

10.7 ESTRUCTURA CA13

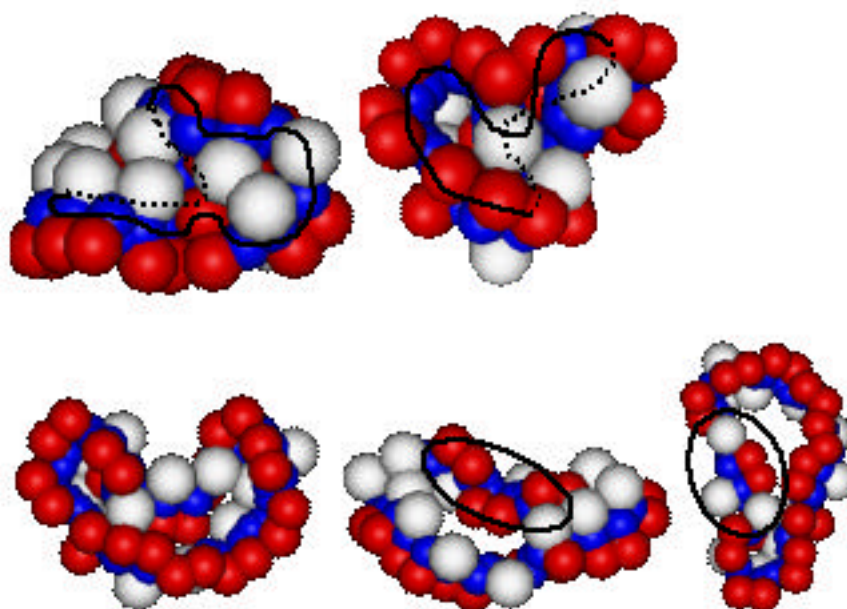


Figura 61 Estructures de CA13 en fase gas: 200, 800, 1600, 2000 i 4000 ps (a 3000 ps és igual i no es mostra). Es plega com CA12 i després es desplega.

La CA13 en fase gas es presenta inicialment plegada en dues meitats però a 1600 ps ja es desplega i continua així durant la resta de la simulació amb poques variacions. Per tal de mantenir les glucoses aproximadament en el mateix pla hi ha dues glucoses invertides i una glucosa enmig que orienta els hidroxils secundaris cap a l'interior, les tres glucoses es presenten encerclades a les dos últimes figures.

