

1. Rodzaje wiązań

Molekuły potocznie zwane także cząsteczkami powstają wskutek łączenia się ze sobą atomów różnych lub tych samych pierwiastków w układy wieloatomowe lub dwuatomowe.

Aby utworzyć typowe wiązanie chemiczne, potrzeba przynajmniej dwóch elektronów. Istnieją wiązania pojedyncze i wielokrotne, które dzielą się na podwójne i potrójne.

- Wiązanie pojedyncze to wiązanie, które tworzą dwa elektrony
- Wiązanie podwójne to wiązanie, w którym uczestniczą cztery elektrony
- Wiązanie potrójne to wiązanie, w którym uczestniczy sześć elektronów

Kiedy suma energii poszczególnych atomów w stanie swobodnym jest większa od energii cząsteczki dochodzi do połączenia się ze sobą atomów. Dochodzi wtedy do istotnych zmian w rozmieszczeniu elektronów, ale tylko na zewnętrznych orbitach atomów. Na wewnętrznych orbitach poszczególnych atomów zmiany w rozmieszczeniu elektronów są praktycznie niezauważalne. Takie rozłożenie elektronów nie jest przypadkowe, ponieważ zewnętrzne elektrony mają znaczący wpływ na właściwości chemiczne cząsteczki.

Minimalna wartość energii potencjalnej otrzymana przez ten układ świadczy o trwałości połączenia atomów w cząsteczkę.

Przebieg tworzenia cząsteczki przez układ dwóch atomów można opisać następująco. Kiedy dochodzi do zbliżenia się atomów do siebie siły przyciągające w pierwszej kolejności rosną, później maleją, a na koniec przechodzą w siły odpychające.

Oddziaływania możemy podzielić na:

- ❖ Oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe, nazywane także międzyatomowymi
 - Wiązania jonowe (elektropolarne, heteropolarne)
 - Wiązania kowalencyjne (atomowe, homeopolarne)
 - Wiązania koordynacyjne

- ❖ Oddziaływania międzycząsteczkowe
 - Uniwersalne (niespecyficzne)
 - Oddziaływania van der Waalsa
 - Oddziaływania specyficzne
 - Oddziaływania wodorowe

2. Oddziaływania wewnątrzcząsteczkowe

2.1 Wiązania Jonowe

Wiązanie jonowe powstaje w wyniku przewagi sił elektrostatycznego przyciągania przeciwnie naładowanych jonów (kationów i anionów) lub grupami funkcyjnymi nad siłami odpychania jednego ładunku. W wiązaniach tego typu następuje przemieszczenie elektronów, aby do tego doszło jeden z pierwiastków musi być silniej elektroujemny, a drugi mniej. Następuje wtedy przeniesienie elektronu, w skutek czego powstaje kation pierwiastka o niskiej elektroujemności i anionu pierwiastka silnie elektroujemnego. Jony takie przyciągają się siłami elektrycznymi i tworzą silnie związaną cząsteczkę. O rozkładzie ładunku pomiędzy dwoma atomami mówi nam elektroujemność, którą zdefiniował Mullikena. Według niego elektroujemność atomów jest określana jako średnia arytmetyczna z sumy z powinowactwa elektronowego i pierwszej energii jonizacji.

Wydzielenie energii następuje w skutek przyjmowania elektronu. Największą elektroujemność mają chlorowce, którym brakuje do oktetu jednego elektronu. Dzieje się tak podczas dołączania do nich elektronu. Natomiast najmniejszą elektroujemność wykazują atomy z układu okresowego grupy I, czyli w atomach metali alkalicznych. Najczęściej jednak powstają wiązania jonowe, kiedy na skutek przejścia elektronu do atomu o mniejszej elektroujemności do atomu o większej elektroujemności tworzą się jednocześnie w pozostałych jonach wypełnione powłoki elektronowe.

2.2 Wiązania kowalencyjne

Wiązania kowalencyjne inaczej zwane wiązania atomowe powstają przede wszystkim w cząsteczkach homodwujądrowych, czyli powstaje pomiędzy identycznymi atomami jednego pierwiastka. Wiązania takie tworzą się w wyniku uwspólniania elektronów pochodzących od obu atomów. Jest to dosyć oczywiste, ponieważ trudno jest sobie wyobrazić aby cząsteczki homojądrowe powstawały w rezultacie przeniesienia elektronów z jednego atomu na drugi o identycznej elektroujemności. Różnica elektroujemności pomiędzy pierwiastkami tworzącymi wiązanie wynosi zero. Poprzez uwspólnianie elektronów atom może uzyskać oktet walencyjny. W takim przypadku oba atomy są partnerami równorzędnymi

Wiązania Kowalencyjne możemy podzielić na dwie grupy:

- Niespolaryzowane – w wyniku takiego wiązania powstaje para tworzona przez dwa jednakowe pierwiastki. Obydwa atomy są tak samo elektroujemne i każdy z nich z równą siłą przyciąga pary elektronów.
- Spolaryzowane- w wyniku takiego wiązania powstaje para lub kilka par elektronowych, które są przesunięte w kierunku bardziej elektroujemnego atomu. W takim przypadku jeden z atomów jest dodatnio naładowany, a drugi ujemnie.

Podział wiązań kowalencyjnych ze względu na charakter wiązania:

- Pojedyncze
- Podwójne
- Potrójne

2.3 Wiązania koordynacyjne

Trzecim typem wiązań wewnątrzcząsteczkowych jest wiązanie koordynacyjne. Czasami jest traktowane jako szczególny przypadek wiązania kowalencyjnego. Jednak różni się ono sposobem powstawania. Istota tego wiązania jest, że do powstania tego wiązania nie potrzebne są elektrony dostarczane przez dwa atomy, po jednym przez każdy z nich. Para elektronów wiążąca atomy pochodzi od uwspólniania jednego z atomów tworzących wiązanie zwanym donorem. Drugi atom zwany akceptorem, uzupełnia własną powłokę walencyjną elektronami donora.

3. Oddziaływania międzycząsteczkowe

Oddziaływania międzycząsteczkowe prowadzą do powstania struktur nadmolekularnych, w szczególności odniesionych do stanów stałego i ciekłego. Generalnie można stwierdzić, że energia wiązania wewnątrzcząsteczkowego jest w przybliżeniu stukrotnie większa od energii wiązania międzycząsteczkowego.

Oddziaływania międzycząsteczkowe dzieli się na tzw. Uniwersalne(niespecyficzne), występujące we wszystkich układach cząsteczkowych, oraz oddziaływania specyficzne, występujące tylko pomiędzy określonymi rodzajami cząsteczek.

3.1 Oddziaływanie van der Waalsa

3.2 Oddziaływania specyficzne

4. Narzędzia RNA - RNA

	AccessFold	Comparative prediction algorithm for small RNA targets CopraRNA	IntaRNA	Intermolecular RNA (BLAT-like) Interaction Search IRBIS	NPInter	RILogo	RNAplex
Sposób dostępu	Program instalowalny	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa	Program instalowalny	Aplikacja internetowa	aplikacja internetowa	Program instalowalny
Typ oprogramowania	Pakiet			Pakiet		Pakiet	Pakiet
Jak jest obsługiwany	Interfejs wiersza poleceń, interfejs graficzny			Interfejs wiersza poleceń		Interfejs wiersza poleceń	Interfejs wiersza poleceń
Ograniczenia w użyciu	żadne	żadne	żadne	żadne	żadne	żadne	żadne

System operacyjny	Unix/Linux			Unix/Linux		Unix/Linux	Unix/Linux
	AccessFold	Comparative prediction algorithm for small RNA targets CopraRNA	IntaRNA	Intermolecular RNA (BLAT-like) Interaction Search IRBIS	NPInter	RILogo	RNAplex
Znajomość obsługi komputera	zaawansowane	Podstawowa	Podstawowa	zaawansowane	Podstawowa	zaawansowane	zaawansowane
stabilność	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny
Dostępna wersja	5.8.1	2.0.3.2	1.2.5	3.0	Brak danych	Brak danych	Niedostępny
Dane wejściowe	Brak Danych	Sekwencje	Sekwencje	Brak Danych	Sekwencje	Sekwencje	
Format wejściowy	Brak Danych	FASTA	FASTA	Brak Danych	FASTA	Stockholm, CLUSTAL, FASTA	
Rok dostępnych publikacji	2015	2013 oraz 2014	2008 oraz 2014	2014	2006 oraz 2014	2006 oraz 2014	
Czas oczekiwania na wynik	Brak Danych	Okolo 2 godzin	Okolo 30-50 minut	Brak Danych	Poniżej minuty	Brak Danych	

4.1 Comparative prediction algorithm for small RNA targets / CopraRNA

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	2.0.3.2
Dane wejściowe:	Sekwencje
Format wejściowy:	FASTA
Rok dostępnych publikacji:	2013 oraz 2014
Czas oczekiwania na wynik:	Okolo 2 godzin

CopraRNA Jest narzędziem do prognozowania sRNA wykorzystując homologię. Oblicza całe przewidywania genomu przez połączenie odrębną całość prognoz genom IntaRNA. Jako wejście, CopraRNA wymaga co najmniej 3 sekwencji homologicznych sRNA z 3 odrębnych organizmów w formacie FASTA. Ponadto sekwencje muszą być częścią bazy danych NCBI w formacie RefSeq (nazwa sekwencji powinna mieć dokładnie format NC_XXXXXX gdzie X oznacza cyfrę od 0 do 9). Została stworzona lista z kompatybilnymi organizmami dla CopraRNA, w której jest już dostępnych ponad 4000 organizmów. Lista ta ciągle jest aktualizowana (ostatnia aktualizacja 3 czerwiec 2016r.). W zależności od długości sekwencji, ilości organizmów wejściowych i wielkości genomu CopraRNA może trwać do około 24 godzin lub dłużej, w celu obliczenia (w większości przypadków jest znacznie szybszy). Aby jednak nie czekać można podać swój e-mail i wrócić, kiedy zadanie zostanie zakończone. Jako wynik CopraRNA produkuje listy domniemanych celów. Wyniki mogą być wyświetlane w przeglądarce, ale dla dokładniejszej analizy danych jest możliwe pobranie danych. CopraRNA nie jest doskonała, a montaż sekwencji może być uciążliwy. Jednak jakość wyników ma przewagę nad innymi narzędziami przeznaczonymi do sekwencji sRNA. Wyniki pokazują, że CopraRNA jest konkurencyjne w porównaniu z danymi uzyskanymi z analiz mikromacierzy. Koszt zgromadzenia danych jest uzasadniony wynikami będącymi

kilka rzędów wielkości większe niż te obliczane przez inne algorytmy. Ponadto CopraRNA jest darmowa i szybka w porównaniu z mikromacierzami.

CopraRNA jest dostępna jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://rna.informatik.uni-freiburg.de/CopraRNA/Input.jsp>. (The Author(s) 2014. Published by Oxford University Press on behalf of Nucleic Acids Research.) Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- Patrick R. Wright, Jens Georg, Martin Mann, Dragos A. Sorescu, Andreas S. Richter, Steffen Lott, Robert Kleinkauf, Wolfgang R. Hess, and Rolf Backofen
[CopraRNA and IntaRNA: predicting small RNA targets, networks and interaction domains](#)
Nucleic Acids Research, 2014, 42 (W1), W119-W123.
- Patrick R. Wright, Andreas S. Richter, Kai Papenfort, Martin Mann, Joerg Vogel, Wolfgang R. Hess, Rolf Backofen and Jens Georg
[Comparative genomics boosts target prediction for bacterial small RNAs](#)
Proc Natl Acad Sci USA, 2013, 110 (37), E3487-E3496.


```
## last updated: Tue Jun  3 10:20:28 CET 2016
## please contact us if you know your
## organism is part of the RefSeq database
## and has an ID in the RefSeq format but
## is not present in this list, or is
## missing IDs
## NC_022785 NC_018220 have been manually omitted
## due to incompatible RefSeq file nomenclature or missing 16S rRNA annotation

RefSeq-IDs      organism-name
NC_009641      Staphylococcus_aureus_subsp._aureus_str._Newman
NC_022593 NC_022587      Lactococcus_lactis_subsp._lactis_KLDS_4.0325
NC_002737      Streptococcus_pyogenes_M1_GAS
NC_007297      Streptococcus_pyogenes_MGAS5005
NC_022659 NC_022658      Burkholderia_pseudomallei_NCTC_13179
NZ_CM001848 NZ_CM001849 Lactobacillus_casei_LcY
NZ_CM001793      Nodularia_spumigena_CCY9414
NC_021894      Candidatus_Carsonella_ruddii_DC
NC_008512      Candidatus_Carsonella_ruddii_PV
NC_018414      Candidatus_Carsonella_ruddii_CE_isolate_Thao2000
NC_018415      Candidatus_Carsonella_ruddii_CS_isolate_Thao2000
NC_018416      Candidatus_Carsonella_ruddii_HC_isolate_Thao2000
NC_018417      Candidatus_Carsonella_ruddii_HT_isolate_Thao2000
NC_018418      Candidatus_Carsonella_ruddii_PC_isolate_NHV
NC_009937      Azorhizobium_caulinodans_OR5_571
NC_020419 NC_020421 NC_020422 NC_020420 uncultured_Termite_group_1_bacterium_phylotype_Rs-D17
NC_022115 NC_022125      Rhodococcus_erythropolis_CCM2595
NC_012730 NC_012732      Rickettsia_peacockii_str._Rustic
NC_012960      Candidatus_Hodgkinia_cicadicola_Dsem
NZ_CM001047      Listeria_marthii_FSL_S4-120
NC_015155      Mycoplasma_suis_str._Illinois
NC_015153      Mycoplasma_suis_KI3806
NC_014497      Candidatus_Zinderia_insecticola_CARI
NC_017293      Candidatus_Tremblaya_princeps_PCVAL
NC_015736      Candidatus_Tremblaya_princeps_PCIT
NC_018219      Candidatus_Mycoplasma_haemolamae_str._Purdue
NC_018149      Mycoplasma_wenyonii_str._Massachusetts
NC_017025      Flavobacterium_indicum_GPTS100-9_=_DSM_17447
NC_000868 NC_001773      Pyrococcus_abyssi_GE5
NC_019674      Helicobacter_heilmannii_ASB1.4
NZ_CM001873      Diapherotrites_16S_DW240
```

Rysunek 1 Lista dostępnych organizmów w formacie RefSeq.

