

4. CARACTERIZAÇÃO TOPOLÓGICA DAS 51.704 CONFIGURAÇÕES CSA

As conformações protéicas mostram regularidades que são descritas por meio de diferentes níveis de padrões estruturais. Algumas delas são mais facilmente “desenháveis” que outras, e sua origem topológica é incerta, pois não há uma aparente dependência entre tipo de estrutura e estabilidade termodinâmica, por exemplo. As explicações concentram-se na cinética do enovelamento da proteína, por meio da qual estruturas intermediárias seriam usadas pelo baixo custo entrópico envolvido, e pela estabilidade apresentada contra eventuais mutações da seqüência⁶⁸. A topologia de uma estrutura protéica pode ser vista como o resultado do arranjo das estruturas secundárias em praticamente todas as proteínas. Por causa de suas regularidades e possíveis origens comuns, todas as informações disponíveis sobre estrutura de macromoléculas biológicas estão organizadas no *Protein Data Bank* (PDB, www.pdb.org), um repositório público para processamento e distribuição de estruturas 3-D de proteínas e ácidos nucléicos. O Gráfico 4.1 mostra a quantidade de estruturas depositadas anualmente no PDB e o total de estruturas conhecidas até 31 de Maio de 2005. A classificação utilizada pelo PDB engloba a evolução hierárquica e as relações estruturais⁶⁹:

- Família – Grupos de seqüências com clara origem evolucionária, i.e., proteínas com grande identidade de resíduos (30% ou maior) ou com pequena identidade na seqüência, mas cujas funções e estrutura são muito similares.
- Super família – Famílias cujas proteínas possuem baixa identidade na seqüência, mas cuja estrutura e características funcionais sugerem a possibilidade de uma evolução comum.

- *Fold* – Superfamílias e famílias que têm suas estruturas secundárias na mesma organização e com as mesmas conexões topológicas, são definidas como tendo *fold* comum⁶⁹.

- Classe – *Folds* distintos são agrupadas em classes baseadas na composição da estrutura secundária em: (i) todas alfa – proteínas essencialmente formadas por alfa hélices; (ii) todas beta – essencialmente formadas por folhas beta; (iii) alfa/beta – mistura de alfa hélices e folhas beta; (iv) alfa + beta – proteínas nas quais as alfa hélices e as folhas beta são totalmente separadas; (v) multi domínio – proteínas com duas ou mais *folds* pertencentes a diferentes classes. Outras classes têm sido desenvolvidas para casos especiais, como peptídeos, pequenas proteínas e proteínas de membrana.

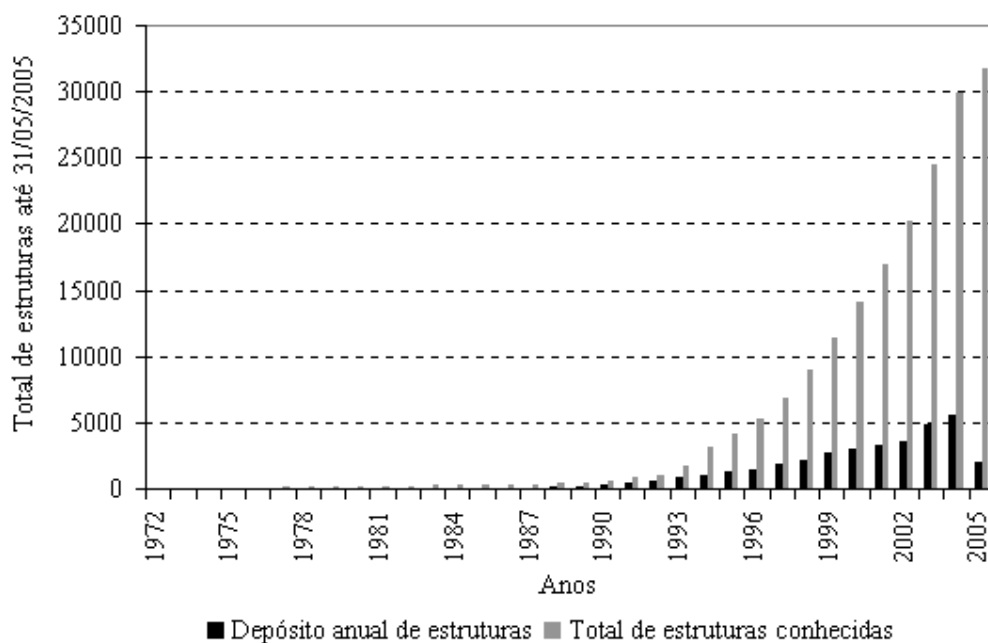


Gráfico 4.1. Total depositado no ano e total acumulado de estruturas conhecidas de moléculas biológicas no PDB até 31/05/2005.

