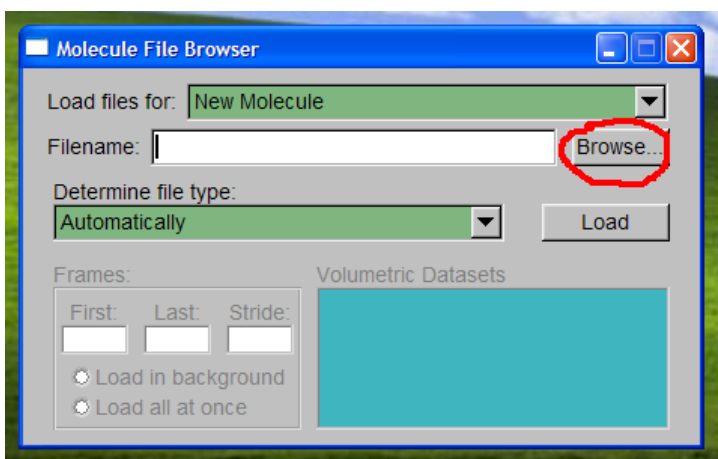
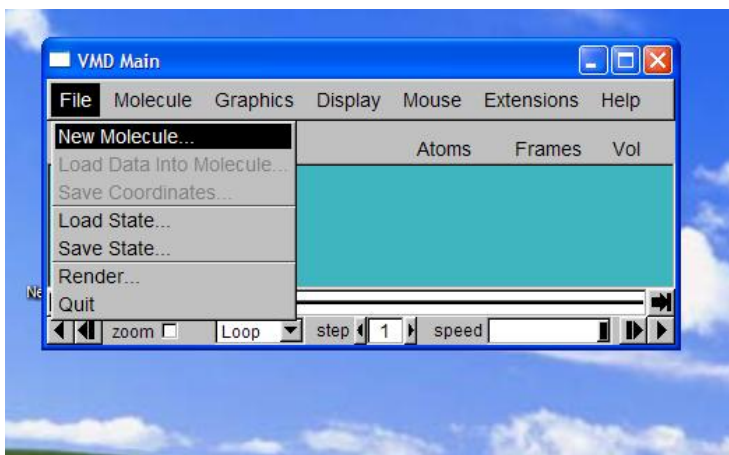