Input Parameters

?

sRNA sequences:

Przeglądaj...

Nie wybrano pliku.

[clear]

```

>NC_000913
acaccgucgcuaaaagugacggcgaauaaauaaaaaauugaaauuccucuuugacgggccaaauagcgauauuggccauuuuuuu
>NC_009792
uaaccagggcgcuacguccuggcgaauaaauaacgaugaaauuccucuuugacgggccaaauagaaauuggccauuuuuuu
>NC_013716
acaccgucgcuaaaagcgcggaauaaauaacgaugaaauuccucuuugacgggccaaauagcgauauuggccauuuuuuu
>NC_011740
acaccgucgcuaaaagugacggcgaauaaauaaaaaauugaaauuccucuuugacgggccaaauagcgauauuggccauuuuuuu
>NC_003197
gauccgaagcgaaagcgucgggaauaaauaacgaugaaauuccucuuugacgggccaaauagcgauauuggccauuuuuuu

```

?

Organism of interest:

☒ NC_000913 = [Escherichia coli str. K-12 substr. MG1655](#)

☐ NC_009792 = [Citrobacter koseri ATCC BAA-895](#)

☐ NC_013716 = [Citrobacter rodentium ICC168](#)

☐ NC_011740 = [Escherichia fergusonii ATCC 35469](#)

☐ NC_003197 = [Salmonella enterica subsp. enterica serovar Typhimurium str. LT2](#)

?

Extract sequences around:

☒ start codon
☐ stop codon

?

nt up (1-300):

200

?

nt down (1-300):

100

?

Minimal rel. cluster size:

0.5

?

Description:

(optional)

?

Your Email:

(optional)

START

Reset

Rysunek 2 Input sekwencji 5 ChiX.

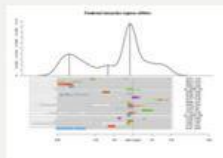
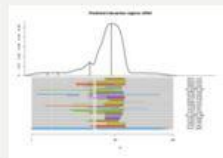
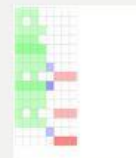
ChiX

Output

[download complete results \[zip\]](#)

Downloadable files

- [CoproRNA result table:](#) [csv]
- [Functional enrichment file](#) [txt]
- [Auxiliary enrichment file](#) [txt]
- [mRNA regions plot](#) [png] [pdf] [ps]
- [sRNA regions plot](#) [png] [pdf] [ps]
- [Functional annotation chart](#) [html] [pdf]
- [16S rDNA tree](#) [txt] [svg]

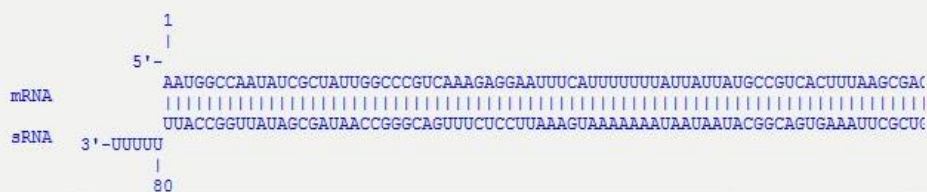
[mRNA region plot](#)[sRNA region plot](#)[Annot. chart](#)[Conserved, identified interactions for NC_000913 Escherichia coli str. K-12 substr. MG1655](#)

Select: 1-10 11-20 21-30 31-40 41-50 51-60 61-70 71-80 81-90 91-100 all

Sort by selecting a column name:

Rank	CoproRNA p-value	CoproRNA fdr value	Locus Tag	Gene Name	Energy [kcal/mol]	IntaRNA p-value	Position mRNA	Position sRNA	Annotation	Additional homologs	sampled p-values
1	0	0	b0481	ybaK	-88.56	0.000000	1 – 79	1 – 79	Cys-tRNA(Pro)/Cys-tRNA(Cys) deacylase		0
2	8.283e-07	0.001502	b1737	chbC	-17.14	0.000469	134 – 152	38 – 56	N N'-diacetylchitobiose-specific enzyme IIC component of PTS		0
3	8.002e-06	0.009674	b0681	chiP	-14.84	0.001536	182 – 193	45 – 56	chitopirin uptake of chitosugars		0
4	0.0003681	0.3338	b1040	csgD	-8.90	0.035889	185 – 199	38 – 52	csgBAC operon transcriptional regulator		0
5	0.0006671	0.4839	b1048	opgG	-10.76	0.013253	159 – 168	44 – 53	osmoregulated periplasmic glucan (OPG) biosynthesis periplasmic protein		0
6	0.001688	0.8623	b1276	aconA	-9.00	0.033954	184 – 196	44 – 55	aconitate hydratase 1		0
7	0.002278	0.8623	b0847	ybjL	-11.75	0.007820	224 – 253	26 – 55	putative transporter		0
8	0.002313	0.8623	b1476	fdnI	-8.82	0.037413	152 – 174	46 – 69	formate dehydrogenase-N cytochrome B556 (gamma) subunit nitrate-inducible		0
9	0.002378	0.8623	b0480	ushA	-7.61	0.071407	166 – 212	25 – 55	bifunctional UDP-sugar hydrolase/5'-nucleotidase		0
10	0.002619	0.8635	b0886	cydC	-10.13	0.018541	184 – 194	44 – 55	fused glutathione cysteine exporter subunits of ABC superfamily; membrane component/ATP-binding component		0

Details of Selected Interaction

[Download Interaction Details](#)

Energy -88.56 kcal/mol
Hybridization Energy -143.2 kcal/mol
Unfolding Energy - mRNA 28.0424 kcal/mol
Unfolding Energy - sRNA 26.5954 kcal/mol

Position - mRNA 1 – 79
Position - sRNA 1 – 79
Position Seed - mRNA 73 – 79
Position Seed - sRNA 1 – 7

Job resubmission

Use the following button if you want to resubmit the job with altered input or parameterization:

[▶ RESTART](#)

4.2 AccessFold

Sposób dostępu:	Program instalowalny
Typ oprogramowania:	Pakiet
Jak jest obsługiwany:	Interfejs wiersza poleceń, interfejs graficzny
Ograniczenia w użyciu:	żadne
System operacyjny:	Unix/Linux
Znajomość obsługi komputera:	zaawansowane
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	5.8.1
Ostatnia aktualizacja	06.06.2016
Rok dostępnych publikacji:	2015

RNAstructure to kompletny pakiet do przewidywania struktury RNA i DNA i wtórnej analizy. Obejmuje ona algorytmy przewidywania struktury drugorzędowej, w tym instalacji do przewidzenia bazowych prawdopodobieństw parowania. Również może być stosowany do przewidywania struktury dwucząsteczkowych i można przewidzieć równowagi wiązania powinowactwo oligonukleotydu do strukturalnego docelowego RNA. Jest to przydatne dla siRNA design. Można również przewidzieć struktury drugorzędowe wspólne dla dwóch, niewyrównana sekwencji, która jest znacznie bardziej dokładne niż przewidywania struktury drugorzędowej jednej sekwencji. Wreszcie RNAstructure może podjąć szereg różnych typów danych kartograficznych eksperyment, aby ograniczyć lub ograniczają przewidywania struktury. Należą mapowanie mapowanie chemiczną, enzymatyczną, NMR i dane kształt.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (DiChiacchio et al., 2015) AccessFold: Predicting RNA-RNA Interactions with Consideration for Competing Self-Structure. Bioinformatics.
[PMID: 26589271](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26589271/)

4.3 IntaRNA

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	1.2.5
Dane wejściowe:	Sekwencje
Format wejściowy:	FASTA
Rok dostępnych publikacji:	2008 oraz 2014
Czas oczekiwania na wynik:	Około 30-50 minut

IntaRNA to program do szybkiego i dokładnego przewidywania interakcji między dwiema cząsteczkami RNA. Został on zaprojektowany do przewidywania miejsc docelowych mRNA dla danych niekodujących RNA (ncRNAs), jak eukariotycznych mikroRNA (miRNA) lub małych bakteryjnych RNA (sRNAs), ale może być również stosowany do przewidywania innych typów interakcji RNA-RNA. IntaRNA akceptuje wejście sekwencji zapytań w postaci wielu plików FASTA. Wejście można podawać jako bezpośredniego wprowadzania tekstu lub przesyłając plik. Każda sekwencja powinna zawierać tylko znaki A, C, G, T, U. Sekwencja w formacie FASTA zaczyna się od jednego rzutu identyfikatorem sekwencji, która rozpoczyna się w większym niż (">") symbol, a następnie linii danych sekwencyjnych. Ponadto sekwencje muszą być częścią bazy danych NCBI w formacie RefSeq (nazwa sekwencji powinna mieć dokładnie format NC_XXXXXX gdzie X oznacza cyfrę od 0 do 9). Została stworzona lista z kompatybilnymi organizmami dla CopraRNA oraz IntaRNA, w której jest już dostępnych ponad 4000 organizmów. Lista ta ciągle jest aktualizowana (ostatnia aktualizacja 3 czerwiec 2016r.). Dla czytelności, zaleca się, aby każda linia jest co najwyżej 80 znaków. IntaRNA predicts RNA-RNA interactions by an energy-based approach that is based on two assumptions: (1) the accessibility of the interaction sites is important for the interaction formation, and (2) a seed region is required to initiate the interaction (e.g. the 5' seed region for miRNAs). (IntaRNA przewiduje interakcji RNA-RNA podejścia energetycznego opartego o który opiera

się na dwóch założeniach: (1) dostępność miejsc interakcji jest ważne dla kształtowania interakcji, oraz (2) region nasion jest wymagane, aby rozpocząć interakcję (np region 5 'seed dla miRNA).)