A seguir são descritos atributos geométricos das configurações CSA, os quais serão usados para classificá-las topologicamente.

4.1. Elementos topológicos básicos

Como visto no Capítulo 3, item 3.1, os elementos E (*End*), T (*Turn*) e S (*Straight*) são os elementos topológicos básicos atribuídos a cada um dos 27 monômeros de uma dada configuração nativa. Dessa forma, cada configuração nativa possui dois elementos E e certa quantidade n_T e n_S de unidades na forma T e S respectivamente, satisfazendo a relação:

$$n_T + n_S = 25. \quad (4.1)$$

O Gráfico 4.2 mostra a distribuição do número $N(n_T)$ de configurações com n_T unidades do tipo T ; o número $N(n_S)$ está relacionado com $N(n_T)$ conforme a expressão: $N(n_S) = N(25 - n_T)$. A maioria das configurações tem n_T aproximadamente quatro vezes o número n_S . O valor máximo de unidades do tipo S no conjunto das 51.704 configurações possíveis é $n_S^{\max} = 11$ e, por sua vez, $n_S^{\min} = 2$, o que implica em $n_T^{\max} = 23$ e $n_T^{\min} = 14$, pela Equação 4.1. Apenas uma pequena quantidade de configurações apresenta estes valores extremos, como mostra o Gráfico 4.2.

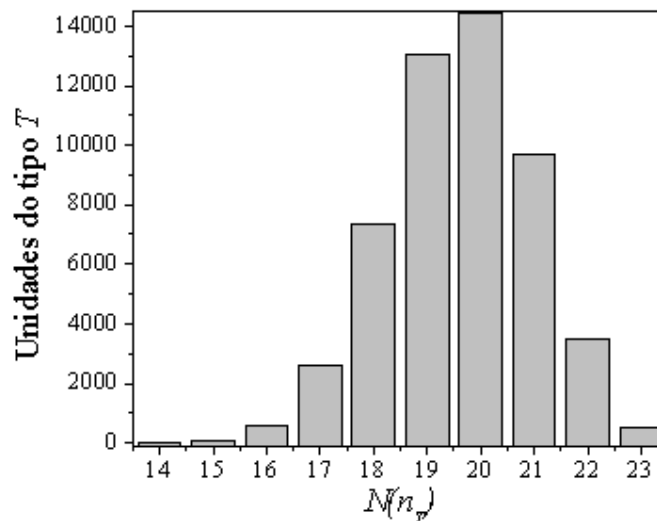


Gráfico 4.2. Distribuição do número $N(n_T)$ de configurações com n_T unidades do tipo T .

4.2. Tipos de finais da cadeia

Para cada configuração CSA, os finais da cadeia podem estar situados no vértice (V) ou no centro da face (F) do cubo $3 \times 3 \times 3$ ⁴⁸. No presente caso (cadeia de 27 monômeros), existem apenas três maneiras de combinar os finais da cadeia, denominados vértice-vértice (VV), vértice-face (VF) e face-face (FF). Os V e F podem ser combinados de diferentes maneiras adicionais, produzindo os seguintes casos: (i) final do tipo VV , que possui três diferentes possibilidades: $VV1$ para os finais se dispendo através da diagonal do cubo, com 3209 configurações; $VV2$ para os finais através da diagonal da face do cubo, com 9.093 configurações; e, $VV3$ para os finais através da aresta do cubo, com 7.791 configurações; (ii) final do tipo VF , que possui duas diferentes alternativas: $VF1$ para os finais dispostos em faces adjacentes do cubo, com 10.940 configurações; e, $VF2$ para os finais em faces opostas, com 14.354 configurações; (iii) final do tipo FF , que possui dois diferentes arranjos: $FF1$ para os finais de cadeia através de faces paralelas, com 1.400 configurações; e, $FF2$ para os finais através de faces perpendiculares, com 4.917 configurações (ver resumo destas quantidades na Tabela 4.1).

Final de cadeia	Total de configurações	Distâncias <i>end-to-end</i>	Raio de Giração
$VV1$	3209	3,4641	1,4411
$VV2$	9093	2,8284	
$VV3$	7791	2,0000	
$VF1$	10940	1,4142	
$VF2$	14354	2,4494	
$FF1$	1400	2,0000	
$FF2$	4917	1,4142	

Tabela 4.1. Quantidade de estruturas para cada tipo de final de cadeia possível, o valor das distâncias *end-to-end* e o valor do raio de giração.

