

Leontis-Westhof Notation

Axel Wintsche

16. Mai 2011

Sekundärstruktur

- RNA Sekundärstruktur als Beschreibung von RNA Struktur
- Darstellung von Sekundärstruktur ...?
- Struktur motive: *stem*, *loop*, *pseudoknot*
- Vorhersage am Computer möglich (Genauigkeit?)

Sekundärstruktur

- RNA Sekundärstruktur als Beschreibung von RNA Struktur
- Darstellung von Sekundärstruktur ...?
- Struktur motive: *stem*, *loop*, *pseudoknot*
- Vorhersage am Computer möglich (Genauigkeit?)

- Wozu Sekundärstruktur?

Sekundärstruktur

- RNA Sekundärstruktur als Beschreibung von RNA Struktur
 - Darstellung von Sekundärstruktur ...?
 - Struktur motive: *stem*, *loop*, *pseudoknot*
 - Vorhersage am Computer möglich (Genauigkeit?)
-
- Wozu Sekundärstruktur?
 - z.B. Homologie-Suche

3D-Modell

- Methoden:
 - Kristallstrukturanalyse
 - Kernspinresonanzspektroskopie
- Informationen in Datenbanken: PDB, NDB

3D-Modell

- Methoden:
 - Kristallstrukturanalyse
 - Kernspinresonanzspektroskopie
- Informationen in Datenbanken: PDB, NDB
- ~ 60% der Basenpaare durch Sekundärstruktur beschrieben

3D-Modell

- Methoden:
 - Kristallstrukturanalyse
 - Kernspinresonanzspektroskopie
- Informationen in Datenbanken: PDB, NDB
- ~ 60% der Basenpaare durch Sekundärstruktur beschrieben
- **Aber: 3D-Interaktionen folgen einem Muster**

3D-Modell

- 3D-Modelle ungeeignet für Standardaufgaben:

3D-Modell

- 3D-Modelle ungeeignet für Standardaufgaben:
Sind Struktur A und B gleich?

3D-Modell

- 3D-Modelle ungeeignet für Standardaufgaben:

Sind Struktur A und B gleich?

Wie findet man eine 3D-Struktur in einer Sequenzdatenbank?

3D-Modell

- 3D-Modelle ungeeignet für Standardaufgaben:

Sind Struktur A und B gleich?

Wie findet man eine 3D-Struktur in einer Sequenzdatenbank?

- Ziel:

Koordinatenunabhängige Beschreibung

3D-Interaktionen

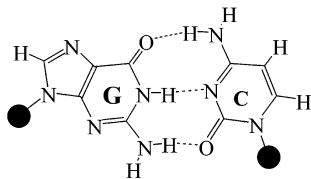
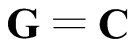
- Welche Interaktionen kennen wir bereits?

3D-Interaktionen

- Welche Interaktionen kennen wir bereits?
- Watson-Crick Basenpaare: A-U und G=C
- nicht Standard-Basenpaare: z.B. G-U

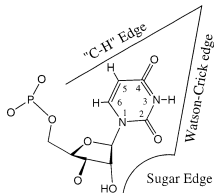
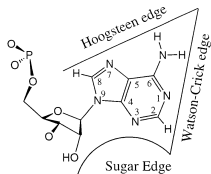
3D-Interaktionen

- Welche Interaktionen kennen wir bereits?
- Watson-Crick Basenpaare: A-U und G=C
- nicht Standard-Basenpaare: z.B. G-U



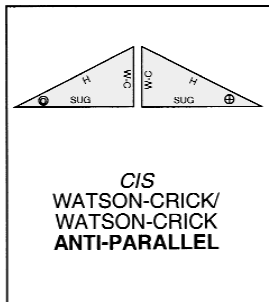
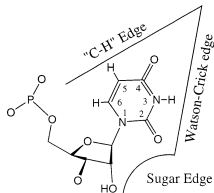
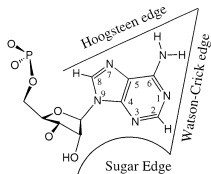
edge-to-edge Interaktion

