

**TOUT EN
FICHES**

L'ESSENTIEL DE

BIOCHIMIE

Émilie GUILLAUME

Professeure agrégée à l'ENS Paris-Saclay

Pierre LE MARÉCHAL

Professeur émérite de Biochimie
à l'Université Paris-Sud (Orsay)

Pierre BARATTI-ELBAZ

Professeure agrégée à l'ENS Paris-Saclay

DUNOD

NOUS NOUS ENGAGEONS EN FAVEUR DE L'ENVIRONNEMENT :



Nos livres sont imprimés sur des papiers certifiés pour réduire notre impact sur l'environnement.



Le format de nos ouvrages est pensé afin d'optimiser l'utilisation du papier.



Depuis plus de 30 ans, nous imprimons 70 % de nos livres en France et 25 % en Europe et nous mettons tout en œuvre pour augmenter cet engagement auprès des imprimeurs français.



Nous limitons l'utilisation du plastique sur nos ouvrages (film sur les couvertures et les livres).

Table des matières

Fiche 1	Appeler chaque molécule par son nom	1
Fiche 2	Les acides aminés des protéines	5
Fiche 3	Structure 3D des protéines	15
Fiche 4	Applications de l'action des protéases	23
Fiche 5	Séparation et dosage des protéines	31
Fiche 6	Interactions protéine-ligand	44
Fiche 7	Catalyse enzymatique	50
Fiche 8	Enzymologie michaelienne: K_M et V_M	56
Fiche 9	Inhibitions des enzymes michaeliennes	66
Fiche 10	Allostérie	72
Fiche 11	Modifications post-traductionnelles des protéines	81
Fiche 12	Vitamines et coenzymes	89
Fiche 13	ATP	95
Fiche 14	Mono et disaccharides	102
Fiche 15	Polyosides	111
Fiche 16	Glycoprotéines	117
Fiche 17	Structure des acides gras et des lipides	122
Fiche 18	Lipides membranaires	133
Fiche 19	Structure des membranes biologiques	140
Fiche 20	Échanges membranaires	149
Fiche 21	Fermentations	159

Fiche 22	Acétyl-CoA et cycle de Krebs	169
Fiche 23	Catabolisme des acides gras	178
Fiche 24	Métabolisme de l'azote	186
Fiche 25	Néosynthèse des sucres	191
Fiche 26	Les oxydations phosphorylantes	198
Fiche 27	Ligands extracellulaires et transduction du signal	205
Fiche 28	Les protéines du cytosquelette	214
Annexe		223
Index		225

Appeler chaque molécule par son nom

1. L'ordre de priorité des principales fonctions chimiques

Fonction	Nom	Préfixe	Suffixe
$R-CO-OH$	Acide carboxylique	Carboxy	Acide... -oïque
$R-CO-OR'$	Ester	Carboalkoxy	-oate d'alkyle
$R-CO-SR'$	Thioester	Carboalkothioxy	-thioate d'alkyle
$R-CO-NHR'$	Amide	Carboxamide	-amide
$R-CHO$	Aldéhyde	Oxo, aldo, formyl	-al
$R-CO-R'$	Cétone	Oxo, céto	-one
$R-OH$	Alcool	Hydroxy	-ol
$R-SH$	Thiol	Mercapto	-thiol
$R-NH_2$	Amine primaire	Amino	-amine

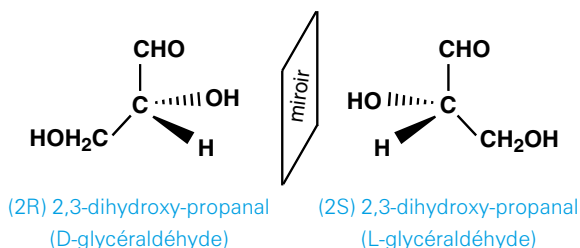
Fonctions particulières

Anhydride d'acide	Entre 2 acides organiques Phosphoanhydride : entre 2 fonctions acide phosphorique	$ \begin{array}{c} R-CO-O-CO-R' \\ \parallel \quad \parallel \\ HO-P-O-P-OH \\ \quad \\ OH \quad OH \end{array} $
Disulfure		$R-S-S-R'$

