

http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/



VMD uiuc



VMD is a molecular visualization program for displaying, animating, and rendering molecular dynamics simulation data. It runs on Linux, Windows, and macOS, is distributed free of charge, and includes source code. ([more details...](#))

Spotlight

VMD was used to make the **winning image** in the Illustration category of the 2016 National Science Foundation. The structure was loaded and visualized with VMD rendered using the **Tachyon multiprocessor ray tracer**.

Other Spotlights

Overview

- Molecular representations
- VMD plugin library
- Molecular file formats
- GPU-accelerated computing
- Interactive molecular dynamics
- Programs that use VMD
- VMD research publications
- How to cite VMD
- VMD citation list (19,000 as of Oct'16)

Download

- [Download \(all versions\)](#)
- VMD 1.9.3 (MacOS X, Unix, Windows)**
- VMD 1.9.2 (MacOS X, Unix, Windows)
- VMD 1.9.1 (MacOS X, Unix, Windows)
- VMD script library
- License, Copyright and Disclaimer

Documentation and Support

- User and installation guides
- VMD mailing list

News and

- J. Physical Chemistry Letters
- Challenges of Molecular Dynamics
- VMD 1.9.3 (MacOS X, Unix, Windows)
- GPU-Accelerated Computing
- Early Experience with VMD
- 2016 **NEW**
- Immersive Molecular Dynamics
- High Performance Computing
- Evaluation of VMD
- Molecular dynamics simulation
- QuikMD - Interactive Molecular Dynamics
- TopoGromacs
- Atomic Detail Visualization
- Past announcements

Gallery

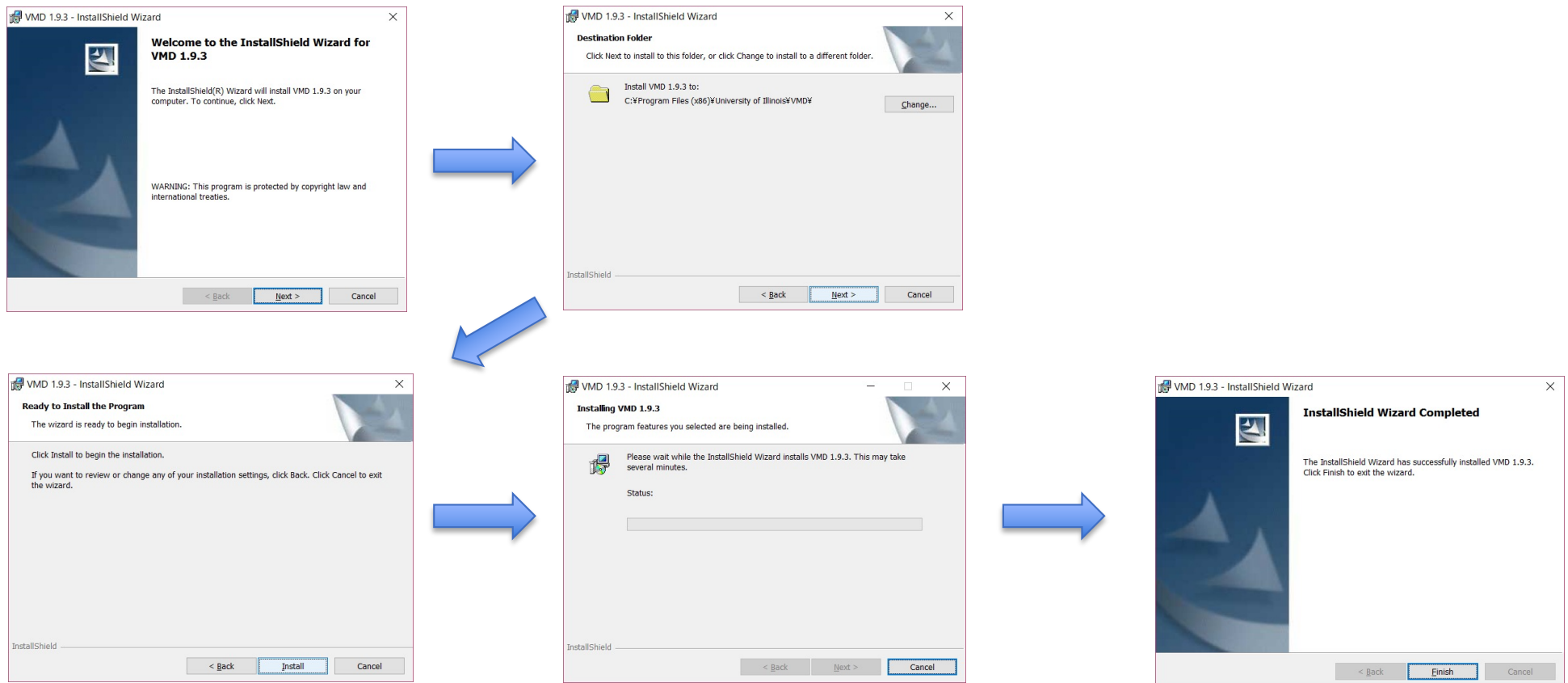
- Chromatophore
- Example VMD
- Chemical Visualization
- Visualization of Molecular Dynamics
- VMD movie gallery

