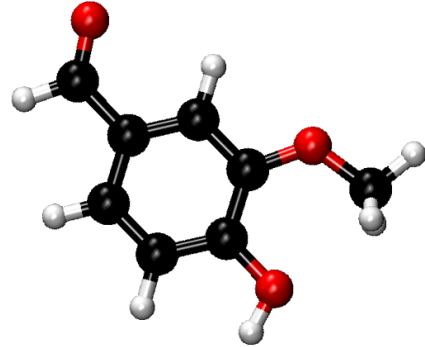


Charger une structure

- Comment ouvrir un fichier avec VMD ?
- Comment charger un fichier PDB directement depuis la Protein Data Bank ?
- Comment charger un fichier restrt de AMBER ?
- Comment charger une trajectoire AMBER ?
- Comment masquer une structure ?
- Comment renommer une structure ?

Déplacement de la vue

- Comment choisir le mode rotation ?
- Comment choisir le mode translation ?
- Comment zoomer ?
- Comment choisir le centre autour duquel tourne la vue ?
- Comment afficher/masquer les axes ?



Outils de sélections

- Comment sélectionner une partie d'une structure ?
- Comment sélectionner un résidu ?
- Comment sélectionner les résidus du numéro 1 à 10 et de 20 à 25 ?
- Comment sélectionner tous les résidus du même type ?
- Comment sélectionner un atome d'un résidu ?
- Comment sélectionner les atomes voisins d'un résidu ou d'un atome ?
- Comment supprimer les molécules d'eau et contre ions ?
- Comment sélectionner une chaîne si plusieurs sont présentes dans le fichier pdb ?
- Comment afficher/Masquer/supprimer une représentation ?

Labels : atomes, distances, angles, dièdres

- Comment faire afficher le nom d'un atome ?
- Comment faire afficher une distance ?
- Comment faire afficher un angle ?
- Comment faire afficher un angle dièdre ?
- Comment cacher/afficher les labels (nom, distances, angles ...)?
- Comment déplacer la position des labels (nom, distances, angles ...)?
- Comment changer le format d'écriture des noms d'atome ?
- Comment changer la taille des labels (nom, distances, angles ...)?
- Comment changer la couleur des labels (nom, distances, angles ...)?

Couleurs - types de représentation - Création de figures ou animations

- Comment changer la coloration d'une représentation ?
- Comment changer le type d'une représentation ?
- Comment changer la couleurs du fond ?
- Comment modifier la couleur d'un élément dans VMD ?
- Comment afficher les structures secondaires ?
- Comment sauvegarder la vue sous forme d'image ?
- Comment faire pour obtenir une jolie image ?
- Comment faire pour obtenir une animation ?

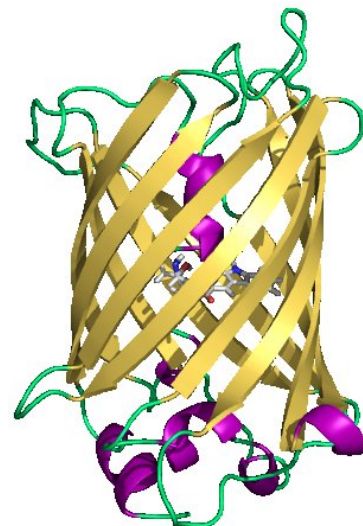
Calculs - Opérations - Gaussian

- Comment tracer un diagramme de Ramachandran ?
- Comment aligner deux structures ? Calcul du RMSd ?
- Comment afficher les orbitales à partir d'un fichier cube de Gaussian ?

Les fenêtres de VMD

Un fichier de configuration : .vmc

Un tutorial VMD (par Ross Walker)



Charger une structure

• Comment ouvrir un fichier avec VMD ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [File/New Molecule](#) puis rechercher le fichier pdb et cliquer sur [Load](#). Si VMD ne détecte pas tout seul le type de fichier, il faut le choisir dans le menu déroulant. VMD peut charger un grand nombre de type de fichier dont en voici quelques un : PDB, PQR, AMBER restrt et mdcrd, GAUSSIAN .log et .cub. Pour un fichier pdb, on peut l'ouvrir directement depuis le terminal en donnant le ou les noms de fichiers pdb à la suite de l'exécutable.

