

Análisis teórico de polipéptidos relacionados con la hélice PII de poliglicina y poliprolina

Herrera, F. E.¹; Sferco, S. J.^{1,2}

1- Departamento de Física, Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral, Ciudad Universitaria, Paraje El Pozo, 3000 Santa Fe, Argentina.

2 - INTEC (CONICET – UNL), Güemes 3450, 3000 Santa Fe, Argentina.

RESUMEN: Se analizaron diversos sistemas de polipéptidos representativos de la poliglicina y el colágeno (ambos relacionados entre sí por la estructura de la hélice PII). Los sistemas fueron analizados cuánticamente en vacío y a través de dinámica molecular clásica en medio acuoso. En vacío, la similitud de homopolipéptidos de glicina con la estructura PII, crece al aumentar el número de residuos y es inestable en medio acuoso. En cambio, los resultados de polipéptidos que guardan relación con el colágeno, permiten inferir que la estructura PII es estable tanto en vacío como en medio acuoso.

Palabras claves: colágeno – poliglicina – estructura PII.

SUMMARY: Theoretical analysis of polypeptides related with polyglycine and polyproline PII helix. Herrera, E.F.; Sferco, S.J.. Several systems of representative polypeptides of polyglycine and collagen were analyzed (both systems are related by the PII helix structure). The systems were analyzed in vacuum using quantum mechanics and through the classical molecular dynamics in aqueous solution. In vacuum, the similitude of glycine homopolypeptides with the PII structure increases when the number of residues grows and it is unstable in aqueous solution. On the other hand, the results from polypeptides that are related with collagen structure allow us to infer that the PII structure is stable in vacuum as well as in aqueous solution.

Key words: collagen – polyglycine – PII structure.