



# AI ACCELERATED DRUG DISCOVERY

## Visualización de trayectoria de Dinámica Molecular en VMD

### Requisitos Previos

Instalar VMD: [VMD - Visual Molecular Dynamics \(uiuc.edu\)](http://vmd.uiuc.edu)

Archivos de Simulación: Asegúrate de tener los siguientes archivos de salida de AMBER:

Archivo de Parámetros/topología (prmtop).

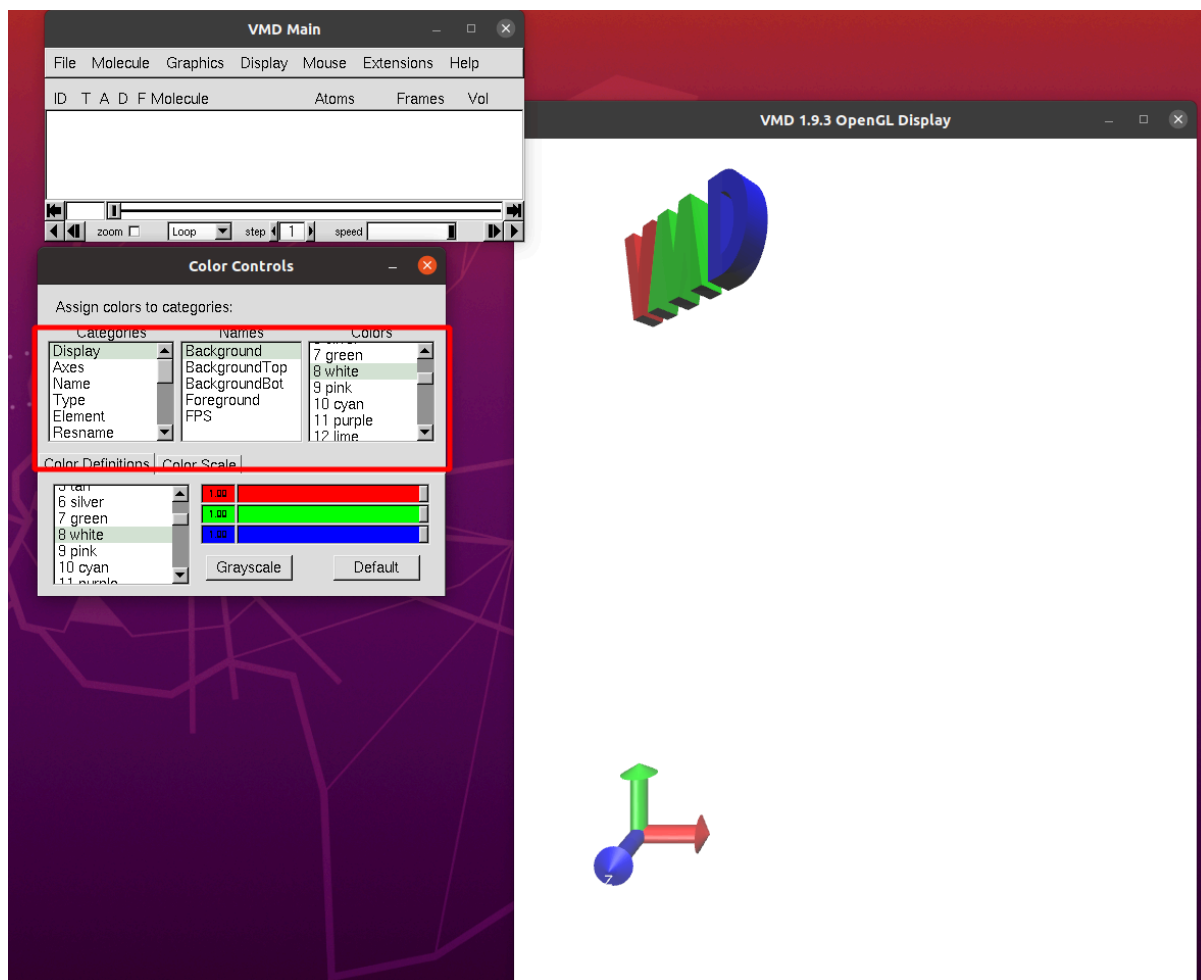
Archivo de trayectoria (.ns).