• Comment charger un fichier PDB directement depuis la Protein Data Bank ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [Extensions/Data/PDB Database Query](#). Cliquer ensuite sur [Load into new molecule in VMD](#) pour charger la structure, ou sur [Download to local PDB file](#) pour enregistrer en même temps le fichier PDB.

• Comment charger un fichier restrt de AMBER ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [File/New Molecule](#) puis sélectionner avec [Browse...](#) le fichier topology (prmtop) en choisissant comme type de fichier [AMBER7 parm](#) puis cliquer sur [Load](#). Dans la même fenêtre, charger ensuite le fichier restrt avec comme type de fichier [AMBER7 restrt](#). Sur la première ligne, il doit être écrit [Load files for : "le fichier prmtop"](#).

• Comment charger une trajectoire AMBER ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [File/New Molecule](#) puis sélectionner avec [Browse...](#) le fichier topology (prmtop) en choisissant comme type de fichier [AMBER7 parm](#) puis cliquer sur [Load](#). Dans la même fenêtre, charger ensuite le fichier trajectoire (mdcrd) avec comme type de fichier [AMBER coordinate](#) ou [AMBER coordinate with periodic box](#) si c'est le cas. Sur la première ligne, de la fenêtre [New Molecule](#) voir, il doit être écrit [Load files for : "le fichier prmtop"](#).

Dans la fenêtre [Main](#) voir, la dernière ligne permet de faire avancer/reculer la trajectoire et de choisir la vitesse d'enchaînement des snapshots en utilisant `+` et `-`. Utiliser `↩` et `↪` pour avancer/reculer pas à pas.

• Comment masquer une structure ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, chaque structure est précédée de 3 lettres ou 4 lettres. La lettre D, comme Display permet de masquer/afficher une structure. [Double cliquer sur D pour masquer une structure](#). Si le D est violet la structure est masquée s'il est noir elle est visible.

• Comment renommer une structure ?

[retour](#)

Si on charge plusieurs structures il est utile de leur donner un nom pour les retrouver. Pour cela, dans la fenêtre [Main](#) voir, [double cliquer sur le nom de la structure](#) (en dessous de Molecule), une fenêtre apparaît dans laquelle on peut entre un nom pour chaque structure.

Déplacement de la vue

• Comment choisir le mode rotation ?

[retour](#)

Le mode rotation est le mode par défaut qui permet de faire tourner la vue. Si on est dans un autre mode (translation par exemple) on revient au mode rotation avec la [touche r](#).

• Comment choisir le mode translation ?

[retour](#)

Pour translater la vue on passe en mode translation en appuyant sur la [touche t](#). On revient au mode rotation par la touche r.

• Comment zoomer ?

[retour](#)

Pour zoomer il existe deux solutions. Le plus simple est d'utiliser la [molette](#) de la souris. Si on n'en a pas on passe en mode zoom avec la [touche s](#). Ensuite il faut déplacer la souris horizontalement pour zoomer ou dezoomer. On revient au mode rotation par la touche r.

• Comment choisir le centre autour duquel tourne la vue ?

[retour](#)

Pour choisir le centre on doit choisir un atome. Il faut appuyer sur la [touche c](#) puis cliquer sur l'atome voulue. On revient au mode rotation par la touche r.

• Comment afficher/masquer les axes ?

[retour](#)

Dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [Display/Axes](#) et cliquer sur ce qui vous convient.

Outils de sélections

• Comment sélectionner une partie d'une structure ?

[retour](#)

Pour agir sur les parties visibles d'une structure on utilise la fenêtre [Graphical Representation](#) voir. Pour l'afficher, dans la fenêtre [Main](#) voir, cliquer sur [Graphics/Representations...](#)

Si plusieurs structures ont été chargées, pour agir sur une structure donnée il faut qu'elle soit affichée dans [Selected Molecule](#) voir. On peut la sélectionner à l'aide du menu déroulant.

• Comment sélectionner un résidu ?