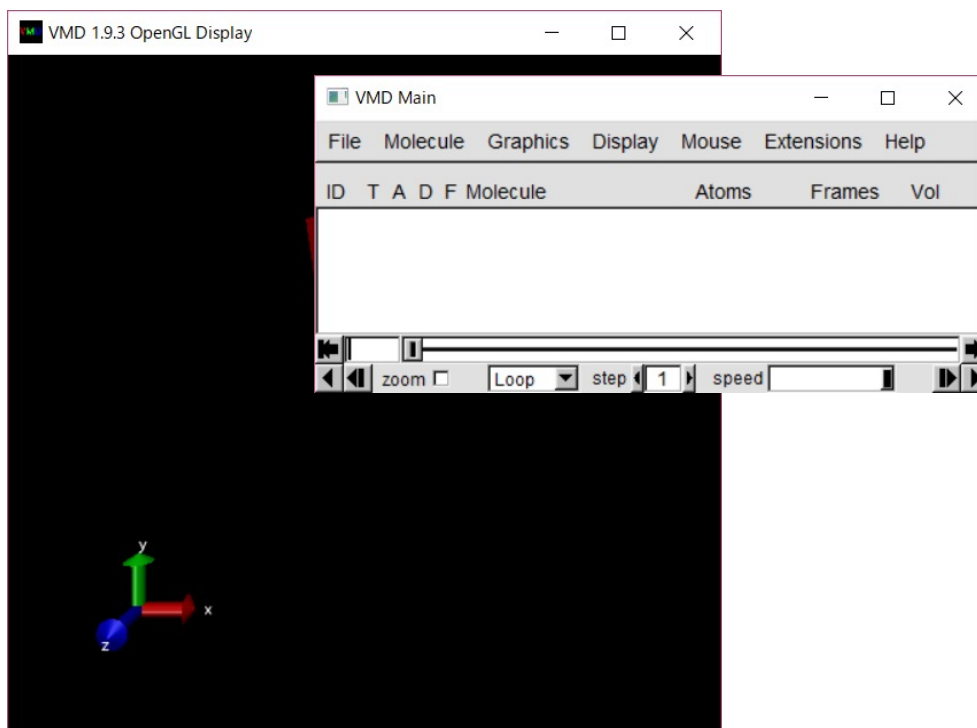
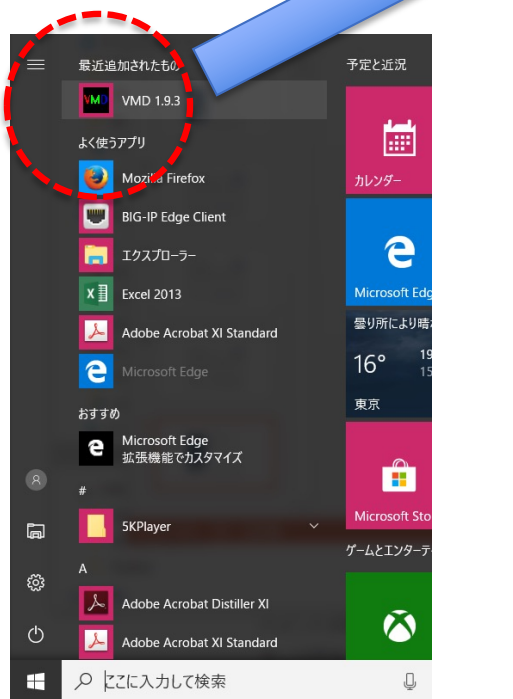
をたどるとダウンロードできます。