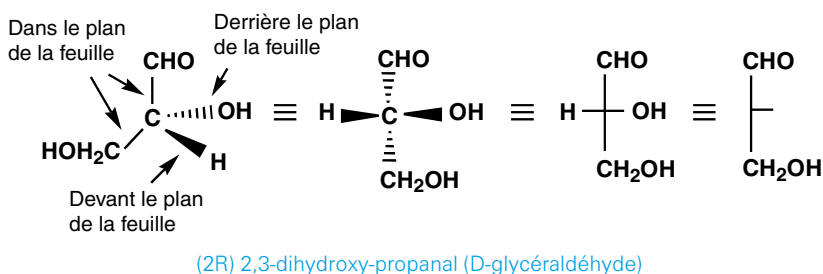
2. Représenter les molécules sur un plan

Les conventions d'écriture dans le cas d'un carbone asymétrique

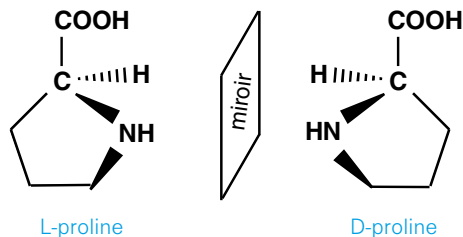
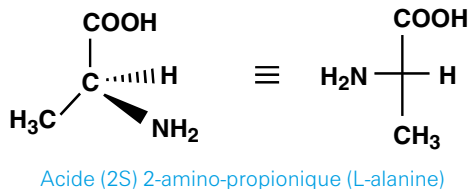
Exemple du 2,3-dihydroxy-propanal (glycéraldéhyde)



Projections de Fischer (utilisées en biologie)



Cas de 2 acides aminés :



La proline possède un cycle pyrrole, c'est le seul acide aminé dans ce cas-là.

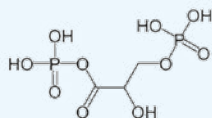
EXERCICE 1 Savoir dessiner à partir des mots

Dessiner les structures des molécules biologiques suivantes (nom chimique et nom commun s'il existe)

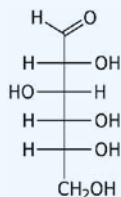
1. Acide 1,3-diphosphonoxypropanoïque ou acide 1,3-bisphosphoglycérique.
2. (2R, 3S, 4R, 5R)-2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal ou glucose.
3. Acide 2-oxoglutarique (acide α -cétoglutarique).

Solution

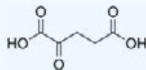
1. Au pH cellulaire, cette molécule existe à l'état 1,3 bisphosphoglycérate (forme déprotonée). C'est un intermédiaire capital de la glycolyse, puisque la rupture de sa liaison phosphoester permet la phosphorylation d'ADP en ATP.



2. La molécule ainsi nommée est le glucose sous sa forme linéaire. Il existe de nombreux pentahydroxyhexanal (sucres simples à 6 carbones et à fonction aldéhyde) : il faut donc décrire pour chaque carbone asymétrique sa configuration. Par exemple, un stéréoisomère bien connu du glucose est le galactose, qui ne diffère qu'au niveau de la configuration relative du carbone 4 (2R, 3S, 4S, 5R-pentahydroxyhexanal).

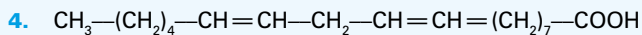
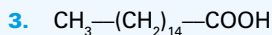


3. Cette molécule est un intermédiaire du cycle de Krebs, et un produit de dégradation de l'acide aminé glutamate. C'est un diacide de 5 carbones possédant une fonction cétone en α (ou sur le carbone 2) : on parle d'acide α -cétonique.

**EXERCICE 2** Et inversement...

Donner les noms des molécules biologiques suivantes :

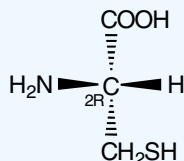
1. $\text{HSCH}_2\text{—CH}(\text{NH}_2)\text{—COOH}$
2. $\text{H}_2\text{N—CH}_2\text{—CO—NH—CH}_2\text{—COOH}$



Solution

1. Cette première molécule est l'acide 2-amino-3-mercaptopropionique. Elle correspond à la cystéine, un acide aminé présent dans les protéines dans sa configuration 2R, c'est-à-dire la L-cystéine (représentation ci-contre).