[retour](#)

Pour sélectionner un résidu le plus simple est d'utiliser son numéro. Dans [Graphical Representations](#) voir on crée une représentation

avec *Create Rep* puis taper :

resid numero

Pour sélectionner plusieurs résidus, on ajoute à la suite leurs numéros :

resid 65 146 213 345

- **Comment sélectionner les résidus du numéro 1 à 10 et de 20 à 25 ?**

[retour](#)

Pour sélectionner un groupe de résidus qui se suivent par exemple de 1 à 10, dans *Graphical Representations* [voir](#) on crée une représentation avec *Create Rep* puis taper :

resid 1 to 10

Pour sélectionner les résidus de 1 à 10 et de 20 à 25 on crée une représentation avec :

resid 1 to 10 20 to 25

- **Comment sélectionner tous les résidus du même type ?**

[retour](#)

Pour afficher, par exemple, tous les acide glutamique (GLU), dans *Graphical Representations* [voir](#) on utilise la commande *resname* :

resname GLU

- **Comment sélectionner un atome d'un résidu ?**

[retour](#)

Par exemple pour sélectionner l'atome OE2 du résidu Glu222, dans *Graphical Representations* [voir](#) saisir :

resid 222 and name OE2

- **Comment sélectionner les atomes voisins d'un résidu ou d'un atome ?**

[retour](#)

Dans *Graphical Representations* [voir](#), on crée une représentation et on utilise la commande *within R of* avec R en Å.

Dans un rayon de 3.5Å autour du résidu 145

within 3.5 of resid 145

Dans un rayon de 4Å autour de l'atome CA du résidu 145

within 4 of (resid 145 and name CA)

- **Comment supprimer les molécules d'eau et contre ions ?**

[retour](#)

Pour cela on sélectionne la protéine en utilisant la commande *protein*. dans *Graphical Representations* [voir](#) on crée une représentation avec la commande :

protein

- **Comment sélectionner une chaîne si plusieurs sont présentes dans le fichier pdb ?**

[retour](#)

Le fichier pdb peut contenir plusieurs répliques de la protéine si celle-ci cristallise sous forme de dimère, trimère ... Dans le fichier pdb chaque monomère est repéré par une lettre. Dans VMD chaque monomère est une chaîne que l'on sélectionne avec la commande *chain*. Par exemple pour sélectionner la chaîne A, dans *Graphical Representations* [voir](#) on crée une représentation avec la commande :

chain A

Pour sélectionner un résidu, un atome ou tout autre sélection dans une chaîne on utilise les mêmes commandes précédées du nom de la chaîne :

chain A and resid 146

- **Comment afficher/Masquer/supprimer une représentation ?**

[retour](#)

Dans *Graphical Representations* il y a la liste des représentations. Double cliquer sur une représentation pour la masquer ou l'afficher. Une fois masquer elle est écrite en violet.

Pour supprimer une représentation cliquer dessus puis cliquer sur *Delete Rep*.

Labels : atomes, distances, angles, dièdres

- **Comment faire afficher le nom d'un atome ?**

[retour](#)

Pour afficher le nom d'un atome on a deux possibilités :

- Par le menu, cliquer sur *mouse/label/Atoms*, puis cliquer sur l'atome voulue.
- Au clavier *taper 1* (shift + 1) puis cliquer sur l'atome voulue.

Le nom de l'atome apparaît sur l'écran ainsi que le nom et le numéro du résidu auquel il appartient. Des informations plus détaillées apparaissent dans la fenêtre console .

- **Comment faire afficher une distance ?**

[retour](#)

Pour afficher une distance on a deux possibilités :

- Par le menu, cliquer sur *mouse/label/Bonds*, puis cliquer sur deux atomes.
- Au clavier *taper 2* (shift + 2) puis cliquer sur deux atomes.

La distance apparaît sur l'écran ainsi que le nom des atomes et les noms et les numéros des résidus auxquels ils appartiennent. Des informations plus détaillées apparaissent dans la fenêtre console.

- **Comment faire afficher un angle ?**

[retour](#)

Pour afficher un angle on a deux possibilités :

- Par le menu, cliquer sur *mou se/label/Angles*, puis cliquer sur trois atomes.
- Au clavier *taper 3* (shift + 3) puis cliquer sur trois atomes.

L'angle apparaît sur l'écran ainsi que le nom des atomes et les noms et les numéros des résidus auxquels ils appartiennent. Des informations plus détaillées apparaissent dans la fenêtre console.

• Comment faire afficher un angle dièdre ?

[retour](#)

Pour afficher un angle dièdre on a deux possibilités :

- Par le menu, cliquer sur *mouse/label/Dihedrals*, puis cliquer sur quatre atomes.
- Au clavier *taper 4* (shift + 4) puis cliquer sur quatre atomes.

L'angle dièdre apparaît sur l'écran ainsi que le nom des atomes et les noms et les numéros des résidus auxquels ils appartiennent. Des informations plus détaillées apparaissent dans la fenêtre console.