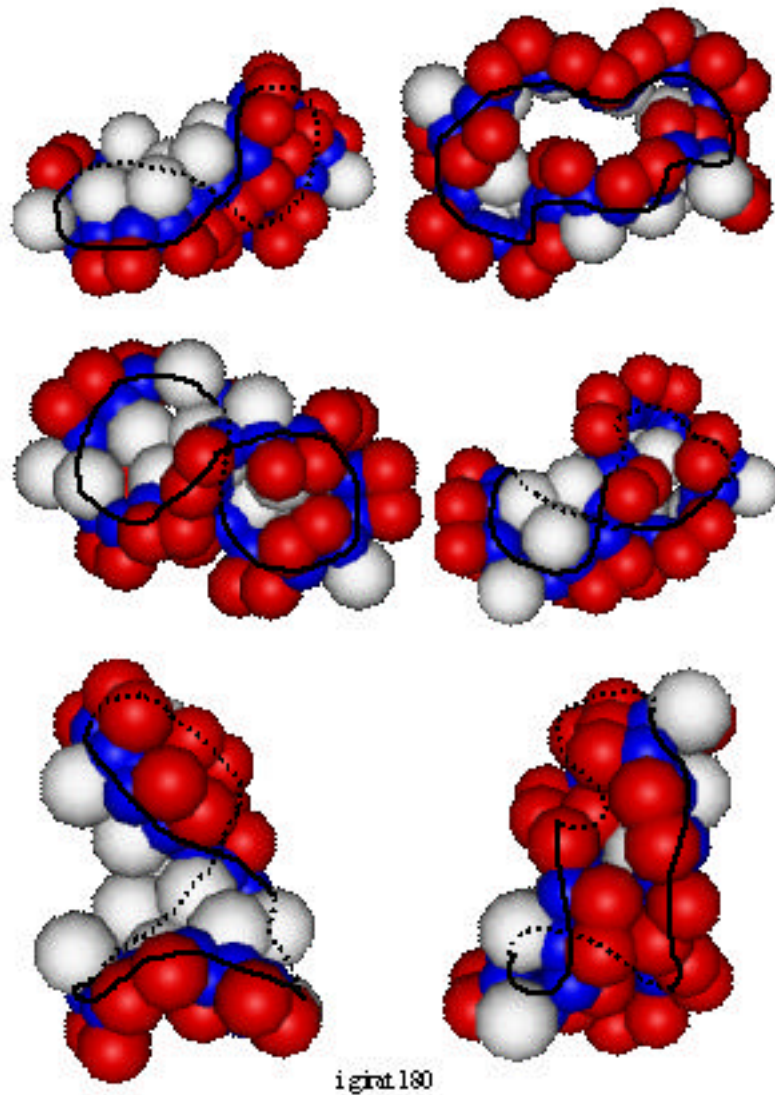


Figura 62 Estructures de CA13 en solució aquosa: 500, 700, 1000, 1500 i 2500 ps (aquesta última dibuixada en dues orientacions diferents).

En solució aquosa, la CA13 es retorç sobre sí mateixa dividint-se en dues parts que acaben plegant-se, com s'observa a 2500 ps. Presenta molts enllaços d'hidrogen

entre hidroxils primaris de glucoses no adjacents, i també entre hidroxils secundaris. També alguns enllaços d'hidrogen invertits.

10.8 ESTRUCTURA CA14

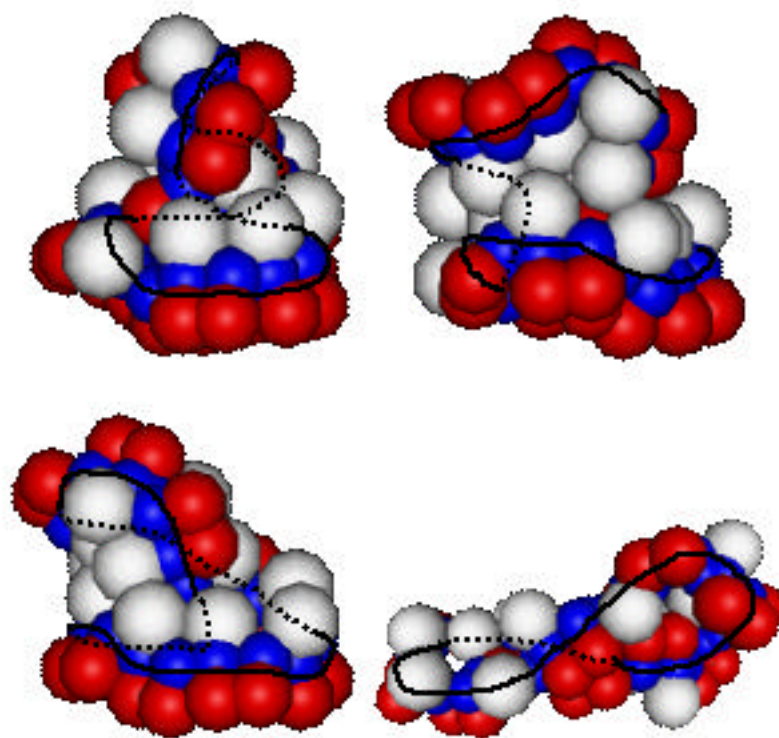


Figura 63 Estructures de CA14 en fase gas: 500, 1000, 2000 i 2400 (les de 3000 i 4000 ps ja són iguals a l'anterior i no es mostren).