La cystéine peut former des ponts disulfures dans les protéines (voir structure tertiaire des protéines fiche n° 3).

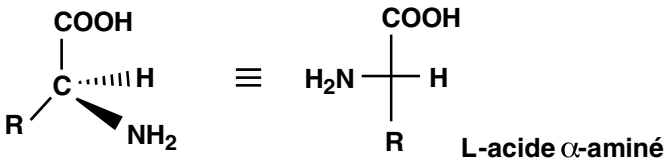


2. Le nom chimique de cette seconde molécule est complexe, mais on peut noter qu'elle possède, de gauche à droite : une fonction amine primaire, une fonction amide et une fonction acide organique. Il s'agit de deux molécules de glycine, l'acide aminé naturel le plus simple, liées par la fonction amide pour former un dipeptide glycine-glycine. La fonction amide est celle qui relie les acides aminés dans les protéines. Elle est appelée « liaison peptidique ».
3. Les formules 3 et 4 correspondent à des acides gras. On nomme ainsi les acides organiques qui possèdent de longues chaînes aliphatiques avec ou sans doubles liaisons. La molécule 3 est un acide n-hexadécanoïque (16C) ou acide palmitique. La molécule 4 est l'acide 9,12-octadécadiénoïque (18C) ou acide linoléique. Les doubles liaisons sont généralement de configuration Z (cis) dans les acides gras insaturés.

1. Configuration des acides aminés

■ Définitions

Les acides α -aminés sont des molécules organiques constituées d'au moins une **fonction amine** et d'au moins une **fonction acide carboxylique**. Ces deux fonctions sont portées par un même carbone (**carbone α**) qui porte également un hydrogène et un **radical R** (chaîne latérale). Ce radical R donne son identité à chaque acide α -aminé.



Vingt acides α -aminés de la **série L** sont identifiés par des codons de l'ARN messager et sont associés à un ARN de transfert lors de la **traduction du code génétique** en protéines. Ces 20 acides α -aminés constituent le squelette des protéines.

■ Les autres acides-aminés

On connaît plus de 20 acides α -aminés chez les organismes vivants. En effet, les protéines peuvent subir des modifications sur une partie des chaînes latérales des résidus d'acides α -aminés qui les constituent. Ces modifications se produisent uniquement après la traduction (modifications post-traductionnelles), voire pendant la traduction (modifications co-traductionnelle, voir fiche n° 11). Elles sont si variées que ce sont près de 200 α -aminoacides différents que l'on peut identifier lorsque l'on procède à l'analyse chimique des protéines. Enfin, certains acides α -aminés se retrouvent dans des peptides cycliques (hormones) ou chez les bactéries dans le peptidoglycane (où ils peuvent exceptionnellement être de la **série D**).

2. Le code génétique

Position 1		Position 2						Position 3	
5'	U	C	A	G	3'				
U	UUU	Phe (F)	UCU	Ser (S)	UAU	Tyr (Y)	UGU	Cys (C)	U
	UUC	Phe (F)	UCC	Ser (S)	UAC	Tyr (Y)	UGC	Cys (C)	C
	UUA	Leu (L)	UCA	Ser (S)	UAA	Stop	UGA	Stop	A
	UUG	Leu (L)	UCG	Ser (S)	UAG	Stop	UGG	Trp (W)	G
C	CUU	Leu (L)	CCU	Pro (P)	CAU	His (H)	CGU	Arg (R)	U
	CUC	Leu (L)	CCC	Pro (P)	CAC	His (H)	CGC	Arg (R)	C
	CUA	Leu (L)	CCA	Pro (P)	CAA	Gln (Q)	CGA	Arg (R)	A
	CUG	Leu (L)	CCG	Pro (P)	CAG	Gln (Q)	CGG	Arg (R)	G
A	AUU	Ile (I)	ACU	Thr (T)	AAU	Asn (N)	AGU	Ser (S)	U
	AUC	Ile (I)	ACC	Thr (T)	AAC	Asn (N)	AGC	Ser (S)	C
	AUA	Ile (I)	ACA	Thr (T)	AAA	Lys (K)	AGA	Arg (R)	A
	AUG	Met (M)	ACG	Thr (T)	AAG	Lys (K)	AGG	Arg (R)	G
G	GUU	Val (V)	GCU	Ala (A)	GAU	Asp (D)	GGU	Gly (G)	U
	GUC	Val (V)	GCC	Ala (A)	GAC	Asp (D)	GGC	Gly (G)	C
	GUA	Val (V)	GCA	Ala (A)	GAA	Glu (E)	GGA	Gly (G)	A
	GUG	Val (V)	GCG	Ala (A)	GAG	Glu (E)	GGG	Gly (G)	G