• Comment cacher/afficher les labels (nom, distances, angles ...) ?

[retour](#)

Dans la fenêtre principale cliquer sur *Graphics/Labels...*. Une fenêtre apparaît avec un menu déroulant sur la gauche permettant de choisir les labels que l'on veut contrôler (Atoms, Bonds ...). Lorsqu'on clique sur un label, des informations le concernant apparaissent et on peut, à l'aide des boutons en haut à droite, le cacher, l'afficher ou le supprimer.

• Comment déplacer la position des labels (nom, distances, angles ...) ?

[retour](#)

Dans la fenêtre principale cliquer sur *Graphics/Labels...*, puis choisir un label et cliquer sur l'onglet *Properties*. Là il y a un réticule que l'on peut déplacer pour déplacer la position du label.

• Comment changer le format d'écriture des noms d'atome ?

[retour](#)

Dans la fenêtre principale cliquer sur *Graphics/Labels...*, puis choisir un label et cliquer sur l'onglet *Properties*. En bas se trouve une ligne *Format* qui par défaut contient *%R%d :%a*. *%R* est le nom du résidu, *%d* est son numéro et *%a* est le nom de l'atome.

Il est possible de réécrire cette ligne comme on le souhaite en supprimant si on le souhaite des informations. Par exemple *%a* pour n'afficher que le nom de l'atome.

• Comment changer la taille des labels (nom, distances, angles ...) ?

[retour](#)

Dans la fenêtre principale cliquer sur *Graphics/Labels...*, puis choisir un label et cliquer sur l'onglet *Properties*. Déplacer le curseur de la ligne *Text size* ou changer la valeur au clavier.

• Comment changer la couleur des labels (nom, distances, angles ...) ?

[retour](#)

Dans la fenêtre principale cliquer sur *Graphics/Colors...*. Dans *Categories* choisir *Labels*, puis dans *Names* choisir le label dont on veut changer la couleur. Enfin dans la dernière colonne choisir la couleur voulue.

Couleurs - types de représentation - Création de figures ou animations

• Comment changer la coloration d'une représentation ?

[retour](#)

Dans *Graphical Representations* voir, dans l'onglet *Draw style*, le menu déroulant *Coloring Method* permet de changer la coloration de la représentation sélectionnée. Cliquer sur une représentation puis sélectionner une coloration en cliquant dessus pour la choisir.

Si *Apply changes automatically* n'est pas coché cliquer sur *Apply*.

• Comment changer le type d'une représentation ?

[retour](#)

Dans *Graphical Representations* voir, dans l'onglet *Draw style*, le menu déroulant *Drawing Method* permet de changer le mode de représentation de la représentation sélectionnée. Cliquer sur une représentation puis sélectionner un type de représentation en cliquant dessus pour le choisir.

Si *Apply changes automatically* n'est pas coché cliquer sur *Apply*.

• Comment changer la couleurs du fond ?

[retour](#)

Dans la fenêtre *Main* voir, choisir *Graphics.../Colors/*, dans *categories* choisir *Display* puis dans *Names* choisir *Background* et enfin choisir une couleur.

• Comment modifier la couleur d'un élément dans VMD ?

[retour](#)

Dans la fenêtre *Main* voir, choisir *Graphics.../Colors/*. Cette fenêtre contrôle toutes les couleurs. Choisir l'élément dont on veut changer la couleur en le cherchant dans *categories* puis dans *Names* enfin choisir la couleur.

• Comment afficher les structures secondaires ?

[retour](#)

Dans *Drawing Method* choisir *Cartoon*, *New Cartoon*, *Tube*, *Ribbons* ou *New Ribbons*. Dans *Coloring Method* choisir *Structure*.

Les couleurs des différentes structures peuvent être changées dans *Graphics.../Colors/*.

• Comment sauvegarder la vue sous forme d'image ?

[retour](#)

Dans la fenêtre *Main*, cliquer sur *Fichier/Render....* En dessous de *Filename*, changer le nom de l'image et cliquer sur *Start Rendering*.

• Comment faire pour obtenir une jolie image ?

[retour](#)

Tout ceci étant très subjectif voici simplement quelques conseils. Une première chose est simplement d'augmenter la résolution dans les différentes représentations affichées. Pour se faire, pour chaque représentation dans *Graphical Representations* voir, dans *Drawing Method*, en bas à droite de la fenêtre il y a généralement plusieurs curseurs permettant de modifier certains paramètres liés à la représentation comme par exemple le rayon des sphères ou des liaisons. Parmi eux il y en a un qui s'appelle résolution qu'il faut augmenter (attention cela peut rendre moins fluide la visualisation il faut donc le faire au dernier moment).

