

Abstrakt

Vyvinuli jsme softwarový framework, který umožňuje analyzovat a porovnávat apo (bez ligandu) a holo (s ligandem) strukturní formy proteinů přístupných v PDB. Software stáhne aktuální verzi PDB, rozdělí struktury do skupin stejných molekul a rozliší zda se jedná o apo či holo strukturní formu. Nakonec je možné analyzovat dvojice apo a holo struktur s ohledem na jejich odlišné strukturální charakteristiky. Kromě samotné softwarové práce prezentujeme výsledky vybraných analýz aktuální verze dat v PDB. Výsledky také ověřujeme oproti výchozímu výzkumu.