Archivo de trayectoria en PDB (Solo si lo hacen en windows)

### Paso 0: Preparar el display de VMD:

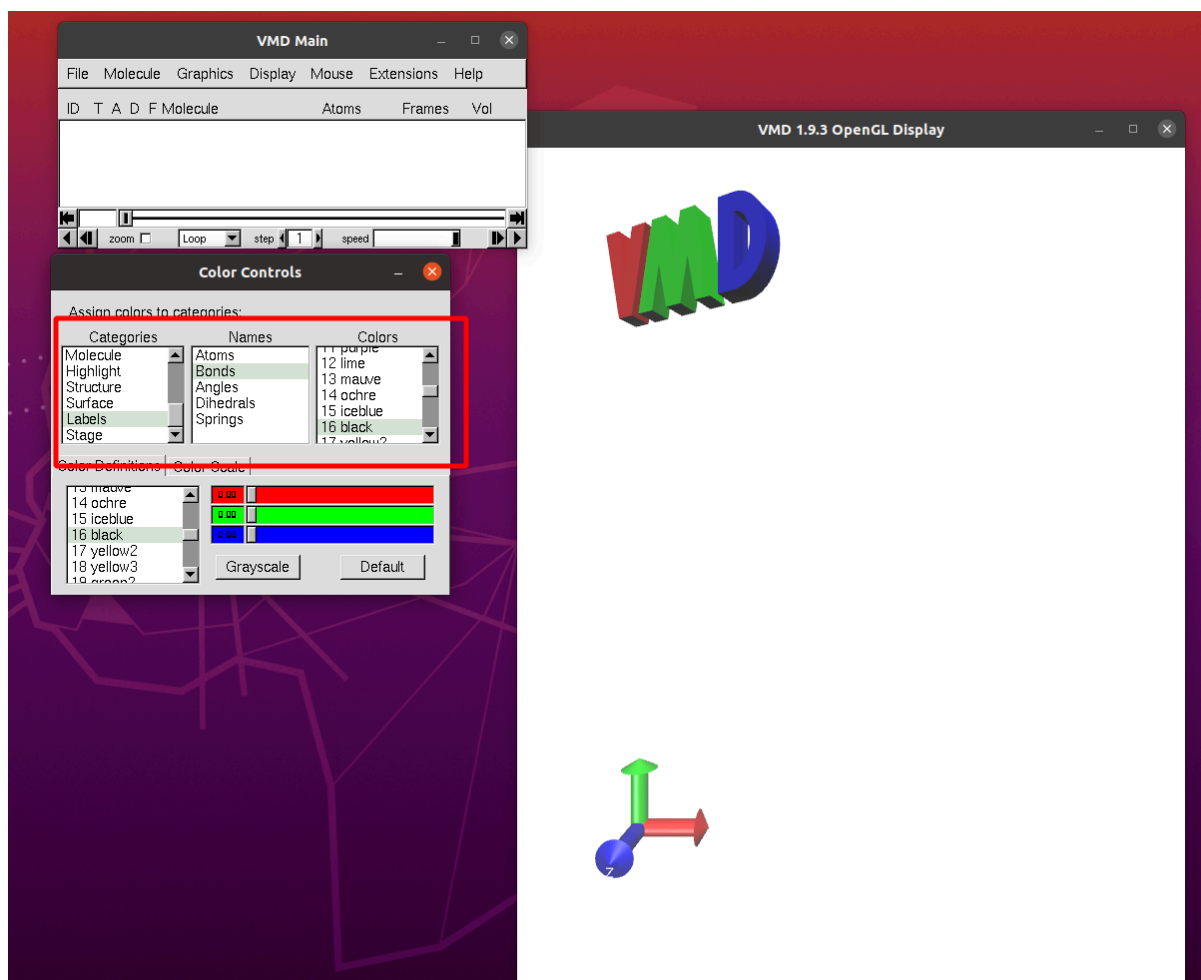
**Graphics-> Colors-> Display→ Background→ White**

**Graphics-> Colors-> Labels→ Bonds→ Black**





# AI ACCELERATED DRUG DISCOVERY



**Display → Axes → off**

## Paso 1: Cargar la Estructura en VMD

a) Cargar el Archivo de Parámetros:

File > New Molecule.