Les structures secondaires donnent un joli rendu si dans *Material* on choisit *Diffuse* (pour mat) ou *Glossy* (pour brillant).

Pour Les atomes et les molécules, les *Drawing Method* CPK et licorice sont les plus efficaces. On obtient un joli rendu en choisissant dans *Material* le mode *Metalic Pastel* ou *Glossy*.

• Comment faire pour obtenir une animation ?

[retour](#)

Plusieurs type d'animations sont possibles. On peut créer une animation à partir d'une simple vue d'une molécule, par exemple pour la faire tourner sur elle même, ou alors on peut créer un film d'une dynamique moléculaire que l'on a chargée dans VMD. La création d'une animation peut prendre quelques minutes et nécessite une bonne partie des ressources de l'ordinateur.

Dans les deux cas, dans la fenêtre *Main* voir, cliquer sur *Extensions/Visualization/Movie Maker*. Une fenêtre s'ouvre dans laquelle on peut changer le *working directory* qui définit le dossier dans lequel sera enregistrée l'animation et juste en dessous *Name of the movie*. Dans *Renderer* cocher la première ligne, *Snapshot*. Puis dans *Format*, choisir la première ligne : *Animated Gif*. Il est indiqué qu'il a besoin de ImageMagick qui est généralement installé par défaut sous linux (c'est la commande convert) et s'installe facilement sous windows ([le lien](#)). Dans *Movie Settings*, il vaut mieux cocher *Delete image files* qui supprime les images qui ont été assemblées pour faire l'animation. Dans *Format*, l'option *MPEG-1* créera un film. Ceci peut avoir des avantages (faire pause, reculer, avance rapide ...) mais peut être plus difficile à insérer dans une présentation ou une page web.

Enregistrer une animation en imposant un mouvement à la vue, par exemple, tourner sur elle-même.

Dans *Movie Settings*, choisir *Rock and Roll* pour un mouvement de balancier selon X et Y ou *Rotation about Y axis*. Ensuite il faut choisir la valeur de l'angle de rotation et la durée de l'animation et cliquer sur *Make Movie* pour créer l'animation. Surveillez la console pour avoir plus d'informations sur l'avancement du travail. Pour choisir l'angle et le temps le mieux est de faire plusieurs essais. Pour tourner selon un autre axe que Y une manipulation des coordonnées est certainement nécessaire. Pour visualiser l'axe de rotation, cliquer sur *Display/Axes/Origin*, l'axe Y est généralement en vert. Dézoomer pour avoir un meilleur aperçu.

Enregistrer une dynamique sous forme d'animation

Dans *Movie Settings*, choisir *Trajectory*. Il vous dis qu'on ne peut pas changer la durée, croyez le sur parole. Si vous laissez *Trajectory step size* avec une valeur de 1, il va créer une animation en incluant tous les snapshots que vous avez chargé (si on met 2, il en saute 1 à chaque fois etc ...). Attention, plus le nombre de snapshots est grand plus la taille du fichier sera importante. Dans ce cas l'angle n'est pas pris en compte. Cliquer sur *Make Movie* pour créer l'animation.

Si le fichier gif est trop lourd

On peut optimiser la taille du fichier avec Gimp. Ouvrir le fichier gif avec gimp, puis cliquer sur *Filtres/Animation/Optimiser (pour Gif)*. Gimp va alors supprimer sur chaque image tout ce qui est identique à la précédente et ne conserver que la différence ce qui devrait diminuer la taille de l'animation.

L'animation est trop rapide et s'arrête au bout de 4 fois. Quand on fait *Make Movie*, VMD commence par créer les images qu'il colle les unes à la suite des autres pour faire l'animation. Il utilise alors *convert*, on peut voir sur la console une ligne de ce genre :
`convert -delay 4.17 -loop 4 movie*.ppm movie.gif`
Ce qui veut dire : j'utilise tous les movie*.ppm pour faire une animation nommé movie.gif avec 4.17 secondes entre chaque image (delay) qui sera affichée 4 fois (loop).

