

Ročníkový projekt - report letný semester

Cieľ na letný semester

Umožniť na stránke zobrazovať proteíny aj z inej ako Alphahold databázy, skrátené proteíny alebo štruktúry s viacerými chains.

Práca počas semestra

Zpracovala som pridanie ďalších modifikácií, upravila som zobrazovanie zdrojov a tooltipy. Pridala som na stránku automatické generovanie legendy modifikácií. V prehliadačoch Google Chrome a Mozilla Firefox som sprístupnila funkcionality SaveImage().

Aby bolo možné zobrazovať z proteíny z rôznych databáz, musela som vyriešiť mapovanie modifikácií na skrátené proteíny, štruktúry s viacerými chain, alebo proteíny s umelo pridanými residues. Najskôr som ručne v Pymol-e testovala farbenie a mapovanie skrátených proteínov, tiež viac-chainových štruktúr.

Upravením sekvencie z pdb súboru som dosiahla správne mapovanie modifikácií.

Zmenila som script, ktorý ofarbujú jednotlivé modifikácie, aby ofarbujú iba vybranú chain a ostatné zvýraznil inou farbou.

Kód, ktorý pracuje s excelovým súborom, som upravila, aby pracoval aj s pridanými stĺpcami (chain, pdb_link).

Aktualizovala som sqlite databázu, ktorá sa používa na generovanie stránok jednotlivých proteínov.

Súčasne som upravila script, aby sa táto automatizácia robila automaticky (napríklad pri doplnení údajov do excelovského súboru).

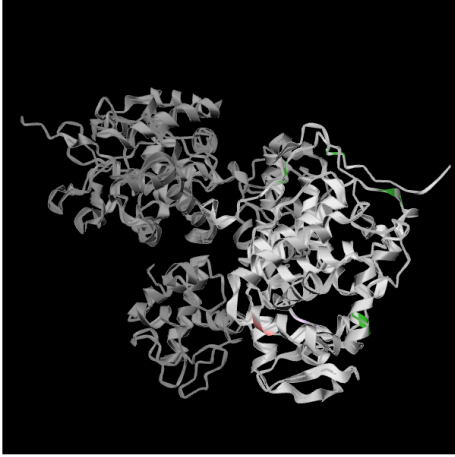
Pridala som automatické sťahovanie pdb súborov proteínov podľa linku uvedenom v exceli.

Nakoniec som spravila som malú úpravu na stránkach proteínov z Protein Data Bank in Europe, aby správne odkazovali na databázu, z ktorej pochádzajú.

Priložené sú náhľady starej a novej 3D verzie proteínu P00431 (naľavo je proteín v štruktúre s viacerými chains, napravo je pôvodná verzia)

Structure

Structure visualized by GLMol written by biochem_fan. The [structure](#) was downloaded from the [Protein Data Bank in Europe](#).



Structure

Structure visualized by GLMol written by biochem_fan. The [structure](#) was downloaded from the [AlphaFold Protein Structure Database](#).