ユーザ登録は必要ですが、
無料で誰でも使えます。

Windowsの設定

vmd_1.9.3_winフォルダの
vmd193win32nocuda.msiをダブルクリック

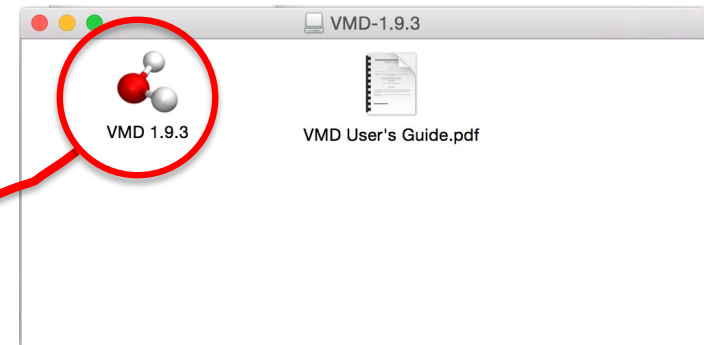
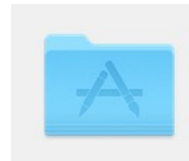
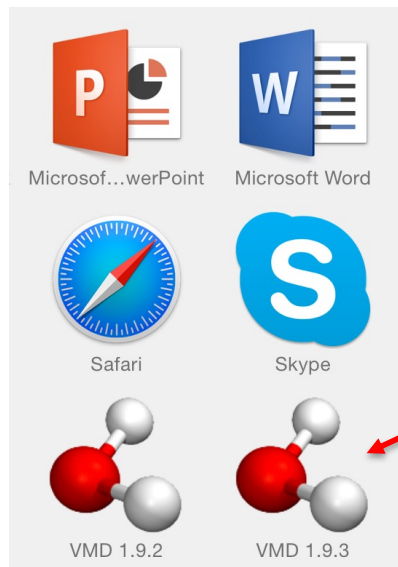




Macの設定

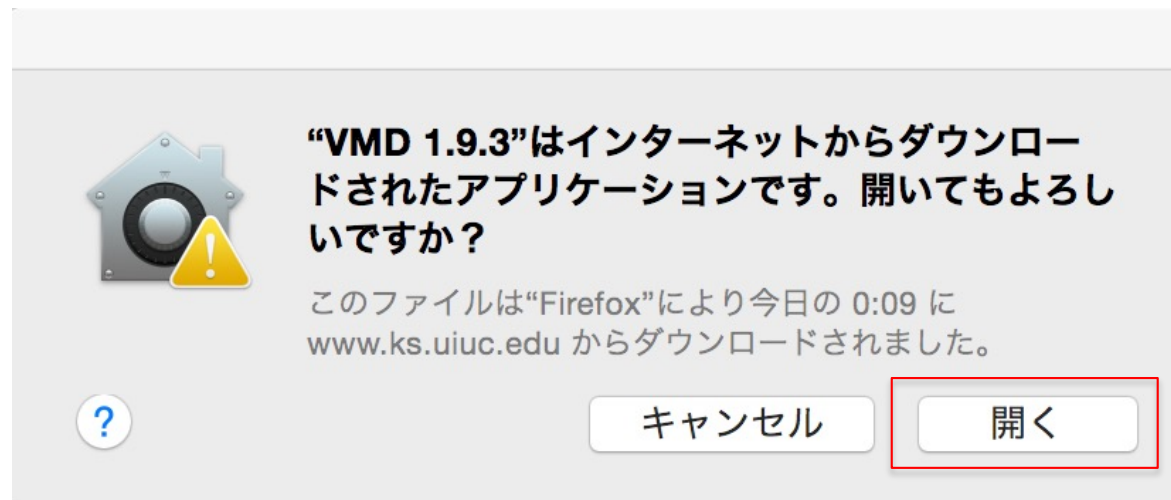
vmd_1.9.3_macフォルダの
vmd193macx86nocuda.dmgをダブルクリック

