

Bílkoviny jsou základními stavebními kameny všech živých organismů. Fungují na základě interakcí s jinými molekulami. Tato práce se zabývá vazebnými místy mezi proteiny a malými molekulami, zejména protože většina současných léků jsou právě malé molekuly. Zatímco nástrojů na predikci těchto vazebných míst je mnoho, počet nástrojů na jejich vizualizaci je téměř nulový. Spojením několika projektů zabývajících se zobrazením proteinů jsme vytvořili nový vizualizační web. Jelikož evoluční konzervovanost koreluje s výskytem vazebných míst, umožňujeme její zobrazení společně s detekovanými vazebnými místy. Vyvinuli jsme několik metod pro výpočet konzervovanosti a použili je v experimentech pro zlepšení detekce vazebných míst. Zde představujeme PrankWeb, moderní webovou aplikaci pro vizualizaci struktury a sekvence proteinů, jejich vazebných míst a konzervovanosti. Doufáme, že PrankWeb bude vědcům poskytovat rychlý a pohodlný prostředek pro analýzu bílkovin.