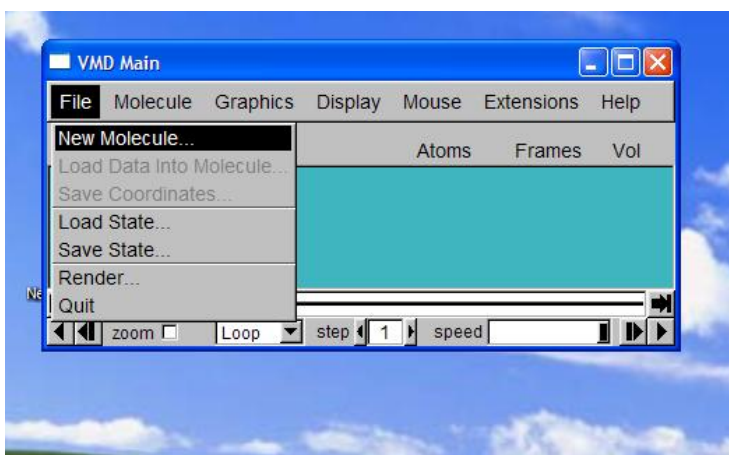
1) Запускаем VMD

2) Загружаем PDB файл

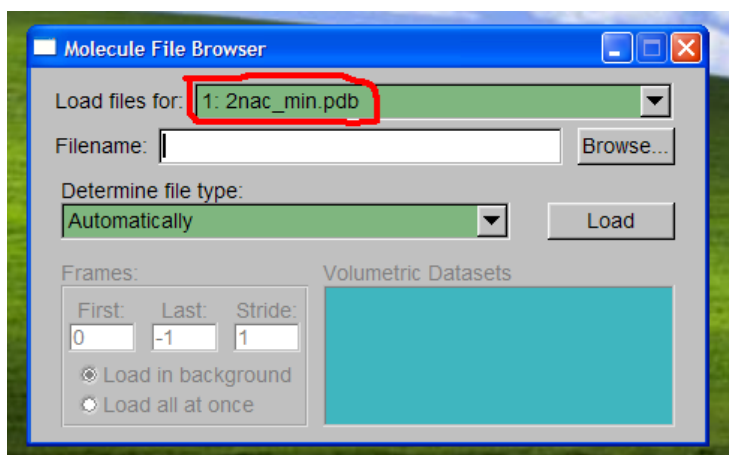


Нажимаем Load

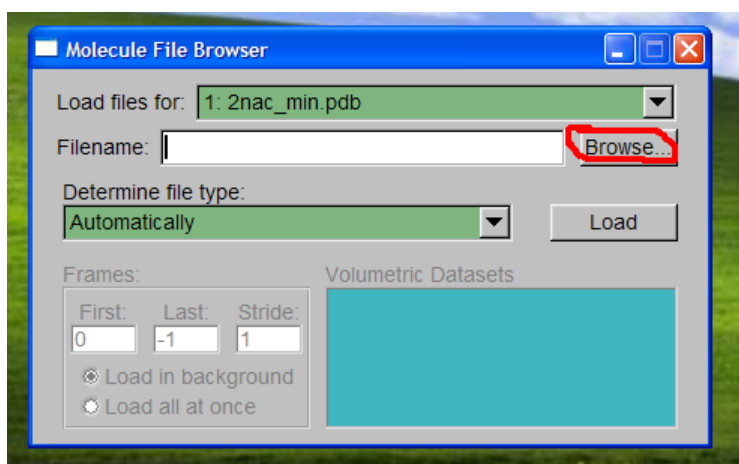
3) загружаем MDCRD файл траектории:



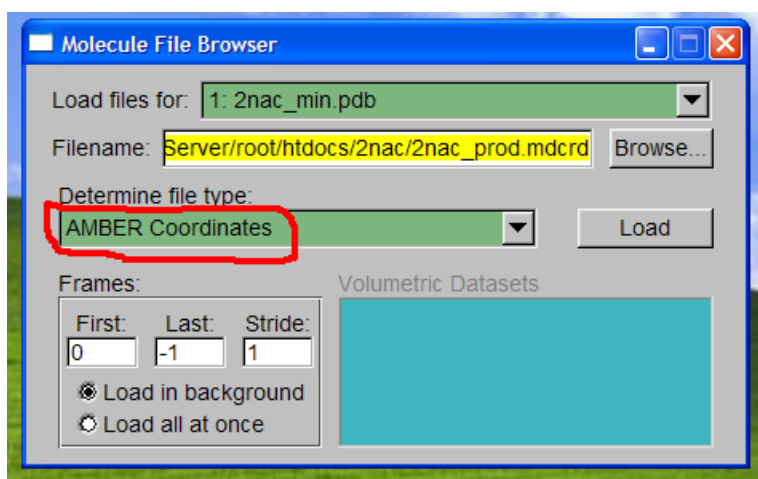
Выбираем уже подгруженную структуру (которая по сути будет являться первым кадром траектории):



Затем выбираем MDCRD файл:

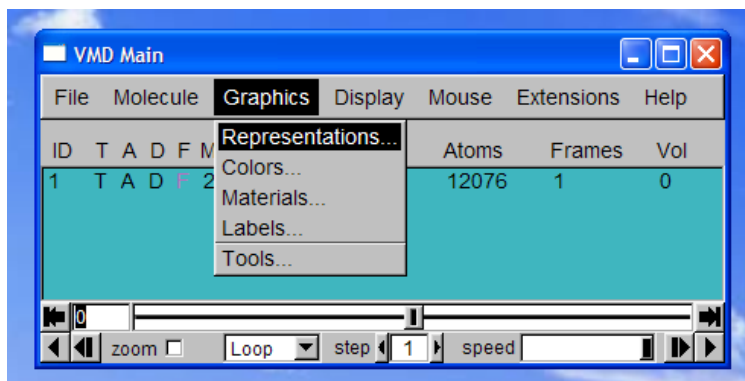


Следим, правильно ли указан тип файла:

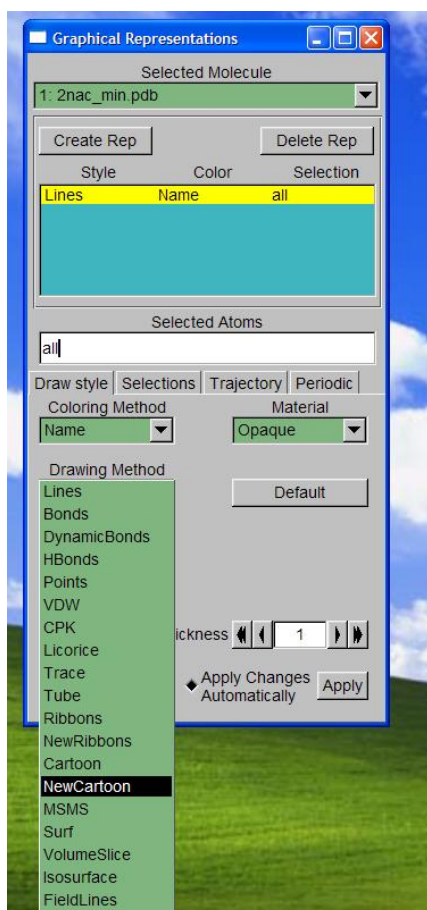


Нажимаем Load, загружается траектория.

4) Репрезентация



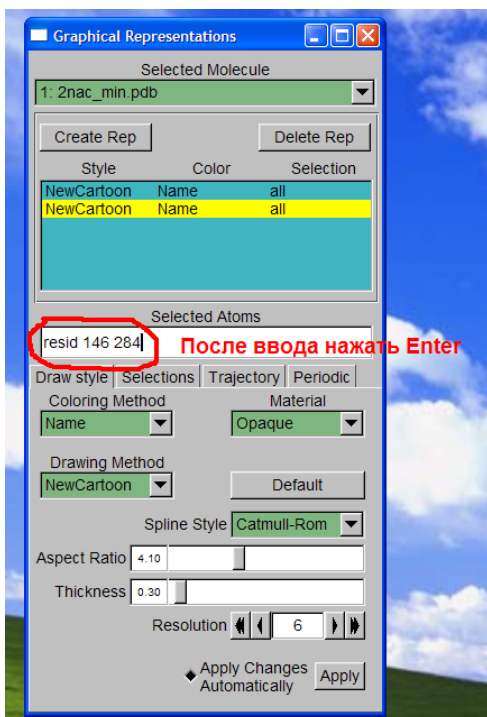
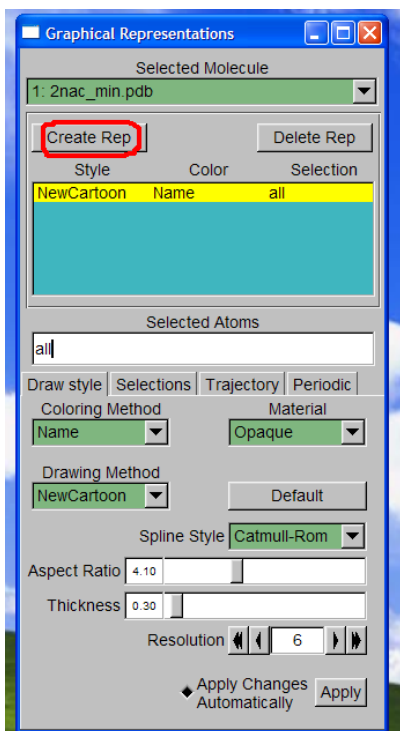
Белок предпочитаю отображать как NewCartoon:



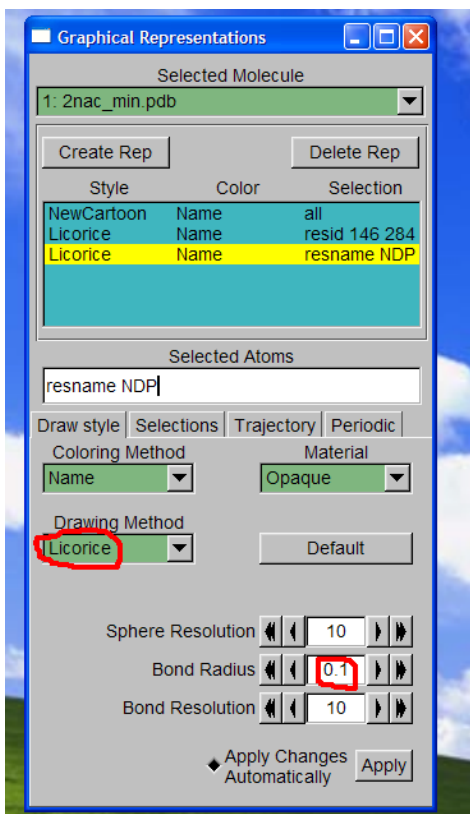
Затем рисуем отдельные остатки (или же лиганды, например HAD^+), для этого нужно создать новую репрезентацию (одну или несколько)

Остатки называются resid, например resid 4.