LE 21^e ÉLÉMENT

On connaît un 21^e codon : UGA (équivalent à un codon stop) qui reconnaît un acide aminé : la sélénocystéine. Celle-ci est semblable à la cystéine et possède un atome de sélénium (Se) à la place du soufre. Le Se a la même valence que le soufre.

3. Propriétés des acides aminés

Les propriétés physicochimiques propres à chaque acide aminé découlent de la nature biochimique du radical : hydrophilie, charge... On classe souvent les acides aminés en comparant ces propriétés chimiques et

notamment la capacité de la fonction portée par la chaîne latérale à s'ioniser. On peut ainsi distinguer :

les **acides aminés non-polaires** constitués d'une chaîne aliphatique ou aromatique (plus ou moins hydrophobes),

les **acides aminés polaires** (hydrophiles) mais **non chargés** au pH physiologique,

les **acides aminés polaires et chargés** : basiques (chargés positivement) et les acides aminés acides (chargés négativement) au pH physiologique.

Les pKa des chaînes latérales permettent cette classification.

NOTION DE pHi

On définit le pHi comme le pH auquel la migration électrophorétique de l'acide aminé est nulle : pas de déplacement dans un champ électrique, indiquant que la charge globale est nulle. Dans ce cas, l'acide aminé peut porter des charges, mais elles se compensent.

CLASSIFICATION DES ACIDES AMINÉS :

Apolaires (non polaires) : Glycine (Gly), Alanine (Ala), Valine (Val), Leucine (Leu), Isoleucine (Ile), Proline (Pro), Methionine (Met), Phenylalanine (Phe), Tryptophane (Trp).

Polaires non chargés : Sérine (Ser), Thréonine (Thr), Tyrosine (Tyr), Cystéine (Cys), Asparagine (Asn), Glutamine (Gln).

Polaires chargés à pH 7,4 :

- Histidine (His) : pKa1 = 6,0 ;
- Lysine (Lys) : pKa1 = 10,5 ;
- Arginine (Arg) : pKa1 = 12,5 ;
- Aspartique (Asp) : pKa2 = 3,9 ;
- Glutamique (Glu) : pKa2 = 4,1.

EXERCICE 1 Exercice de traduction

1. Traduire en acides aminés (codes à une lettre) la séquence nucléotidique suivante qui correspond à une partie de l'ADN codant (ADNc) pour la protéine prion de chat :

ATC ACG GTC AGG CAG CAC ACG GTC ACC ACC ACC ACC AAG GGG
 GAG AAC TTC ACG GAG ACC GAC ATG AAG ATA ATG GAG CGC GTG
 GTG GAG CAG ATG TGC GTC ACC CAG TAC CAG AAA GAG TCC GAG
 GCT TAC TAC CAA AGA GGG GCG AGC

Penser à remplacer T (ADN) par U (ARNm) pour obtenir la correspondance avec le code génétique ci-dessus.

2. Comparer cette séquence protéique à celle de la partie correspondante du prion humain. Quel est le pourcentage d'acides aminés identiques ?
 ITIKQHTVTT TTKGENFTET DVKMMERVVE QMCITQYERE SQAYYQRGSS
3. Les acides aminés qui diffèrent changent-ils la charge globale de ce peptide ?

