

Sara Kemmler 5760949

Robin Bonkaß 5769588

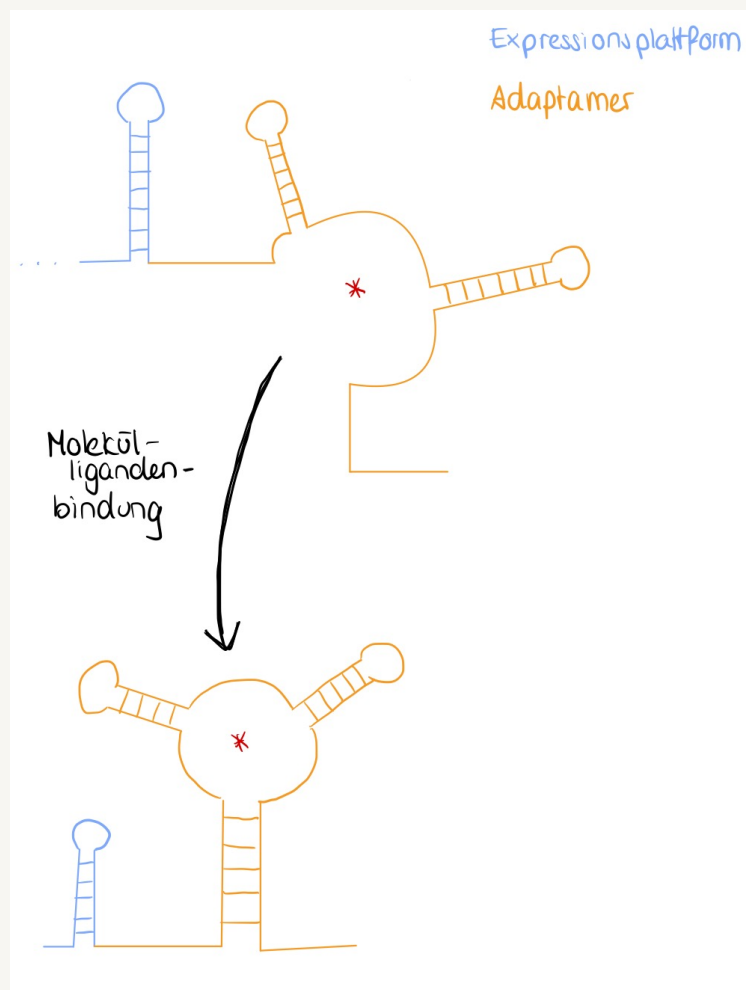
1	2	3	4	$\Sigma$

## Übungsblatt Nr. 11

(Abgabetermin 21.07.22)

### Aufgabe 1

Riboswitches sind regulatorische Elemente in nicht-kodierender mRNA, die unter anderem die RNA-Translation modulieren. Riboswitches finden sich am häufigsten in der 5'UTR-Region, wo sie direkt einen kleinen Molekülliganden binden. Die Sekundärstruktur von Riboswitches ist sehr konserviert - sie enthält eine Adaptamer-Domäne, die das Effektormolekül erkennt und eine Expressionsplattform, die einen sekundären Strukturschalter enthält, der die Transkription oder Translation beeinträchtigt. Die Bindung des Zielmoleküls an das Adaptamer löst eine Konformationsänderung des Adaptamers und infolgedessen der Expressionsplattform aus, die eine Genregulierung durch einen von vielen möglichen Mechanismen bewirkt. Wenn sich diese beiden Domänen überschneiden, bildet sich eine Schaltsequenz. Diese Schaltsequenz bestimmt die Faltung der RNA in den Off- oder On-Zustand der RNA.



## Aufgabe 2

Die Sequenz **GGUCCCUAC** erzeugt folgende Tabelle nach Anwendung des Nussinov Algorithmus:

		G	G	U	C	C	C	U	A	C
G	0	0	0	1	2	2	2	2	3	3
G		0	0	1	1	1	1	1	2	2
U			0	0	0	0	0	0	1	1
C				0	0	0	0	0	1	1
C					0	0	0	0	1	1
C						0	0	0	1	1
U							0	0	1	1
A								0	0	0
C									0	0

