

# Simulaciones con el método de Monte Carlo para estudiar la estabilidad de factores estructurales de una horquilla $\beta$

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:** Se estudió la estabilidad de una horquilla  $\beta$  de la proteína G de estreptococo, a través de simulaciones Monte Carlo en vacío y usando AMBER96. Estos resultados, en conjunto con los de trabajos anteriores, sugieren que los enlaces de H intracatenarios de la horquilla  $\beta$  son más estables que su cluster hidrofóbico, e indican que el primer elemento en formarse en el proceso de plegamiento sería el patrón de enlaces de H mientras que el cluster hidrofóbico se formaría tardíamente, aportando de manera complementaria a la estabilidad del sistema. De los resultados de una simulación mutando el residuo nativo de Valina por uno de Glicina, se observa que el cluster hidrofóbico se desestabiliza, indicando que el residuo de Valina podría jugar un papel relevante en la estabilidad del mencionado cluster. A partir de la coincidencia cualitativa entre nuestros resultados y los de Yoda *et al.* (2004, Chem. Phys. 307, 269-283), se remarca la importancia de elegir un campo de fuerzas en particular, sobre los resultados de las simulaciones.

**Palabras clave:** horquilla  $\beta$  – cluster hidrofóbico – Monte Carlo – AMBER96

**SUMMARY:** Simulations with the Monte Carlo method to study the stability of structural factors of a  $\beta$ -hairpin. Nicastro, A.; Sferco, S.J.. The stability of a  $\beta$ -hairpin of the streptococcal protein G was studied, performing vacuum simulations with Monte Carlo method and AMBER96 force field. These results together with those of previous works suggest that the interstrand H-bonds of the  $\beta$ -hairpin are more stable than its hydrophobic cluster, and indicate that, if we observe the folding process, the first event could be the interstrand H-bonds formation, while the hydrophobic cluster would contribute in a complementary way to the system stability. From results of a mutant  $\beta$ -hairpin simulation, where the Valine residue was replaced with Glycine one, we observe that the hydrophobic cluster turns unstable, which indicates that the Valine residue could be important in order to stabilize this cluster. The qualitative coincidence between our results and those of Yoda *et al.* (2004, Chem. Phys. 307, 269-283) stresses the importance of the particular force field selected for the calculations, in obtaining simulation results.

**Key words:**  $\beta$ -hairpin – hydrophobic cluster – Monte Carlo – AMBER96