VMD.md 2024-02-21

VMD

インストール方法

公式サイトのダウンロードページからダウンロードの手続きを行う.

ログインページが出るが, 適当なものを入力する. あとで思い出しやすいものにするなら, 今後研究室で使う可能性のあるユーザ名とパスワードがあるのでそれにしておくと良い.

操作方法

- VMDアプリを起動し, File -> New Molecule ...とクリック.
- Load files forがNew Moleculeになっていることを確認する.
- Browse . . . をクリックし表示したいファイルを選ぶ.
- Loadをクリック

グラフィック操作

- VMD MainディスプレイのGraphics -> Representations...
- Drawing Methodを選択し、Pointsに変更.
- Thicknessを適当に大きくする.

VMD起動時の設定を変更する

分子可視化ソフトであるVMDの起動時の設定を変更する方法について解説する.

.vmdrcをおく

- ./.vmdrc (つまり現在のディレクトリに vmdrcを置いておく)
- ~/.vmdrc(自分のホームディレクトリに vmdrcを置いておく)
- /VMDDIR/.vmdrc (VMDのインストールディレクトリに vmd rcを置いておく)

の3つのやり方がある。 ちなみに3つのディレクトリは上に行くほど優先順位が高くなる。

最も手っ取り早いのは、自分のホームディレクトリに、vmdrcを置いておくことである。

.vmdrcの中身

例えば、以下のようにする

#main,graphics画面を表示
menu main on
menu graphics on
#軸の表示を消す
axes location Off
#背景を白にする
color Display Background white

VMD.md 2024-02-21

これにより、軸も表示されず、白い背景で起動する

参考

YouTube: 10.2 How to install VMD on a newer Mac VMDの使い方の基本 (Mac)