

# Семинар 1: Программа VMD

VMD (Visual Molecular Dynamics) программа, предназначенная для визуализации биологических молекул, анализа результатов моделирования в молекулярной динамике. VMD поддерживает большое число форматов файлов биомолекул, позволяет работать с большими объёмами данных, имеет обширные возможности по визуализации и рендеренгу изображении и анимации.

## 1 Загрузка структуры молекулы

Первым шагом работы с VMD необходимо загрузить желаемую молекулу. При доступном соединении с сетью интернет, это можно сделать напрямую из базы данных белковых структур [pdb.org](http://pdb.org). Для того, чтобы загрузить молекулу, выберите Load из меню File (Рис. 1). Чтобы загрузить структуру напрямую с сайта [pdb.org](http://pdb.org), введите 1UBQ в поле (c) и нажмите кнопку Load (d). После этого на экране должно появиться изображение молекулы.

## 2 Графические представления

VMD способно отрисовывать молекулу несколькими различными способами. Для выбора метода отрисовки, необходимо открыть диалог “Graphical Representations”, как это показано на рисунке 3. Каждый метод отрисовки позволяет изменять основные параметры: выборку атомов, которые необходимо отрисовывать, стил отрисовки, метод выбора цветовой гаммы и материал. На рисунке 4 изображены три возможных варианта отрисовки

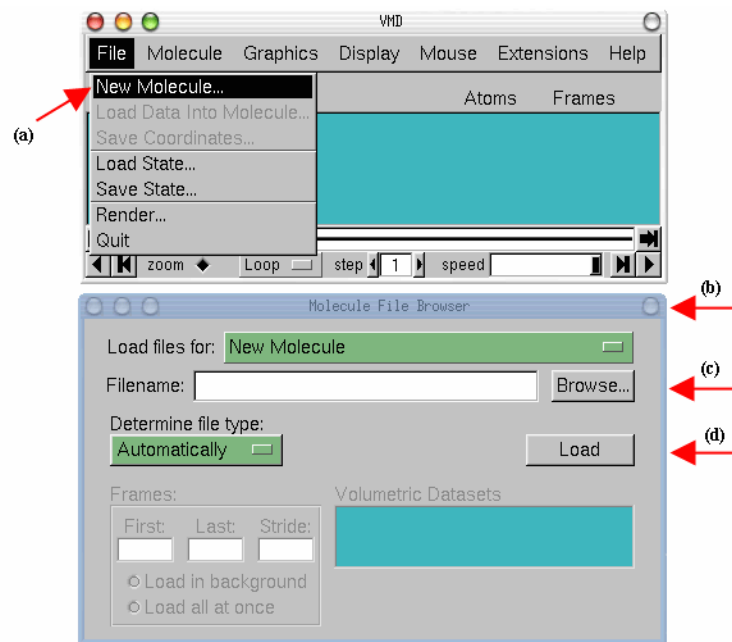


Рис. 1: Загрузка молекулы в VMD.

молекулы. Первый вариант позволят увидеть атомарные детали молекулярной структуры, последний показывает элементы вторичной структуры белка.

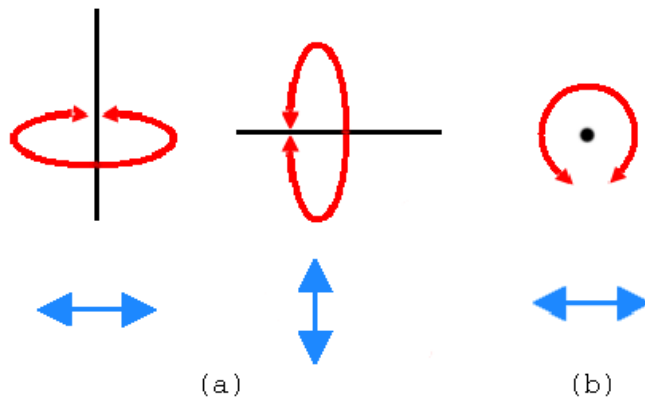


Рис. 2: Выбор режима работы мышцы.