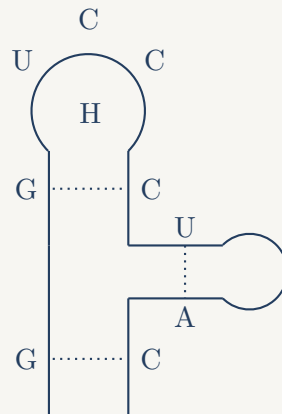
Der Traceback ist in folgender Matrix durch die roten Pfeile dargestellt:

		G	G	U	C	C	C	U	A	C
G	0	0	0	1	2	2	2	2	3	3
G		0	0	1	1	1	1	1	2	2
U			0	0	0	0	0	0	1	1
C				0	0	0	0	0	1	1
C					0	0	0	0	1	1
C						0	0	0	1	1
U							0	0	1	1
A								0	0	0
C									0	0

Daraus ergibt sich eine Struktur, welche durch folgende Dot-Bracket Schreibweise dargestellt werden kann:

((...))

Der Graph dieser Sekundärstruktur sieht dementsprechend wie folgt aus:



Diese Struktur besitzt eine Bifurkation, ein Hairpin mit einem Stamm, der zwei Basenpaare lang ist und einen Loop, welcher drei Nucleotide beinhaltet.

3

### Aufgabe 3

Die gegebene RNA-Sequenz im file proteinMRNA.fasta wurde zunächst mittels BLAST in eine Proteinstruktur umgeschrieben. Da die BLAST-Suche bereits ergeben hat, dass es sich bei der gegebenen RNA um SsrA-binding protein SmpB [Thermus] handelt, haben wir uns in der PDB-Suche auf diesen Organismus beschränkt. Die Proteinstruktur haben wir dann in der PDB unter dem Reiter 'Advanced Search' eingefügt und gesucht.

Folgende Suchergebnisse wurden gefunden:

- 1J1H: Solution structure of a tmRNA-binding protein, SmpB, from Thermus Thermophilus
- 1WJX: Crystal structure of TT0801 from Thermus thermophilus
- 2OB7: Structure of tmRNA-(SmpB)<sub>2</sub> complex as inferred from cryo-EM
- 1ZC8: Coordinates of tmRNA, SmpB, EF-Tu and h44 fitted into Cryo-EM map of the 70S ribosome and tmRNA complex

Aufgrund unserer Suchergebnisse und der Sucheinstellungen wird es sich am Ehesten um folgendes Ergebnis handeln: Solution structure of a tmRNA-binding protein, SmpB, from Thermus Thermophilus. Das small protein B (SmpB) wird für Trans-Translation benötigt und bindet spezifisch an tmRNA. Der Thermus Thermophilus HB8 ist ein extrem thermophiles Bakterium. Der Kern des Proteins besteht aus einem antiparallelen beta-"Fass", das wiederum aus 8 beta-Strängen besteht. Jedes der Strangenden ist mit der zweiten oder dritten Helix bedeckt. Die C-terminale Sequenz, welche reich an basischen Rückständen ist, zeigt eine schlecht strukturierte Form, wie sich sonst auch oft bei ribosomalen Proteinen zu sehen ist.

4

## Aufgabe 4

Das Programm in der Datei `Sara_Kemmler_Robin_Bonkass_A11.py` kann mit dem Befehl

```
python3 Sara_Kemmler_Robin_Bonkass_A11.py -f nussinov.fasta -l 0
```

ausgeführt werden. Dabei ist der Parameter hinter `-f` der Dateiname der Fasta-Datei, welche die Sequenzen enthält und die Zahl hinter dem Parameter `-l` gibt die minimale Anzahl an Nukleotiden in einem Loop an.

Da die Aufgaben auf einem Rechner mit Windows Betriebssystem erstellt wurde, war es nicht möglich `forgi` zu installieren. Denn `bioconda / viennarna 2.5.1` ist nur auf `linux-64` und `osx-64` verfügbar.

Das Programm könnte jedoch durch folgenden Code erweitert werden, um eine Ausgabe der Sekundärstruktur zu erzeugen. Hierbei sei `dotbracket` der String, welcher von der Funktion `make_dot_bracket()` zurück gegeben wird.

```
import matplotlib.pyplot as plt
import forgi.visual.mplotlib as fvm
import forgi
cg = forgi.load_rna(dotbracket, allow_many=False)
fvm.plot_rna(cg, text_kwargs={"fontweight":"black"}, lighten=0.7,
             backbone_kwargs={"linewidth":3})
plt.show()
```