IntaRNA jest dostępna jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://rna.informatik.uni-freiburg.de> (The Author(s) 2014. Published by Oxford University Press on behalf of Nucleic Acids Research.) Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- Patrick R. Wright, Jens Georg, Martin Mann, Dragos A. Sorescu, Andreas S. Richter, Steffen Lott, Robert Kleinkauf, Wolfgang R. Hess, and Rolf Backofen
[CoproRNA and IntaRNA: predicting small RNA targets, networks and interaction domains](#)
Nucleic Acids Research, 2014, 42 (W1), W119-W123.
- Anke Busch, Andreas S. Richter, and Rolf Backofen
[IntaRNA: efficient prediction of bacterial sRNA targets incorporating target site accessibility and seed regions](#)
Bioinformatics, 24 no. 24 pp. 2849-56, 2008


```
## last updated: Tue Jun  3 10:20:28 CET 2016
## please contact us if you know your
## organism is part of the RefSeq database
## and has an ID in the RefSeq format but
## is not present in this list, or is
## missing IDs
## NC_022785 NC_018220 have been manually omitted
## due to incompatible RefSeq file nomenclature or missing 16S rRNA annotation

RefSeq-IDs      organism-name
NC_009641      Staphylococcus_aureus_subsp._aureus_str._Newman
NC_022593 NC_022587      Lactococcus_lactis_subsp._lactis_KLDS_4.0325
NC_002737      Streptococcus_pyogenes_M1_GAS
NC_007297      Streptococcus_pyogenes_MGAS5005
NC_022659 NC_022658      Burkholderia_pseudomallei_NCTC_13179
NZ_CM001848 NZ_CM001849 Lactobacillus_casei_LcY
NZ_CM001793      Nodularia_spumigena_CCY9414
NC_021894      Candidatus_Carsonella_ruddii_DC
NC_008512      Candidatus_Carsonella_ruddii_PV
NC_018414      Candidatus_Carsonella_ruddii_CE_isolate_Thao2000
NC_018415      Candidatus_Carsonella_ruddii_CS_isolate_Thao2000
NC_018416      Candidatus_Carsonella_ruddii_HC_isolate_Thao2000
NC_018417      Candidatus_Carsonella_ruddii_HT_isolate_Thao2000
NC_018418      Candidatus_Carsonella_ruddii_PC_isolate_NHV
NC_009937      Azorhizobium_caulinodans_OR5_571
NC_020419 NC_020421 NC_020422 NC_020420 uncultured_Termite_group_1_bacterium_phylotype_Rs-D17
NC_022115 NC_022125      Rhodococcus_erythropolis_CCM2595
NC_012730 NC_012732      Rickettsia_peacockii_str._Rustic
NC_012960      Candidatus_Hodgkinia_cicadicola_Dsem
NZ_CM001047      Listeria_marthii_FSL_S4-120
NC_015155      Mycoplasma_suis_str._Illinois
NC_015153      Mycoplasma_suis_KI3806
NC_014497      Candidatus_Zinderia_insecticola_CARI
NC_017293      Candidatus_Tremblaya_princeps_PCVAL
NC_015736      Candidatus_Tremblaya_princeps_PCIT
NC_018219      Candidatus_Mycoplasma_haemolamae_str._Purdue
NC_018149      Mycoplasma_wenyonii_str._Massachusetts
NC_017025      Flavobacterium_indicum_GPTSA100-9_=_DSM_17447
NC_000868 NC_001773      Pyrococcus_abyssi_GE5
NC_019674      Helicobacter_heilmannii_ASB1.4
NZ_CM001073      Dickeya_sp._DSM_20740
```

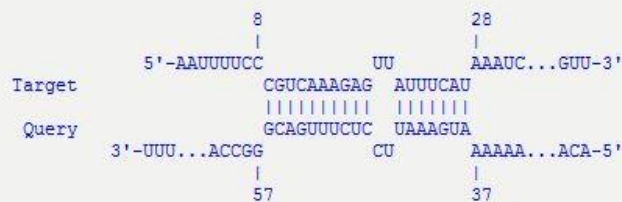
Rysunek 3 Lista dostępnych organizmów w formacie RefSeq.

Output

Downloadable files

Select: [1-10](#) [11-20](#) [21-30](#) [31-40](#) [41-50](#) [51-60](#) [61-70](#) [71-80](#) [81-90](#) [91-100](#) [all](#)

p-value	fdr value	Target	Position	Query	Position	Energy	Gene	Annotation
0.0003251	0.88269	b1737	9 – 27	NC_000913	38 – 56	-18.19260	chbC	NN'-diacetylchitobiose-specific enzyme IIC component of PTS
0.0014284	0.88269	b0681	57 – 68	NC_000913	45 – 56	-14.49590	ohiP	chitoporin uptake of chitosugars
0.0023528	0.88269	b0619	39 – 50	NC_000913	46 – 57	-13.32990	oitA	sensory histidine kinase in two-component regulatory system with CitB
0.0043673	0.88269	b4357	63 – 72	NC_000913	44 – 53	-11.93740	yjiM	yjiMN operon transcriptional activator
0.0048265	0.88269	b3133	60 – 69	NC_000913	44 – 53	-11.71760	agaV	N-acetylgalactosamine-specific enzyme IIB component of PTS
0.0054306	0.88269	b0847	99 – 128	NC_000913	26 – 55	-11.46020	ybjL	putative transporter
0.0061323	0.88269	b1048	34 – 43	NC_000913	44 – 53	-11.19700	opgG	osmoregulated periplasmic glucan (OPG) biosynthesis periplasmic protein
0.007533	0.88269	b2688	129 – 139	NC_000913	45 – 55	-10.75610	gshA	glutamate-cysteine ligase
0.0075902	0.88269	b4199	59 – 70	NC_000913	46 – 57	-10.74000	yjFY	YhcN family protein periplasmic
0.0075902	0.88269	b4199	59 – 70	NC_000913	46 – 57	-10.74000	yjFY	YhcN family protein periplasmic
0.007618	0.88269	b1561	112 – 148	NC_000913	44 – 82	-10.73220	rem	Qin prophage uncharacterized protein

[Download Interaction Details](#)

Energy	-18.19260 kcal/mol	Position - Target RNA	9 -- 27
Hybridization Energy	-22.4	Position - Query RNA	38 -- 56
Unfolding Energy - Target	1.86758	Position Seed - Target RNA	21 -- 27
Unfolding Energy - Query	2.33978	Position Seed - Query RNA	38 -- 44

Job resubmission

▶ RESTART

4.4 Intermolecular RNA (BLAT-like) Interaction Search / IRBIS

Sposób dostępu:	Program instalowalny
Typ oprogramowania:	Pakiet
Jak jest obsługiwany:	Interfejs wiersza poleceń
Ograniczenia w użyciu:	żadne
System operacyjny:	Unix/Linux
Licencja:	GNU General Public License w wersji 2.0
Znajomość obsługi komputera:	zaawansowane
Wersja	IRBIS wersja 3.0
Stabilność:	Stabilny
Rok dostępnych publikacji:	2014

Intermolecular RNA (BLAT-like) Interaction Search w skrócie IRBIS służy do wykrywania konserwatywnych komplementarnych regionów w niedopasowanych ortologicznych sekwencjach. W przeciwieństwie do innych metod, IRBIS przeszukuje wszystkie możliwe kombinacje komplementarnych nukleotydów. Procedura przycinania zmniejsza rozmiar nowych przestrzeni poszukiwań i poprawia działanie w stosunku do punktu, w którym staje się możliwa duża skala analizy wewnątrz- i międzycząsteczkowych oddziaływań RNA-RNA.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:


- (Pervouchine, 2014) IRBIS: a systematic search for conserved complementarity. Rna.
[PMID: 25142064](#)

4.5 NPInter




Sposób dostępu:	aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Wersja:	v3.0
Stabilność:	Stabilny
Dane wejściowe:	Sekwencje
Format wejściowy:	FASTA
Rok dostępnych publikacji:	2006 oraz 2014
Czas oczekiwania na wynik:	Poniżej minuty

NPInter weryfikuje eksperymentalnie funkcjonalne interakcje między niekodującym RNA (z wyjątkiem tRNA i rRNAs) i biocząsteczkami (białek, DNA i RNA). Robi to poprzez interakcje funkcjonalnych, czyli przede wszystkim oddziaływania fizyczne, chociaż może pojawić się kilka innych form interakcji. Szczegółowe badania dotyczące interakcji ncRNA wykazały, że ncRNAs może stanowić część kompleksów enzymatycznych lub regulatory genów strukturalnych lub innych elementów funkcjonalnych. NPInter pozwala użytkownikom na przeglądanie oddziaływań według gatunku, klasy ncRNA lub tagi interakcji (interaction tags). Użytkownicy mogą również zadać zapytanie do bazy danych poprzez interfejs wyszukiwania, używając nazwy lub aliasów cząsteczek, cząsteczki identyfikatorów lub innych opisowych słów.

Na stronie NPInter znajduje się lista interakcji, gdzie dostępnych jest ponad 8000 interakcji. Przeszukiwanie tak dużej liczby interakcji ułatwia nam możliwość stosowania filtrów danych np. ID interakcji, poziom interakcji, organizm itp.



Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars





















[Home](#)
[Search](#)
[Browse](#)
[Functional Annotation](#)
[Blast](#)
[Genome](#)
[Submit](#)
[Download](#)
[Statistics](#)
[Help](#)

Interaction List if you want to browse by different types:

Species: Interaction Class: Interaction Level: Data Source:

Display items per page

Page Total Page: 407 Total amount: 8130 [first page](#) | [previous page](#) | [next page](#) | [last page](#)

Interaction ID	ncRNA	Interaction partner	Interaction Level	Interaction Class	Organism	Tags	Data Source
ncRI-3000001	4.5S	fusA	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000002	4.5S	ffh	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000003	6S	rpoB	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000004	6S	rpoD	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000005	6S	rpoC	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000007	7SK	ABO	RNA-RNA	regulatory	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000008	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000009	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000010	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000011	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000012	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000013	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000014	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000015	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000016	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000016	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000017	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000018	7SK	Oct1	DNA-TF	regulatory	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000019	7SK	Tat	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000020	7SK	Tat	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining

Page Total Page: 407 Total amount: 8130 [first page](#) | [previous page](#) | [next page](#) | [last page](#)


Copyright:ChenLab,Laboratory of Noncoding RNA,Institute of Biophysics,Chinese Academy of Sciences.

Institute of Computing Technology,Chinese Academy of Sciences.




Rysunek 5 Lista interakcji

Kiedy w liście interakcji znajdziemy interesującą nas interakcję klikamy na ID. Wyniki podzielne są na pięć głównych części. W „General Information” znajdziemy podstawowe informacje między innymi te, które wybraliśmy w filtrach. „Molecule Information” znajdziemy szczegółowe dane takie jak identyfikator bazy UniProt ID, podobne biocząsteczki, nazwę itp.. W kolejnej części „References” zawarte są ogólne informacje o publikacji. Ostatnią częścią jest ” Cross Interaction” , który wyświetla prostą sieć wizualna, gdzie każda cząsteczka jest węzłem na wykresie, a interakcje są zaznaczone jako krawędzie. Czerwone węzły stanowią białka, lub RNA i DNA kodujące białka, podczas gdy niebieskie i

różowe węzły reprezentują odpowiednio ncRNAs i miRNA. Kolor krawędzi dyskryminuje źródło każdej interakcji, zielony sugeruje, że interakcja jest od NPInter i fioletowy sugeruje, że interakcja jest z łańcucha.



Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

[Home](#)
[Search](#)
[Browse](#)
[Functional Annotation](#)
[blast](#)
[Genome](#)
[Submit](#)
[Download](#)
[Statistics](#)
[Help](#)

Interaction Information


General Information

Interaction ID: ncRI-3008120

Interaction Molecules: TERC -- MCAM

Interaction Level: RNA-Protein

Interaction Class: binding

Tags: 

Organism: Homo sapiens

Tissue or Cell Type: bladder cancer cell biu-87

Experiment: qRT-PCR

Description: Gene chip analysis revealed that 21 genes were down-regulated (ATM, BAX, BCL2, BCL2L1, BIRC5, CD44, CTNNB1, E2F1, JUN, MCAM, MTA1, MYC, NFKB1, NFKBIA, NME4, PNN, PNN, SERPINE1, THBS1, TNFRSF1A, and UCC1).?

Datasource: literature mining

Molecule Information

ncRNA		Protein	
Name	TERC	Name	MCAM
NONCODE ID	NONHSAG036615	UniProt ID	Q9NQ41
Description	Linc	Description	NULL
Related Biomolecule	TERT PCNA TNFRSF1A THBS1 SERPINE1	Related ncRNA	

References

PubMed ID: 20556588

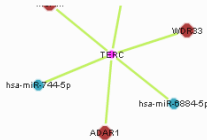
Title: Effects of combined siRNA-TR and -TERT on telomerase activity and growth of bladder transitional cell cancer BIU-87 cells.

Authors: "Cheng W,?Wei Z,?Gao J,?Zhang Z,?Ge J,?Jing K,?Xu F,?Xie P."

Journal: J Huazhong Univ Sci Technolog Med Sci

Cross Interaction

Click to see network in a new window.



Each molecule is a node in the graph and interactions between molecules are designated as edges in the graph. Red nodes represent proteins, or protein-coding RNAs and DNAs while blue and pink nodes represent ncRNAs and miRNAs respectively. Color of edges discriminates source of each interaction, green suggesting that interaction is from NPInter and purple suggesting that interaction is from STRING.

No Binding Site Information!

Copyright:ChenLab,Laboratory of Noncoding RNA,Institute of Biophysics,Chinese Academy of Sciences.