アプリケーションフォルダへドラッグ



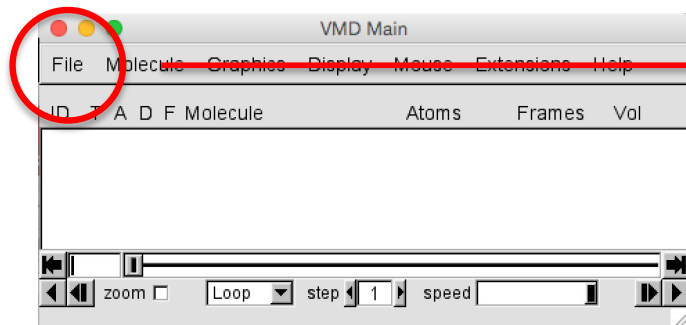
コピーができるが、実行すると



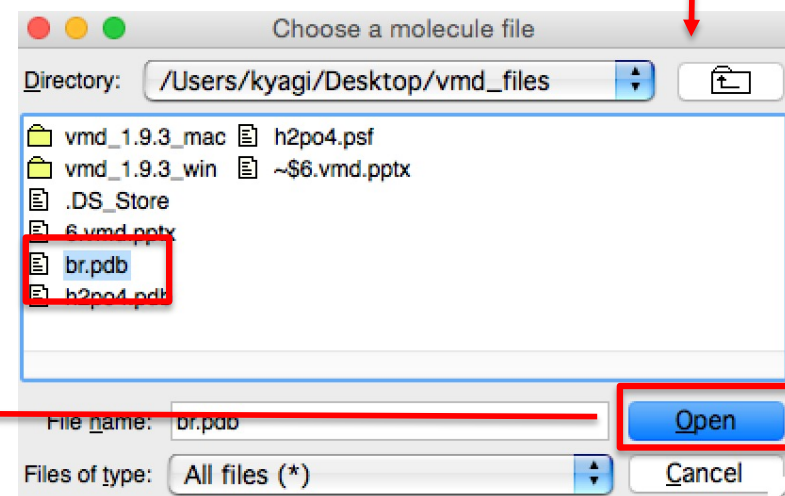
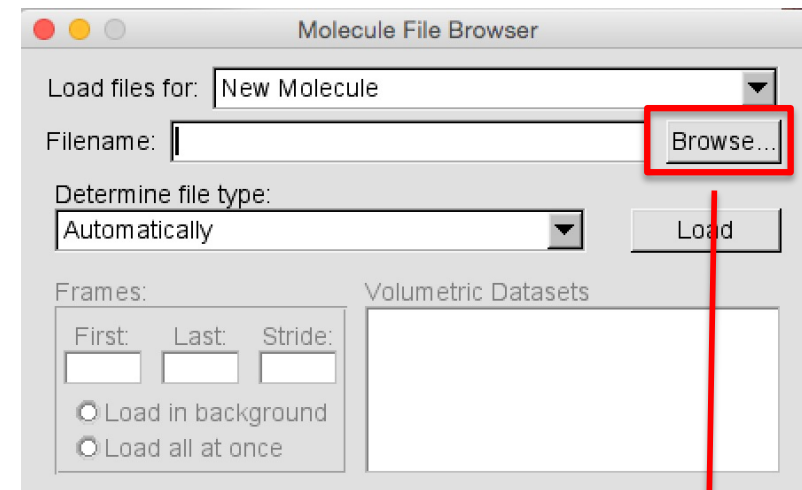
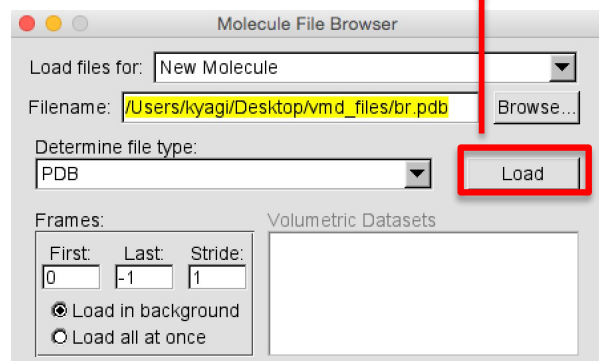
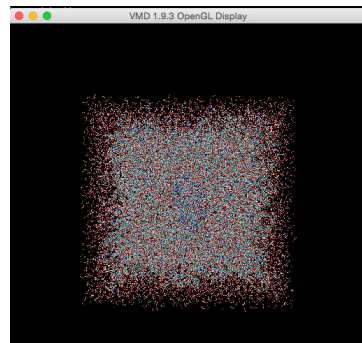