Solution

Les espaces ont pour vocation de faciliter la lecture

Chat	ITVRQHTVTT TTKGENFTET DMKIMERVVE QMCVTQYQKE SEAYYQRGAS
Homme	ITIKQHTVTT TTKGENFTET DVKMMERVVE QMCITQYERE SQAYYQRGSS

Ces séquences sont identiques à 82 %. Les acides aminés qui diffèrent ne changent pas l'état global d'ionisation de ce peptide car les acides aminés neutres comme la valine (V) sont remplacés par d'autres acides aminés neutres comme l'isoleucine (I) ou la méthionine (M), un acide aminé basique comme la lysine (K) est remplacée par un autre acide aminé basique l'arginine (R) et, de même, un acide aminé acide comme l'acide glutamique (E) est remplacé par un acide aspartique (D).

EXERCICE 2

Sachant qu'au sein d'un acide aminé libre en solution, le pKa de la fonction $-NH_3^+/-NH_2$ vaut 2,3 et que celui de la fonction $-COOH/-COO^-$ vaut 9,6 : quelles seront les charges associées à ces fonctions à pH cellulaire (pH = 7,4) ?

Solution

La fonction amine sera protonée à $\text{pH} = 7,4$ (forme $-\text{NH}_3^+$) alors que la fonction acide carboxylique sera déprotonée (forme $-\text{COO}^-$). L'acide aminé portera donc une charge positive et une charge négative : on parle d'ion dipolaire ou de zwitterion. La charge globale est nulle : l'acide aminé est neutre.

Évidemment, la chaîne latérale pourra porter d'autres charges et modifier ce qui a été dit dans le cas général.

EXERCICE 3 Migration différentielle

Une goutte d'une solution contenant un mélange de glycine, alanine, acide glutamique, lysine, arginine et histidine est placée au centre d'une feuille de papier et séchée. Le papier est humidifié avec une solution tampon à $\text{pH} 6$ et un champ électrique est appliqué. Indiquer la position de chacun des acides aminés lorsque la migration est arrêtée.

Solution

MÉTHODE

La migration électrophorétique d'un acide aminé dépend de sa charge au pH de l'électrophorèse. Pour déterminer la charge il faut comparer le pH de l'électrophorèse au pHi de l'acide aminé.

Si $\text{pH} < \text{pHi}$: l'acide aminé est chargé positivement, il migre vers la cathode chargée négativement.

Si $\text{pH} > \text{pHi}$: l'acide aminé est chargé négativement, il migre vers l'anode chargée positivement.

Le glutamate ($\text{pHi} = 3,2$) est chargé négativement à $\text{pH} 6$, il migrera donc vers l'anode (chargée positivement). La glycine et l'alanine ne sont pas chargées ($\text{pHi} = \text{pH}$), elles ne migreront pas et resteront localisées au niveau de la zone du dépôt. L'histidine, la lysine, et l'arginine ($\text{pHi} 7,6$; $9,9$ et $10,7$ respectivement) sont chargées positivement à $\text{pH} 6$ et vont migrer vers la cathode (chargée négativement). Pour ces trois derniers acides aminés la migration est fonction de la charge nette à $\text{pH} 6$ celle-ci est d'autant plus grande que l'on s'éloigne du pHi , donc Arg migrera le plus rapidement, puis Lys, puis His.

EXERCICE 4 **Leucine et isoleucine : les points communs**

La leucine et l'isoleucine ont logiquement des caractéristiques et propriétés communes. Indiquez lesquelles en vous appuyant sur la liste suivante :

- ce sont des acides aminés apolaires ;
- ce sont des acides aminés indispensables ;
- ils possèdent un ou des carbones asymétriques au sein de leur chaîne latérale ;
- ce sont des acides aminés branchés.

Solution

Leucine et isoleucine sont des isomères (même formule brute mais formules semi-développées différentes). Leur chaîne latérale est totalement apolaire.

La leucine ne possède pas de carbone asymétrique sur sa chaîne latérale. L'isoleucine en possède deux.

