



## INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Inovace vzdělávání v chemii a biologii s ohledem na aktuální trendy  
v biomedicinálním výzkumu  
reg. č.: CZ.1.07/2.2.00/28.0184

### Zpráva ze zahraniční cesty

Zahraníční stáž byla realizována v rámci projektu INOVACE VZDĚLÁVÁNÍ V CHEMII A BIOLOGII  
S OHLEDEM NA AKTUÁLNÍ TRENDY V BIOMEDICINÁLNÍM VÝZKUMU (CZ.1.07/2.2.00/28.0184).

Účel cesty: Stáž v Evropském bioinformatickém institutu (EMBL-EBI) u dr. Sameera Velankara

Účastník: RNDr. Karel Berka, PhD.

Doba trvání cesty: 23.2. – 27.2. 2015

Místo zahr. cesty: Cambridge, UK

V rámci pracovní stáže v Evropském bioinformatickém institutu (EMBL-EBI) jsem se od dr. Sameera Velankara – (<http://www.ebi.ac.uk/about/people/sameer-velankar>, v pozici team leader PDBe content and integration) dozvěděl, jak používat evropskou mutaci databáze struktur proteinů [www.pdbe.org](http://www.pdbe.org) k získání strukturních informací, které jsou nedosažitelné ve standardní [www.pdb.org](http://www.pdb.org) spravované americkou NCBI. Mezi těmito informacemi bylo například zaměření informací o vazebných místech a přítomných ligandů ve větším detailu a propojení s databází ChEMBL (<https://www.ebi.ac.uk/chembl/>), v níž se ukládají veřejně dostupná data o aktivitě látek získávaná z literatury i z průmyslového testování látek.

Dr. Velankar mi také ukázal, jak pracovat v databázi Apache Solr (<http://lucene.apache.org/solr/>), na kterou postupně s PDBe přecházejí a jejíž výhodou je hlavně velká rychlost a škálovatelnost. Dále jsme probírali možnosti připojení informací o tunelech v proteinech, které jsme schopni analyzovat pomocí našeho olomouckého (a brněnského) nástroje MOLE.

Vzhledem k tomu, že návrh léčiv více a více vychází ze znalosti aktivit látek a díky dostupnosti proteinových struktur se stále víc provádí pomocí strukturního přístupu, tak získané informace rozhodně využijí ve vylepšování výuky racionálního návrhu léčiv (KFC-DD).

*Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.*



## INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Inovace vzdělávání v chemii a biologii s ohledem na aktuální trendy  
v biomedicinálním výzkumu  
reg. č.: CZ.1.07/2.2.00/28.0184

Hlavním poznatkem z této stáže pro mě na vědecké a pedagogické úrovni bylo především zjištění, s jakými typy informací jsou studenti i akademičtí pracovníci zvyklí pracovat. Dle zjištění dr. Velankara podle jejich rozsáhlého uživatelského průzkumu jsou studenti a vědci navyklí pracovat hlavně se zjednodušujícími modely, ukazujícími neúplnou informaci.

Například biologové jsou zvyklí dívat se na geny a proteiny především jako na řádky písmen nukleotidové, resp. aminokyselinové abecedy, ale jen málokdy jsou schopni zpracovávat tuto informaci v trojdimenzionální struktuře výsledného proteinu tak, aby si uvědomili, proč např. bodová mutace může mít zcela fatální důsledky, ale také může být zcela neškodná a to v závislosti na trojdimenzionální pozici v proteinu.

Chemici naproti tomu jsou zvyklí pracovat hlavně s topologií chemických látek – klasickými 2D strukturními vzorci, které ale také neposkytují možnost jednoduchému pochopení interakcí s proteinem, pokud není použit nějaký nástroj typu LigandScout, LigPlot a podobně.

Proto hodlám do přednášek a do připravovaných skript zabudovat části, které by studenty navedly k pochopení interakcí léčiv s receptory v trojdimenzionálním prostoru na základě laskavě poskytnutých podkladů dr. Velankara. (Příloha II)

V Olomouci dne 11.3.2015

*RNDr. Karel Berka, Ph.D.*

## INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Inovace vzdělávání v chemii a biologii s ohledem na aktuální trendy  
v biomedicinálním výzkumu  
reg. č.: CZ.1.07/2.2.00/28.0184

### *Příloha I: Fotky ze stáže*



Dr. Sameer Velankar

<http://www.ebi.ac.uk/about/people/sameer-velankar>



Ukázky nových (zatím neveřejných) stránek PDBe. Karel Berka úplně vpravo

**Příloha II** (samostatné PDF) – prezentace Dr. Sameera Velankara o použití PDBe (Protein Data Bank in Europe – Bringing Structure to Biology), která bude zapracována do výuky Racionálního návrhu léčiv KFC/DD do přednášky o získávání strukturních informací o léčivech a jejich interakcích s proteiny

*Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.*