

# Dinámica molecular de un péptido sintético antigénico derivado del Virus AIE en agua

Garay, Alberto S.<sup>1</sup>; Rodrigues, Daniel<sup>2</sup>; Burton, Gerardo<sup>3</sup>; Tonarelli, Georgina<sup>1</sup>

1- Dto de Qca. Orgánica. Facultad de Bioq. y Cs. Biológicas. Universidad Nacional del Litoral. (CP: 3000) Casilla de Correo: 242. Santa Fe. Argentina

2- Departamento de Física e INTEC. Facultad de Bioq. y Cs. Biológicas. Universidad Nacional del Litoral - CONICET. (CP: 3000) Casilla de Correo: 242. Santa Fe. Argentina

3- Dto. de Qca. Orgánica. Fac. de Cs. Exactas y Naturales. Ciudad Universitaria (1428). UBA. Buenos Aires. Argentina.  
T.E.: +54(342)457-5213 - FAX: +54(342)457-52221

E-mail: sgaray@fbc.unl.edu.ar

**RESUMEN:** Se realizó una simulación computacional mediante el método de dinámica molecular de la estructura de un péptido sintético cuya secuencia reproduce el extremo c terminal de la proteína p26 del virus de la Anemia Infecciosa Equina (AIE). Se analizó la estabilidad en solución acuosa de este péptido partiendo de la estructura que esta porción posee en el cristal de la proteína. Los resultados muestran que esta estructura es estable en agua en los periodos de la simulación. Los resultados son consistentes con los datos de dicroísmo circular para este sistema. Se efectuó un análisis de las interacciones que estabilizan esta conformación.

**Palabras claves:** Dinámica Molecular - Estructura - Péptidos Sintéticos.

**SUMMARY:** Molecular Dynamics in water of an antigenic synthetic peptide of EIA virus. Garay, Alberto S.; Rodrigues, Daniel; Burton, Gerardo; Tonarelli, Georgina. The structure of the synthetic peptide that has the same sequence of the c-terminal of the EIAV p26 protein was studied using molecular dynamics. The stability in aqueous solution of the structure of such sequence in the crystalized protein was analyzed. The results show that this structure is stable under the conditions of the simulation. The secondary structure found in the calculations agree with the experimental results of circular dichroism for this system. An analysis of the interactions that give rise to the stability of this structure was made.

**Keys Words:** Molecular Dynamics - Structure - Synthetic Peptide.