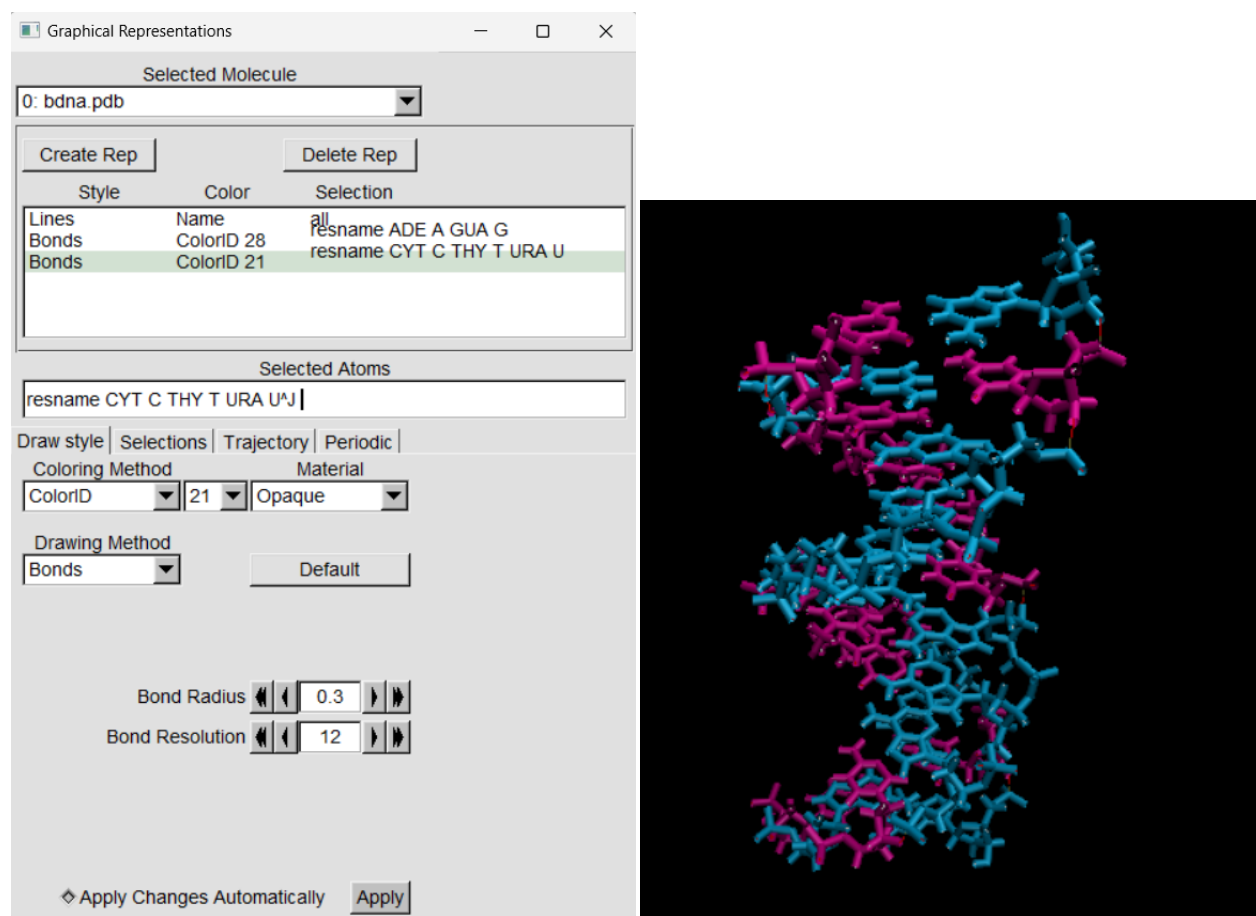
“Coloring Method” definisce i colori con cui vengono rappresentate le componenti della molecola (ad es. **ResType** per distinguere amminoacidi basici, acidi ecc..., oppure ‘Chain’ distinguere per distinguere l’elica 5’-3’ da quella 3’-5’).