A Figura 4.1 (a – g) ilustra os sete casos de finais de cadeia, vistos acima. Estes casos somam sete possibilidades para os extremos da cadeia, que correspondem a cinco distintas distâncias *end-to-end* ($E_{VV1} = 3,4641$, $E_{VV2} = 2,8284$, $E_{VV3} = E_{FF1} = 2$, $E_{VF1} = E_{FF2} = 1,4142$, $E_{VF2} = 2,4494$) para a cadeia com mesmo tamanho $L = 27$ e mesmo raio de giração $R_G = 1,4411$.

Para cadeias com 27 monômeros o tipo de disposição dos finais de cadeia parece ter pouca ou nenhuma influência na cinética do enovelamento, porém, para cadeias maiores nas quais outros arranjos poderão ocorrer, algum efeito certamente emergirá.

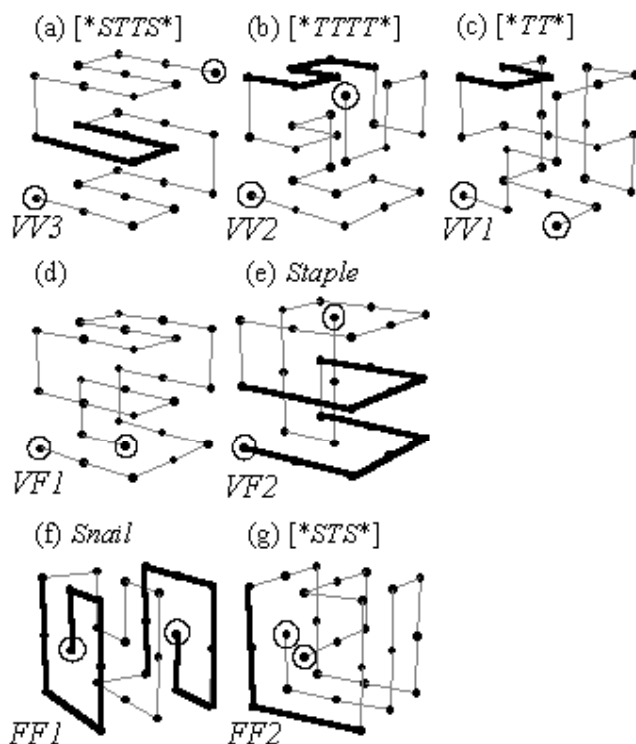


Figura 4.1. Os círculos abertos mostram os sete casos dos finais da cadeia. Os padrões estruturais [*STTS*], [*TTTT*], [*TT*] [*STS*], *Snail* e *Staple* estão enfatizados.

4.3. Padrões estruturais

Algumas combinações sequenciais de unidades *S* e *T* são notáveis porque se assemelham a estruturas secundárias de proteínas reais, como as seqüências [*STTS*] (Figura 4.1-a), [*TTTT*] (Figura 4.1-b) e [*TT*] (Figura 4.1-c). O asterisco (*) significa livre escolha para as outras duas unidades da seqüência, isto é, combinações de *E* e *T* para [*STTS*] e [*TT*], e combinações de *E*, *S* e *T* para o padrão [*TTTT*]. Os colchetes indicam que todas as unidades, incluindo aquelas referentes aos asteriscos, estão no mesmo plano. O Gráfico 4.3 mostra a distribuição de padrões [*STTS*] em função dos valores da ordem de contato relativo das estruturas (ver Capítulo 3 Equação 3.4 para a definição de ordem de contato relativo). É possível observar que para determinados valores da ordem de contato relativo, há um máximo possível de

ocorrência de padrões [*STTS*]. Como veremos adiante, a condição de coplanaridade parece aumentar a chance para o enovelamento cooperativo; de outra forma, a mesma seqüência determina muitos padrões distintos sem o mesmo efeito cooperativo no mecanismo do enovelamento. Os padrões [*TTTT*] e [*TT*] são casos especiais da seqüência geral de T_s , representada aqui por $\{T...T\}$. Tal seqüência inclui até o máximo de 23 T_s e é um formador potencial de estruturas tipo secundária. O Gráfico 4.4 mostra a distribuição da seqüência geral de T_s , $\{T...T\}$, para as 51.704 configurações CSA.