La CA14 en fase gas ja mostra replegaments més variats, a 500 ps l'observem retorçada sobre sí mateixa partida en dues meitats perpendiculars, a 1000 ps es troba

plegada en dues meitats com la CA12 en fase gas (ja que ambdues tenen un nombre parell de glucoses i aquesta estructura és molt simètrica). A 2000 ps l'estructura plegada es retorç i finalment a 2400 ps s'acaba desplegant i es manté desplegada i retorçada durant la resta de la simulació.

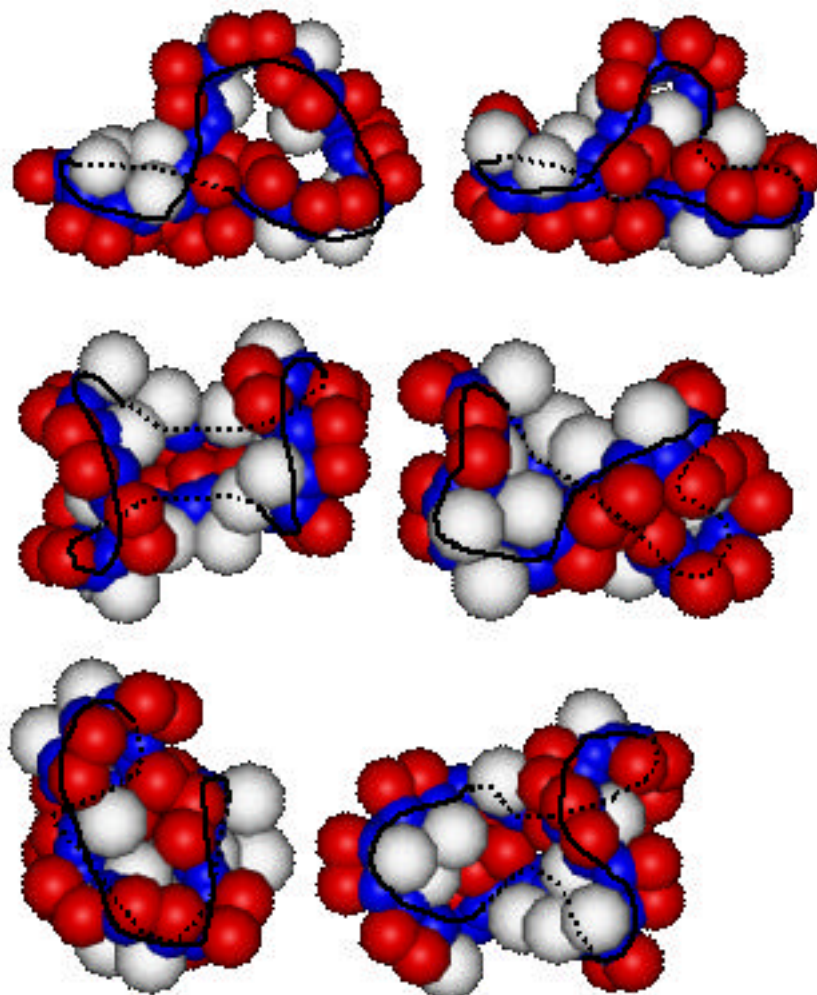


Figura 64 Estructures CA14 en solució aquosa: 500, 1500, 2000, 2500, 3500 i 4000 ps (la de 5000 ps és igual i no es mostra).

La CA14 en solució aquosa es manté plegada durant tota la simulació, es plega i es retorç de manera similar a CA12 i CA13 però de més maneres i amb molta més variació. Presenta enllaços d'hidrogen entre hidroxils primaris de glucoses no adjacents, entre hidroxils secundaris i també enllaços d'hidrogen invertits.