Institute of Computing Technology,Chinese Academy of Sciences.

Można również szukać oddziaływań na cztery różne sposoby. Dla przykładu W jednej z wyszukiwarek wpiszemy w ncRNA „hotair”

NP Inter
Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

NETWATCH Science, NCI, Bmcc

Home Search Browse Functional Annotation Blast Genome Submit Download Statistics Help

Search

Keyword Search

Keyword Query: Species: Data Source:

This search function allows you to search any ID stored in the database .

Search by ID: you can use pubmed ID(9018369), interaction ID(ncRI-3000006), ncRNA identifier in NONCODE(NONHSAG040596) and miRBase(MI0000113), mRNA identifier in RefSeq(NM_002467), protein identifier in UniProt(Q94992) as keywords without pre-selection of the ID category.

Search by Name: you can use ncRNA name(Hotair, hsa-mir-100-5p), protein name(MYC) and their name alias as keywords without pre-selection of the molecule class.

Basic Search

Basic Query: In:

ID Search

ID Query: In:

Example: **NONCODE ID:** NONHSAG011264 **miRBase ID:** MI0000102 **Uniprot ID:** Q9EPU0 **PubMed ID:** 23766421 **Interaction ID:** ncRI-3000003

Text Search

Text Query:

Example: RNA interference

Search hints

Basic Search: you can use ncRNA name, protein name, their name alias, ncRNA class, class alias as keywords.

ID Search: you can use pubmed ID, interaction ID, ncRNA identifier in NONCODE and miRBase, protein identifier in UniProt as keywords.

Text Search: you can search all sections in the database including organism, interaction description, ncRNA description, protein description, experiments.

Be aware, Text Search may produce a very large number of hits. The other two search forms support more focused questions by providing more options for searching specific categories of information.

Copyright©ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences.
Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

Po wyszukaniu np. Hotair przechodzimy do listy interakcji w której mamy powybierane same Hotair.

Na tej samej stronie można również wyszukać wklejając sekwencje ncRNA i białek.

The screenshot shows the NPInter web interface. At the top, there is a teal header with the NPInter logo and the tagline "Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars". To the right of the logo are logos for NETWATCH Science, NCI, and Bmcc. Below the header is a navigation bar with links: Home, Search, Browse, Functional Annotation, Blast, Genome, Submit, Download, Statistics, and Help. The main content area is titled "Blast in NPInter". It contains a form for choosing a program and database, with "blastn" selected for the program and "NPInter_ncRNA" for the database. Below this is a text area for entering a sequence in FASTA format. There is also a section for loading a file from disk, with a "Wybierz plik" button and a note "Nie wybrano pliku". Further down, there are fields for setting a subsequence range (From and To) and buttons for "Clear sequence" and "Search". A teal bar indicates "The query sequence is filtered for low complexity regions by default." Below this, there are filter options: "Filter" (checked), "Low complexity" (checked), "Mask for lookup table only" (unchecked), "Expect" (10), "Matrix" (BLOSUM62), and "Perform ungapped alignment" (unchecked). There is also a field for "Frame shift penalty for blastx" set to "No OOF". Other advanced options include "Graphical Overview" (checked), "Alignment view" (Pairwise), "Descriptions" (100), "Alignments" (50), and "Color schema" (No color schema). At the bottom of the form, there are "Clear sequence" and "Search" buttons, a link for comments and suggestions to "blast-help@ncbi.nlm.nih.gov", and a note "Last modified: Jan 11, 2002". The footer of the page contains copyright information for ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences, and the Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

NPInter
Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

NETWATCH Science NCI Bmcc

Home Search Browse Functional Annotation Blast Genome Submit Download Statistics Help

Blast in NPInter

Choose program to use and database to search:

Program Database

Enter sequence below in FASTA format

Or load it from disk

Nie wybrano pliku

Set subsequence: From To

The query sequence is filtered for low complexity regions by default.

Filter ☒ Low complexity ☐ Mask for lookup table only

Expect Matrix ☐ Perform ungapped alignment

Frame shift penalty for blastx

Other advanced options:

☒ Graphical Overview

Descriptions Alignments Color schema

Comments and suggestions to: < blast-help@ncbi.nlm.nih.gov >

Last modified: Jan 11, 2002

Copyright: ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences.
Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

NPInter jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://www.bioinfo.org/NPInter/>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia. NPInter zapewnia nam wiele możliwości wyszukiwania oraz ma przydatne filtry aby sprawnie przeszukiwać dane.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne. A wynik otrzymujemy od razu.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Yuan et al., 2014) NPInter v2.0: an updated database of ncRNA interactions. Nucleic acids research.
[PMID: 24217916](#)
- (Wu et al., 2006) NPInter: the noncoding RNAs and protein related biomacromolecules interaction database. Nucleic acids research.
[PMID: 16381834](#)

4.6 RILogo

Sposób dostępu:	aplikacja internetowa
Typ oprogramowania:	Pakiet
Jak jest obsługiwany:	Interfejs wiersza poleceń
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Dane wejściowe:	Sekwencja
Format wejściowy:	Stockholm, CLUSTAL, FASTA
Język programowania:	C++
Licencja:	GNU General Public License w wersji 2.0
System operacyjny:	Unix/Linux
Znajomość obsługi komputera:	zaawansowane
Stabilność:	Stabilny
Rok dostępnych publikacji:	2012

RILogo jest to oprogramowanie do wizualizacji między- i wewnątrzcząsteczkowych i parowania zasad pomiędzy dwoma sekwencjami RNA. Wejście to dwie pojedyncze sekwencje lub dwa różne rodzaje sekwencji z wewnątrz- i międzycząsteczkowych par zasad

dwóch współdziałających genów RNA. RILogo wyświetla zachowanie sekwencji przez logo dla każdej sekwencji RNA i zachowania struktury poprzez wzajemne informacji drugorzędnych par bazowych struktury. RILogo obsługuje cztery różne metody obliczania wymiany informacji.

Obsługiwane formaty to Sztokholm, CLUSTAL lub FASTA.

Jako wyjście wyświetlane jest logo składające się liter o różnej wielkości. Wewnątrzczęsteczkowe par zasad są wyświetlane przez łuki zawarte w logu. Reprezentacja łuk o drugorzędowej struktury RNA formalnie wykres z zasadami reprezentowane węzłów i par bazowych jak krawędzie, gdzie węzły są wyświetlane obok siebie, podczas gdy krawędzie są przedstawione jako łączące. Pseudoknots można łatwo dostrzeżone jako łuki przejściach. Każdy łuk jest zabarwiona gradientem oznaczająca MI bazowego pary zasad. Międzyczęsteczkowe parowanie zasad jest wyświetlana za pomocą linii prostych między poszczególnymi kolumnami dwóch logotypów sekwencji. Oba znaki są poziomo ułożone w taki sposób, tak że średnia odległość między podstawami interakcji jest zminimalizowana.

Zrobiłam opis a kiedy chciałam wejść ponownie na stronę następnego dnia była już niedostępna.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Menzel et al., 2012) RILogo: visualizing RNA-RNA interactions. Bioinformatics.
[PMID: 22826541](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/22826541/)

4.7 RNAPlex

Sposób dostępu:	Program instalowalny
Typ oprogramowania:	Pakiet
Jak jest obsługiwany:	Interfejs wiersza poleceń
Ograniczenia w użyciu:	żadne
System operacyjny:	Unix/Linux
Znajomość obsługi komputera:	zaawansowane
Stabilność:	Stabilny
Rok dostępnych publikacji:	2012

Narzędzie stworzono specjalnie do szybkiego wyszukiwania krótkich interakcji pomiędzy dwoma długimi RNA. RNAPlex stosuje nieco inny model energii, co zmniejsza czas obliczeń o współczynnik 10-27 w porównaniu z RNAhybrid. Ponadto kara za długość pozwala skupić docelowe poszukiwania na krótkich bardzo stabilnych interakcjach.

5. Narzędzia białko - RNA

	BindUP	bioCOMplexes COn tact MAPS – COCOMAPS	catRAPID omics	catRAPID signature	Hot Spot at Protein- RNA interacting surface/ HotSPRing	NPInter
Sposób dostępu	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu	żadne	żadne	żadne	żadne	żadne	żadne
Ostatnia aktualizacja	7.6.2016r.	Brak danych	Brak danych	Brak danych	Brak danych	Brak danych
Znajomość obsługi komputera	Podstawowa	Podstawowa	Podstawowa	Podstawowa	Podstawowa	Podstawowa
stabilność	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny	Stabilny
Dostępna wersja	1.0	Brak danych	Brak danych	Brak danych	Brak danych	Brak danych

	BindUP	bioCOMplexes COn tact MAPS – COCOMAPS	catRAPID omics	catRAPID signature	Hot Spot at Protein- RNA interacing surface/ HotSPRing	NPInter
Dane wejściowe	ID PDB lub plik tekstowy	ID PDB lub plik tekstowy	FASTA	FASTA	Plik PDB oraz plik HSSP	FASTA
Rok dostępnych publikacji	2016	2011	2011 i 2013	2015	2015	2006 oraz 2014
Czas oczekiwania na wynik	Około 10 sekund	Około 2-3 minut	Około 10-30 minut	Około 1-20 minut	Około 10 sekund	Poniżej minuty

5.1 BindUP

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	1.0
Dane wejściowe:	ID PDB lub plik tekstowy
Ostatnia aktualizacja	7.6.2016r.
Rok dostępnych publikacji:	2016
Czas oczekiwania na wynik:	Około 10 sekund

BindUP przewiduje oddziaływania cząsteczek DNA i RNA, stosując podejście oparte na braku homologiczności. BindUP bazuje się na funkcji oddziaływań elektrostatycznych na powierzchni białek i innych ogólnych właściwościach białka. BindUP przewiduje funkcję wiązania kwasu nukleinowego z trójwymiarowej struktury białka lub modelu strukturalnego. Dodatkowo BindUP dostarcza informacji na temat największych plam powierzchniowego oddziaływania elektrostatycznego, wizualizowanego na serwerze. Serwer badano na kilku zestawach danych DNA z białkami wiążącymi RNA, w tym białek, które nie posiadają domen wiążących DNA lub RNA i nie posiadają podobieństwa do znanych białek wiążących kwasy nukleinowe, osiągając bardzo wysoką dokładności. BindUP przechowuje informacje o wszystkich strukturach białkowych w [bazie RCSB PDB](http://www.rcsb.org/pdb) i jest aktualizowany co miesiąc. Serwer jest dostępny zarówno w trybie single lub batch i może być stosowany do testowania tysiąca białek równocześnie w bardzo efektywny sposób.

BindUP jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://bindup.technion.ac.il/index.html>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Paz et al., 2016) BindUP: a web server for non-homology-based prediction of DNA and RNA binding proteins. *Nucleic acids research*. [PMID: 27198220](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/27198220/)

W zakładce „Single protein mode” są obliczane specyficzne łańcuchy lub wszystkie łańcuchy białkowe dla jednej struktury białka. Jako wejście można podać identyfikator PDB (czyli 4 znaki składające się z liter rozróżnialnej wielkości i cyfr). Jeśli zostanie podane takie wejście program pobiera z bazy danych PDB i automatycznie analizuje dane co sprawia, że czas oczekiwania na wynik jest krótki. Innym sposobem na wejście jest przesłanie pliku w formacie PDB. Czas oczekiwania na wynik może trwać od kilku sekund do kilkunastu minut. Możemy również wybrać, czy chcemy obliczać wszystkie łańcuchy czy tylko jakiś wybrany przez nas. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania linka do wyników.

bindup.technion.ac.il/index.html

BindUP
Predicting DNA and RNA binding proteins
using the electrostatic patches on the protein surface

Home | Overview | Manual | Contact | Version 1.0

Single protein mode | Batch mode

Input ?

☒ Enter a PDB ID: 1d66

☐ Upload a coordinate file in PDB format: Przeglądaj... Nie wybrano pliku.

Load example Clear example

Calculation options ?

Chain selection:

☒ Calculate all protein chains (each chain is calculated separately)

☐ Select a protein chain identifier:

Patches calculation:

☒ Calculate positive patches

☐ Calculate negative patches

Number of patches (of each type) to display: 1

General options ?