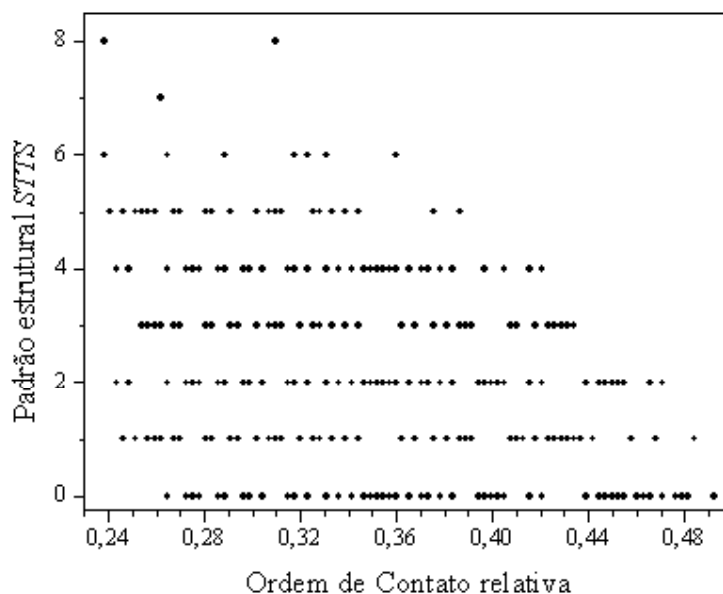


Gráfico 4.3. Distribuição do padrão [*STTS*] em função dos valores da ordem de contato relativo das estruturas.

Estes e outros padrões podem ser vistos como componentes estruturais elementares. Eles ocorrem em diferentes quantidades e disposições em cada estrutura particular do conjunto de 51.704. Claramente, a quantidade de determinado padrão em particular limita a ocorrência de outros tipos de padrões na mesma estrutura. Uma estrutura com alto conteúdo de padrão [*STTS*] (que pode ser até oito, Gráfico 4.3) não deixa espaço para padrões do tipo [*TTTT*] ou [*TT*]. Combinações destes padrões podem corresponder a estruturas secundárias de proteínas reais e constituem importante fator cinético que favorece o enovelamento rápido. Por outro lado, a presença de alguns padrões, em particular, na estrutura, pode tornar mais lento seu processo de enovelamento. Algumas destas estruturas assemelham-se a pseudo-nós, como

encontrado em proteínas reais^{70, 71}, como ilustrado na Figura 4.2. No presente modelo, eles são constituídos por longos *loops* planares assumindo, por exemplo, formas do tipo *Snail* e *Staple* (Figuras 4.1-f e 4.1-e, respectivamente, página 41).

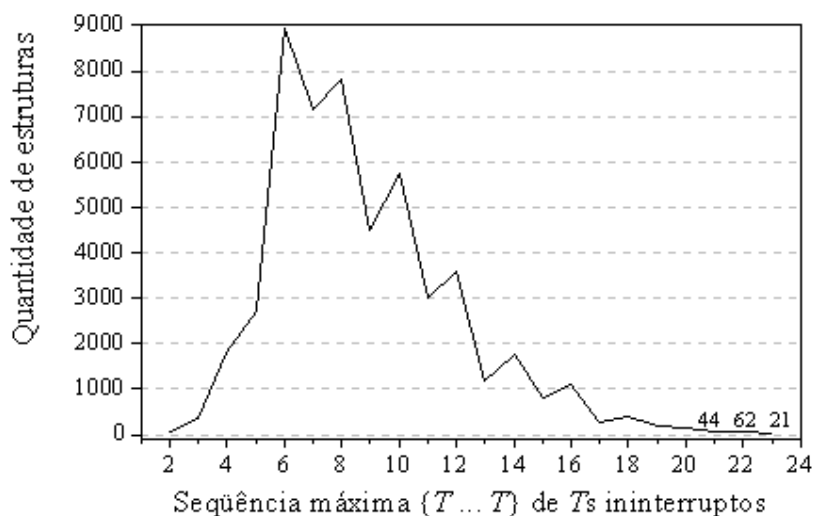


Gráfico 4.4. Distribuição da seqüência $\{T...T\}$ para as 51704 configurações CSA.



Figura 4.2. Estruturas tridimensionais das proteínas reais 1DMX e 1ZNC, mostrando a ocorrência de pseudo-nós.

Aproximadamente 24% de todas as 51.704 estruturas apresentam ao menos um dos padrões do tipo *Snail* ou *Staple* (ver Tabela 4.2, resumo), que podem aparecer combinados em diferentes quantidades em cada configuração, satisfazendo $n_{snail} + n_{Staple} \leq 3$, onde $n_{snail} \leq 3$ e $n_{Staple} \leq 3$, são as quantidades de padrões *Snail* e *Staple* em uma estrutura (Gráfico 4.5). O número de estruturas com padrões *Snail* e *Staple* juntos é muito pequeno: existem 470 estruturas com um *Staple* e um *Snail*,

somente 14 com dois *Staple* e um *Snail* e somente seis com um *Staple* e dois *Snail* (ver Tabela 4.2).

