**Probes & Drugs – portál, který šetří čas**

Svět je nabitý informacemi, valí se na nás ze všech stran. Jak ale najít ty pravdivé, jak se vyvarovat polopravd a lží? Jak informace správně zkombinovat, aby výsledný úsudek dával správný smysl? S těmito problémy se potýkáme všichni, ovlivňuje to naše rozhodování, náš úsudek. Taková analýza zabere mnohdy daleko více času, než jsme si původně mysleli. Na Ústavu molekulární genetiky AV ČR vyvinuli webový portál, který výrazně usnadní práci s informacemi nejen vědcům, kteří se primárně zabývají chemickými sloučeninami a jejich účinkem na živé organismy.

Portál s jednoduchým, ale výstižným názvem “Probes & Drugs” (do češtiny přeložitelným jako Próby a léky) v současné době obsahuje více než 30 000 sloučenin a číslo stále narůstá. Na jednom místě jsou zde shromážděna veřejně dostupná data o těchto sloučeninách, která jsou jinak roztroušena v různých databázích po světě, často velmi těžko dohledatelná. Jedná se především o biologicky aktivní látky, u kterých je již buď částečně či úplně známá aktivita vůči různým proteinům, v konkrétních biologických systémech či jejich terapeutický účinek. Zatímco léky jsou jasně popsané a k užívání schválené sloučeniny, chemické próby nebo, chcete-li, sondy se běžně používají ke studiu funkcí genů, ověřování cílových molekul či k popsání buněčných procesů, a jejich biologická aktivita je popsána mnohdy pouze částečně. V databázi najdeme struktury jednotlivých sloučenin, případně informace s jakými dalšími látkami je možné danou sloučeninu nahradit. Samotný portál využívá data o těchto sloučeninách a různě je kombinuje podle požadavků uživatelů. Někdo by mohl namítnout, že není přece tak výjimečné či obdivuhodné, že si někdo dal práci nashromáždit všechna dostupná data „pod jednu střechu“, ale jak uvádí Petr Bartůněk, vedoucí týmu, který tuto databázi připravil a spravuje: „Kouzlo Probes & Drugs spočívá hlavně v tom, že na jedno až dvě kliknutí myší můžete během několika sekund (minut) nalézt souvislosti mezi sloučeninami, ke kterým jste se dříve dopracovali po dlouhých hodinách prosezených u svých počítačů. Naše databáze tak vědcům ušetří mnoho času. A navíc, díky promyšlenému jednoduchému uživatelskému designu mohou v databázi hledat a poměrně rychle se zorientovat i naprostí laici, kteří viděli chemický vzorec naposledy na základní škole.“ Bohužel se stává, že informace o chemických próbách, které jsou uváděny v databázích, mohou být zastaralé či v horším případě i chybné, ale přesto jsou nadále vědeckou komunitou používané. Jak vysvětluje Ctibor Škuta, doktorand z týmu Petra Bartůňka: „Probes & Drugs se snaží tyto chybně uváděné informace o chemických próbách eliminovat. To je velmi důležité, protože tak lze předejít omylům a mnoha vědcům ušetřit čas a případně i peníze. Naši databázi samozřejmě neustále aktualizujeme o nejnovější data. “

Důležitost Probes & Drugs portálu byla stvrzena přijetím vědeckého článku, který jej popisuje, do prestižního časopisu Nature Methods (článek vyjde v jeho srpnovém čísle). Samotný portál se otevře svým uživatelům 28. 7. 2017 a jen čas ukáže, nakolik si budou vědci Probes & Drugs cenit, jak hojně portál budou využívat ke svým úvahám, jak často se k němu budou vracet. Nezbývá než popřát jejím tvůrcům hodně pozitivních zpětných vazeb a hodně citací “Probes & Drugs”.

<http://www.nature.com/nmeth/index.html>

[www.probes-drugs.org](http://www.probes-drugs.org)

[www.openscreen.cz](http://www.openscreen.cz)

[www.img.cas.cz](http://www.img.cas.cz)

Kontakt: RNDr. Petr Bartůněk, CSc., CZ-OPENSCREEN, Ústav molekulární genetiky AV ČR, v.v.i.; tel: 241063117, e-mail: bartunek@img.cas.cz