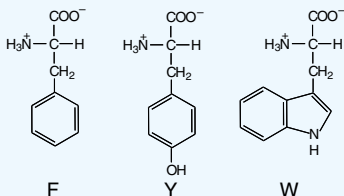
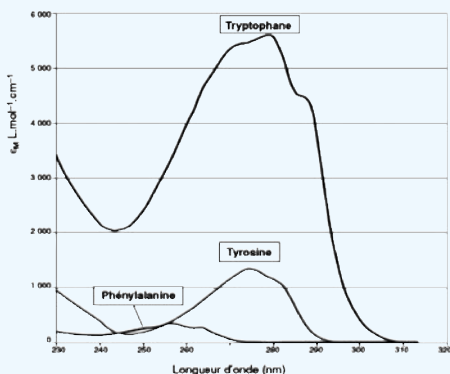
Ce sont des acides aminés branchés (cela fait référence à la forme du squelette carboné), tout comme la valine.

MÉTHODE

Les acides aminés indispensables pour l'Homme ne peuvent être synthétisés par l'organisme et doivent donc être apportés par l'alimentation. On trouve en effet la leucine et l'isoleucine, aux côtés de tryptophane, lysine, thréonine, phénylalanine, valine et méthionine.

Voici un moyen mnémotechnique pour retenir cette liste :

Le Très Lyrique Tristan Fait Vachement Marcher Yseult.

EXERCICE 5 Détecter les protéines en UV

Voici les spectres d'absorption dans l'ultra-violet (UV) des trois acides aminés aromatiques que l'on trouve dans les protéines

- Qu'est ce qui caractérise ces différents spectres ? Estimer les valeurs de l'épsilon molaire à 280 nm (ϵ_M^{280} appelé également coefficient d'extinction molaire) de chaque acide aminé.
- Sachant que l' ϵ_M^{280} d'un peptide ou d'une protéine est la somme des ϵ_M^{280} de chaque acide aminé, quelle sera l'absorbance d'une solution de concentration $C = 0,556$ mM du peptide suivant qui correspond à la partie N-ter de la protéine prion humaine ?

LGCWMLVLFV ATWSDLGLCK KRPKPGGWNT GGSRYPG

Quelle sera l'absorbance d'une solution à 0,1 % de ce polypeptide ? Prendre 110 Da comme masse molaire moyenne d'un acide aminé.

Solution

- La phénylalanine, la tyrosine et le tryptophane portent un cycle aromatique, phényle pour F, phénol pour Y et indole pour W. L'hydroxyle phénolique de la tyrosine confère à cette molécule une certaine polarité qui jouera un rôle sur la valeur de la longueur d'onde maximale d'absorption (λ_{\max}) et ϵ_M^{280} . À partir de ces spectres, on peut déterminer λ_{\max} et ϵ_M^{280} . Pour W, $\lambda_{\max} = 280$ nm et $\epsilon_M^{280} = 5\,600$ M⁻¹·cm⁻¹ et pour Y, $\epsilon_M^{280} = 1\,200$ M⁻¹·cm⁻¹ à pH 7 ($\lambda_{\max} = 275$ nm, $\epsilon_M^{280} = 1\,400$ M⁻¹·cm⁻¹). On remarque donc que le noyau indole

du tryptophane, de par le nombre plus important d'électrons π conjugués qu'il porte, absorbe beaucoup plus la lumière UV que le noyau phénol de la tyrosine et que la phénylalanine n'absorbe pas du tout à 280 nm, mais à 260 nm avec un ϵ_M de $200 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$.

Enfin, ce n'est pas présenté sur le spectre, la liaison peptidique (fonction amide) absorbe également dans l'UV, mais à 210-215 nm. Ainsi, une protéine qui ne possède aucun acide aminé aromatique peut tout de même être détectée en UV. Rappelons tout de même que de nombreuses molécules biologiques absorbent en UV et particulièrement les acides nucléiques à 260 nm.

