

FRET GESTÜTZTE RNA STRUKTURMODELLVORHERSAGE EINES RIBOSOMALEN TERTIÄRKONTAKTES

Felix Erichson¹, Fabio D. Steffen², Richard Börner¹

¹Laserinstitut Hochschule Mittweida / Schillerstraße 10, 09648 Mittweida

²Department of Chemistry University of Zurich / Winterthurerstrasse 190, 8057 Zurich

Durch langreichweitige Interaktion, sogenannte RNA Tertiärkontakte, z.B. zwischen RNA-Tetraloops und ihren RNA-Rezeptoren wird die Faltung der ribosomalen RNA stabilisiert und die Reifung des Ribosoms unterstützt¹. Ohne diese Tertiärkontakte gebe es kein stabiles, funktionierendes Ribosom und somit auch kein Leben. Der Fokus unserer Arbeit liegt auf einem kürzlich entdeckten, essenziellen Tertiärkontakt der rRNA der Bäcker-Hefe, dessen Struktur und Faltung noch weitgehend unbekannt ist². Wir nutzen Computer-Modelle der fluoreszent markierten RNA, *de novo* Modelle und MD Simulationen der Farbstoffe am Biomolekül, um die Struktur dieser RNA vorherzusagen und mit Experimenten zu vergleichen³. Hierfür sollen experimentelle Abstandsinformationen aus FRET (Förster-Resonanz Energietransfer) Messungen herangezogen werden. Dieser hybride Ansatz aus Experiment und Simulation erlaubt die Vorhersage von Strukturmodellen inkl. Dynamikinformation und soll helfen, die Entwicklung von artifiziellen Biomolekülen z.B. als Medikament zu beschleunigen⁴. Wir bedanken uns bei der Hochschule Mittweida für die finanzielle Unterstützung.

¹ Nissen, P. *et al.*: RNA tertiary interactions in the large ribosomal subunit: The A-minor motif. Proceedings of the National Academy of Sciences, Proceedings of the National Academy of Sciences, **2001**, 98, 4899-4903

² Gerhardy, S. *et al.* Working title: Proteome profiling unveils a role for Puf6 in 60S pre-ribosome nuclear export at low temperature. *To be submitted.* **2020**.

³ Steffen, F. D.; Sigel, R. K. O. & Börner, R.: An atomistic view on carbocyanine photophysics in the realm of RNA Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry (RSC), **2016**, 18, 29045-29055

⁴ Hoefling, M. & Grubmüller, H.: In silico FRET from simulated dye dynamics. Computer Physics Communications, Elsevier BV, **2013**, 184, 841-852