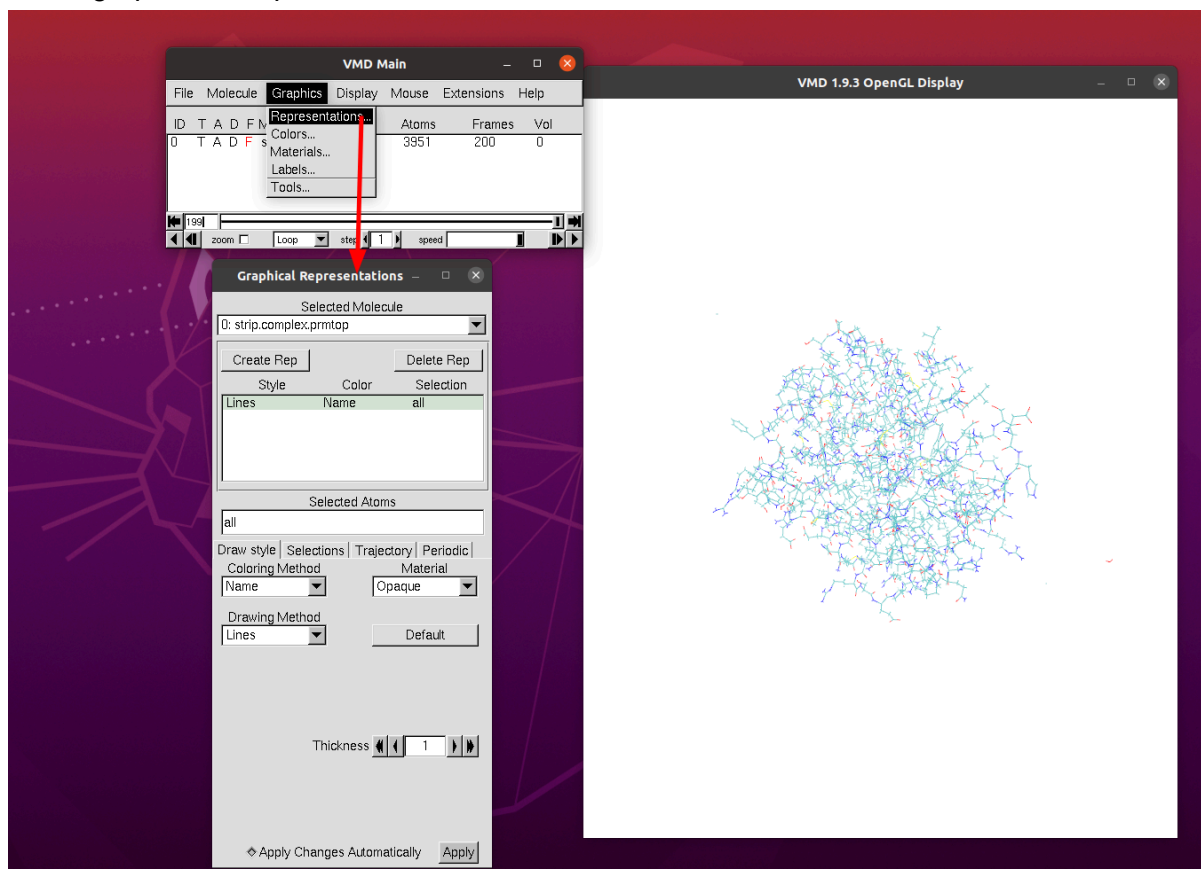
En el campo Filename, seleccionar el archivo de parámetros/topología (.prmtop).

Sin cerrar la ventana damos nuevamente a load y seleccionamos el archivo .nc

Listo! Nuestra trayectoria ya está abierta

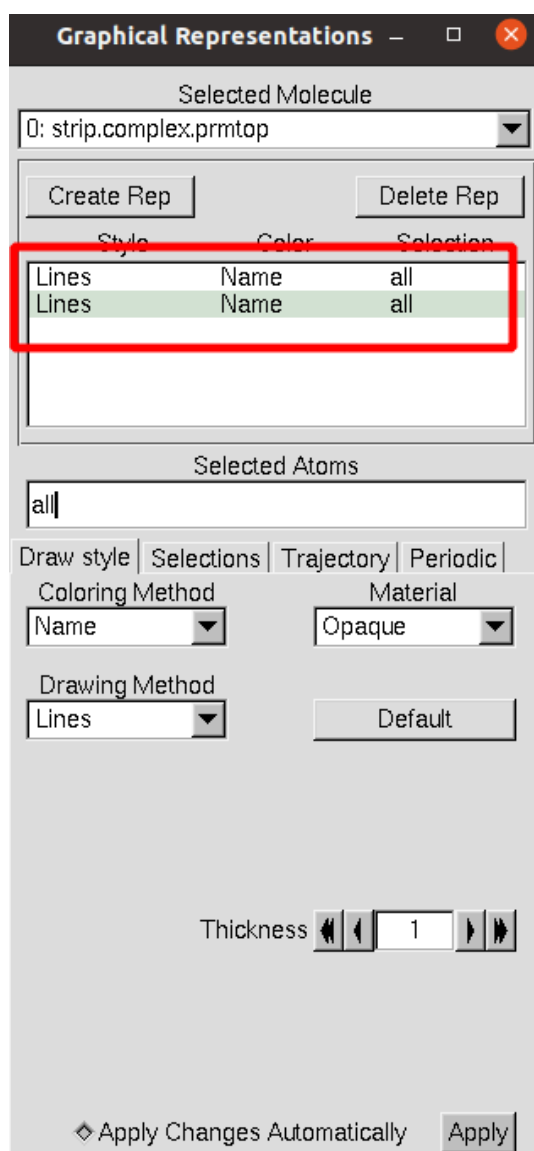
## Paso 2: Visualización primaria de la Trayectoria

