

Figura 68 Estructures de CA26 (partint de les dades raigs X) en fase gas: a 1000, 2000 i 3000 ps (la de 4000 i 5000 ps són iguals a l'anterior i no es mostren).

L'estructura de la CA26 partint de les dades cristal·lines, en fase gas, no es manté estable, si no que presenta diferents deformacions que repleguen l'estructura de

forma no simètrica i amb menys ordenació, i finalment a 3000 ps s'acaba desplegant gairebé completament i es manté així la resta de la simulació, amb diferents glucoses invertides i una lleugerament retorçada sobre sí mateixa. El comportament és molt similar a la CA26 en fase gas que partia d'una estructura desplegada; en tots dos casos s'observen replegaments diversos fins a 3000 ps en què l'estructura es desplega gairebé completament.

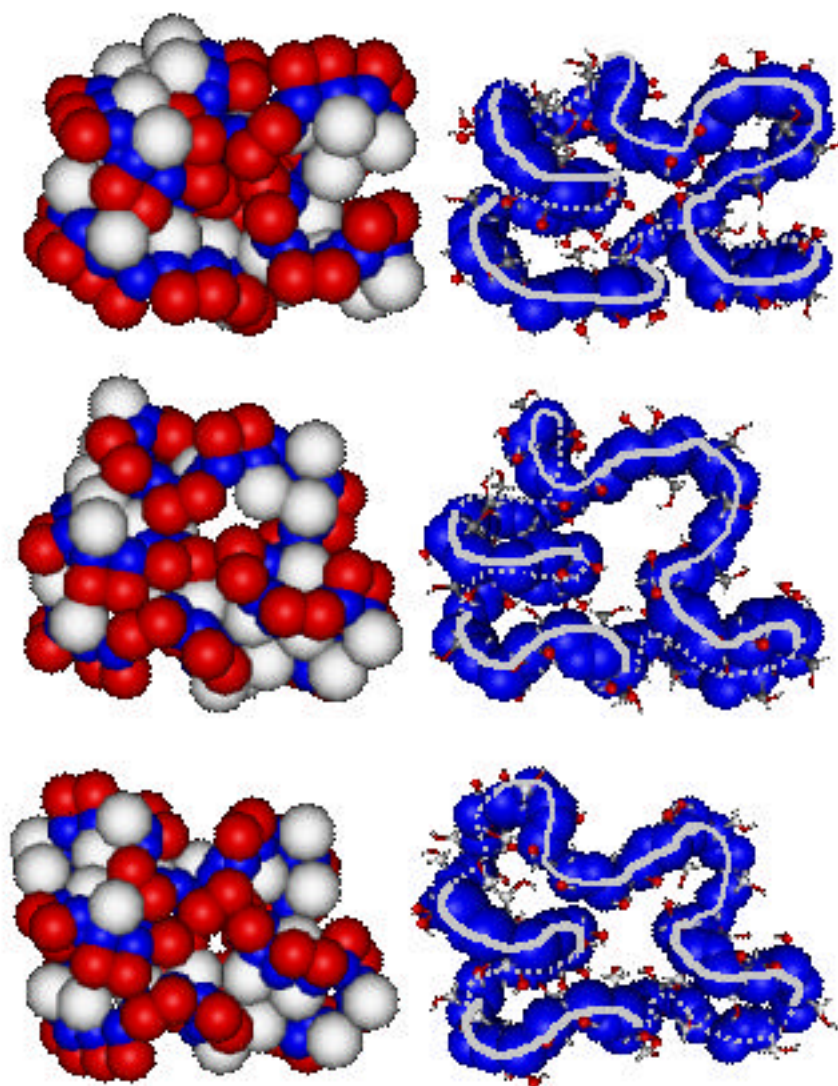
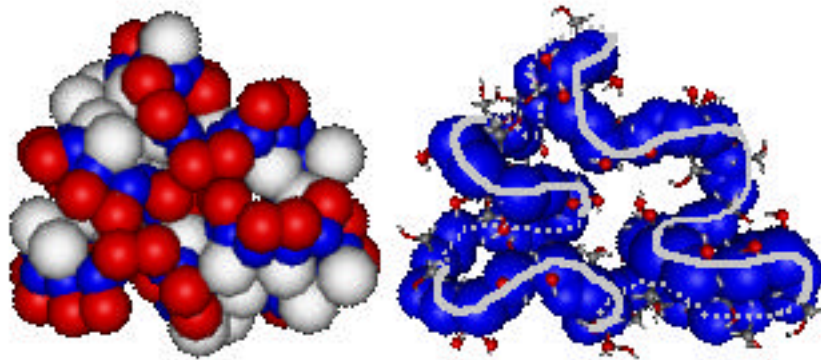


Figura 69 Estructures de CA26 (partint de l'estructura de raigs X) en solució aquosa: 500, 1000, 2000 i 3000 ps (pàgina següent).