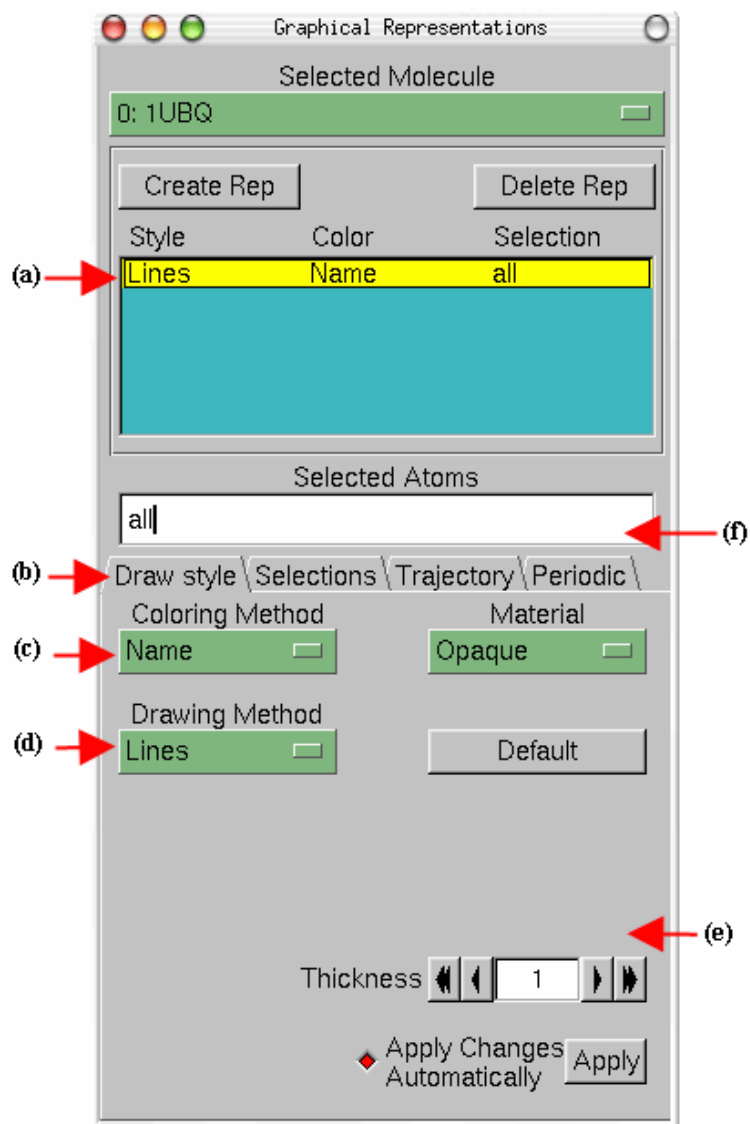


Рис. 3: Выбор метода отрисовки.

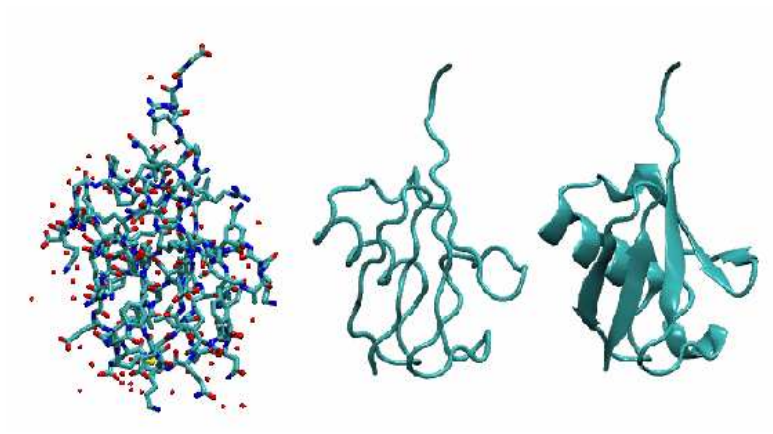


Рис. 4: Молекула в различных вариантах отрисовки.