Si dans *Movie Settings* vous avez coché *Delete image files* il faut le décocher, on pourra alors dans un terminal utiliser *convert* en changeant les options. Cliquer à nouveau sur *Make Movie*, cette fois en plus de l'animation (fichier gif) pour chaque image de l'animation un fichier image (au format ppm) est créé avec le nom de l'animation et un numéro. Dans le dossier où sont les fichier images entrer la commande *convert* ci-dessus en augmentant la valeur de *-delay* (par exemple 10, 20 ou plus) et en mettant *-loop 0* pour que l'animation boucle jusqu'à l'infini.

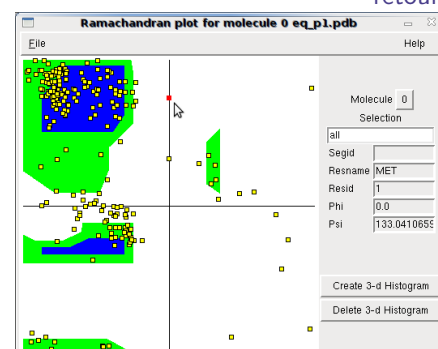
Calculs - Opérations - Gaussian

• Comment tracer un diagramme de Ramachandran ?

[retour](#)

Après avoir charger une (ou plusieurs) structures, dans la fenêtre Main, cliquer sur *Extensions/Analysis/Ramchandran Plot*. Un diagramme apparaît avec tracé en vert et bleu les zones caractéristiques du digramme de Ramachandran.

Sur la ligne molécule cliquer sur le rectangle et choisir la structure sur laquelle vous voulez tracer le diagramme. Celui si se trace automatiquement sous forme de carré jaune. En cliquant sur un carré jaune les données le concernant apparaissent sur la droite. Dans le rectangle blanc sous *Selection* on peut spécifier le ou les résidus pour lesquels on veut tracer le diagramme (voir la partie sélection). Une vision 3D est disponible en cliquant sur le bouton *Create 3-d Histogram*.

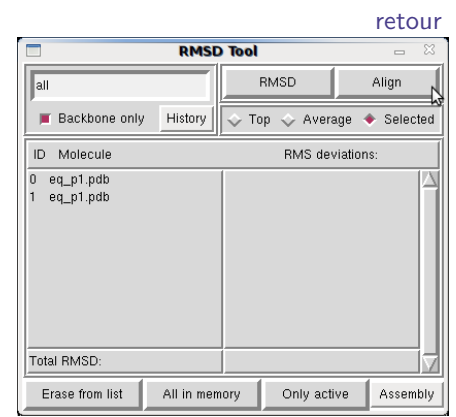


• **Comment aligner deux structures? Calcul du RMSd?**

Il est possible d'aligner deux structures et de calculer le RMSd si elles ont le même nombre d'atomes. Pour cela, charger deux structures puis cliquer sur *Extensions/Analysis/RMSD Calculator*.

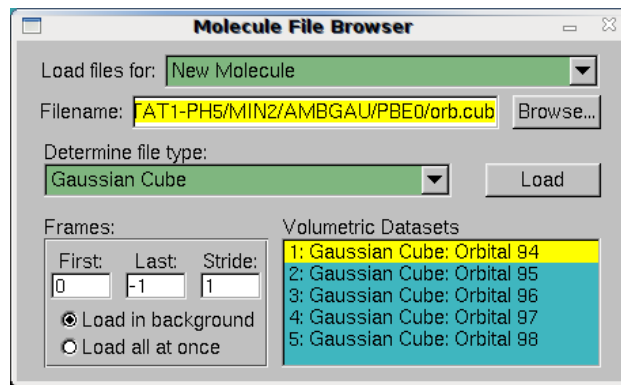
Dans le cadre en haut à gauche on peut faire une sélection des atomes sur lesquels on veut aligner les structures. Dans le cadre en haut à droite choisir *Selected*. Dans le cadre à gauche se trouve la liste des structures disponibles. Cliquer sur la structure sur laquelle vous voulez aligner les autres. Cliquer sur *Align* en haut à droite pour aligner les structures. Cliquer ensuite sur *RMSD* pour calculer le RMSd.

Si l'une des structures est une trajectoire de dynamique, tous les snapshots de la dynamique seront alignés.