Estructura a 3000 ps de la Figura 69.

En solució aquosa la CA26 manté una estructura similar a la cristal·lina inicial. A la banda esquerra de les figures es manté l'hèlix inicial però més distorsionada, mentre que l'hèlix de la banda dreta es fa molt menys compacta i es deforma molt més. Sembla ser que els enllaços d'hidrogen entre les glucoses enfrontades en les hèlixs són capaços d'estabilitzar lleugerament l'estructura però no fins al grau de mantenir-la en solució aquosa sense l'efecte de l'empaquetament cristal·lí.

10.10 ESTRUCTURA CA28

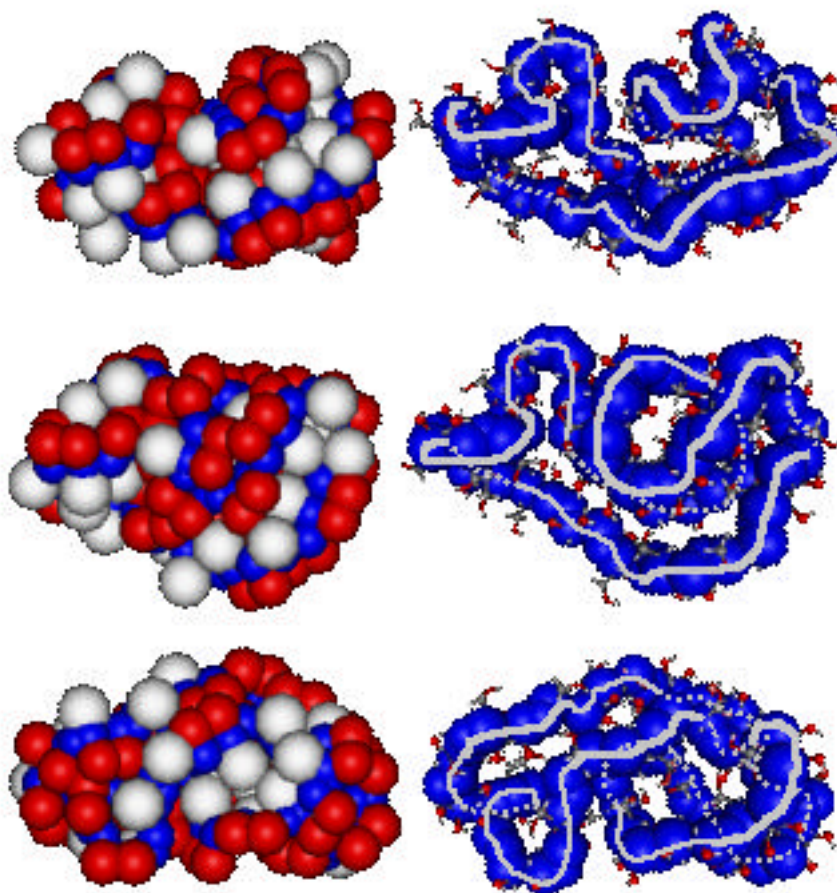


Figura 70 Estructures de CA28 en fase gas: 500, 1000 i 2000 ps (semblant a l'anterior, en una altra orientació). Les estructures continuen a la següent figura.