2. Le polypeptide en question possède 3 tryptophanes ($\epsilon_M^{280} = 5600 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et une tyrosine ($\epsilon_M^{280} = 1200 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$).

$$\text{LGCWMLVLFV ATWSDLGLCK KRPKPGGWNT GGSRYPG}$$

$$\epsilon_M^{280} = (5600 \times 3) + 1200 = 18000 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$$

Selon la loi de Beer-Lambert (voir également fiche n° 5) : $\Delta_{\text{Abs}} = \epsilon_M \times C \times l$
 $C = 0,0556 \text{ mM} = 0,0556 \cdot 10^{-3} \text{ M} \quad l = 1 \text{ cm}$

Ainsi $\Delta_{\text{Abs}} = 0,0556 \cdot 10^{-3} \times 18000 = 1$

Une solution à 0,1% contient $1 \text{ g} \cdot \text{L}^{-1}$. Soit pour une masse molaire approximative de $110 \times 37 = 4070 \text{ Da}$:

$$\Delta_{\text{Abs}} = 1/4070 \times 18000 \times 1 = 4,42$$

CALCUL DES PARAMÈTRES D'UNE PROTÉINE SUR LE WEB

Calcul des paramètres d'un peptide ou d'une protéine automatiquement.

Se connecter au site **protparam tools** (outils pour déterminer les paramètres d'un peptide ou d'une protéine)

<http://web.expasy.org/protparam/>

Saisir la séquence ci-dessus sans les espaces. Cliquer sur « compute parameters ».

Détailler ce qui s'affiche. Que constate-t-on quant à la valeur d' ϵ_M^{280} et à celle de la valeur Δ_{Abs} pour une solution 1% ?

EXERCICE 6 Acides aminés chargés

Toujours sur ce même polypeptide

1 10 11 20 21 30 31 37

LGCWMLVLFV ATWSDLGLCK KRPKPGGWNT GGSRYPG

1. Quels sont les acides aminés chargés de ce polypeptide ?

2. Quel est le point isoélectrique (pI) de ce peptide (pour simplifier, faire la moyenne des pK des 6 groupes chargés de ce polypeptide à pH 7) ?

On donne : leucine $pK(NH_3^+) = 9,9$ et $pK(COO^-) = 2,4$; glycine $pK(NH_3^+) = 9,6$ et $pK(COO^-) = 2,3$; lysine pK chaîne latérale = 10,6 et $pK(NH_3^+)$; arginine pK chaîne latérale = 12,5 ; aspartate pK chaîne latérale = 3,8

Que donne l'analyse par **protparam tools** et **Protein calculator**, par exemple ?

<http://web.expasy.org/protparam/>

<http://protcalc.sourceforge.net>

POINT ISOÉLECTRIQUE

Le pH isoélectrique (pHi) ou point isoélectrique (pI) est le pH pour lequel la migration d'une substance est nulle lorsqu'on la place dans un champ électrique.

Connaissant les pK des 2 fonctions d'un acide aminé sans chaîne latérale chargée, on peut calculer théoriquement le pHi selon la formule : $pHi = (pK_1 + pK_2)/2$

Exemple de la glycine : $pHi = (2,3 + 9,6)/2 = 5,95$

Exemple de la lysine : on ne prend en compte que les groupes ionisables au-dessus de pH 7. $pHi = (9,2 + 10,6)/2 = 9,9$

Il en est de même pour un acide aminé à chaîne latérale acide comme l'aspartate, on prendra en compte des groupes ionisables pour $pH < 7$: $pHi = (1,9 + 3,8)/2 = 2,85$

Solution

1. Dans la séquence proposée on constate que les 14 premiers acides aminés sont neutres. Le 15^e est un aspartyle (D), acide aminé acide, pK de la chaîne latérale = 3,8. Les acides aminés 20 à 24 représentent une séquence très basique. On y trouve 3 lysines (pK chaîne latérale = 10,6) et une arginine (pK chaîne latérale = 12,5). La charge globale de ce polypeptide à 37 résidus sera donc plutôt basique.
2. Le pHi du polypeptide serait de l'ordre de $3,8 + (10,6 \times 3) + 12,5 + 9,6 = 57,7$
Soit en moyenne pour 6 résidus chargés à pH 7, $pHi = 9,62$
Le calcul sur divers sites web qui permettent une détermination directe donne les pHi théoriques suivants :
<http://www.expasy.ch/tools/protparam.html> : 9,70
<http://www.scripps.edu/~cdputnam/protcalc.html> : 9,62

La variabilité de ces résultats traduit les diverses approximations faites dans les équations permettant de déterminer le pHi d'une protéine. Dans le cas d'une protéine, seule la valeur obtenue par l'expérience aura un intérêt.