Combinação		Total de configurações	Resumo		
Snail	Staple		Padrão	Total de configurações	
0	0	39345	Padrão	Total de configurações	
0	1	7684			
0	2	188			
0	3	16	Snail	0	47233
1	0	3780		1	8168
1	1	470		2	194
1	2	6		3	16
2	0	199	Staple	0	43326
2	1	14		1	4256
3	0	2		2	213
				3	2

Tabela 4.2. Quantidade de estruturas com combinações dos padrões *Snail* e *Staple* e total de configurações resumidas por quantidade de cada padrão.

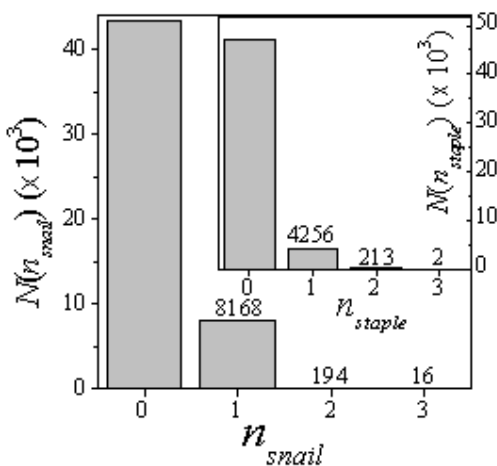


Gráfico 4.5. Distribuição do número $N(n_{snail})$ das 51.704 configurações tendo $n_{snail} = 0, 1, 2$ ou 3 padrões *Snail* na mesma estrutura. O *inset* mostra o mesmo para configurações com padrões *Staple*.

4.4. Energia da cadeia na configuração CSA

A energia potencial da cadeia em cada estrutura CSA, como previamente descrita no Capítulo 3 item 3.1, depende exclusivamente dos níveis hidrofóbicos dos diferentes elementos do alfabeto utilizado. O Gráfico 4.6 mostra a distribuição dos

valores da energia em função dos valores da ordem de contato relativo para as 51.704 configurações CSA. Neste gráfico é possível observar três intervalos de valores da energia, para os mesmos valores da ordem de contato relativo, concentrando-se ao redor de -59 , -63 e -66 unidades arbitrárias de kT . A energia configuracional está diretamente relacionada com a estabilidade termodinâmica da mesma, porém nota-se que no presente modelo, a diferença entre os extremos das energias possíveis não é muito grande, ficando ao redor de 14%. Isto, até certo ponto, está em acordo com o que se observa experimentalmente, pelo fato de não se poder discriminar tipos de estruturas em função de sua maior ou menor estabilidade termodinâmica⁷².

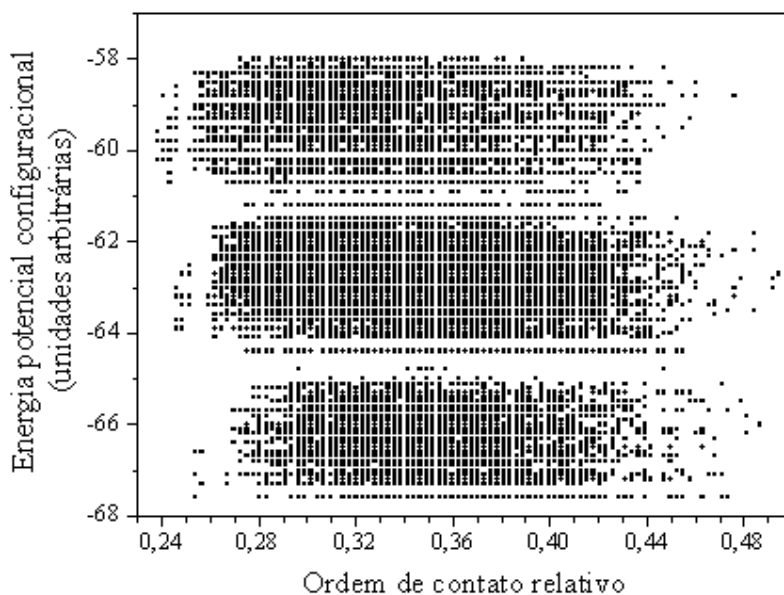


Gráfico 4.6. Distribuição dos valores da energia em função da ordem de contato relativo.