☐ Send a link to the results by E-mail. E-mail address:

Submit

If you use BindUP results, please cite:
Paz I, Kligen E, Bengad B, Mandel-Gutfreund Y. (2016) BindUP: a web server for non-homology-based prediction of DNA and RNA binding proteins. *Nucleic Acids Res.* pii: gkw454. [\[PDF\]](#)

Yael Mandel Gutfreund's Lab
Computational Molecular Biology

Technion
Israel Institute of Technology

BindUP Results

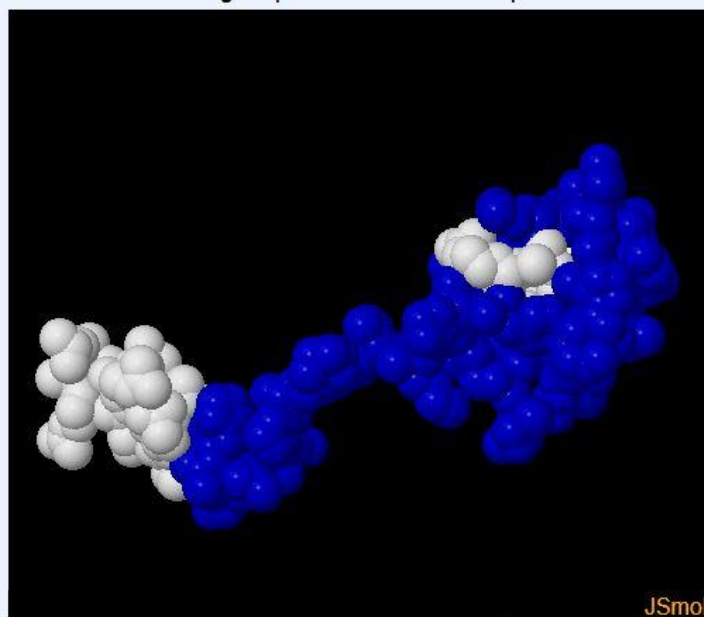
PDB ID: 1d66

Protein chains: A, B

Displaying results for chain:

NA-binding prediction: **This chain is classified as NA-binding**

The largest positive electrostatic patch:



[View the results for chain A as text file](#)

[Download the PDB file of chain A including the patches annotation](#)

The results will be kept on our server for one month.

If you use BindUP results, please cite:

Paz I, Kligun E, Bengad B, Mandel-Gutfreund Y. (2016) BindUP: a web server for non-homology-based prediction of DNA and RNA binding proteins. *Nucleic Acids Res.* pii: gkw454. [\[PDF\]](#)



Yael Mandel Gutfreund's Lab
Computational Molecular Biology



Technion
Israel Institute of Technology

Chain A

=====

This chain is classified as NA-binding

Largest Positive Patch:

GLU8 GLN9 ALA10 ASP12 ILE13 CYS14 ARG15 LEU16 LYS17 LYS18 LEU19 LYS20 CYS21
SER22 LYS23 GLU24 LYS25 PRO26 LYS27 ALA29 LYS30 LEU32 LYS33 ASN34 ASN35 TRP36
GLU37 TYR40 SER41 PRO42 LYS43 THR44 LYS45 ARG46 SER47 PRO48 LEU49 THR50 ARG51
ALA52 HIS53 LEU54

Rysunek 11 Przykład wyjścia za pomocą zakładki „Single protein mode” dla przykładu PDB ID 1d66. Po kliknięciu na ["View the results for chain A as text file"](#)

W zakładce „Batch mode” są obliczane specyficzne łańcuchy lub wszystkie łańcuchy białkowe dla więcej niż jednej struktury białka. Jako wejście można podać listę identyfikatorów PDB (czyli 4 znaki składające się z liter rozróżnialnej wielkości i cyfr). Liczba identyfikatorów jest nieograniczona. Identyfikatory można podać w dwóch formach w zależności, czy interesują nas wszystkie łańcuchy, czy tylko jakiś konkretny. W przypadku kiedy podamy PDB ID np. 1d66 zostaną wypisane wszystkie łańcuchy. Natomiast jeśli chcemy konkretny łańcuch musimy podać np. 1d66A. Innym sposobem na wejście jest przesłanie pliku w formacie PDB. Możemy również wybrać, czy chcemy obliczać wszystkie łańcuchy czy tylko jakiś wybrany przez nas. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania linka do wyników.

bindup.technion.ac.il/index.html#

Single protein mode **Batch mode**

Input ?

☒ Paste your list of PDB IDs here: ☐ Or, upload a file: Nie wybrano pliku.

1a6f
1d66A
2er8B

Calculation options ?

Patches calculation:

☒ Calculate positive patches
☐ Calculate negative patches


Number of patches (of each type) to calculate:


General options (optional) ?

☐ Send a link to the results by E-mail. E-mail address:

Enter a name for the current job:

If you use BindUP results, please cite:
Paz I, Kligun E, Bengad B, Mandel-Gutfreund Y. (2016) BindUP: a web server for non-homology-based prediction of DNA and RNA binding proteins. *Nucleic Acids Res.* pii: gkw454. [\[PDF\]](#)

 Yael Mandel Gutfreund's Lab
Computational Molecular Biology

 Technion
Israel Institute of Technology

Rysunek 12 Przykład wejścia za pomocą zakładki „Batch mode” dla przykładu PDB ID 1a6f, 1d66A, 2er8B.

Home | Overview | Manual | Contact | **Version 1.0**

BindUP Results

Job name: **Batch example**
[View a summary of the results for all the entries together](#)

Results for PDB ID: 1a6f
[View the results for all the protein chains as text file](#)
[Download the PDB file including the patches annotation](#)


Results for PDB ID: 1d66, selected chain: A
[View the results for chain A as text file](#)
[Download the PDB file of chain A including the patches annotation](#)


Results for PDB ID: 2er8, selected chain: B
[View the results for chain B as text file](#)
[Download the PDB file of chain B including the patches annotation](#)

Results for PDB ID: 2er8, selected chain: D
[View the results for chain D as text file](#)
[Download the PDB file of chain D including the patches annotation](#)

The results will be kept on our server for one month.

If you use BindUP results, please cite:
Paz I, Kligun E, Bengad B, Mandel-Gutfreund Y. (2016) BindUP: a web server for non-homology-based prediction of DNA and RNA binding proteins. *Nucleic Acids Res.* pii: gkw454. [\[PDF\]](#)

 Yael Mandel Gutfreund's Lab
Computational Molecular Biology

 Technion
Israel Institute of Technology

Rysunek 13 Przykład wyjścia za pomocą zakładki „Batch mode” dla przykładu PDB ID 1a6f, 1d66A, 2er8B.


```
=====
PDB ID: 1a6f
=====
```

```
Chain A
=====
```

```
This chain is classified as NA-binding
```

```
Largest Positive Patch:
```

```
-----
ALA2 HIS3 LEU4 LYS5 LYS6 ARG7 ARG9 LEU10 LYS11 LYS12 ASN13 GLU14 ASP15 PHE16
GLN17 LYS18 PHE20 LYS21 HIS22 SER25 VAL26 ALA27 ASN28 ARG29 GLN30 VAL32 TYR34
LEU36 ARG45 VAL46 LEU48 SER49 VAL50 SER51 LYS52 LYS53 ILE54 GLY55 ASN56 ALA57
VAL58 MET59 ARG60 ASN61 ARG62 LYS64 ARG65 LEU66 ILE67 ARG68 GLN69 LEU72 GLU73
LYS75 GLU76 ARG77 LYS79 LYS81 ILE85 ILE86 ALA87 ARG88 LYS89 PRO90 SER92 GLN93
LEU94 THR95 TYR96 GLU97 GLU98 LYS100 LYS101 SER102 GLN104 HIS105 LEU106 ARG108
LYS109 SER110 SER111 LEU112 TYR113 LYS114
```

Rysunek 14 Przykład wyjścia za pomocą zakładki „Batch mode” dla przykładu PDB ID 1a6f. Po kliknięciu na "View the results for chain A as text file"

5.2 bioCOMplexes COntact MAPS – COCOMAPS

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	Brak danych
Dane wejściowe:	ID PDB lub plik tekstowy
Ostatnia aktualizacja	Brak Danych
Rok dostępnych publikacji:	2011
Czas oczekiwania na wynik:	Około 2-3 minut

Aplikacja WWW łatwo i skutecznie analizuje i wizualizuje interfejs w kompleksach biologicznych (takich jak białko-białko, białko-DNA i kompleksach białko-RNA), wykorzystując międzycząsteczkowe mapy kontaktowe. Użytkownik musi jedynie pobrać pliki wejściowe bezpośrednio z PDB lub przesłać własne pliki w formacie FASTA oraz określić

identyfikatory łańcuchowe jakie mają być analizowane dla cząsteczek biorących udział w interakcji.

Wejście COCOMAPS jest zbliżone do wejścia narzędzia BindUP.

W zakładce „Option 1” jako wejście można podać identyfikator PDB (czyli 4 znaki składające się z liter rozróżnialnej wielkości i cyfr). Jeśli zostanie podane takie wejście program pobiera z bazy danych PDB i automatycznie analizuje. Innym sposobem na wejście jest przesłanie pliku w formacie PDB. Czas oczekiwania na wynik może trwać od 2-3 minut. Możemy również wybrać, czy chcemy obliczać wszystkie łańcuchy czy tylko jakiś wybrany przez nas. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania odnośnika do wyników.

Natomiast w zakładce „Option 2” jako wejście można podać dwa identyfikatory PDB (czyli 4 znaki składające się z liter rozróżnialnej wielkości i cyfr). Innym sposobem na wejście jest przesłanie pliku w formacie PDB. Czas oczekiwania na wynik może potrwać od kilku minut. Możemy również wybrać, czy chcemy obliczać wszystkie łańcuchy czy tylko jakiś wybrany przez nas. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania odnośnika do wyników.

W odróżnieniu od BindUP narzędzie COCOMAPS na wyjściu daje dużo więcej wyników. Z uwagi na obszerność wyników interpretacje oraz ich opis pomijam.

COCOMAPS jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <https://www.molnac.unisa.it/BioTools/cocomaps/index.psp>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Vangone et al., 2011) COCOMAPS: a web application to analyze and visualize contacts at the interface of biomolecular complexes. Bioinformatics. [PMID: 21873642](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/21873642/)

Data Entry

☒ OPTION 1: Enter a single PDB code and the chain identifiers for the interacting molecules.

4-letter PDB code
(e.g. 2ZA4) ⓘ

Chain/s Molecule 1
(e.g. A or A B) ⓘ

Chain/s Molecule 2
(e.g. C or C D) ⓘ

☐ OPTION 2: Upload coordinates of **one** or **two** PDB files and enter the chain identifiers of the interacting molecules.

1 file ☒ **2 files** ☐

PDB File Nie wybrano pliku ⓘ

Chain Molecule 1
(e.g. A or A B) ⓘ

Chain Molecule 2
(e.g. C or C D) ⓘ

Cut-Off

ⓘ

Threshold distance to select interacting residues in Å (default value: 8 Å)

Advanced Options (Optional)

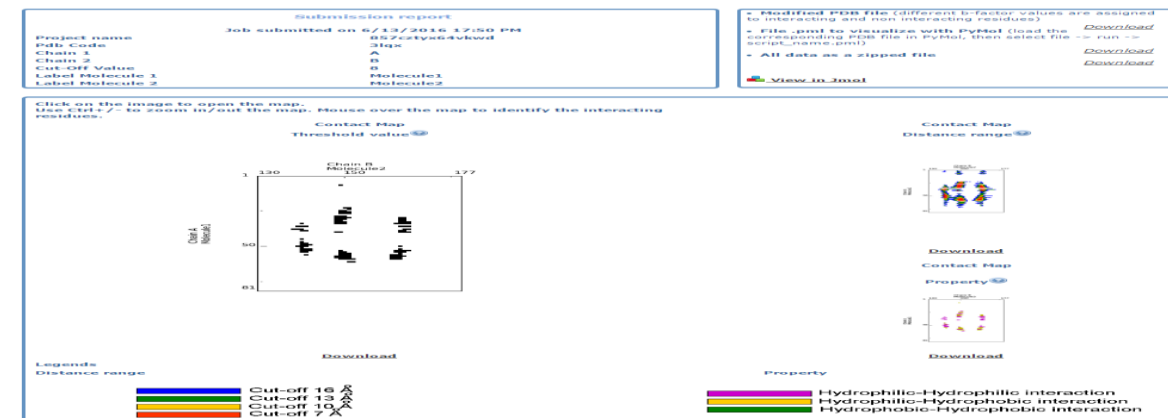
Project Name
(No white-space) ⓘ

Email ⓘ

Name Molecule1 ⓘ

Name Molecule2 ⓘ

Rysunek 15 Przykładowe wejście dla 3lqx

[View Results](#)

-Jump to table

Interaction overview
Table of minimum distances
H-Bonds Table
Distance Table
ASA Table
ASA Table for Molecule 1
ASA Table for Molecule 2