10.9 ESTRUCTURA CA26

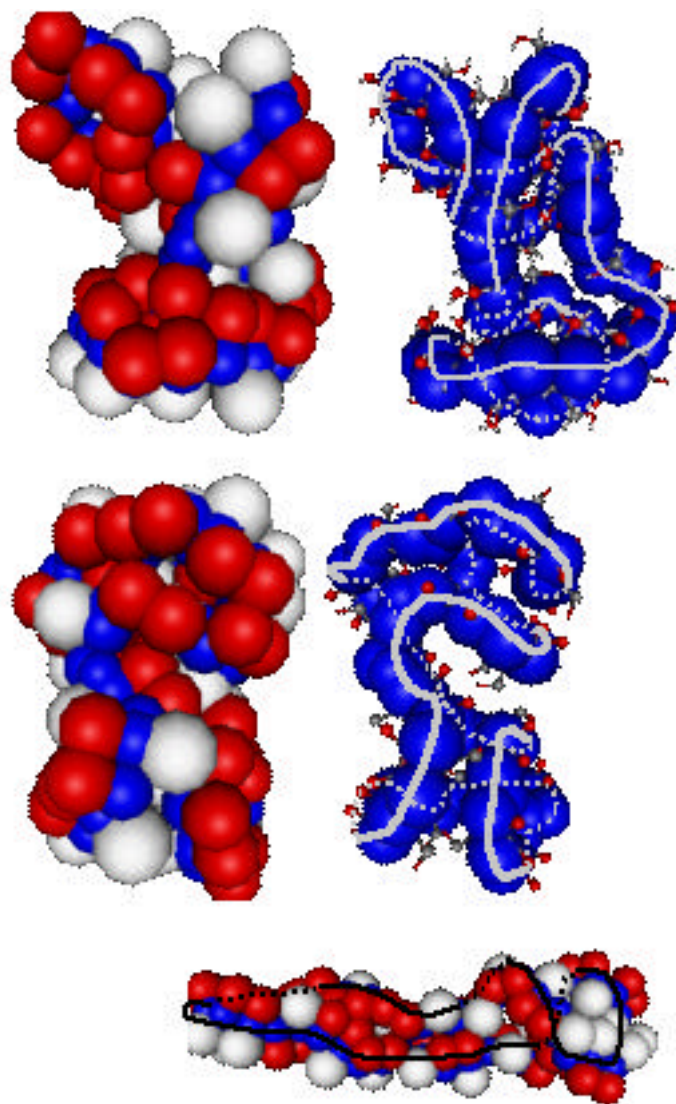


Figura 65 Estructures CA26 en fase gas: 1000, 2000 (semblant a l'anterior, en un altra orientació) i 3000 ps (la de 4000 i 5000 ps són iguals i no es mostren).

La CA26 en fase gas, partint d'una estructura desplegada, mostra replegaments més complicats però a 3000 ps es desplega gairebé completament mantenint-se així la resta de la simulació. Quan està replegada els diferents plecs interaccionen entre ells mantenint l'estructura, ja sigui entre els hidroxils primaris o els secundaris. Cada plec consta d'uns 4-7 residus de glucosa. Quan està desplegada adopta una estructura lineal que no deixa cavitat interior i un extrem una mica plegat. Per tal de mantenir l'estructura lineal presenta diverses glucoses invertides.

