

RNA (kwas rybonukleinowy) jest unikatową makrocząsteczką chemiczną, która może funkcjonować w organizmach żywych na różne sposoby. Na najbardziej podstawowym poziomie budowy chemicznej, RNA przypomina DNA. Podobnie jak DNA, jest to liniowy polimer zbudowany z dużej liczby „budulców” A, C, G, i U, połączonych ze sobą liniowo jak koraliki na sznurku. W pierwszym przybliżeniu RNA wygląda jak połowa podwójnej helisy DNA i wykazuje tylko kilka pozornie małych różnic chemicznych. Podstawowe budulce DNA i RNA są bardzo podobne - RNA ma tylko dodatkowy atom tlenu w cząsteczce rybozy (co odróżnia tę cząsteczkę od deoksyrybozy w DNA i tłumaczy różnicę w nazwie RNA i DNA). Poza tym jeden z elementów budulcowych RNA, uracyl (U), nie posiada małej grupy chemicznej zwanej metylem, w porównaniu do tyminy (T) w DNA.

W komórkach organizmów żywych, w tym ludzi, RNA pełni jednak bardzo odmienne role od tych zarezerwowanych dla DNA. RNA może przekazywać informację genetyczną z DNA do białek. Ponadto wykazano, że wiele cząsteczek RNA katalizuje reakcje chemiczne w komórkach. Co więcej, cząsteczki RNA pełnią wiele ról regulacyjnych, które są kluczowe dla komórek - na przykład mogą nadzorować i włączać lub wyłączać procesy przeprowadzane przez inne cząsteczki biologiczne. Cząsteczki RNA są głównymi regulatorami komórek i są absolutnie niezbędne do życia na poziomie molekularnym.

Funkcje komórkowe i molekularne RNA zależą od ich struktur przestrzennych, które z kolei zależą od tego, jak sekwencja bloków budulcowych RNA samorzutnie układa się w przestrzeni, zależne od tego jak poszczególne bloki budulcowe oddziałują ze sobą. Co ciekawe, cztery podstawowe budulce RNA mogą być chemicznie modyfikowane przez maszyny komórkowe na wiele różnych sposobów, dając ponad 150 różnych pochodnych wariantów, które oddziałują ze sobą w odmienny sposób! Te modyfikacje podstawowych elementów konstrukcyjnych mogą wpływać na strukturę cząsteczek RNA, a także na zdolność tych cząsteczek do oddziaływania z innymi cząsteczkami w komórce.

Struktura RNA może być badana doświadczalnie, ale jest to długi i żmudny proces badawczy. W tym celu można także wykorzystywać symulacje komputerowe. Naukowcy opracowali różne metody służące do modelowania komputerowego, jak sekwencja RNA układa się w przestrzeni, aby przyjąć biologicznie istotny kształt. Także nasz zespół opracował program nazwany SimRNA. Jednak jak dotąd żadna z istniejących metod nie jest w stanie uwzględnić wpływu chemicznych modyfikacji czterech podstawowych elementów budulcowych na to, jak cząsteczki RNA układają się w przestrzeni.

Nasz projekt badawczy opisuje jak planujemy opracować nowy program komputerowy do modelowania molekularnego cząsteczek RNA zawierających modyfikacje chemiczne. Zaczniemy od istniejących prototypów naszych programów komputerowych i rozbudujemy je o nowe dane otrzymane na podstawie serii analiz, obejmujących połączenie badań obliczeniowych i doświadczalnych. Projekt będzie realizowany przez interdyscyplinarny zespół naukowców, w tym programistów komputerowych, naukowców specjalizujących się w symulacjach komputerowych i analizie danych oraz biochemików.

Oczekiwane rezultaty tego projektu będą miały duże znaczenie dla zrozumienia procesów komórkowych, które wiążą się z działaniem cząsteczek RNA, a w przyszłości mogą znaleźć praktyczne zastosowanie w biotechnologii i medycynie. Uzyskane przez nas wyniki badawcze przyczynią się do lepszego zrozumienia zależności między sekwencją, strukturą i funkcją cząsteczek RNA.