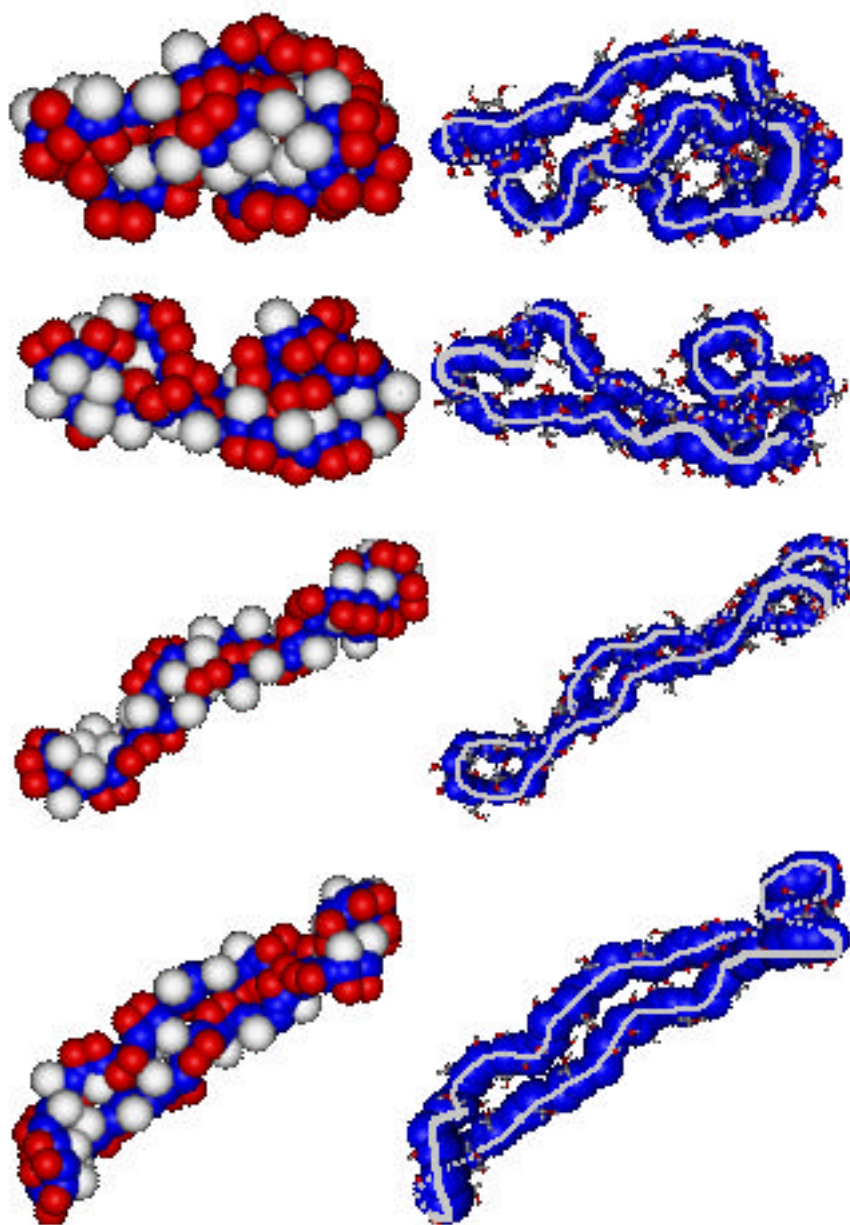


Figura 71 Continuació estructures CA28 en fase gas: 2600, 2900, 3500 i 4000 ps.

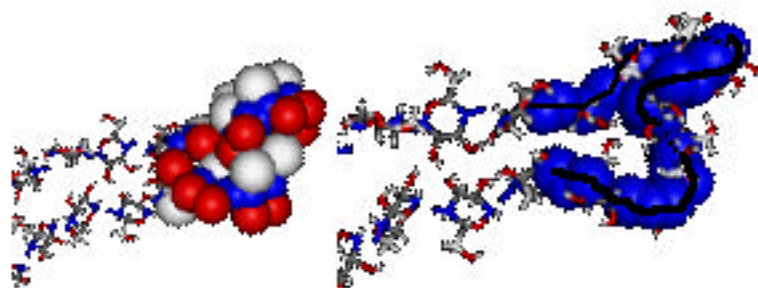


Figura 72 Detall de l'estructura a 5000 ps de CA28 en fase gas. L'estructura és igual a la de 4000 ps.

La CA28 en fase gas presenta estructures molt replegades, en moltes conformacions diferents, però a 2900 ps ja es comença a desplegar i acaba gairebé completament desplegada fins al final de la simulació. En algunes estructures podem observar com existeixen hèlixs com les presents en l'estructura cristal·lina de la CA26, però són trossos de l'estructura i no es defineixen com a motiu dominant; és un dels molts replegaments que pot adoptar. L'hèlix es pot veure clarament a la Figura 72.