-Interaction overview ②

Title	Value
Number of interacting residues Molecule1	34
Number of interacting residues Molecule2	18
Number of hydrophobic-hydrophobic interaction	10
Number of hydrophobic-hydrophilic interaction	72
Number of hydrophilic-hydrophobic interaction	0

[Download Table](#)

-Table of minimum distances @

[illegible][Download Table](#)

-H-Bonds Table ©

ACCEPTOR				DONOR				Dist(A) Dist H-Bonds	Type	Dist CA- CA
Res 1 [Edit All]	N° res [Edit All]	Atom1 [Edit All]	Chain1 [Edit All]	Res2 [Edit All]	N° res [Edit All]	Atom2 [Edit All]	Chain2 [Edit All]			
SER	34	OG	A	C	163	O2	B	2.72	SH	-1.00
SER	34	OG	A	C	140	N1	B	2.72	SH	-1.00
ARG	53	NH1	A	A	140	N3	B	3.13	SH	-1.00
G	140	N2	A	ALA	30	C	A	2.72	HH	-1.00
A	140	N6	B	ASN	3	C	A	2.05	HH	-1.00
G	140	N2	B	SER	34	OG	A	2.00	HS	-1.00
G	140	N1	B	GLY	27	C	A	2.00	HH	-1.00

[Download Table](#)

-Distance Table ©

Open table

-ASA Table ②

Title	Value
Buried area upon the complex formation (\AA^2)	1274.1
Buried area upon the complex formation (%)	5.6
Interface area (\AA^2)	637.05
Interface area POLAR (%)	33.92
Interface area POLAR (%)	2.32
Interface area upon the complex formation (\AA^2)	248.45
POLAR Interface (%)	44.05
POLAR Interface area (\AA^2)	248.45
PCN POLAR Buried area upon the complex formation (\AA^2)	705.2
PCN POLAR Interface (%)	33.2
PCN POLAR Interface area (\AA^2)	132.6
Residue at the Interface: POL (n)	13
Residue at the Interface: POL	3.2
Residue at the Interface: POL	2.6

[Download Table](#)

-ASA Table for Molecule 1 ©

Res	N-Res	Chain	Complex ASA	Free ASA	Buried ASA (Interface)	Buried ASA%
VAL	VAL	VAL	VAL	VAL	VAL	VAL
ARG	2.7	2.7	40.0-4.0	62.0-0.1	1.3-1.0	2.3-2.2
ASP	2.7	2.7	60.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0
ALA	3.0	3.0	10.0-0.0	30.0-3.0	3.0-0.0	10.0-0.0
ASP	3.0	3.0	20.0-0.0	2.0-0.0	2.0-1.0	10.0-0.0
SER	3.0	3.0	2.0-0.0	3.0-0.0	3.0-0.0	10.0-0.0
THR	3.0	3.0	2.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0	10.0-0.0
LYS	3.0	3.0	1.0-0.0	1.0-0.0	1.0-0.0	3.0-0.0
THR	3.0	3.0	5.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0	3.0-0.0
SER	4.0	4.0	3.0-0.0	2.0-0.0	2.0-1.0	10.0-0.0
ARG	4.0	4.0	1.0-0.0	1.0-0.0	1.0-0.0	4.0-0.0
ASP	4.0	4.0	3.0-0.0	3.0-0.0	3.0-0.0	10.0-0.0
ALA	5.0	5.0	1.0-0.0	1.0-0.0	1.0-0.0	5.0-0.0
GLY	5.0	5.0	1.0-0.0	1.0-0.0	1.0-0.0	5.0-0.0
SER	5.0	5.0	2.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0	10.0-0.0
GLY	5.0	5.0	2.0-0.0	2.0-0.0	2.0-0.0	10.0-0.0

[Download Table](#)

-ASA Table for Molecule 2 ②

Res	PC Res	Chain	Complex ASA	Free ASA	Buried ASA (Interface)	Buried ASA %
Res	PC Res	Chain	Complex ASA	Free ASA	Buried ASA (Interface)	Buried ASA %
A	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
C	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
G	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
U	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
A	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
C	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
G	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
U	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
A	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
C	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
G	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2
U	1.40	ES	2.27 ± 0.2	2.00 ± 0.2	2.00 ± 0.2	6.25 ± 1.2

[Download Table](#)

5.3 catRAPID omics

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	Brak danych
Dane wejściowe:	FASTA
Ostatnia aktualizacja	Brak Danych
Rok dostępnych publikacji:	2011 i 2013
Czas oczekiwania na wynik:	Około 10-30 minut

Serwer do obliczeń wielkoskalowych oddziaływań białko-RNA. „catRAPID omics” pozwala na przewidywania na poziomie proteomicznym i transkryptomicznym, wykorzystanie białek i RNA sekwencji bez ograniczeń rozmiaru, analizę regionów wiążących kwasów nukleinowych i białek, oraz na wykrywanie motywów RNA biorących udział w rozpoznawaniu białka.

catRAPID jest algorytmem do oszacowania skłonności do tworzenia wiązania przez pary białko-RNA. Poprzez połączenie struktury drugorzędowej, wiązań wodorowych i oddziaływań van der Waalsa, catRAPID przewiduje oddziaływania białko-RNA z dużą dokładnością.

Moduł „catRAPID omics” umożliwia przewidywanie oddziaływań RNA-Białko w wielu organizmach modelowych.

Na wejście tego narzędzia podajemy sekwencje w formacie FASTA. Rozmiar sekwencji powinien być pomiędzy 50 - 750 aminokwasów. Wybieramy również jakie biblioteki chcemy analizować. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania odnośnika do wyników. Na wynik jednak trzeba poczekać do 30 minut.

Wyjście składa się z graficzną reprezentacją sekwencji / domen wykorzystywanych do obliczeń. Pierwsza linia reprezentuje cząsteczkę wejściową (czarna linia) i domeny są zidentyfikowane i wykorzystane do analizy (kolorowe linie). W wyniku dostajemy również tabelę która mówi nam o rankingu interakcji.



catRAPID omics

This module computes the interaction propensities between a protein of interest and the transcriptome in the model organism of choice.

Submission reference: 16685

Submission label (optional)

TADBP_interactome

Protein sequence (FASTA format - min 50 aa)

```
>TADBP_MOUSE
HSEVIRVTEDEHDEPIETPSEDGTVLLSTVTAQPPGACGLRYRNPVSQCIRGVRVLEGIHAPDAGWNLVYVYVNPKNKRKHDETDASSAVKVKRA
VQKTSDLVLGLPHKTTTEQDLKDYFSTFGVLIHQVKDLKTGHSKGFGFVRFTEYETQVKVHSQRHIDGRWCDCKLPNSKQSPDEPLRSRKVFVGRG
TEDMTAEELQQFFCQYGEVVDVFIPKPFRAFVTFADDKVAQSLCGEDLIKGISVHISNAEPKHNSNRQLERSGRFGGNGPFGFGNQRGFGNSRGGA
GLGNQSGNNVGGGWNFGAFSINPAWIAAQAALQSSWGMGMMLASQQNQSGPSGNNQSGGSHQREPNQAFGSGNNISYSGNSGAPLGWGSASNAAGSGG
FNGGFGSSIDSKSSGWRG
```

Which library would you like to analyze?

- ☐ Caenorhabditis elegans
- ☐ Danio rerio
- ☐ Drosophila melanogaster
- ☐ Homo sapiens
- ☐ Mus musculus
- ☒ Rattus norvegicus
- ☐ Saccharomyces cerevisiae
- ☐ Xenopus tropicalis
- ☐ Custom library

Would you like to use nucleic acid binding domains?

- ☐ No, use full-length protein instead (max 750aa)
- ☒ Yes

Which part of the transcriptome would you like to interrogate?

- ☒ Coding
- ☐ Noncoding

Email address (optional, used for notification)

Submission status: Submitted! See [result](#) [Prześlij](#)

Sample data

Just trying it out? Pre-populate the form with: (**Please, check that you do not have active proxies!**)

EZH2 and its RNA interactome - EZH2 protein (full-length) against the mouse transcriptome [[Zhao et al., 2010](#)]

TADBP and its RNA interactome - TADBP protein (nucleic-acid-binding domains) against the rat transcriptome [[Sephton et al., 2011](#)]

Rysunek 17 Przykładowe wejście dla CatRapid omics.

Your submission results

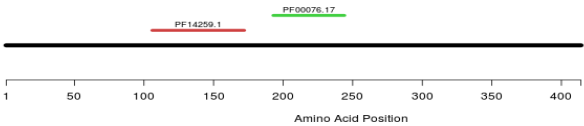
Turn help OFF

Information about the JOB:

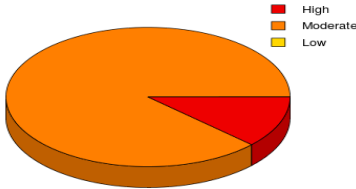
ID: 16685
User label: TADBP_interactome
Input: Protein
Use domains: yes
RNA potential: coding
Generated: 2016-06-13 18:45:42.214129

Sequences and Fragments:

TADBP_MOUSE_1



Ranking Distribution



Complete list of all the interactions

#	Protein ID	RNA ID	Z-score	Discriminative Power (%)	Interaction Strength (%)	Domain?	Motif?	Ranking?
1	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000011508	3.55	100	100	yes	yes	★★★★
2	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000011508	2.61	99	100	yes	yes	★★★★
3	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000037489	2.38	99	100	yes	yes	★★★★
4	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000065803	2.33	99	100	yes	yes	★★★★
5	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000065803	2.97	100	100	yes	yes	★★★★
6	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000037489	2.85	100	100	yes	yes	★★★★
7	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000054755	2.70	99	100	yes	yes	★★★★
8	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000064939	2.13	99	99	yes	yes	★★★★
9	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000054866	2.08	99	100	yes	yes	★★★★
10	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000054755	2.14	99	100	yes	yes	★★★★
11	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000023911	2.12	99	100	yes	yes	★★★★
12	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000018458	2.57	99	100	yes	yes	★★★★
13	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000058612	2.51	99	100	yes	yes	★★★★
14	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000054866	2.44	99	100	yes	yes	★★★★
15	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000027270	2.42	99	100	yes	yes	★★★★
16	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000066844	1.89	99	100	yes	yes	★★★★
17	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000059601	1.91	99	100	yes	yes	★★★★
18	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000048437	1.92	99	100	yes	yes	★★★★
19	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000018458	1.86	99	99	yes	yes	★★★★
20	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000023911	2.40	99	100	yes	yes	★★★★
21	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000008328	2.41	99	100	yes	yes	★★★★
22	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000028685	1.84	99	99	yes	yes	★★★★
23	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000027270	1.83	99	100	yes	yes	★★★★
24	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000020160	1.81	99	100	yes	yes	★★★★
25	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000028685	2.24	99	100	yes	yes	★★★★
26	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000024691	2.30	99	100	yes	yes	★★★★
27	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000019265	2.32	99	100	yes	yes	★★★★
28	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000049353	1.76	99	99	yes	yes	★★★★
29	TADBP_MOUSE_1_106-172	ENSRNOT00000066844	2.23	99	100	yes	yes	★★★★
30	TADBP_MOUSE_1_193-244	ENSRNOT00000062091	1.67	99	100	yes	yes	★★★★

Rysunek 18 Fragment przykładowego wyjścia

CatRAPID omics jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę http://s.tartagialab.com/update_submission/90265/05001ff7fe. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Agostini et al., 2013) catRAPID omics: a web server for large-scale prediction of protein-RNA interactions. Bioinformatics.

[PMID: 23975767](#)

- (Bellucci et al., 2011) Predicting protein associations with long noncoding RNAs. Nature methods.

[PMID: 21623348](#)

5.4 catRAPID signature

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	Brak danych
Dane wejściowe:	FASTA
Ostatnia aktualizacja	Brak Danych
Rok dostępnych publikacji:	2015
Czas oczekiwania na wynik:	Okolo 1-20 minut

Innym ale podobnym nawet z nazwy narzędziem jest catRAPID signature.

Przewiduje regiony wiążące rybonukleoprotein i RNA, za pomocą właściwości fizykochemicznych zamiast wyszukiwania podobieństw sekwencji. Algorytm został wyszkolony na ludzkich białkach i przetestowany na modelowych organizmach, oblicza ogólną skłonność RNA do tworzenia wiązania a następnie przewiduje regiony wiążące w RN. „catRAPID signature” wyprzedza inne algorytmy w identyfikacji białek wiążących RNA oraz w wykrywaniu nieklasycznych regionów wiążących RNA. Wyniki są wizualizowane na stronie internetowej i mogą być pobierane lub przekazywane „catRAPID omics” w celu przewidywania docelowych RNA.

