

# **Análisis de la estabilidad del cluster hidrofóbico de una horquilla beta usando el método Monte Carlo**

Nicastro, A.<sup>1</sup>; Sferco, S.J.<sup>1,2</sup>

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:** Utilizando el método de Monte Carlo se analizó la estabilidad del cluster hidrofóbico de la horquilla beta de la proteína G. Tanto en vacío como en presencia de solvente explícito el cluster hidrofóbico resultó inestable, mientras que se mantuvo el patrón de enlaces de hidrógeno intracatenarios de la horquilla (simulación solo en vacío). Estos resultados sugieren que en el proceso de plegamiento de la horquilla, la estabilidad viene dada principalmente por los enlaces de hidrógeno intracatenarios del esqueleto peptídico y solo adicionalmente por la formación del cluster hidrofóbico. La mutación de un residuo por otro aún más hidrofóbico aumenta la estabilidad de dicho cluster.

**Palabras clave:** horquilla beta – cluster hidrofóbico – plegamiento – Monte Carlo

**SUMMARY:** Stability analysis of the hydrophobic cluster of a  $\beta$ -hairpin using monte carlo method. Nicastro, A<sup>1</sup>; Sferco, S.J.<sup>1,2</sup>. Using Monte Carlo method, the hydrophobic cluster stability of a  $\beta$ -hairpin of the protein G was analyzed. Both in vacuo and explicit solvent the hydrophobic cluster proved to be unstable while it preserved its interstrand hydrogen bond pattern in the hairpin (simulation only in vacuo). These results suggest that in the folding process of the hairpin, stability is essentially achieved by formation of backbone hydrogen bonds and only in a complementary way by formation of the hydrophobic cluster. The mutation in a cluster residue for another even more hydrophobic one increases the stability of the cluster.

**Key words:**  $\beta$ -hairpin – hydrophobic cluster – folding – Monte Carlo.