



RNA falten

Wie sagt man die Sekundärstruktur einer RNA-Sequenz voraus? Am einfachsten mit Hilfe der Web-Site von Michael Zuker! Sie ist der RNA gewidmet und insbesondere der Vorhersage der Sekundärstruktur von Nucleinsäuren. Sie enthält darüber hinaus Links zu Veröffentlichungen, Biophysik- und Bioinformatikkursen am Rensselaer Polytechnic Institute im Staat New York und einige sehr gute Skripte über RNA-Sequenzen und -sekundärstrukturen. Die Site ist ausgezeichnet gepflegt und wird kontinuierlich aktualisiert.

Der wichtigste Teil der Site ist eine benutzerfreundliche Bedienoberfläche zu Zuckers Programm MFOLD zur Vorhersage von RNA-Sekundärstrukturen, dessen ausführliche Dokumentation in mehreren Formaten erhältlich ist. Die aktuellste Version des Programms greift auf die neuesten Energieparameter von Doug Turners Arbeitsgruppe zurück,^[1] aber die Temperatur ist auf 37 °C fixiert. Zum Falten von DNA-Sequenzen werden die Parameter von John SantaLucia Jr. benutzt.^[2] Auf diese Weise können

Sequenzen mit bis zu 3000 Nucleotiden berechnet werden. Die Behandlung der eingeschickten Daten und die Rückgabe der Ergebnisse hängt von deren Menge ab. Die Parameter der Rechnungen, wie z. B. Randbedingungen aus experimentellen Untersuchungen, und der Grafikausgabe (Numerierung, Drehung und Farbkodierung) können über das WWW-Formular eingestellt werden. Die Strukturen von Sequenzen mit bis zu 500 Nucleotiden werden sehr schnell berechnet, sodass man das Ergebnis direkt zurück erhält. Bei längeren Sequenzen erhält man per E-Mail einen Link zugeschickt, unter dem die Ergebnisse abzuholen sind. Der Quikfold-Server erlaubt die simultane Berechnung von mehreren Sequenzen mit bis zu 600 Nucleotiden. Die Freie Energie einer gefalteten Sequenz mit bis zu 1500 Nucleotiden kann mit Hilfe des Efn-Servers bestimmt werden. Die Ergebnisse werden anhand der Adresse des Absenders identifiziert und zwei Tage lang auf dem Server für ihn zum Abruf bereitgehalten. Ihre Interpretation bleibt der Expertise der Nutzer überlassen.

Für jede Sequenz können Energiedarstellungen als Text-, Postscript-, PNG- oder JPEG-Datei erzeugt werden, sowie thermodynamische Daten und Bilder. Die berechneten Sekundärstrukturen können in mehreren Formaten (auch komprimiert) zur Weiterverarbeitung in anderen Programmen heruntergeladen werden, z. B. mit RNADraw, LoopD-Loop oder GCG. Auch das noch in Entwicklung befindliche Madison-Format^[3] bietet die Site an.

Man kann sich das Programmpaket MFOLD auch auf den eigenen Rechner herunterladen, sofern er unter UNIX oder Windows läuft. ESSA und das

Vienna Package^[4] sind ebenfalls hier zu finden. Es gibt auch einen Link, um Sequenzen an das Berlozersky-Institut in Moskau zu schicken, wo die Vorhersage von Sekundärstrukturen zueinander ausgerichteter Sequenzen möglich ist. Weitere Links führen zu Routinen, die das Manipulieren der Strukturen ermöglichen. Man findet darüberhinaus Links zu Sites mit RNA-Datenbanken,

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:
angewandte@wiley-vch.de

Zeitschriften und Konferenzen. Vor allem aber ist die ausgezeichnete RNA-World-Site am IMB in Jena zu empfehlen.^[5] Schließlich sind wertvolle Lehr- und Lernmaterialien auf der Site abgelegt: Veröffentlichungen von Zuker, aber auch detaillierte Beschreibungen der thermodynamischen Zusammenhänge, die den Vorhersagen zugrunde liegen.

Das Gästebuch enthält alle Fragen früherer Besucher und auch die sehr ausführlichen Antworten von Michael Zuker. Diese Web-Site ist aufgrund ihres Nutzens und ihrer Nutzerfreundlichkeit jedem zu empfehlen, der mit RNA arbeitet.

Fabrice Jossinet, Eric Westhof
Institut de Biologie Moléculaire et Cellulaire (CNRS), Strasbourg (Frankreich)

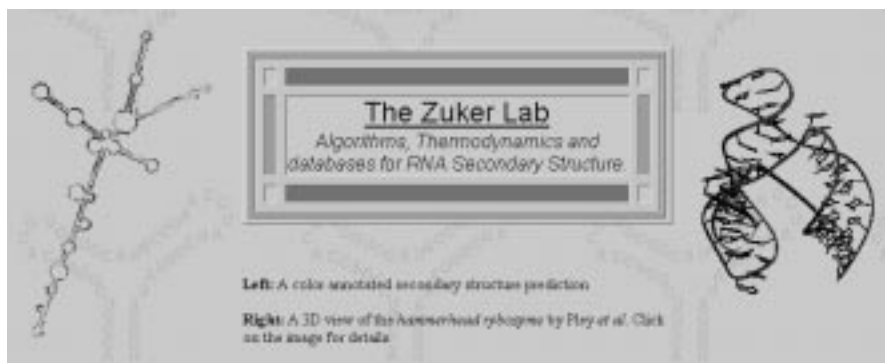
[1] <http://128.151.176.70/>

[2] <http://sun2.science.wayne.edu/~jslsun2/>

[3] <http://bioinfo.math.rpi.edu/~zukerm/rna/Madison.html>

[4] <http://www.tbi.univie.ac.at/cgi-bin/RNAfold.cgi>

[5] <http://www.imb-jena.de/RNA.html>



Für weitere Informationen besuchen Sie:

<http://bioinfo.math.rpi.edu/~zukerm/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
zukerm@rpi.edu