DAL MOLIN, J. P. O papel do código estereoquímico e das flutuações térmicas locais no processo de *folding* de proteínas. **2011. 92 f.** Tese (Doutorado em Ciências Farmacêuticas – Área de Concentração: Física Biológica) - Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2011.

ERRATA

Folha	Parágrafo/linha	Onde se lê	Leia-se
i	1/4	...é uma proposta especulativa e minimalista para investigar...	...é uma proposta minimalista para investigar...
i	1/21	...revelar comportamentos intrigantes consistentes...	...revelar comportamentos intrigantes, porém consistentes...
i	1/26	...e a cooperatividade estrutural, corroboram com a...	...e a cooperatividade estrutural, corroboram com a...
ii	1/23	...emerges as a amount that depends...	...emerges as an amount that depends...
2	1/4	...minimalistas apresentarem a peculiaridade...	...minimalistas apresentam a peculiaridade...
2	2/11	...novos fenômenos, a criticalidade auto...	...novos fenômenos, como a criticalidade auto...
2	3/9	...originalmente também proposto por Plaxco...	...originalmente proposto por Plaxco...
3	1/14	...termodinâmica clássica [18]...	...termodinâmica clássica (termodinâmica de equilíbrio) [18]...
11	1/2	...[39]), tem sido o centro de nossas...	...[39]), têm sido o centro de nossas...
13	3/3	...(nanoscópico) de um sistema heterogêneo...	...(nanoscópica) de um sistema heterogêneo...
13	4/5	...faixa estreita de temperatura. Como...	...faixa estreita de temperaturas.

14	2/10	...responder questões como essas possuem potencial...	Como... ...responder questões como essas apresenta potencial...
16	2/7	...também já citado, em meados da década de...	...também já citado no primeiro capítulo, em meados da década de...
17	2/4	...para uma proteína típica, sua estabilidade, que para uma proteína típica, é da ordem de...	...para uma proteína típica, sua estabilidade é da ordem de...
21	2/5	...tais CSA's configurações possuem padrões...	...tais configurações CSA's possuem padrões...
24	3/9	...é necessário especificar. Os integrantes de cada...	...é necessário especificar os integrantes de cada...
24	3/11	...R e C. Os membros do conjunto $R(1)$...	...R e C. Para os membros do conjunto $R(1)$...
26	1/13	..., constituem o conjunto de parâmetros do modelo...	..., constitui os parâmetros do modelo...
27	1/6	...hidrofóbico $\{h_{ij}\}$, conforme...	...hidrofóbico $\{h_{ij}\}$, conforme...
32	1/2	...mais tarde, no tópico 4.2)...	...mais adiante, no tópico 4.2)...
33	4/4	...considerados com que em contato quando...	...considerados em contato quando...
37	1/6	...é praticamente o mesmo que para...	...é praticamente a mesma que para...
38	1/6	...intervalo $1.2 \leq T \leq 1.5$ apresentam o mesmo...	...intervalo $1.2 \leq T \leq 1.5$ apresentam o mesmo...
40	2/2	Para todos os casos, foram considerados...	Para todos os casos adotamos...
41	Figura 3-A, caixa de texto da figura superior	Ajuste com uma única exponencial.	Ajuste com duas exponenciais.
41	Figura 3-A, valor $\langle q \rangle$ na figura inferior	$\langle q \rangle = 1.16$	Não se pode definir o valor médio de uma grandeza quando está dada por uma distribuição bimodal.
44	1/15	No, caso intermediário, com...	No caso intermediário, com...

