



Fig. 3 Gràfic del logaritme del valor absolut de l'energia total, electrostàtica, enllaçant i de van der Waals de l'estructura objecte d'estudi, emprent: A) Una expressió de la constant dielèctrica dependent de la distància; b) Una expressió de la constant dielèctrica independent de la distància. L'energia enllaçant és desestabilitzant (positiva), i el reste dels termes són estabilitzants (negatius).

En l'actualitat estem realitzant estudis en presència explícita de molècules d'aigua. Resultats preliminars indiquen que la seqüència RGD segueix implicada en una estructura de γ turn.

BIBLIOGRAFIA

- 1) DiMarchi, R.; Brooke, G.; Galue, C.; Cracknell, V.; Doel, T. and Mowat, N. *Science* **232**, 639-641 (1986); Rouslahti, E. A. *Rev. Biochem.* **57**, 375-572 (1990).
- 2) Paul, A.V.; Schultz, A.; Pincus, S.E.; Oroszlam, S. and Wimmer, E. *Proc. Natl. Acad. Sci, U.S.A.* **84**, 7827-7831 (1987).
- 3) Rossmann, M.G.; Arnold, E.; Erickson, J.W.; Frankenberger, E.A.; Griffith, J.P.; Hecht, H.J.; Johnson, J.E.; Kamer, G.; Luo, M.; Mosser, A.G.; Rueckert, R.R.; Sherry, B. and Vriend, G. *Nature* **317**, 145-153 (1985); Hogle, J.M.; Chow, M. and Filman, D.J. *Science* **229**, 1358-1365 (1985); Luo, M.; Vriend, G.; Kamer, G.; Minor, I.; Arnold, E.; Rossmann, M.G.; Boegew, U.; Scraba, D.G.; Duke, G.M. and Palmenberg, A.C. *Science* **235**, 182-191 (1987).
- 4) Acharya, R.; Fry, E.; Stuart, D.; Fox, G.; Rowlands, D. and Brown, F. *Nature* **337**, 709-716 (1989).
- 5) Parry, H.; Fox, G.; Rowlands, D.; Brown, F.; Fry, E.; Acharya, R.; Logan, D. and Stuart, D. *Nature* **347**, 569-572 (1990).
- 6) Kirkpatrick, S.; Gelatt, C.D. Jr. and Vecchi, M.P. *Science* **220**, 671 (1983).