PDBファイルを開く

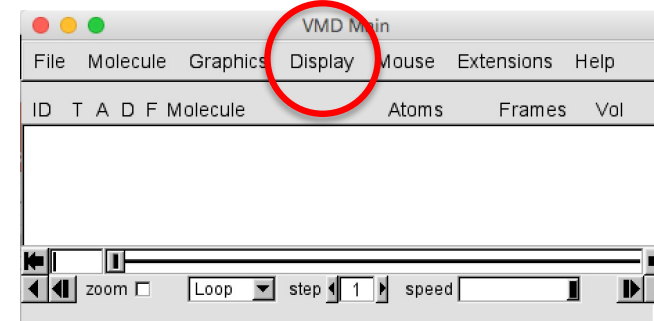
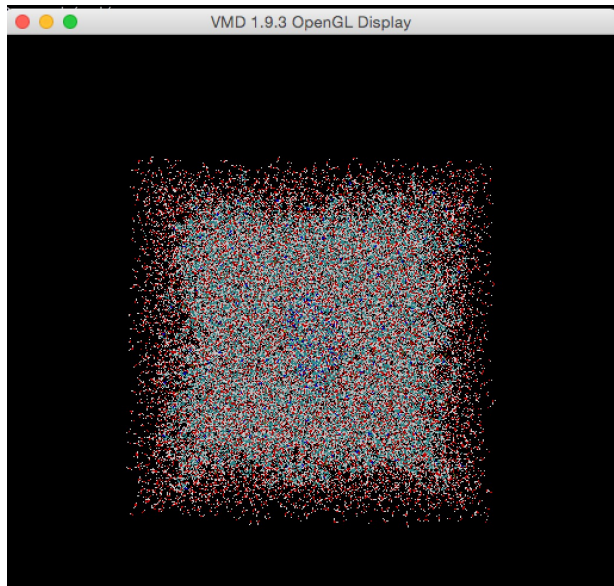
vmd_files/br.pdbを表示してみましょう。



New Molecule



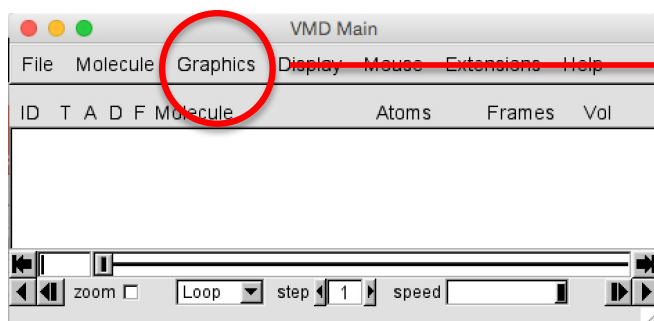
基本操作



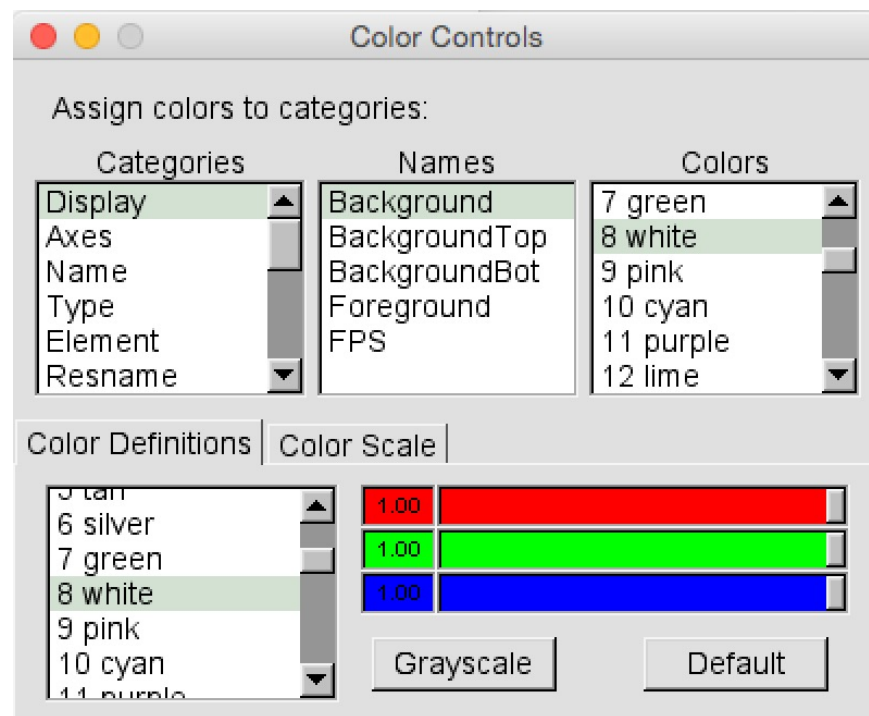
デフォルトでは、マウスで回転
キーボードのtを押すと、マウスで並行移動
キーボードのsを押すと、マウスで拡大縮小
キーボードのrを押すと、マウスで回転

位置がわからなくなったら、
Display -> Reset View(あるいはキーボードの=)