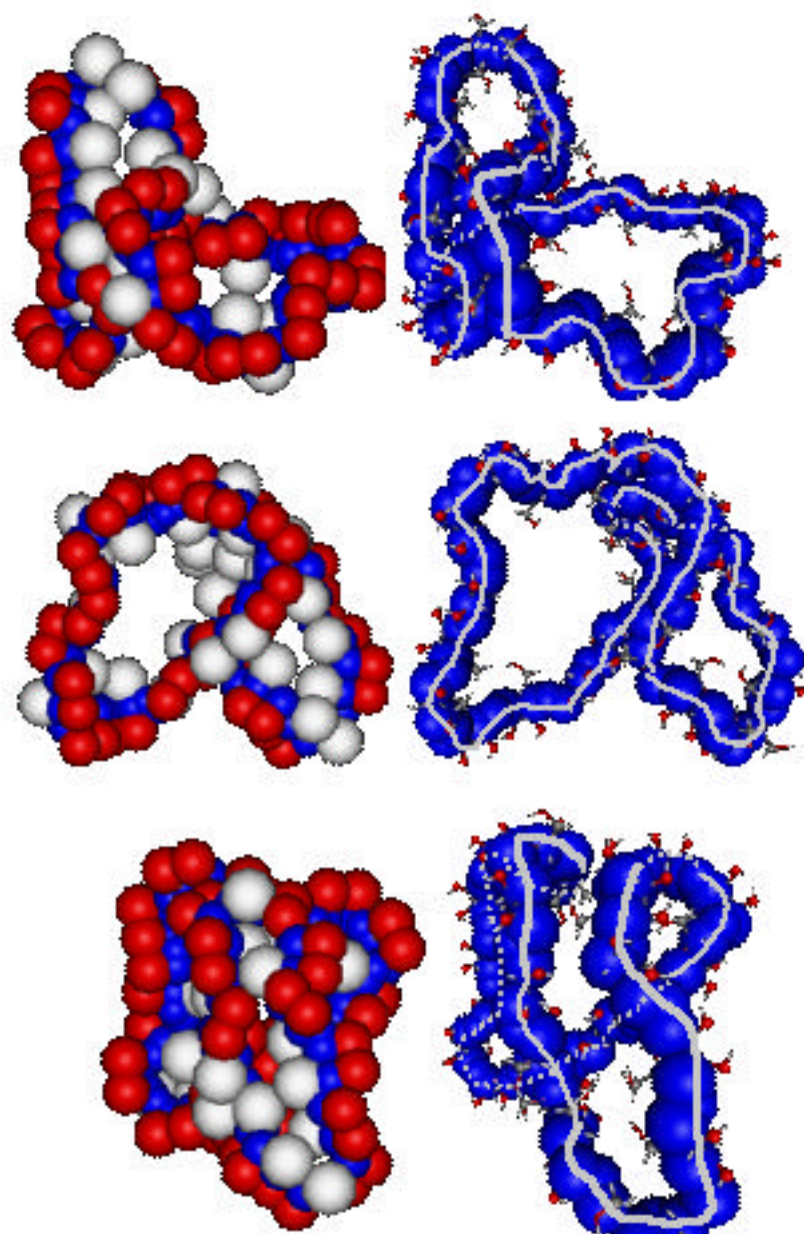


Figura 73 CA28 en solució aquosa: 500, 1000 i 1400 ps (similar a l'anterior). Continua.