VMD tiene un lenguaje propio para seleccionar y visualizar partes de la estructura total: Por ejemplo ver solo la proteína, o ver solo el ligando, ver solo un residuo, etc. Esto se hace desde graphics > Representations



En selected atoms se introduce lo que queremos ver.

- Escribir protein para ver la proteína
- Create rep para crear una réplica de lo que estamos viendo. Ahora verán que hay dos entradas:



- c)
- d) Haciendo doble click sobre las entradas podrán ver que una se torna color rojo. Eso significa que en la vista de visualización, esa representación no se está viendo.
- e) En alguna representación, escribimos resname RES para seleccionar y visualizar solo el átomo
- f) En la entrada de la representación de la proteína seleccionamos new cartoon en Drawing method y Secondary structure en coloring method
- g) EN la entrada de la representación del ligando seleccionamos Licorice como Drawing method
- h) Creamos una replica mas y en selected Atoms escribimos resid 256. Verán que aparece un agua presente en el sitio de unión. Como drawing method seleccionar CPK

**Ya tenemos una representación básica del sistema! Ahora exploren un poco todos los tipos de representación, sobre todo para la proteína**



### Paso 3: Análisis de Trayectoria

Ahora vamos a calcular el RMSD (Root Mean Square Deviation):

Ir a Extensions > Analysis > RMSD Trajectory Tool.

Selecciona los átomos de referencia (Backbone en lugar de protein)

Haz clic en Align y luego en RMSD.

Haz clic en file → Plot data para visualizar las fluctuaciones de los residuos.

Ahora reproducir la trayectoria y verán un movimiento distinto respecto a cuando reproducimos la trayectoria inicialmente

ir a Extensions > Analysis > RMSD Trajectory Tool.

Seleccionar los átomos de referencia: rename RES

Click en RMSD (No en align).

### Paso 4: Análisis de puentes de hidrógeno

La visualización de puentes de hidrógeno en VMD no es la mejor dentro de los softwares disponibles, pero se puede lograr una representación correcta.