“Drawing Method” definisce il modo in cui vengono rappresentati gli atomi e i legami della molecola (ad es. **CPK** per una rappresentazione balls and sticks come i modellini di chimica, **VDW** per rappresentare solo gli atomi con il loro raggio di Van Der Waals). “Material” definisce il materiale con cui viene rappresentata la molecola, quindi un materiale più o meno trasparente, lucido, opaco, riflettente.



Si usa **Create Rep** per creare un “layer”.

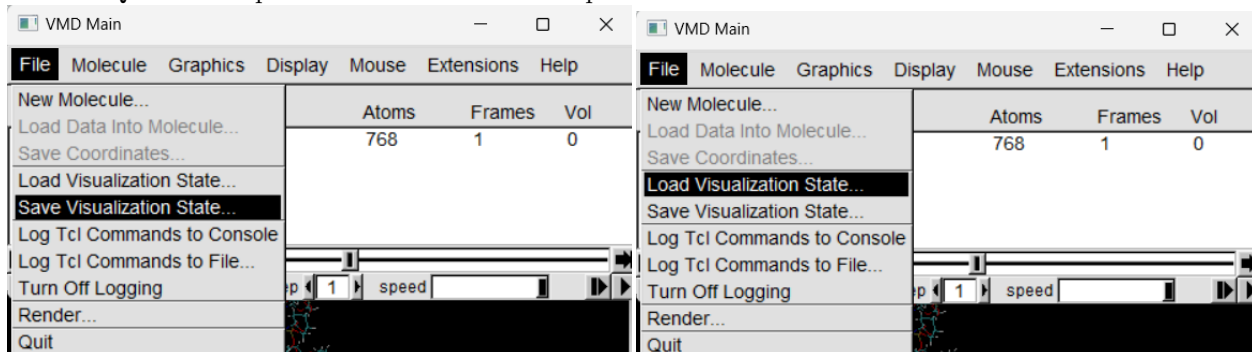
Per esempio si crea un layer solamente con le purine colorate con un certo colore e un layer con le pirimidine colorate con un colore diverso.



## Visualization State (proj.vmd)

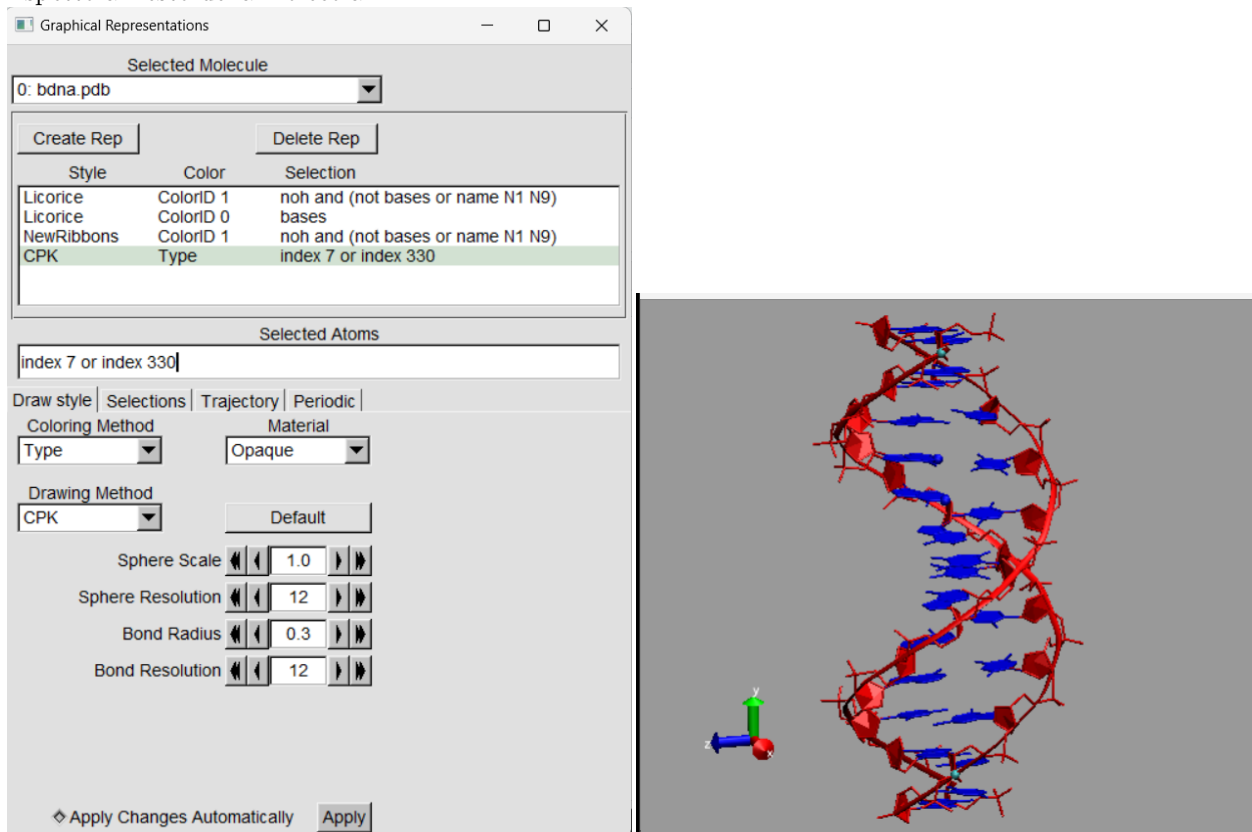
Per salvare il proprio lavoro con i layer creati in un file .vmd, cliccare su **File > Save Visualization**