45	3/3	...ou seja, $q^* \approx \langle q \rangle$. Realmente,...	...ou seja, $q^* \approx \langle q \rangle$. Realmente,...
46	3/4	O curioso é OC é um parâmetro global, pois OC essencialmente é...	O curioso é OC ser considerado um parâmetro global, pois ele essencialmente é...
50	Figura 5, legenda	... $T=1$ (unidades de <i>energia/k</i>);...	... $T=1$ (unidades de <i>energia/K</i>);...
50	2/4	...consideradas (sem nenhum...	...consideradas (sem nenhum...
53	2/6	...referidas tabelas. E quanto a...	...referidas Tabelas. E quanto a...
57	Referência [4]	Dill KA, Ozkan SB, Weikl TR, Chodera JD, Voelz VA. The protein folding problem: when will it be solved? Current Opinion in Structural Biology. 2007; 17:342–46.	Dill KA, Ozkan SB, Weikl TR, Chodera JD, Voelz VA. The protein folding problem: when will it be solved? Current Opinion in Structural Biology. 2007;17:342–46.
58	Referência [13]	C. D. Snow; E. J. Sorin; Y. M. Rhee, V. S. Pande, Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct., 2005;34:43–69	Snow CD, Sorin EJ, Rhee YM, Pande VS. How well can simulation predict kinetics and thermodynamics of protein folding? Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct. 2005;34:43–69.
58	Referência [14]	...Bak P, Paczuski M. Complexity, contingency, and criticality. Proc Natl Acad Sci USA. 92(15):6689–96.	...Bak P, Paczuski M. Complexity, contingency, and criticality. Proc Natl Acad Sci USA. 1995;92(15):6689–96.
58	Referência [15]	Dill KA, Ozkan SB, Shell MS, Weikl TR. The protein folding problem. Annu Ver Biophys. 2008;(37): 289-316.	Dill KA, Ozkan SB, Shell MS, Weikl TR. The protein folding problem. Annu Ver Biophys. 2008;(37):289–316.
58	Referência [22]	Rose GD. Protein folding and the Paracelsus challenge. Nature Structural Biology. 1997;4(7): 512–4.	Rose GD. Protein folding and the Paracelsus challenge. Nature Structural Biology. 1997;4(7):512–4.
58	Referência [25]	Kamerzell TJ, Middaugh CR. The complex inter-	Kamerzell TJ, Middaugh CR. The

		relationships between protein flexibility and stability. Journal of Pharmaceutical Sciences. 2008; 97(9):3494-517.	complex inter-relationships between protein flexibility and stability. Journal of Pharmaceutical Sciences. 2008;97(9):3494–517.
59	Referência [36]	Lattman EE, Rose G. Protein folding - what's the question? Proc Natl Acad Sci.1993;90: 439-441.	Lattman EE, Rose G. Protein folding - what's the question? Proc Natl Acad Sci.1993;90:439–441.
60	Referência [48]	Fox MA, Whitesell JK. Organic Chemistry, Jones & Bartlett Publishers; 3rd 2004.	Fox MA, Whitesell JK. Organic Chemistry, Jones & Bartlett Publishers; 3rd 2004.
61	Referência [56]	Nölting B. Protein Folding Kinetics - Biophysical Methods. Springer. 2nd edition.Capítulo 11. 2006.	Nölting B. Protein Folding Kinetics - Biophysical Methods. Springer. 2nd edition. Capítulo 11. 2006.
61	Referência [58]	Vendruscolo M, Domany E. Pairwise contact potentials are unsuitable for protein folding. J Chem Phys. 1998;109:11101– 8.	Vendruscolo M, Domany E. Pairwise contact potentials are unsuitable for protein folding. J Chem Phys. 1998;109:11101–8.
62	Referência [63]	Head-Gordon T, Stillinger FH, Wright MH, Gay DM. Poly(L-alanine) as a universal reference material for understanding protein energies and structures. Proc Natl Acad Sci.1992; 89: 11513–7.	Head-Gordon T, Stillinger FH, Wright MH, Gay DM. Poly(L-alanine) as a universal reference material for understanding protein energies and structures. Proc Natl Acad Sci. 1992;89:11513–7.
62	Referência [73]	Rocha LFO, Silva IR, Caliri A. Distinct conformational properties determined by implicit and explicit representation of protein–solvent interactions. An analytical and computer simulation study. Physica A. 2009;338: 4097–104.	Rocha LFO, Silva IR, Caliri A. Distinct conformational properties determined by implicit and explicit representation of protein–solvent interactions. An analytical and computer simulation study. Physica A. 2009;338:4097–104.