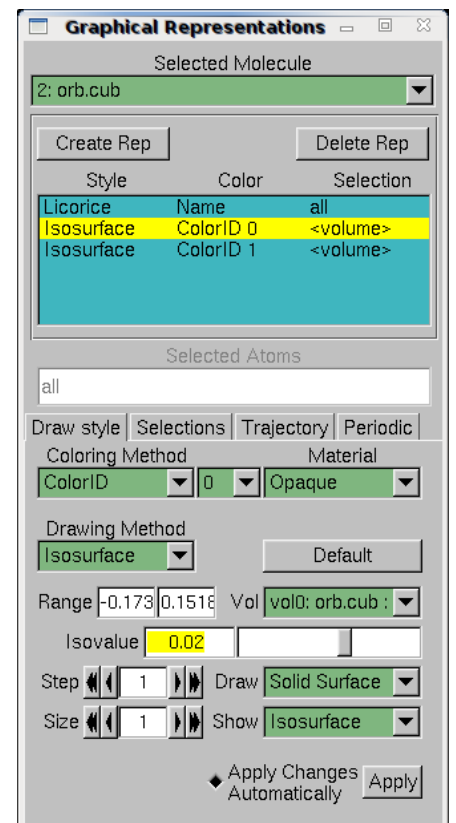
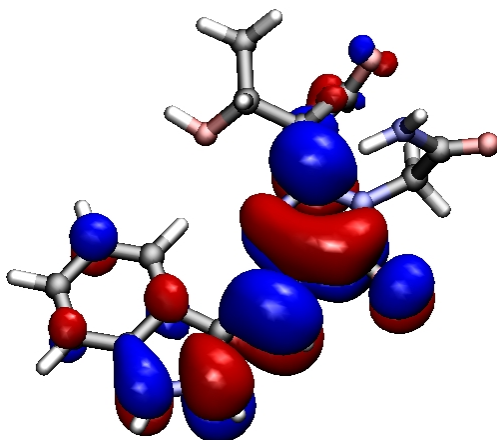
• **Comment afficher les orbitales à partir d'un fichier cube de Gaussian?**

VMD peut lire les fichiers cube et afficher les orbitales. Pour cela créer une nouvelle molécule en chargeant le fichier cube issu de gaussian. Dans la liste des types de fichier mettre Gaussian Cube. La liste des orbitales présent dans le fichier cube apparaît alors sur la droite. Double cliquer sur l'orbitale voulue.



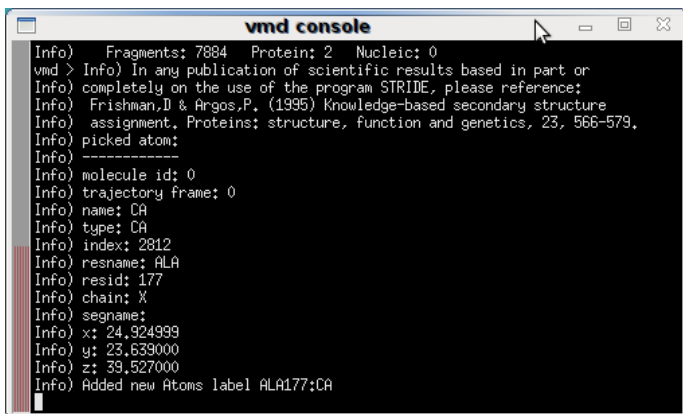
Pour visualiser une orbitale suivez les étapes suivantes :

1. Créer une représentation avec *Drawing Method : Lines, CPK ou licorice*.
2. Créer une représentation avec *Drawing Method : Isosurface*.
3. Dans isovalue mettre ± 0.02 (valeur par défaut de Gaussview)
4. Dans *Draw*, choisir *Solid Surface*.
5. Dans *Show*, choisir *Isosurface*.
6. Dans *Coloring Method*, choisir *Color ID* et choisir une couleur.
7. Recommencer au point 2 avec une isovalue opposée et une autre couleur. Les points 3 et 4 devraient être déjà sélectionnés.

