

Zkoumáme strukturu stavebních látek živých organismů

Vyvíjíme průlomové metody a programy

Příkladem je projekt virtuálního mikroskopu (více informací viz níže)

Chcete pracovat s námi?

Hledáme talentované studenty pro spolupráci v rámci **SOČ** nebo **projektů** (pište na mail svobodova@chemi.muni.cz)

Nebo přijďte **studovat k nám na Masarykovu univerzitu** – např. studijní obor **Chemoinformatika a bioinformatika** na Přírodovědecké fakultě nebo další obory, orientované na bioinformatiku a biochemii.

Virtuální mikroskop rychleji ukáže strukturu bílkoviny

Podívat se na trojrozměrnou strukturu viru či některé z bílkovin umožňuje nový software, který vyvinuli odborníci z Masarykovy univerzity.

Jde o soubor nástrojů s názvem LiteMol, který dokáže za pár sekund z rozsáhlé databáze strukturních údajů získat všechna potřebná data a vytvořit 3D model požadované biomakromolekuly. Ten pak lze prohlížet nejen ze všech možných úhlů, ale také se dá podívat na jeho podrobnou strukturu v libovolném místě.

Virtuální mikroskop umí studované molekuly či jejich soubory zobrazit jako celek, ale také „zaostřit“ na jejich detaily a ukázat tak například, jak se váží léčiva na příslušné receptory nebo jaké jsou vazby mezi jednotlivými atomy bílkovin.

Práci výzkumné skupiny, kterou vede Jaroslav Koča z Ceitecu MU a Národního centra pro výzkum biomolekul Přírodovědecké fakulty MU, zveřejnil časopis Nature Methods. Software LiteMol je také součástí celosvětové databáze biomakromolekul Protein Data Bank.

„V posledních letech se výrazně rozvíjejí metody jako cryo-elektronová mikroskopie, které produkují obrovské množství údajů o struktuře látek, z nichž se skládají živé organismy. Během jednoho dne získáme více dat, než kolik jich bylo v celé Alexandrijské knihovně. Jen jejich stažení z internetu tak zabere hodiny a pročíst se jimi je téměř nemožné,“ přiblížil jeden z motivů pro vytvoření nového softwaru Koča.

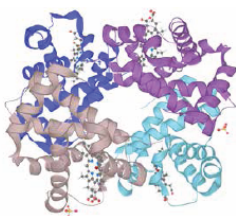
Nástroj, jehož hlavním autorem je David Sehnal, našel cestu, jak vizualizovat potřebné informace v reálném čase. Zjednodušeně jde o to, že na základě požadavku vyhledá jen ta data, která jsou pro vytvoření trojrozměrného modelu nezbytná. Pro celek tak nezpracovává detailní polohy každého atomu a pro podrobný pohled naopak nenačítá celou strukturu molekuly.

Vědci se tak k vizualizaci jednoduše dostanou i v mobilním telefonu. „Je to praktické třeba na konferencích. Spousta nápadů také nepřichází zrovna ve chvíli, kdy sedíte u počítače a můžete stahovat velké objemy dat. Naopak ty nejlepší vás napadnou někde u kávy nebo na procházce a teď máme nástroj, kterým si můžeme rovnou ověřit, zda mají potenciál,“ podotkla Radka Svobodová, která vývoj koordinovala.

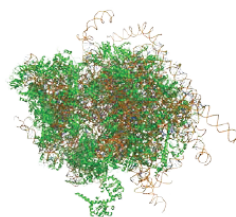
Trojrozměrné struktury jsou velmi důležité. „Můžeme vidět uspořádání látky v prostoru, její biologické vlastnosti i původní experimentální data. Takto získáme na základě struktury látek klíč k pochopení jejich funkce,“ uvedl Koča.



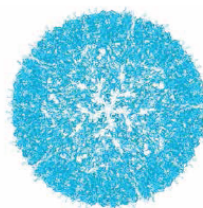
TRANSFEROVÁ RNA
1600 ATOMŮ
2,7 GB



HEMOGLOBIN
47000 ATOMŮ
7,6 GB



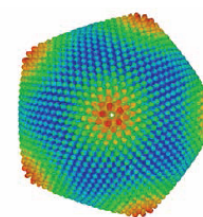
RIBOZOM
200 000 ATOMŮ
290 GB



VIRUS ZIKĀ
66 1 000 ATOMŮ
1,7 GB



HIV KAPSIDA
2440000 ATOMŮ
250 MB*



FAUSTOVIRUS
40 000 000 ATOMŮ
3,92 GB

Na základě znalosti struktury látek získají vědci klíč k pochopení jejich funkce.

Nejnovějším trendem je také propojování informací z dalších databází. Software tak nabízí i anotace, dokáže tedy k jednotlivým místům zobrazené struktury ukázat, zda jsou data o nich dostatečně přesná, zda je to třeba místo častých mutací nebo zda je důležité pro nějakou funkci dané bílkoviny.

Na soubor nástrojů pracoval tým zhruba sedm let, dílem ve spolupráci s vědci z Univerzity Palackého Olomouc a vědci z EMBL (European Molecular Biology Laboratory) ve Velké Británii, kteří spravují evropskou část databáze Protein Data Bank. Ta nyní obsahuje už přes 130 tisíc struktur různých biomakromolekul, od malých bílkovin po jejich velké komplexy.

„Před pěti lety bylo známo jen asi 86 tisíc struktur. Přitom například hemoglobin, což je velmi jednoduchá bílkovina, obsahuje pět tisíc

atomů a představuje tak data o velikosti 133 KB. Zatímco v současné době největší struktura, kapsid faustaviru, má přes 40 milionů atomů a jde tedy o 1,9 GB dat,“ přiblížila změny v objemu vytvářených dat Svobodová.

Výzkumná skupina software využívá pro studium bílkovin zvaných cytochromy, které se vyskytují ve všech organismech od bakterií přes rostliny až po člověka, kde mají na starost odstraňování toxických látek. Dříve nebylo možné je navzájem srovnávat, teď ale vědci mají k dispozici dostatek dat a jednoduchou možností vizualizace, aby mohli sledovat, jak se odlišují cytochromy vytvářené různými typy organismů nebo určené k odbourávání rozdílných látek.

>> litemol.org
Ema Wiesnerová