4.5. Tabela Resumo

Todos os padrões estruturais das 51.704 configurações foram dispostos numa tabela resumo (CD *rom*). A Tabela 4.3 e a Tabela 4.3-a são complementares, unindo-se pela coluna da direita/esquerda da Tabela 4.3/4.3-a. A começar pela coluna da esquerda, na Tabela 4.3, aparece a numeração utilizada neste trabalho para as 52 estruturas inicialmente analisadas. A coluna “Número” refere-se à identificação numérica geral das 51.704 estruturas existentes. Coluna “O.C.” é o valor da ordem de contato relativo da estrutura. As colunas “S” e “T”, mostram as quantidades destes elementos

topológicos básicos existentes na estrutura em questão. A coluna $\{T...T\}$ mostra a quantidade máxima de T s ininterruptos na estrutura. A coluna $[*STS*]$ mostra outro padrão, como ilustrado na Figura 4.1-g. Note que para o perfil estrutural $[*STTS*]$ também é mostrado o número de ocorrências para o caso não planar ($(*STTS*)$ N.P). Na seqüência a quantificação dos padrões *Staple* e *Snail* é apresentada. A coluna seguinte mostra o padrão denominado *Big O*, composto pela seqüência $[TSTSTSTT]$ ou $[TTSTSTST]$). Em seguida vem a quantidade dos padrões configuracionais $[*TT*]$ e $[*TTTT*]$. Na Tabela 4.3-a, da esquerda para a direita, aparece inicialmente dois outros padrões, $[*TTTTSTS*]$ e $[*TTTTST*]$. Em seguida vem o tipo de fim de cadeia. A degenerescência estrutural (rotulada na Tabela 4.3-a como Degenerescência), também foi determinada. O seu valor corresponde ao número de diferentes estruturas encontradas durante a simulação que possuem uma mesma seqüência de aminoácidos. O domínio foi considerado como sendo dado pelo número de seqüências com nove monômeros co-planares, separados do resto da estrutura por uma única ligação. O cálculo da energia de cada estrutura foi feito conforme Equação 3.3.

Na seqüência aparece a quantidade de monômeros que compõem a diagonal secundária (Diag-S) e a diagonal primária (Diag-P) do mapa de contatos de cada configuração (Figura 4.3). A diagonal secundária corresponde às folhas beta e a diagonal primária às alfa hélices, na proteína real. Para a contagem dos monômeros em ambas diagonais, foram considerados aqueles dispostos, no mínimo, em pares e sem nenhum monômero de espaço entre eles. Na Figura 4.3 é possível observar que, na parte superior esquerda do mapa de contato da estrutura de número 10.448, existem 11 monômeros constituindo a diagonal secundária (linhas pontilhadas) e na parte inferior direita, 10 monômeros compondo a diagonal primária (linhas pontilhadas). Por fim é mostrado o cálculo de $\log k_f$ considerando o modelo estéreo-químico e também o cálculo somente com o potencial hidrofóbico ($\log k_f$ S.R.).

Muitos dos dados acumulados na Tabela 4.3, não puderam ainda ser tratados completamente. Há, portanto, muito espaço para se analisar todas as implicações dos diversos atributos topológicos das estruturas CSA, em termos energéticos (termodinâmicos) e cinéticos. Como será visto no próximo Capítulo, este trabalho

ocupou-se principalmente das implicações dos fatores topológicos na cinética do enovelamento.

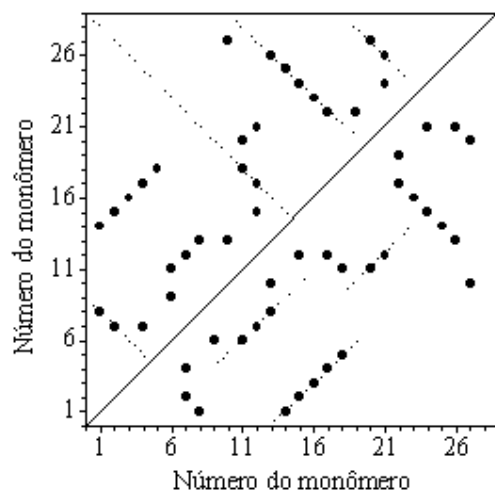


Figura 4.3. Mapa de contato da estrutura número 10.448 mostrando na parte superior esquerda 11 monômeros compondo a diagonal secundária (pontos incluídos pelas linhas pontilhadas) e na parte inferior direita, 10 monômeros compondo a diagonal primária (pontos sequenciais incluídos pelas linhas pontilhadas).