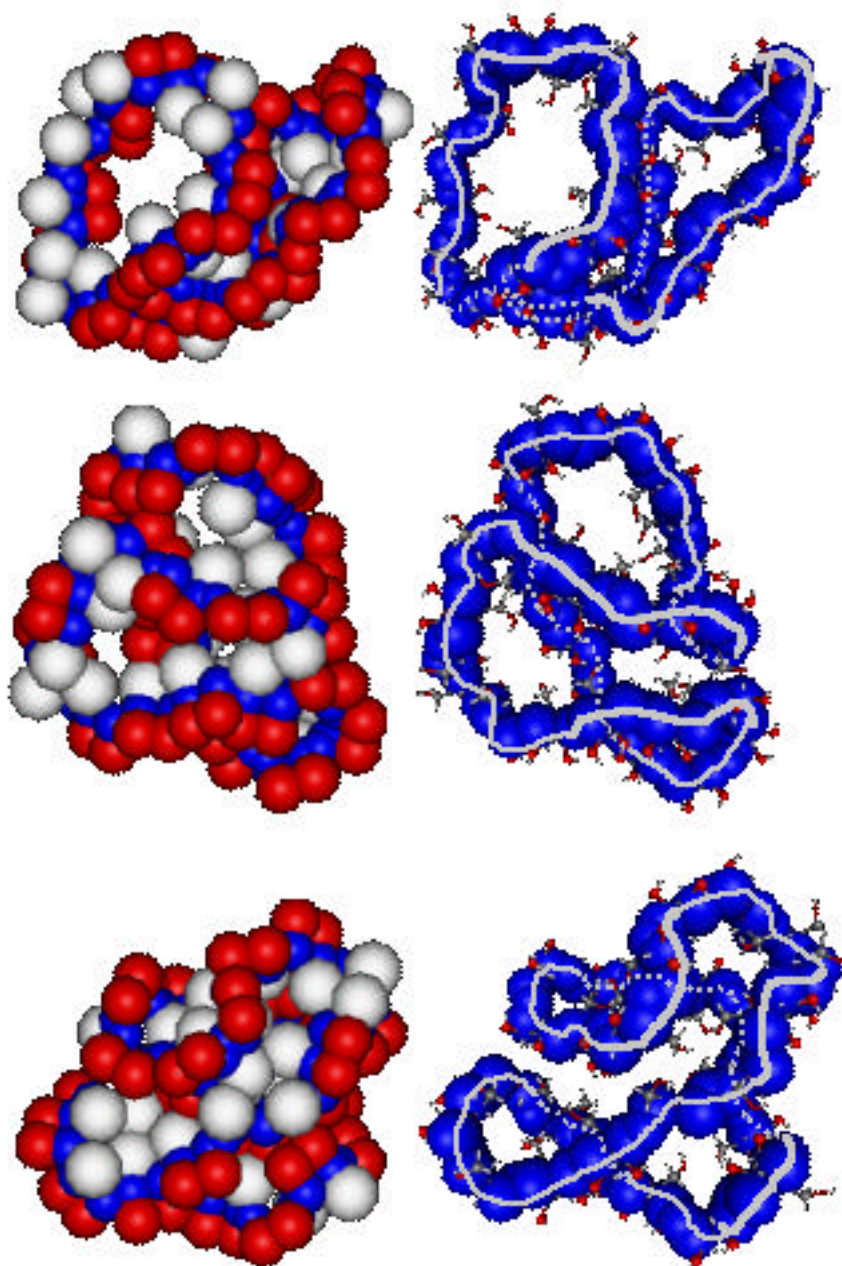


Figura 74 Continuació estructures CA28 en solució aquosa: 1600, 2500 i 3500 ps.

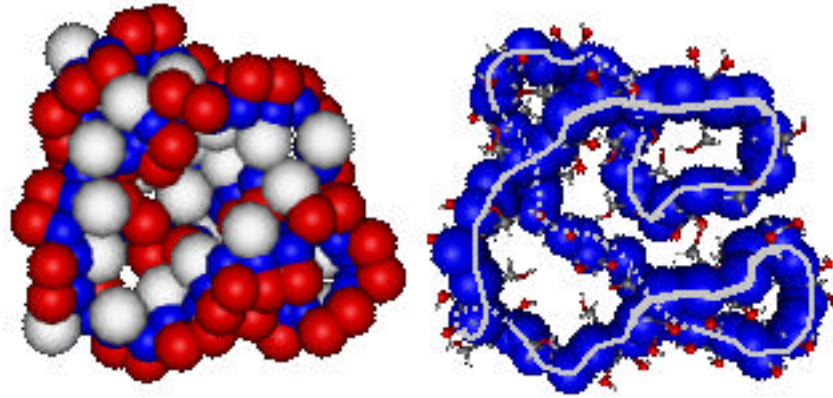


Figura 75 Estructura a 4500 ps de CA28 en solució aquosa. És similar a la de 3500 (vista d'una altra banda) i a la de 5000 (no es mostra).

La CA28 en solució aquosa comença plegant-se poc a poc en dues parts, cada una de les quals presenta una cavitat important, Figura 73. A 3500 ps les dues parts s'enfronten i cada una es retorç sobre sí mateixa, minimitzant així la cavitat. L'estructura es manté replegada així fins al final de la simulació.