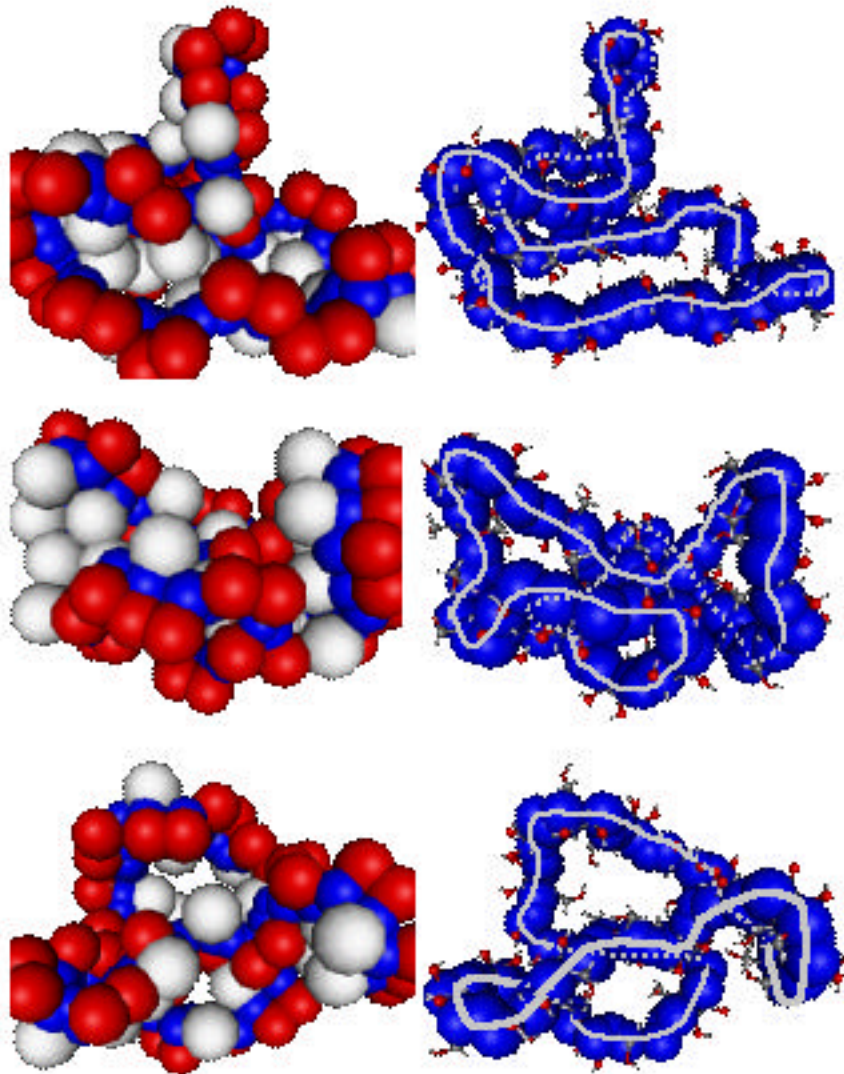


Figura 66 Estructures de CA26 en solució aquosa: 500, 1000 i 2000 ps (molt semblant a l'anterior, girada 90 graus).

La CA26 en solució aquosa, partint d'una estructura desplegada, presenta estructures molt replegades i es manté al llarg de la simulació.

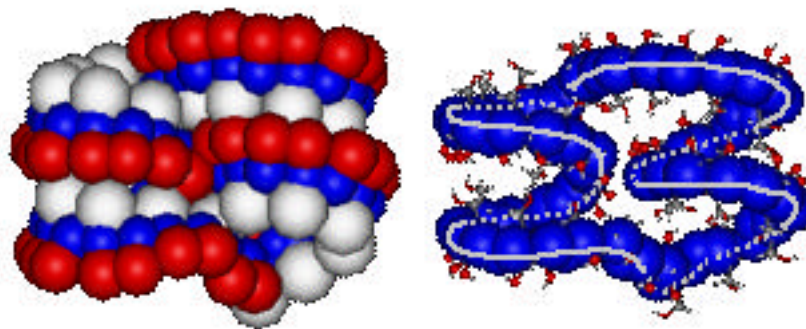


Figura 67 Estructura de raigs X de la CA26.

S'han realitzat simulacions de dinàmica molecular, en fase gas i en solució, de la CA26 agafant com a estructura de partida la corresponent a les dades de raigs X, Figura 67, per observar si aquesta estructura es manté estable al llarg de la simulació.