63	Referência [77]	Cooper A. Thermodynamic fluctuations in protein molecules. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1976;73(8): 2740–1.	Cooper A. Thermodynamic fluctuations in protein molecules. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1976;73(8):2740–1.
63	Referência [79]	Hoi Sung Chung, John M. Louis, William A. Eaton, Experimental determination of upper bound for transition path times in protein folding from single-molecule photon-byphoton trajectories. Proc. Natl. Acad. Sci., v. 106(29), pp. 11837–11844, (2009).	Chung HS, Louis JM, Eaton WA. Experimental determination of upper bound for transition path times in protein folding from single-molecule photon-byphoton trajectories. Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2009;106(29):11837–11844.
63	Referência [80]	Beck C. Non-additivity of Tsallis entropies and fluctuations of temperature. Europhys Lett. 2002;57(3):329– 33...	Beck C. Non-additivity of Tsallis entropies and fluctuations of temperature. Europhys Lett. 2002;57(3):329–33...
64	Referência [91]	Dissertação de mestrado de João Paulo Dal Molin: Correções de cadeia finita para a teoria elástica clássica (2006), hospedada em: http://www.dominiopublico.gov.br/pesquisa/PesquisaObraForm.do?select_action=&co_autor=9031	Dissertação de mestrado de João Paulo Dal Molin. Correções de cadeia finita para a teoria elástica clássica (2006). Hospedada em: http://www.dominiopublico.gov.br/pesquisa/PesquisaObraForm.do?select_action=&co_autor=9031
64	Referência [93]	Kaya H, Chan HS. Contact order dependent protein folding rates: kinetic consequences of a cooperative interplay between favorable nonlocal interactions and local conformational preferences. Proteins: Struct Funct Genet. 2003;52:524–33, (2003).	Kaya H, Chan HS. Contact order dependent protein folding rates: kinetic consequences of a cooperative interplay between favorable nonlocal interactions and local conformational preferences. Proteins: Struct Funct Genet. 2003;52:524–33.
65	Referência [95]	Thirumalai D, O'Brien EP, Morrison G, Hyeon C.	Thirumalai D, O'Brien EP, Morrison

		Theoretical Perspectives on Protein Folding. Annu Rev Biophys. 2010; 39: 159–83.	G, Hyeon C. Theoretical Perspectives on Protein Folding. Annu Rev Biophys. 2010;39:159–83.
65	Referência [99]	Tsallis C. Capítulo do livro Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications. Gell-Mann M, Tsallis C (Editores). Oxford University Press. Oxford. 2004 .	Tsallis C. Nonextensive statistical mechanics: construction and physical interpretation. Capítulo do livro Nonextensive Entropy – Interdisciplinary Applications. Gell-Mann M, Tsallis C (Editores). Oxford University Press. Oxford. 2004.
65	Referência [103]	E. K. Lenzi, C. Anteneodo, L. Borland, Escape time in anomalous diffusive media. Phys. Rev. E 63, 051109 (2001).	Lenzi EK, Anteneodo C, Borland L. Escape time in anomalous diffusive media. Phys. Rev. E. 2001;63:051109.
67	3/6	...conferir maleabilidade ao glóbulo protéico [83].	...conferir maleabilidade ao glóbulo protéico [84].
69	1/7	...do processo de <i>folding</i> isto foi realizado mediante milhares...	...do processo de <i>folding</i> , isto foi realizado mediante milhares...
70	2/14	...anômalos como indicada por Klafter e Sokolov...	...anômalos como indicado por Klafter e Sokolov...
70	2/16	...feita por Plastino e colaboradores...	...feita por Plastino, Plastino e colaboradores...
71	1/3-6	...dos subsistemas isolados, este caso corresponde à sub-extensividade. Por outro lado há sistemas nas quais $q < 1$, chamada de super-extensividade, pois a entropia do sistema composto é maior do que a dos subsistemas isolados.	...dos subsistemas quando isolados, este caso corresponde à sub-extensividade. Por outro lado há sistemas nos quais $q < 1$, situação esta chamada de super-extensividade, pois a entropia do sistema composto é maior do que a dos subsistemas quando isolados.
75	1/2	...obtido como ajuste de duas funções...	...obtido com o ajuste de duas funções...

77	1/5	...os resíduos que realizam os contatos nativos.	...os resíduos que realizam os contatos nativos. O valor ótimo do índice entrópico q que minimiza τ para o alvo 866 ($q = 1.10$) é usado como referência para as outras quatro estruturas apresentadas aqui. Segue o alvo 1128.
78	Figura D-3	Antes de apresentar a Figura D-3, cabe a seguinte frase da coluna ao lado.	Segue o alvo 36335.