Na wejście tego narzędzia podajemy sekwencje w formacie FASTA. Rozmiar sekwencji powinien być pomiędzy 60 - 2645 aminokwasów. Istnieje również opcja podania adresu e-mail w celu wysłania odnośnika do wyników. Na wynik jednak trzeba poczekać od 1-3 minut dla pojedynczego białka, natomiast kiedy jest więcej sekwencji np. 10 czas oczekiwania to 15-20 minut. Dla 100 białek czas oczekiwania wydłuża się do 3 godzin.

Wyjście składa się z ogólnego wyniku dla sekwencji, który wskazuje czy białko jest wiążące. Taki wynik reprezentuje wartość z przedziału od 0-1. Jeżeli złożona sekwencja daje ogólny wynik niższy niż 0,5, co wskazuje na brak aktywności RNA wiążącego.

CatRAPID signature jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę http://service.tartaglialab.com/update_submission/90277/bcc46bc451. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Livi et al., 2015) catRAPID signature: identification of ribonucleoproteins and RNA-binding regions. Bioinformatics.
[PMID: 26520853](#)

Portal Home

catRAPID signature

[catRAPID signature home - Tutorial - Documentation - Licensing Notice - Group page @ CRG]

catRAPID
Signature

catRAPID signature

The algorithm calculates the overall RNA-binding propensity followed by the prediction of RNA-binding regions

Submission reference: 90278

Submission label (optional)

TMM70_HUMAN

Protein sequence (FASTA format)

>sp|Q9BUB7|TMM70_HUMAN Transmembrane protein 70, mitochondrial OS=Homo sapiens GN=TMEM70 PE=1 SV=2
MLFLALGSPHAWELPLCGRRRTALCAAAALRGPRASVSRASSSSGSPGPAAGWSTGPSGAA
RLLRPPGQAQIPVYMEGYVRF LNTPSDKSEDRLLYTGMARAVFGVKCF5YSTSLTGLT
FLPVIPTQNHAISESVP LPIQIIFVIGINGSFVTITPVLLHFIKGVIRLVHEATTOTYK
ALTYNALAEETSTVFHQNDVKIPDAKHVFTTFYAKTKSLLVNPVLFNREDYIHLMSYDK
EEFILYHEETSEEKRHKDDK

Email address (optional). Please note: the email address is required for submissions with MORE than one protein!

Submission status: Submitted! See [result](#) [Prześlij](#)

© 2012 - Gene Function and Evolution - Center for Genomic Regulation (CRG)

Rysunek 19 Przykładowe wejście dla TMM70_HUMAN

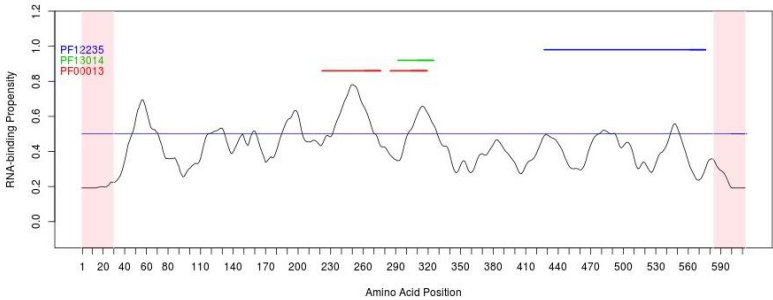
Your submission results

Information about the JOB:

ID: 90276
User label: FMR1_HUMAN_iso7
Sequence: protein.fasta
Generated: 2016-06-13 23:16:15.141977

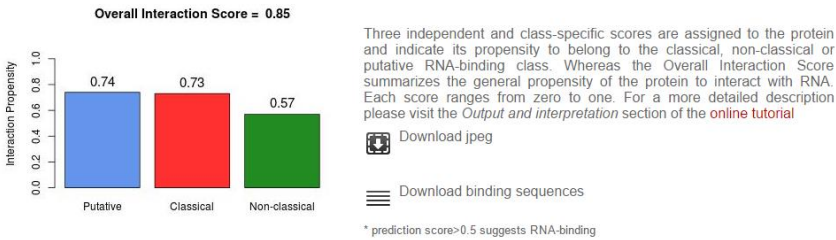
Protein sequence and putative binding-sites

Your sequence obtained an overall prediction score of 0.85 *



PFAM	Domain
PF00013	KH_1
PF13014	KH_3
PF12235	FXR1F_C

Would you like to continue with the prediction of the interactome? catRAPID



Continue with a [new submission](#)

Rysunek 20 Przykładowe wyjście dla TMM70_HUMAN

5.5 Hot Spot at Protein-RNA interacting surface/ HotSPRing

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	Brak danych
Dane wejściowe:	Plik PDB oraz plik HSSP
Ostatnia aktualizacja	Brak Danych
Rok dostępnych publikacji:	2015
Czas oczekiwania na wynik:	Około 10 sekund

Serwer WWW do przewidywania miejsc wiązań RNA z białkami. Metoda do przewidywania miejsc wiązań może być skutecznie wykorzystywana w celu zawężenia docelowych reszt hamujących interakcje białko-RNA. Metoda może być również przydatna dla modelowania kompleksów białko-RNA z pożądanym powinowactwem wiązania (afinicznością).

Wejście tego narzędzia jest dosyć kłopotliwe, ponieważ każdą sekwencję którą chcemy przetestować musimy pobrać na komputer w formacie Protein Data Bank (.pdb). (<http://www.rcsb.org/>) i dopiero wtedy możemy wczytać plik. Następnie za pomocą bazy danych HSSP: <http://mrs.cmbi.ru.nl/~HEAD=pobj> wyszukujemy i pobieramy plik do wyrównania w Formacie (.hssp). Wybieramy również odpowiednio łańcuchy jakie nas interesują. Program zwykle trwa 10 sekund.

Niestety nie udało mi się uzyskać pliku wyjściowego, ponieważ przy pobieraniu wyjścia wyskakuje błąd.

HotSPRing jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://www.csb.iitkgp.ernet.in/applications/HotSPRing/main>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Barik et al., 2015) Probing binding hot spots at protein-RNA recognition sites.
Nucleic acids research.

[PMID: 26365245](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/26365245/)

www.csb.uic.edu/emet.in/applications/HotSPRing/main

HotSPRing: Hot Spot at Protein-RNA interacting surface

Tutorial
Instructions
References
Contact us

Please submit the following: Items labelled (*) are mandatory

Protein-RNA complex file* 1dfu.pdb Protein chain ID(s)*

Please submit the **HSSP** file* 1DFU.hssp RNA chain ID(s)*

Unbound protein file (Optional) 1b75.pdb **HSSP** chain ID(s)*

Unbound chain ID(s)

This is a test run on Protein-RNA interface residues affinity prediction.

PDB IDs of files used are: 1DFU (bound), 1B75 (unbound).

You do not need to submit any PDB/HSSP file. Download link is also provided.

Rysunek 21 Przykładowe wejście HotSPRing

5.6 Pprint

Sposób dostępu:	Aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Znajomość obsługi komputera:	Podstawowa
Stabilność:	Stabilny
Dostępna wersja:	Brak danych
Dane wejściowe:	PDB ID lub plik
Ostatnia aktualizacja	Brak Danych
Rok dostępnych publikacji:	2015
Czas oczekiwania na wynik:	Około 1- 5 minut

Ogólną ocenę wiązania do przewidywania prawdopodobieństwa wiązania w białkach kwasu nukleinowego. Wynik bezpośrednio pochodzi od cech fizykochemicznych i ewolucyjnych.

Na wejściu narzędzie to daje nam możliwość wyboru czy będziemy korzystać z struktury PDB, czy z sekwencji białka, którą musimy wkleić w formacie FASTA. Możemy wpisać PDB ID lub wybrać z pliku. Istnieje również możliwość wyboru łańcucha oraz podania adresu email w celu wysłania odnośnika do naszego zapytania.

W wyjściu każdą strukturę możemy pobrać w różnych formatach. Wyjście jest dosyć obszerne dlatego nie będę szczegółowo jego omawiać.

Pprint jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://ahsoka.u-strasbg.fr/rbscore/predict.html>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Miao and Westhof, 2015) Prediction of nucleic acid binding probability in proteins: a neighboring residue network based score. Nucleic acids research.
[PMID: 25940624](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/25940624/)

Predict

Input protein information for prediction

☒ I have a PDB structure
☐ I only have a protein sequence

♣ Please input a **PDB code**:


Or **Upload a PDB file**:


Nie wybrano pliku

♣chain: [Multi-Chain?](#)

♣ are required as inputs

Your **Email Address**: (optional)




[Privacy & Terms](#)

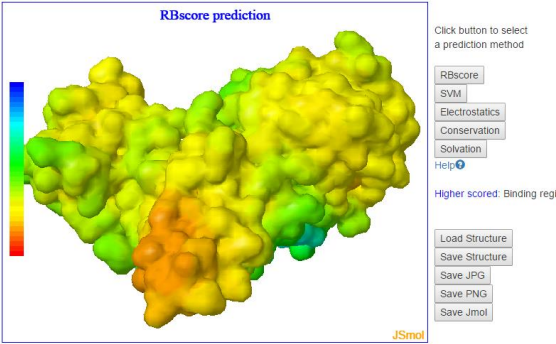
Rysunek 22 Przykładowe wejście dla 1K8wA

Result of Job 2016061417460180935165

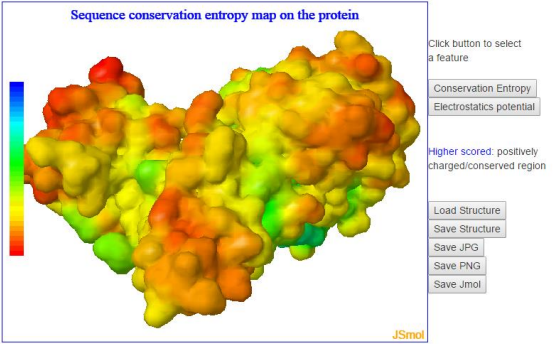
Summary of prediction

Jod ID:	2016061417460180935165
Sequence length:	303 residues
Possible binding sites No.:	37 - 59
Download results data:	download
Prediction by RBscore:	
Defined specificity:	85.00%
Estimated sensitivity:	76.31%
Binding sites Number:	43 residues
Threshold in RBscore:	341.5
Prediction by SVM:	
Defined specificity:	85.00%
Estimated sensitivity:	83.46%
Binding sites Number:	39 residues
Threshold in SVM:	-0.437502

Predictions based on different features



Features map on protein structure



Deatiled Results

RBscore: total prediction score
Qscore: prediction based on ELECTROSTATICS
CScore: Prediction based on CONSERVATION ENTROPY
SOLscore: Prediction based on SOLVATION ENERGY
Entropy: Conservation entropy
RBpred: Binary prediction by RBscore
SVmpred: prediction based on SVM
SVlpred: Binary prediction by SVM
N: Nucleic acid binding site

No.	Res	RBscore	Qscore	CScore	SOLscore	Entropy	RBpred	SVmpred	SVlpred
1	H	248.1	23.9	1409.1	82.3	1.72		-1.000	
2	D	233.6	30.1	1302.3	29.0	1.10		-1.024	
3	I	167.5	3.3	1283.3	26.3	1.25		-1.000	
4	H	187.5	2.6	1112.1	-2.6	1.14		-1.000	
5	G	25.1	-89.4	823.3	-99.9	2.16		-1.256	
6	V	-17.0	-99.2	780.6	-108.7	1.52		-1.000	
7	L	-43.4	-112.0	816.5	-139.7	1.42		-1.062	
8	L	-16.8	-97.0	861.1	-122.0	1.02		-1.103	
9	L	-100.0	-100.0	-100.0	-100.0	1.43		-1.000	
10	D	201.8	7.8	1450.8	-36.9	1.61		-1.000	
11	K	52.1	-100.9	846.7	-88.3	2.86		-1.000	
12	P	237.5	7.1	1288.0	-14.5	2.10		-0.999	
13	Q	268.0	30.1	1323.0	-2.7	0.51		-1.074	
14	G	329.7	59.4	1548.2	-22.0	1.97		-1.000	
15	H	322.3	76.3	1320.6	9.6	1.44		-1.134	
16	S	474.9	165.6	1815.3	0.2	1.89		1.000	
17	S	540.3	185.3	1523.4	20.6	2.57		-1.000	
18	H	550.1	228.1	1550.3	55.9	1.89		1.000	
19	D	406.8	139.8	1668.8	4.3	1.43		1.000	
20	A	-100.0	-100.0	-100.0	-100.0	1.39		-1.000	
21	L	458.1	179.4	1505.0	19.4	1.57		1.000	
22	Q	406.1	143.9	1349.3	46.3	0.89		1.001	
23	K	311.8	136.3	1453.7	46.4	1.37		-1.000	
24	V	-100.0	-100.0	-100.0	-100.0	1.21		-1.315	
25	K	343.3	126.4	1366.0	74.0	1.92		-0.256	
26	R	398.1	180.4	1640.1	55.7	1.49		-0.800	
27	I	150.0	-4.4	1019.1	-60.2	1.20		-1.000	
28	Y	150.6	-19.8	1042.6	19.6	1.38		-0.987	
29	H	230.1	16.1	1246.9	71.7	0.87		-1.000	
30	A	203.2	12.7	954.1	43.9	0.75		-1.000	