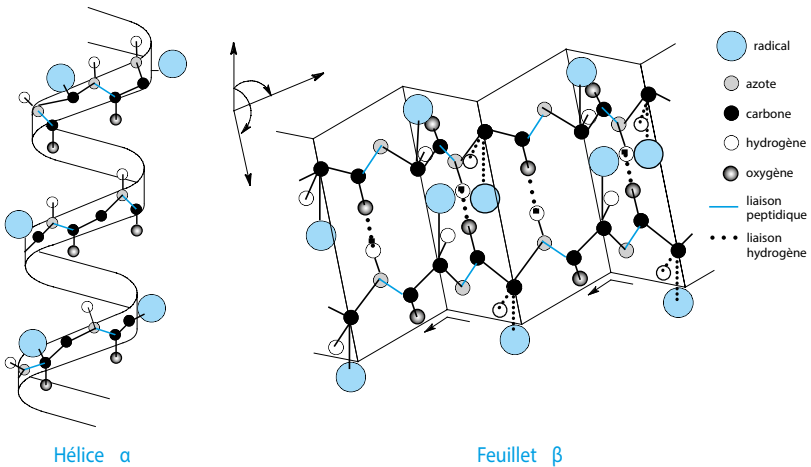
MASSE MOLÉCULAIRE DES ACIDES AMINÉS

Acide aminé	Code 3 lettres	Code 1 lettre	MM	pHi
Glycine	GLY	G	75,06	5,9
Alanine	ALA	A	89,09	6,0
Valine	VAL	V	117,14	5,9
Leucine	LEU	L	131,17	6,0
Isoleucine	ILE	I	131,17	6,0
Proline	PRO	P	115,13	6,5
Méthionine	MET	M	149,20	5,7
Phénylalanine	PHE	F	165,19	5,4
Tyrosine	TYR	Y	181,19	5,6
Tryptophane	TRP	W	204,22	5,9
Sérine	SER	S	105,09	5,6
Thréonine	THR	T	119,12	5,7
Cystéine	CYS	C	124,15	6,4
Asparagine	ASN	N	132,12	5,4
Glutamine	GLN	Q	146,14	5,6
Aspartate	ASP	D	133,10	2,8
Glutamate	GLU	E	147,13	3,2
Lysine	LYS	K	146,19	9,9
Arginine	ARG	R	174,20	10,7
Histidine	HIS	H	155,15	7,6

La MM moyenne des acides aminés est de 137,04 Da. Cependant, on prend généralement une MM moyenne de 110 Da par acide aminé lorsque l'on veut déterminer approximativement celle d'une protéine dont on connaît le nombre d'acides aminés. Cette valeur moyenne de 110 résulte de la répartition des acides aminés dans les protéines. L'alanine et l'aspartate apparaissent plus fréquemment dans les protéines que la tyrosine ou le tryptophane.

1. Structure secondaire

Sous l'influence de diverses forces attractives et répulsives, les chaînes polypeptidiques ne gardent pas une structure linéaire. On appelle structure secondaire les divers repliements structurés dans l'espace de la chaîne polypeptidique. Des liaisons hydrogènes interviennent dans ces repliements, impliquant les groupements C=O et N-H de deux liaisons peptidiques. Les deux principales structures secondaires régulières sont l'hélice α et le feuillet plissé β . Ces deux structures sont généralement reliées entre elles par des boucles de longueur variable et de structure irrégulière. De telles boucles sont situées plutôt à la surface de la protéine. Les interactions hydrophobes dues aux chaînes latérales des acides aminés n'interviennent pas directement dans la stabilité de la structure secondaire.



L'hélice α , est une hélice droite constituée de 18 acides aminés pour 5 tours (3,6/tour), avec un pas de 5,4 Å.