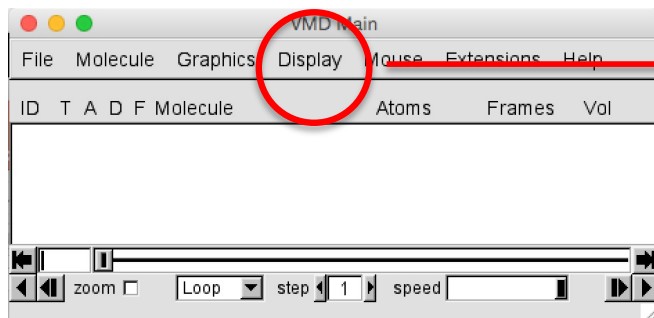
背景色



Colors

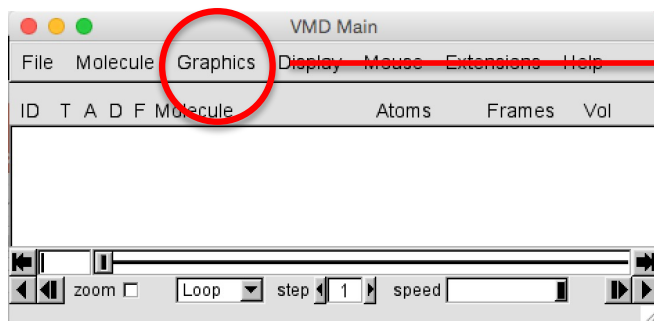


まっすぐは、まっすぐがいい

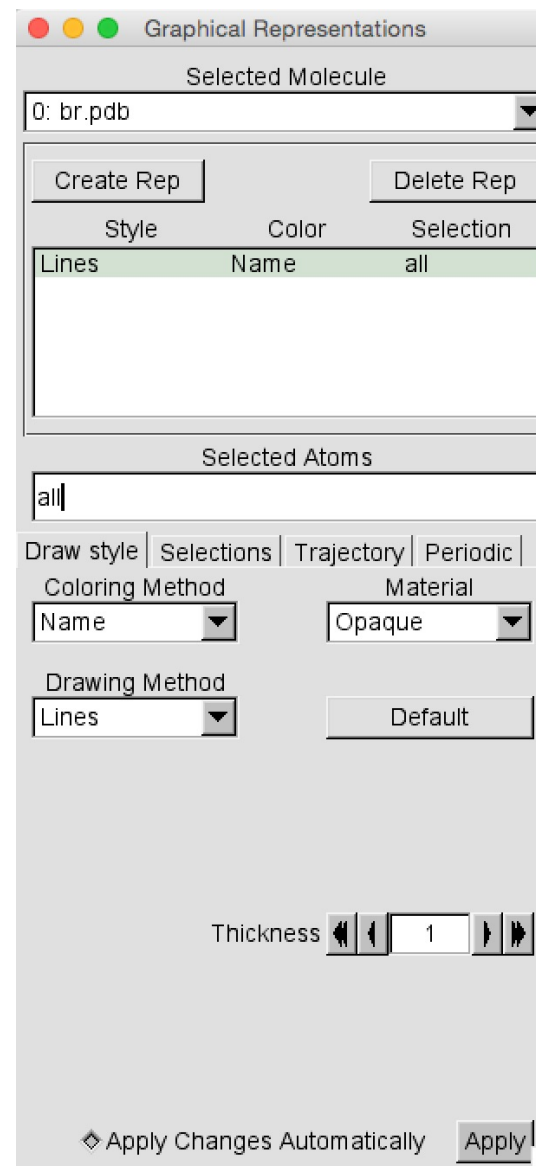
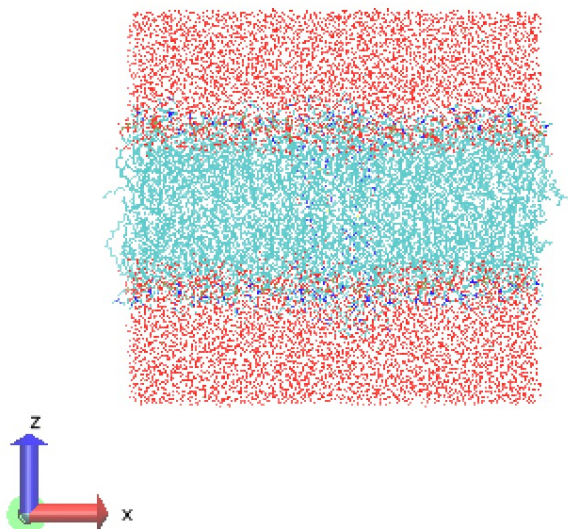


Orthographic

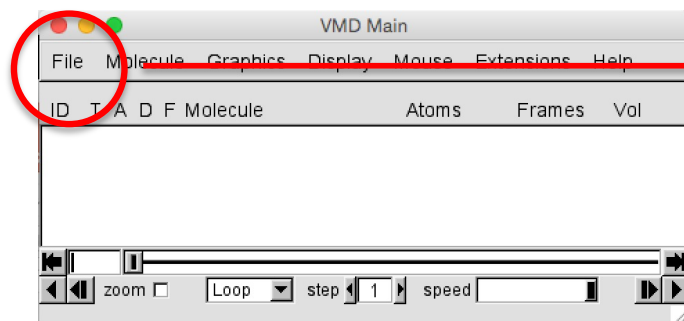
見た目をかっこよく..