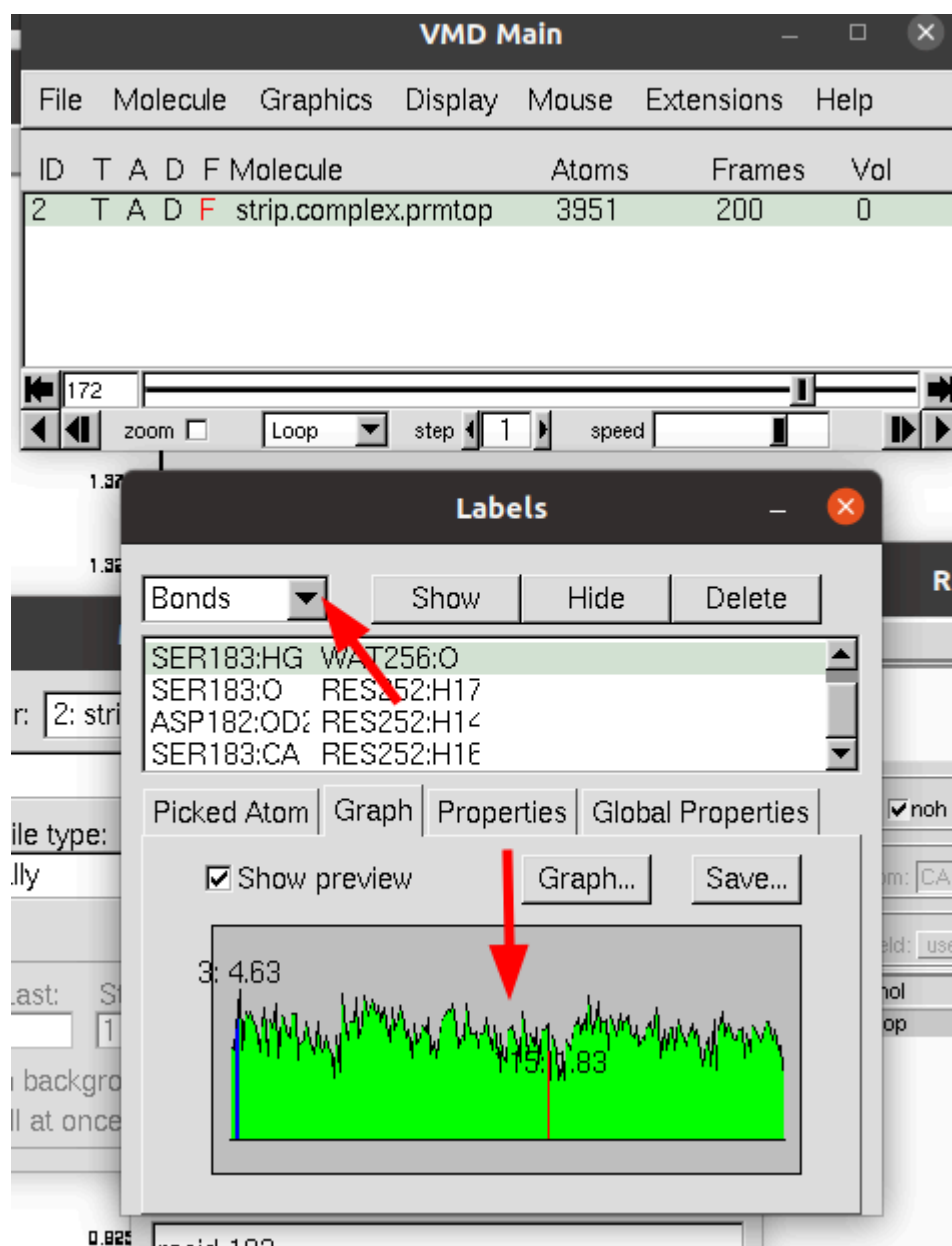
Para ver si hay puentes de hidrógeno entre el ligando y la proteína vamos a crear una réplica y vamos a seleccionar todos los átomos a 5 angstroms de distancia del ligando:  
“ within 5 of rename RES“

Cambiamos la representación a H Bonds. Así veremos los posibles puentes de hidrógeno del ligando a los átomos que tienen como mucho 5 Å de distancia. Ahora nos toca seleccionar cada uno de estos, determinar el residuo, crear una representación y visualizarla como lines.

Luego tenemos que seleccionar la distancia entre los átomos que interactúan (Mouse→ Label→ bonds) vía puente de hidrógeno. También podemos calcular los ángulos (Mouse→ Label→ Angles

Estas distancias y ángulos se pueden graficar en función al frame:

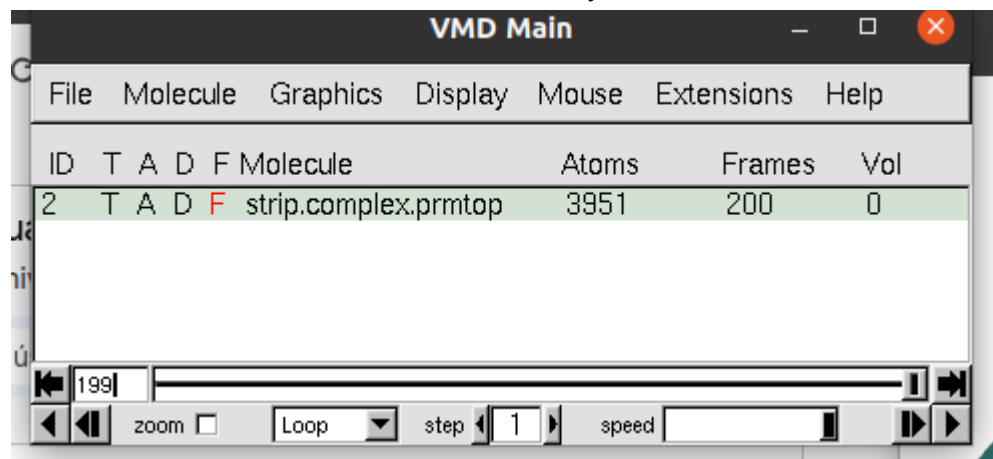
Graphics→ Labels→ Seleccionar el par de átomos para bonds, o la terna para angles



## Paso 6: Guardar y Exportar Datos

Guardamos algunos frames:

Ir al main, click derecho→ Save coordinates y seleccionar los frames



Exportar una animación:

Ve a **Extensions > Visualization > Movie Maker**.

Movie setting→ Trajectory