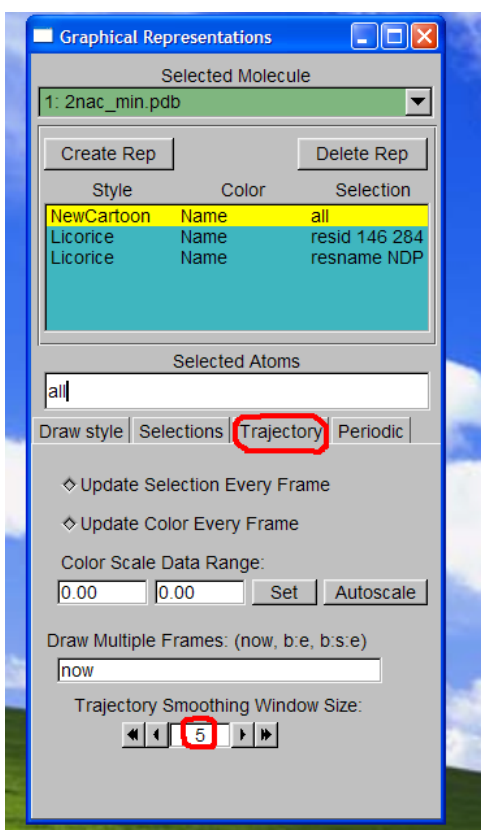
НАД⁺ называется resname NDP



Остатки предпочитаю изображать как Licorice:



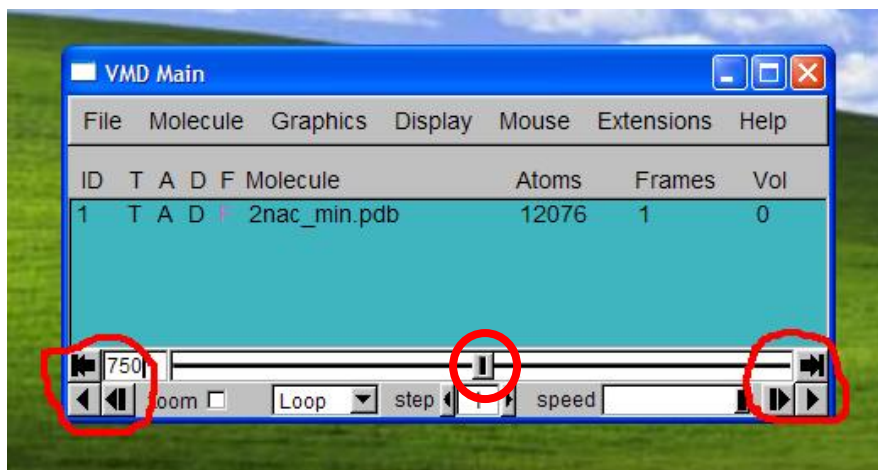
Траекторию можно сгладить для лучшего восприятия, воспользовавшись закладкой Trajectory:



Сглаживание нужно применять отдельно для каждой репрезентации

5) Прокрутка траектории

Для этого нужно просто воспользоваться бегунками:



В траекториях может быть вода.

Ее можно изобразить Licorice, при этом вбив в поле Selected Atoms ключевое слово water.

Т.к. номера остатков и молекул воды могут совпадать, необходимо более точно указывать, что нужно отобразить: resid 146 284 and not water

Чтобы посмотреть окружение молекулы воспользуйся например такими командами (расстояние 5 A)

same resid as within 5 of resid 284

(same resid as within 5 of resid 284) and not water

same resid as within 5 of resname NDP

water within 5 of resname NDP

Graphical Representations

Selected Molecule
1: 2nac_min.pdb

Create Rep Delete Rep

Style	Color	Selection
NewCartoon	Name	all
Licorice	Name	resid 146 284
Licorice	Name	resname NDP
Licorice	Name	water within 5

Selected Atoms
same resid as|within 5 of resname NDP

Draw style Selections Trajectory Periodic

Coloring Method Name Material Opaque

Drawing Method Licorice Default

Sphere Resolution 10

Bond Radius 0.1

Bond Resolution 10

Apply Changes Automatically Apply