Representation



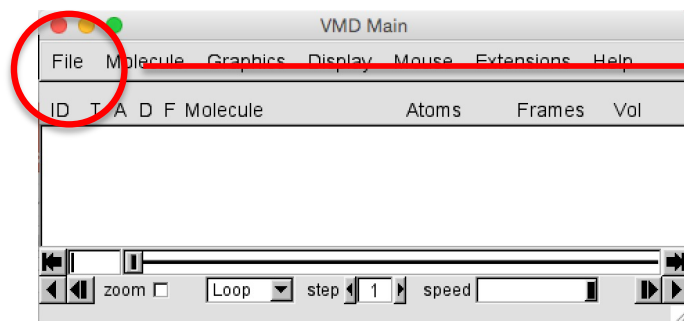
可視化状態を保存



save visualization state

適当な名前で保存。拡張子は.vmd
を使うことが多い。

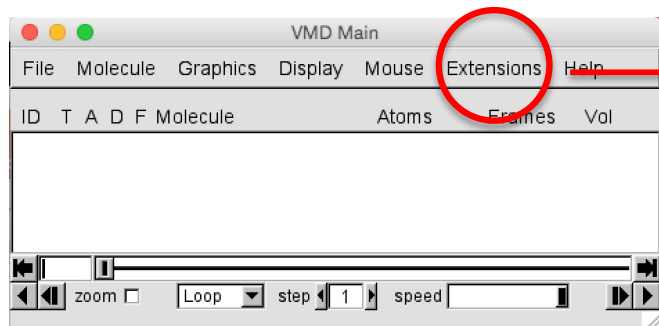
可視化状態を再開



load visualization state

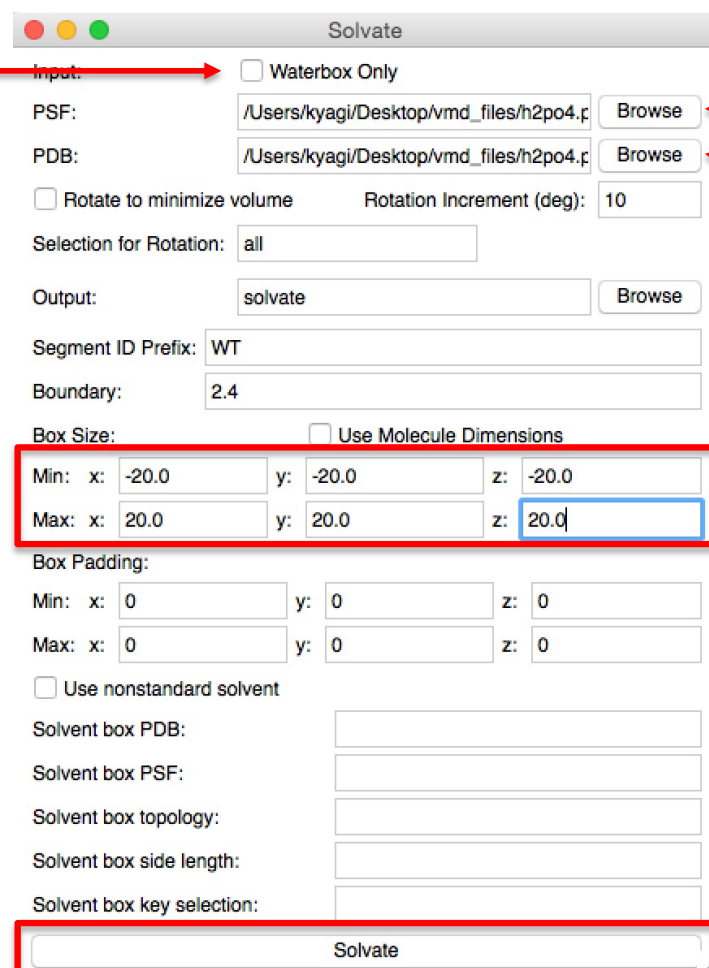
関係ファイル(br.pdb)を動かすと読
めなくなるので、注意。

水和モデルを作る



Modelling / Add Solvation Box

チェックを外す

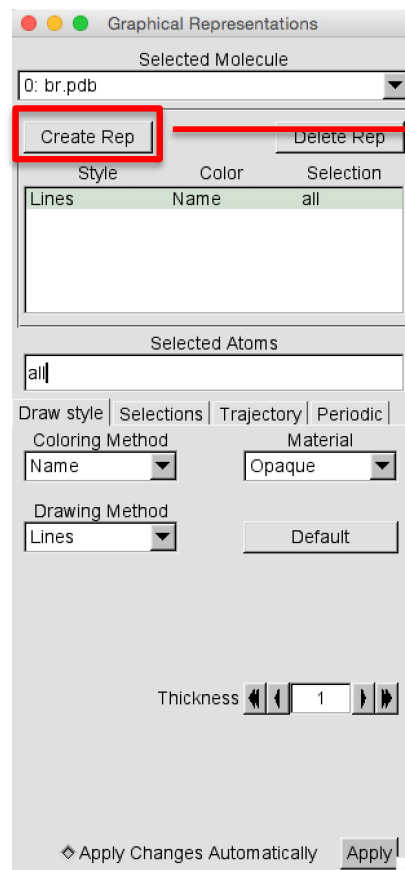