Número	<i>O.C.</i>	<i>S</i>	<i>T</i>	$\{T...T\}$	$[*STS*]$	$[*STTS*]$	$(*STTS*)$ N.P.	<i>Staple</i>	<i>Snail</i>	<i>Big O</i>	$[*TT*]$	$[*TTTT*]$
1	866	0,2381	9	16	2	0	8	0	0	0	0	0
2	98	0,2381	9	16	2	0	7	1	0	0	0	0
3	93	0,2381	9	16	2	0	6	2	0	0	0	0
4	34494	0,2434	7	18	4	2	4	0	0	0	2	2
5	791	0,2434	7	18	6	2	3	0	0	0	2	2
6	1	0,2434	7	18	6	2	2	1	0	0	2	2
7	868	0,2460	9	16	2	2	6	0	0	1	0	0
8	10448	0,2460	6	19	10	3	0	0	0	0	3	3
9	184	0,2593	7	18	4	0	4	1	0	0	2	1
10	1760	0,2593	8	17	6	2	3	0	0	0	0	0
11	102	0,2593	7	18	7	1	3	1	0	0	2	1
12	1128	0,2619	9	16	2	0	8	0	0	0	0	0
13	311	0,2619	9	16	2	0	7	1	0	0	0	0
14	11544	0,2619	3	22	16	1	0	0	0	0	8	4
15	6995	0,2619	4	21	10	1	0	0	0	0	5	3
16	636	0,2725	8	17	3	0	6	0	0	0	0	0
17	9983	0,2725	3	22	15	1	0	0	0	0	7	2
18	1110	0,3042	7	18	2	1	4	0	0	0	2	1
19	24586	0,3042	4	21	10	1	0	0	0	0	5	1
20	1136	0,3095	9	16	2	0	8	0	0	0	0	0
21	319	0,3095	9	16	2	0	7	1	0	0	0	0
22	9145	0,3095	3	22	11	0	0	0	0	0	6	2
23	34014	0,3148	7	18	6	2	3	0	0	0	2	2
24	18224	0,3175	8	17	4	1	6	0	0	0	1	0
25	14636	0,3175	6	19	6	2	0	0	1	0	3	1
26	26795	0,3280	6	19	6	0	4	0	0	0	3	1
27	2681	0,3307	8	17	3	0	6	0	0	0	0	0
28	4038	0,3307	6	19	7	1	1	1	0	0	3	0
29	15728	0,3307	6	19	12	2	0	1	0	0	3	0
30	43065	0,3307	5	20	10	3	0	0	0	1	3	1
31	41035	0,3333	5	20	7	2	0	0	0	0	3	1
32	35364	0,3333	7	18	4	0	6	0	0	0	1	1
33	30884	0,3333	7	18	6	4	2	0	1	0	2	0
34	42442	0,3492	6	19	9	2	2	0	0	0	3	0
35	16253	0,3677	8	17	5	2	4	0	0	0	1	0
36	43010	0,3677	5	20	6	1	0	1	0	0	2	1
37	41826	0,4048	6	19	6	1	4	0	0	0	1	0
38	50468	0,4048	4	21	12	3	0	0	0	1	6	3
39	38218	0,4101	7	18	5	3	3	0	0	0	2	0
40	18858	0,4101	5	20	8	1	0	1	0	0	3	1
41	42735	0,4127	6	19	6	1	2	1	0	0	2	0
42	15956	0,4153	7	18	5	1	4	0	0	0	0	0
43	42295	0,4286	7	18	3	1	3	0	0	0	1	0
44	42384	0,4418	7	18	4	2	2	0	0	0	1	0
45	39012	0,4418	5	20	5	1	0	1	0	0	3	0
46	9256	0,4444	6	19	7	0	3	1	0	0	0	0
47	50587	0,4524	7	18	4	2	3	0	0	0	1	0
48	45048	0,4524	6	19	6	3	0	0	0	0	1	1
49	42831	0,4656	5	20	6	1	2	0	0	0	1	1
50	50576	0,4656	4	21	9	1	0	0	0	0	4	1
51	51074	0,4788	5	20	10	2	0	1	0	0	3	1
52	27620	0,4841	8	17	6	4	1	1	1	0	0	0

Tabela 4.3. Parte da tabela resumo das 51.704 estruturas. Da esquerda para a direita:

Número, *O.C.* (ordem de contato relativo), *S*, *T*, $\{T...T\}$ (seqüência máxima de *Ts* ininterruptos), $[*STS*]$ (padrão planar), $[*STTS*]$, $(*STTS*)$ N.P. (padrão não planar), *Staple*, *Snail*, *Big O* (padrão com a seqüência $[*STSTST*]$ ou $[*TSTSTS*]$), $[*TT*]$, $[*TTTT*]$, conforme descrito no texto (item 4.5).