Rysunek 23 Fragment przykładowego wyjęcia dla 1k8wA

5.7 NPInter




Sposób dostępu:	aplikacja internetowa
Ograniczenia w użyciu:	żadne
Wersja:	v3.0
Stabilność:	Stabilny
Dane wejściowe:	Sekwencje
Format wejściowy:	FASTA
Rok dostępnych publikacji:	2006 oraz 2014
Czas oczekiwania na wynik:	Poniżej minuty

NPInter weryfikuje eksperymentalnie funkcjonalne interakcje między niekodującym RNA (z wyjątkiem tRNA i rRNAs) i biocząsteczkami (białek, DNA i RNA). Robi to poprzez interakcje funkcjonalnych, czyli przede wszystkim oddziaływania fizyczne, chociaż może pojawić się kilka innych form interakcji. Szczegółowe badania dotyczące interakcji ncRNA wykazały, że ncRNAs może stanowić część kompleksów enzymatycznych lub regulatory genów strukturalnych lub innych elementów funkcjonalnych. NPInter pozwala użytkownikom na przeglądanie oddziaływań według gatunku, klasy ncRNA lub tagi interakcji (interaction tags). Użytkownicy mogą również zadać zapytanie do bazy danych poprzez interfejs wyszukiwania, używając nazwy lub aliasów cząsteczek, cząsteczki identyfikatorów lub innych opisowych słów.

Na stronie NPInter znajduje się lista interakcji, gdzie dostępnych jest ponad 8000 interakcji. Przeszukiwanie tak dużej liczby interakcji ułatwia nam możliwość stosowania filtrów danych np. ID interakcji, poziom interakcji, organizm itp.



Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars





















[Home](#)
[Search](#)
[Browse](#)
[Functional Annotation](#)
[Blast](#)
[Genome](#)
[Submit](#)
[Download](#)
[Statistics](#)
[Help](#)

Interaction List if you want to browse by different types:

Species: Interaction Class: Interaction Level: Data Source:

Display items per page

Page Total Page: 407 Total amount: 8130 [first page](#) [previous page](#) [next page](#) [last page](#)

Interaction ID	ncRNA	Interaction partner	Interaction Level	Interaction Class	Organism	Tags	Data Source
ncRI-3000001	4.5S	fusA	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000002	4.5S	ffh	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000003	6S	rpoB	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000004	6S	rpoD	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000005	6S	rpoC	RNA-Protein	binding	Escherichia coli		Literature mining
ncRI-3000007	7SK	ABO	RNA-RNA	regulatory	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000008	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000009	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000010	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000011	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000012	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000013	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000014	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000015	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000016	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000016	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000017	7SK	HEXIM1	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000018	7SK	Oct1	DNA-TF	regulatory	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000019	7SK	Tat	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining
ncRI-3000020	7SK	Tat	RNA-Protein	binding	Homo sapiens		Literature mining

Page Total Page: 407 Total amount: 8130 [first page](#) [previous page](#) [next page](#) [last page](#)


Copyright©ChenLab,Laboratory of Noncoding RNA,Institute of Biophysics,Chinese Academy of Sciences.

Institute of Computing Technology,Chinese Academy of Sciences.




Rysunek 24 Lista interakcji

Kiedy w liście interakcji znajdziemy interesującą nas interakcję klikamy na ID. Wyniki podzielne są na pięć głównych części. W „General Information” znajdziemy podstawowe informacje między innymi te, które wybraliśmy w filtrach. „Molecule Information” znajdziemy szczegółowe dane takie jak identyfikator bazy UniProt ID, podobne biocząsteczki, nazwę itp.. W kolejnej części „References” zawarte są ogólne informacje o publikacji. Ostatnią częścią jest ” Cross Interaction” , który wyświetla prostą sieć wizualna, gdzie każda cząsteczka jest węzłem na wykresie, a interakcje są zaznaczone jako krawędzie. Czerwone węzły stanowią białka, lub RNA i DNA kodujące białka, podczas gdy niebieskie i

różowe węzły reprezentują odpowiednio ncRNAs i miRNA. Kolor krawędzi dyskryminuje źródło każdej interakcji, zielony sugeruje, że interakcja jest od NPInter i fioletowy sugeruje, że interakcja jest z łańcucha.




Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

[Home](#)
[Search](#)
[Browse](#)
[Functional Annotation](#)
[blast](#)
[Genome](#)
[Submit](#)
[Download](#)
[Statistics](#)
[Help](#)

Interaction Information

General Information

Interaction ID ncRI-3008120
Interaction Molecules TERC -- MCAM
Interaction Level RNA-Protein
Interaction Class binding
Tags 
Organism Homo sapiens
Tissue or Cell Type bladder cancer cell biu-87
Experiment qRT-PCR
Description Gene chip analysis revealed that 21 genes were down-regulated (ATM, BAX, BCL2, BCL2L1, BIRC5, CD44, CTNNB1, E2F1, JUN, MCAM, MTA1, MYC, NFKB1, NFKBIA, NME4, PNN, PNN, SERPINE1, THBS1, TNFRSF1A, and UCC1).?
Datasource literature mining


Molecule Information

ncRNA		Protein	
Name	TERC	Name	MCAM
NONCODE ID	NONHSAG036615	UniProt ID	Q9NQ41
Description	Linc	Description	NULL
Related Biomolecule	TERT PCNA TNFRSF1A THBS1 SERPINE1 Related ncRNA		

References

PubMed ID 20556588
Title Effects of combined siRNA-TR and -TERT on telomerase activity and growth of bladder transitional cell cancer BIU-87 cells.
Authors "Cheng W.?Wei Z.?Gao J.?Zhang Z.?Ge J.?Jing K.?Xu F.?Xie P."
Journal J Huazhong Univ Sci Technolog Med Sci

Cross Interaction
[Click to see network in a new window.](#)



Each molecule is a node in the graph and interactions between molecules are designated as edges in the graph. Red nodes represent proteins, or protein-coding RNAs and DNAs while blue and pink nodes represent ncRNAs and miRNAs respectively. Color of edges discriminates source of each interaction, green suggesting that interaction is from NPInter and purple suggesting that interaction is from STRING.

No Binding Site Information!

Copyright:ChenLab,Laboratory of Noncoding RNA,Institute of Biophysics,Chinese Academy of Sciences.

Institute of Computing Technology,Chinese Academy of Sciences.

Można również szukać oddziaływań na cztery różne sposoby. Dla przykładu W jednej z wyszukiwarek wpiszemy w ncRNA „hotair”

NP Inter
Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

NETWATCH Science, NCI, Bmcc

Home Search Browse Functional Annotation Blast Genome Submit Download Statistics Help

Search

Keyword Search

Keyword Query: Species: Data Source:

This search function allows you to search any ID stored in the database .

Search by ID: you can use pubmed ID(9018369), interaction ID(ncRI-3000006), ncRNA identifier in NONCODE(NONHSAG040596) and miRBase(MI0000113), mRNA identifier in RefSeq(NM_002467), protein identifier in UniProt(O94992) as keywords without pre-selection of the ID category.

Search by Name: you can use ncRNA name(Hotair, hsa-mir-100-5p), protein name(MYC) and their name alias as keywords without pre-selection of the molecule class.

Basic Search

Basic Query: In:

ID Search

ID Query: In:

Example: **NONCODE ID:** NONHSAG011264 **miRBase ID:** MI0000102 **Uniprot ID:** Q9EPU0 **PubMed ID:** 23766421 **Interaction ID:** ncRI-3000003

Text Search

Text Query:

Example: RNA Interference

Search hints

Basic Search: you can use ncRNA name, protein name, their name alias, ncRNA class, class alias as keywords.

ID Search: you can use pubmed ID, interaction ID, ncRNA identifier in NONCODE and miRBase, protein identifier in UniProt as keywords.

Text Search: you can search all sections in the database including organism, interaction description, ncRNA description, protein description, experiments.

Be aware, Text Search may produce a very large number of hits. The other two search forms support more focused questions by providing more options for searching specific categories of information.

Copyright©ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences.
Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

Po wyszukaniu np. Hotair przechodzimy do listy interakcji w której mamy powybierane same Hotair.

Na tej samej stronie można również wyszukać wklejając sekwencje ncRNA i białek.

The screenshot shows the NPInter web interface. At the top, there is a header with the NPInter logo and the tagline "Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars". To the right of the logo are logos for NETWATCH Science, NCI, and Bmice. Below the header is a navigation bar with links: Home, Search, Browse, Functional Annotation, Blast, Genome, Submit, Download, Statistics, and Help. The main content area is titled "Blast in NPInter". It contains a form for choosing a program and database, with "blastn" selected for the program and "NPInter_ncRNA" for the database. There is a text area for entering the sequence in FASTA format, and a button to "Wybierz plik" (Choose file). Below this, there are fields for "Set subsequence: From" and "To", and buttons for "Clear sequence" and "Search". A note states "The query sequence is filtered for low complexity regions by default." There are also filter options: "Filter" (checked), "Low complexity" (checked), "Mask for lookup table only" (unchecked), "Expect" (10), "Matrix" (BLOSUM62), and "Perform ungapped alignment" (unchecked). There is a field for "Frame shift penalty for blastx" (No OOF). Below this, there are "Other advanced options" with a "Graphical Overview" (checked) and buttons for "Alignment view", "Pairwise", "Descriptions" (100), "Alignments" (50), "Color schema" (No color schema), and "Clear sequence". At the bottom of the form, there is a link for "Comments and suggestions to: < blast-help@ncbi.nlm.nih.gov >" and a "Last modified: Jan 11, 2002" date. The footer contains copyright information for ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences, and the Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

NPInter
Interaction between noncoding RNAs and biomoleculars

NETWATCH Science NCI Bmice

Home Search Browse Functional Annotation Blast Genome Submit Download Statistics Help

Blast in NPInter

Choose program to use and database to search:

Program Database

Enter sequence below in FASTA format

Or load it from disk
 Nie wybrano pliku

Set subsequence: From To

The query sequence is filtered for low complexity regions by default.

Filter ☒ Low complexity ☐ Mask for lookup table only
Expect Matrix ☐ Perform ungapped alignment

Frame shift penalty for blastx

Other advanced options:

☒ Graphical Overview
Descriptions Alignments Color schema

Comments and suggestions to: < blast-help@ncbi.nlm.nih.gov >

Last modified: Jan 11, 2002

Copyright: ChenLab, Laboratory of Noncoding RNA, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences.
Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences.

NPInter jest dostępny jako aplikacja internetowa. Można z niej skorzystać wchodząc na stronę <http://www.bioinfo.org/NPInter/>. Dzięki temu w każdej chwili bez konieczności instalacji można skorzystać z tego narzędzia. NPInter zapewnia nam wiele możliwości wyszukiwania oraz ma przydatne filtry aby sprawnie przeszukiwać dane.

Nie ma żadnych ograniczeń w użyciu. Nawet użytkownik z podstawową obsługą komputera jest w stanie sobie poradzić. Jest to narzędzie stabilne. A wynik otrzymujemy od razu.

Dodatkowe informacje można znaleźć w podanych poniżej publikacjach:

- (Yuan et al., 2014) NPInter v2.0: an updated database of ncRNA interactions. Nucleic acids research.
[PMID: 24217916](#)
- (Wu et al., 2006) NPInter: the noncoding RNAs and protein related biomacromolecules interaction database. Nucleic acids research.
[PMID: 16381834](#)

Lista niedostępnych już programów:

- BindN
- Bind+
- dRNA-3D
- NAPS
- Prediction of RNA-Binding Proteins / PRBP
- Prediction of RNA-binding Residues / PRBR
- PRINTR
- Protein-RNA / PiRaNhA
- RNA-interaction site prediction / RISP
- RNABindR
- SVM-Prot
- TeloPIN