State. Quindi alla prossima sessione VMD si potrà caricare con File > Load Visualization State.

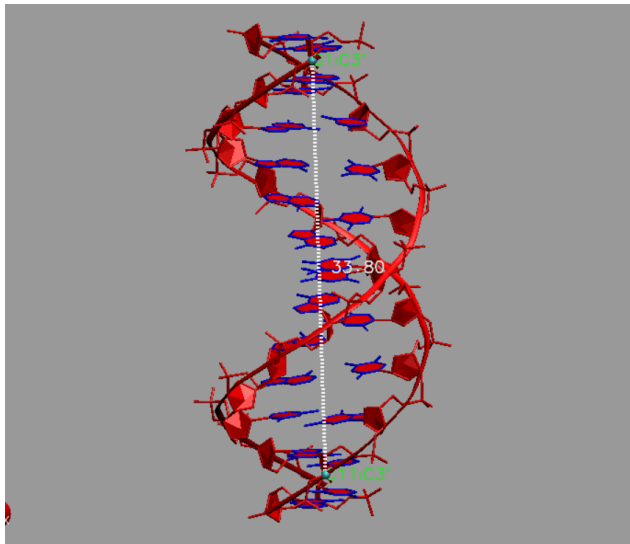
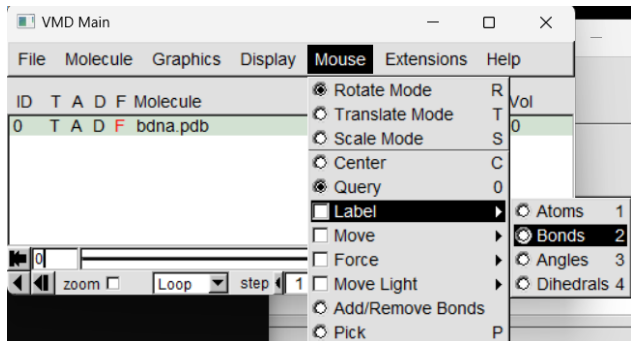


### Misurare la distanza tra due atomi

Aprire Graphics > Representations, cliccare su Create Rep, scrivere nel box Selected Atoms il testo “index 7 or index 330”, modificare il Drawing Method in CPK, in questo modo gli atomi saranno più visibili rispetto al resto della molecola.



Selezionare Mouse > Label > Bonds, cliccare sugli atomi. Verrà creata una linea tratteggiata affiancata da un numero che rappresenta la distanza tra i due atomi.



### Creare uno snapshot

Clickare su **File > Render**, infine **Start Rendering**. Verrà creata un'immagine con il nome `vmdscene.bmp`.