[*TTTTSTS*]	[*TTTTST*]	Fim de Cadeia	Degenerescência	Domínio	Energia	Diag-S	Diag-P	log k_f	log k_f (S.R.)
0	0	VV3	3	3	-59,8	28	0	-5,1180	-7,0956
0	0	VV3	3	3	-59,6	26	0	-5,7372	-7,3132
0	0	VV3	3	3	-60,2	24	0	-5,4445	-7,0643
2	0	VV3	1	3	-60,2	20	4	-6,3346	-7,6882
2	0	VV3	1	3	-60,7	19	4	-6,5845	-7,4230
2	0	VV3	1	3	-59,3	21	2	-6,5297	-7,1954
0	0	VF2	1	3	-63,2	19	7	-6,6898	-7,2915
3	0	VV2	1	3	-59,8	11	10	-5,9671	-7,3803
0	0	VV3	1	1	-59,3	23	0	-5,8928	-6,8959
0	0	VV1	1	1	-60	16	7	-6,4885	-7,2763
0	0	VF2	1	1	-63,4	19	2	-6,2883	-7,4048
0	0	VV2	3	1	-60	28	0	-5,1995	-7,1117
0	0	VV2	3	1	-59,8	22	0	-5,4900	-7,0685
1	0	VV2	16	1	-60	14	2	-5,3981	-7,1910
1	0	VV3	2	1	-60,2	14	4	-6,1914	-7,3163
0	0	VF2	2	1	-62,8	20	4	-5,6040	-7,3502
1	0	VV3	24	1	-59,2	14	2	-5,2437	-6,7704
1	0	VF1	2	2	-62,6	15	3	-5,7481	-7,3490
0	0	VV1	7	0	-59,1	16	2	-7,0103	-7,6538
0	0	VF2	3	1	-63,5	28	0	-5,1569	-7,1854
0	0	VF2	3	1	-63,3	24	2	-5,2285	-6,9977
0	2	VV1	26	0	-59,6	17	0	-6,0442	-7,4612
2	0	VF2	1	1	-63,3	17	5	-6,3523	-7,4202
0	0	VV1	2	0	-60,2	19	2	-5,5535	-7,2037
0	1	VV2	6	0	-60,5	12	8	-6,8025	-7,8988
0	0	VV1	1	0	-60	22	2	-5,3917	-6,9696
0	0	VV2	2	0	-60	24	0	-5,7037	-7,0574
0	1	VF2	1	0	-64,1	10	9	-6,7095	-7,7891
0	0	VV1	4	0	-61,2	15	5	-7,6804	-7,8849
0	0	VF2	2	1	-63,5	5	7	-7,9085	-7,2415
0	0	VV3	1	0	-59,5	12	6	-7,6425	-7,2132
0	0	VV1	1	0	-60,2	25	0	-5,2141	-7,3928
0	0	VF2	1	0	-63,9	11	10	-7,6696	-7,3040
0	0	VF1	1	1	-62,7	18	4	-6,7474	-7,6500
0	0	VF1	1	1	-63,2	12	5	-6,4517	-7,8462
0	1	VF2	7	0	-62,8	7	9	-6,9279	-7,2624
0	0	VF1	2	0	-62,9	13	9	-7,3863	-7,5929
1	0	FF1	3	0	-66,7	10	4	-6,8866	-7,4728
0	0	VF1	2	0	-64,1	8	13	-6,6375	-7,5176
0	0	VF1	9	0	-63,1	10	8	-7,3855	-7,6212
0	0	VF2	7	0	-63,6	8	13	-7,2360	-7,3616
0	0	VV1	1	0	-60,2	23	0	-5,7699	-7,5258
0	0	VF2	2	0	-63,1	8	14	-7,1422	-7,2751
0	0	VF2	1	0	-63,9	6	15	-7,1434	-7,2804
0	0	VF2	2	0	-64,4	9	9	-7,6466	-7,8777
0	0	VF1	6	0	-63,3	6	17	-7,3565	-7,4439
0	0	FF2	1	1	-67	14	10	-7,2289	-7,7868
1	0	VF1	1	1	-64,4	5	13	-7,5965	-7,6770
1	0	VF1	2	2	-62,8	6	15	-7,3155	-7,7702
0	0	FF1	4	0	-67	10	5	-6,9103	-7,9085
0	0	FF1	7	0	-67	17	2	-7,1931	-7,7525
0	0	VF1	2	0	-64,4	6	16	-7,9085	-7,4286

Tabela 4.3-a. Continuação da Tabela 4.3. Da esquerda para a direita: padrões [*TTTTSTS*] e [*TTTTST*]; tipo de fim de cadeia; degenerescência; domínio; energia; quantidade de monômeros que compõem a estrutura secundária e a estrutura primária; log k_f e log k_f sem restrições estéricas, conforme texto item 4.5.