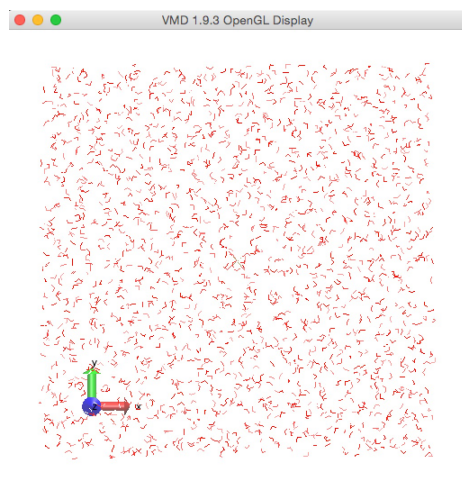


vmd_files/h2po4.psf
vmd_files/h2po4.pdb

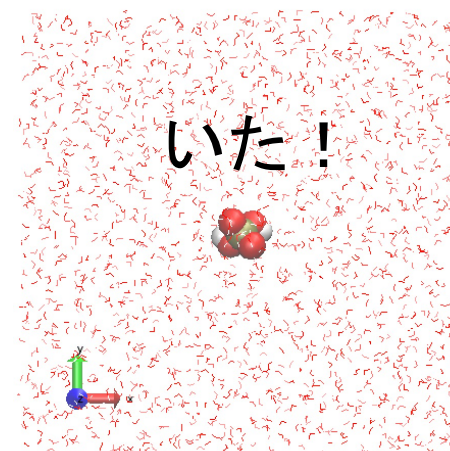
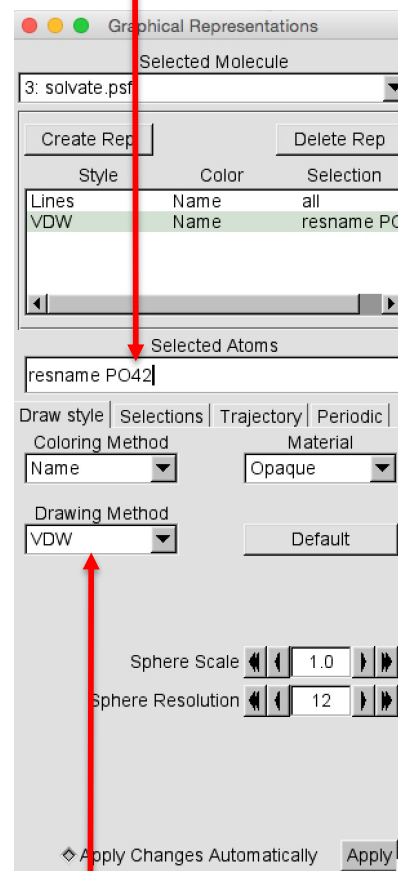
-20.0 ~ 20.0
の箱を指定

最後にクリック

水ボックスはできたけど、
リン酸が見えない・・



resname PO42



VDW

練習

br.pdbを綺麗に表示してみよう。

- 膜タンパク質は生体膜にどのように埋まっているか。
- タンパク質の2次構造を表示しよう。 α ヘリックスは何本あるか。
- レチナールを表示してみよう。(resname LYR)
- バクテリオロドプシンの機能を図とともに解説せよ。