Interacting Edges

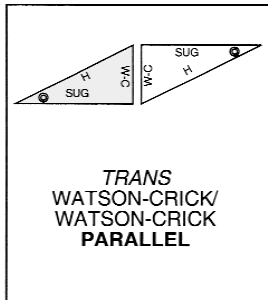
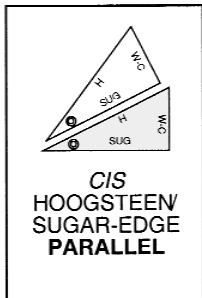
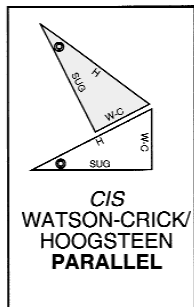


edge-to-edge Interaktion

Interacting Edges



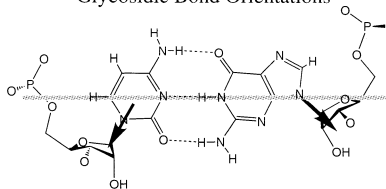
edge-to-edge Interaktion



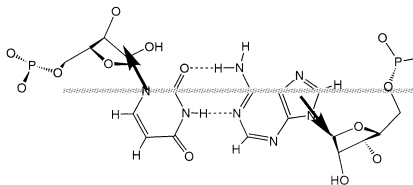
und weitere...

cis- und *trans*-Konfiguration

Glycosidic Bond Orientations



Cis orientation of the Glycosidic Bonds



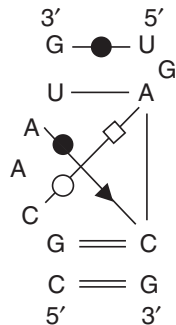
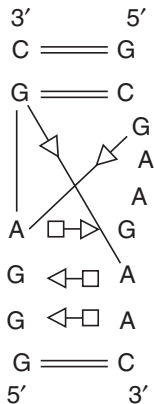
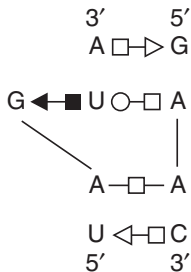
Trans orientation of the Glycosidic Bonds



Geometrische Familien

No.	GLYCOSIDIC BOND ORIENTATION	INTERACTING EDGES	SYMBOL	DEFAULT LOCAL STRAND ORIENTATION
1	<i>Cis</i>	Watson-Crick / Watson-Crick		Anti-parallel
2	<i>Trans</i>	Watson-Crick / Watson-Crick		Parallel
3	<i>Cis</i>	Watson-Crick / Hoogsteen		Parallel
4	<i>Trans</i>	Watson-Crick / Hoogsteen		Anti-parallel
5	<i>Cis</i>	Watson-Crick / Sugar Edge		Anti-parallel
6	<i>Trans</i>	Watson-Crick / Sugar Edge		Parallel
7	<i>Cis</i>	Hoogsteen / Hoogsteen		Anti-parallel
8	<i>Trans</i>	Hoogsteen / Hoogsteen		Parallel
9	<i>Cis</i>	Hoogsteen / Sugar Edge		Parallel
10	<i>Trans</i>	Hoogsteen / Sugar Edge		Anti-parallel
11	<i>Cis</i>	Sugar Edge / Sugar Edge		Anti-parallel
12	<i>Trans</i>	Sugar Edge / Sugar Edge		Parallel

Beispiele



Zusammenfassung

- Leontis-Westhof Notation reduziert 3D auf 2D
- Strukturvergleich jetzt einfacher
- neue Struktur motive: K-turn, C-motif, Hook-turn usw.
- Datenbanksuche (Homologieerkennung) möglich

Literatur



N.B. Leontis, J. Stombaugh, and E. Westhof.

The non-watson–crick base pairs and their associated isostericity matrices.

Nucleic acids research, 30(16):3497, 2002.



N.B. LEONTIS and E. Westhof.

Geometric nomenclature and classification of rna base pairs.

Rna, 7(04):499–512, 2001.



N.B. Leontis and E. Westhof.

Analysis of rna motifs.

Current opinion in structural biology, 13(3):300–308, 2003.



E. Westhof, B. Masquida, and F. Jossinet.

Predicting and modeling rna architecture.

Cold Spring Harbor Perspectives in Biology, 2010.