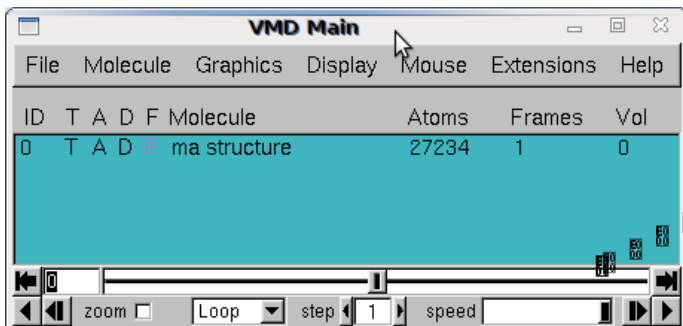


Les fenêtres de VMD

Lorsqu'on utilise VMD plusieurs fenêtres apparaissent. Voici les principales et leurs fonctions :

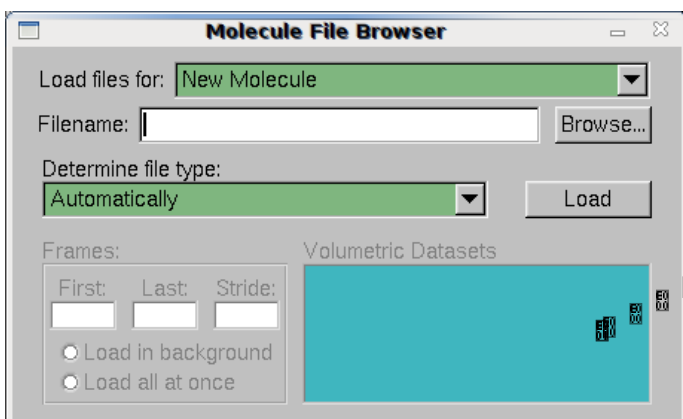


La *console VMD* affiche diverses informations notamment lorsqu'on affiche le label d'un atome ou d'une liaison. Si on ferme la console VMD s'arrête sans sauvegarder.



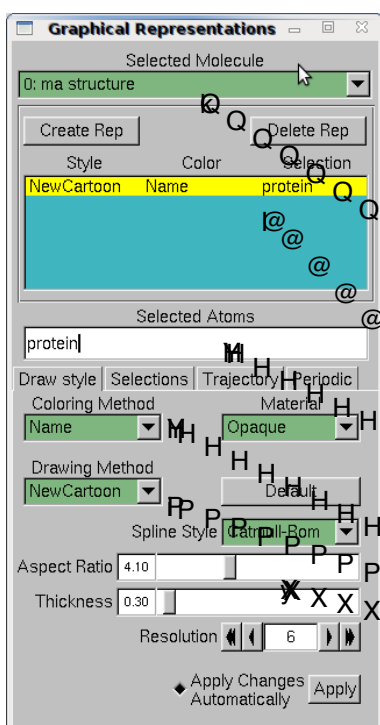
La fenêtre *Main* est celle à partir de laquelle on peut faire afficher toutes les autres. C'est également celle à partir de laquelle on a accès à tous les outils de VMD.

La dernière ligne permet de contrôler la visualisation d'une trajectoire.



La fenêtre *Molecule File Browser* permet de rechercher un fichier et de charger une structure ou encore de rajouter des données dans une structure déjà existante. Le menu déroulant permet de sélectionner le type de fichier.

Le rectangle vert affiche un aperçu du fichier ou des informations le concernant.



La fenêtre *Graphical Representations* permet de sélectionner ce que l'on souhaite voir et de changer la façon dont on le voit : la couleur, le type de représentation etc ... Pour l'afficher, dans la fenêtre *Main* cliquer sur *Graphics/Representations*.

Sélection de la molécule ou la structure sur laquelle agir.

Création/Suppression/Liste des représentations. Chaque représentation correspond à une sélection d'une partie de la structure et à son mode de vue.

Sélection des résidus groupe de résidus etc ...

L'onglet *Draw style* permet de choisir :

Le mode de couleur

Le type de représentation

Des options liées à la couleur ou à la représentation

Un fichier de configuration : .vmdrc

Ce fichier permet d'ouvrir automatiquement certaines fenêtres utile dans VMD et les dispose à l'écran. Il doit être placé dans /home/votre nom d'utilisateur/.

```
# turn on lights 0 and 1
light 0 on
light 1 on
light 2 off
light 3 off

# position the stage and axes
axes location off
stage location off

# position and turn on menus
menu main on
menu graphics on
menu files on

menu main move 5 180
menu graphics move 5 455
menu files move 800 750

# display vue
display projection orthographic
```

Un tutorial VMD (par Ross Walker)

Le tutorial fait par Ross Walker sur le site de AMBER est bien. Il est bien sur adapté à l'utilisation des données AMBER (restrt, mdcrd, prmtop ...) mais le début est très général.

Tutorial VMD sur AMBER <http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/>