**MOLE: Pokročilý nástroj pro vyhledávání a charakterizaci tunelů**

*Pravda L.1, Svobodová Vařeková R. 1, Sehnal D. 1, Ionescu C.-M.1, Berka K.2, Otyepka M.2 a Koča J.1*

1 Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta a CEITEC – Středoevropský technologický institut, Masarykova Univerzita Brno, Kamenice 5, 625 00 Brno-Bohunice, xpravda@ncbr.muni.cz.

2 Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Olomouc, tř. 17. listopadu 12, 771 46, Olomouc.

Tunely a póry mají nezastupitelnou úlohu v různých životně důležitých procesech, jelikož umožňují enzymatickou aktivitu v mnoha proteinech s  aktivním místem umístěným hluboko pod povrchem proteinu. Jejich geometrické vlastnosti, jako délka nebo průměr, ale i chemické vlastnosti (polarita, hydropatie nebo potenciál) mají velký vliv na specificitu a selektivitu celé řady enzymatických reakcí. Nejen z těchto důvodů je identifikace a charakterizace tunelů předmětem zájmu pro mnoho různých oblastí – např. pro vývoj léků nebo proteinové inženýrství.

MOLE je nástroj pro snadnou, rychlou a intuitivní analýzu tunelů a pórů v biomakromolekulárních systémech. Díky svým vlastnostem jako jsou interaktivita, rychlost nebo propojení s externími systémy pro vizualizaci molekul nachází uplatnění např. při hloubkovém studiu jednotlivých biologických systémů od malých proteinů až po ribozomy. Navíc je schopen dávkově zpracovávat velké množství proteinů paralelně. Funkcionalita MOLE bude ukázána prostřednictvím analýzy tunelů v rámci více než 4000 proteinů s katalytickou aktivitou uvedenou v CSA databázi.

MOLE je dostupný zdarma jako online služba (http://mole.upol.cz/) nebo jako samostatný softwarový balík s vestavěnou vizualizací (http://mole.chemi.muni.cz).

1. Sehnal,D., Svobodová Vařeková,R., Berka,K., Pravda,L., Navrátilová,V., Banáš,P., Ionescu,C.-M., Otyepka,M. and Koča,J. (2013) MOLE 2.0: advanced approach for analysis of biomacromolecular channels. *J. Cheminform.*, **5**, 39.doi:10.1186/1758-2946-5-39.
2. Berka,K., Hanák,O., Sehnal,D., Banás,P., Navrátilová,V., Jaiswal,D., Ionescu,C.-M., Svobodová Vareková,R., Koca,J. and Otyepka,M. (2012) MOLEonline 2.0: interactive web-based analysis of biomacromolecular channels. *Nucleic Acids Res.*, **40**, W222–7.doi:10.1093/nar/gks363.PMID:22553366.
3. Otyepka,M., Berka,K. and Anzenbacher,P. (2012) Is there a relationship between the substrate preferences and structural flexibility of cytochromes P450? *Curr. Drug Metab.*, **13**, 130–42.PMID:22208528.
4. Pravda, L., Berka, K., Svobodová Vařeková, R., Sehnal, D., Banáš, P., Laskowski, R.A., Koča, J., Otyepka, M. (2014) Anatomy of Enzyme Channels. *Bioinformatics*, submitted.
5. Furnham,N., Holliday,G.L., de Beer,T. a P., Jacobsen,J.O.B., Pearson,W.R. and Thornton,J.M. (2013) The Catalytic Site Atlas 2.0: cataloging catalytic sites and residues identified in enzymes. *Nucleic Acids Res.*doi:10.1093/nar/gkt1243.PMID:24319146.