

Androgēns nukleārais receptors - olbaltumviela ar lipīdu gēnu ekspresijas slēdzis „trigers”.

A. Uzdevums: pētījumam ar studentu praktisku iepazīstināšanu interaktīvo molekulu lietošanā:

ChemScape MDL  RasMol  (RasMac ); MAGE  FireFox aplikācija.

risinājumi: B. RSU Āra Kakša 2025 pētījums par **androgēniem** adresē:

htdocsLocal <http://aris.gusc.lv/ChemFiles/BilipidCholine/Membrane/AndrogenReceptor/Androgen1.htm>

1) 2AM9 TES, 2AMA DHT, 2AMBMarz 17H THG, 1XQ3 R1881; cilvēka androgēna receptora liganda saistošais domēns (hARLBD) ar testosteronu (TES), dihidro testosteronu (DHT), androgēniem steroīdiem un lietoti sporta dopingā, tetrahydrogestrinons (THG (17H)) un sintētiskais androgēns (R1881);

2) 3DZyMarz DNS saistošais **Zn** pirkstiņu (**Zn** -finger) motīvs REA_model.pdb;

peroksisomu pavairošanas-aktivējošais receptors (PPARs) ir heterodimērs ar retinoīda X receptoru (RXR)

3. Ievietot Testosteronā

(TES) ogļūdeņražu virknē

ciklu simbolus: A B C D

stabilizējošo dubultsaiti no

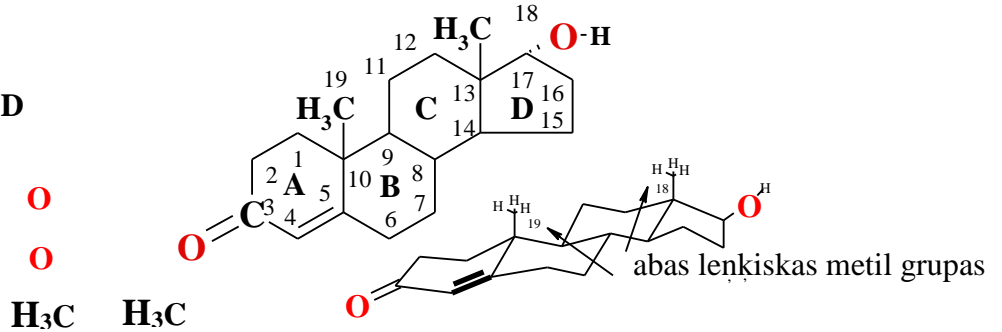
C4 uz C5 $>C=C<$

skābekļa atomu spirtā

HO- pie C17 un karbonila

pie C3 un metil grupas pie

C10, C13!



4. Kādas atšķirības ir 5-ALPHA-DIHIDROTESTOSTERONĀ (DHT) salīdzinot ar testosteronu (TES)?..... nav dubultsaite starp C.....=C.....

5. Ievietot pie C10,C13 DHT

5 α -dihidro--testosteronā

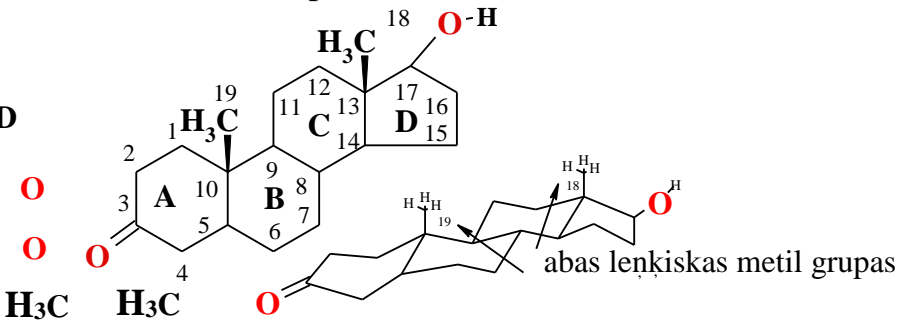
ciklu simbolus: A B C D

skābekļa atomus spirtā **HO**-

pie C17 un karbonilā pie C3

un metilgrupas pie C10,

C13!!



6. Kādas atšķirības dopinga 17H tetrahydrogestrinonā THG salīdzinot ar testosteronu TES? dubultsaite C4=C5 papildinās ar C9.....=C10..... un C8.....=C14....

7. Ievietot dopinga 17H

tetrahydrogestrinonā (THG)

ciklu simbolus:

dubultsaites no C4-5, C10-9,

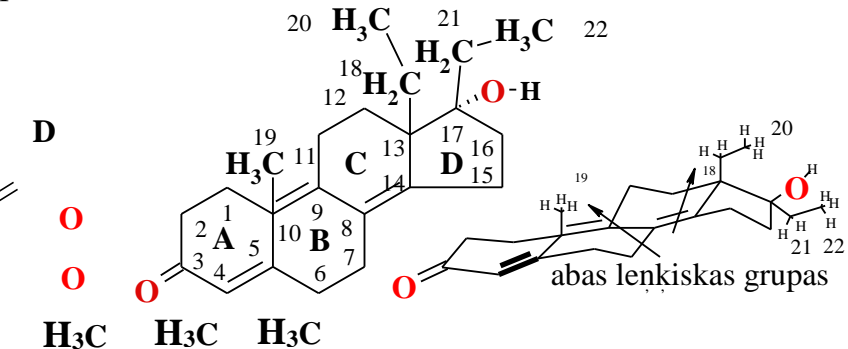
C8-14 $>C=C<$

skābekļa atomus spirtā **HO**-

pie C17 un karbonilā pie C3!

un metilgrupas

pie C10, C18,C21!!



8. Kuri trīs nukleāro receptoru funkcionējoši domēni olbaltumvielu sub vienības iesaistīti gēnu ekspresijas regulācijā piesaistot atbildīgās-olbaltumvielas uz DNS spirāles?

1. Konservēts DNS-saistošais (binding) domēns DBD..... **Zn** pirkstiņu (**Zn** -finger) motīvs;

2. Otrā komplementāra receptora molekula ligandu saistošais (binding) domēns LBD

3. **N-termināla** domēns NTD..... variabls receptora **aktivējošs domēns AD**... DNS saistošs;

9a. Nosakiet **N-termināla** 2AM9.pdb aminoskābi Gln670 ... un **C-termināla** aminoskābi Gln919.....!

Cik aminoskābes ir androgēnā 920..... (skatīt 5.lpp) un 2AM9.pdb 919-670=249+1=250.....

9b. Lietojot **Backbone** Display iespēju, norādiet **N-termināla** domēna **2AMA.pdb** sākuma aminoskābi ... Pro671 ... un **C-termināla** domēns beidzas ar aminoskābi Gln919.!

Cik aminoskābes veido androgēna receptora liganda saistošo domēnu hARLBD **2AMA.pdb** primāro struktūru... 919-671=248+1=249.....

9c. Lietojot **Backbone** Display iespēju, norādiet **N-termināla** domēna **2AMB.pdb** sākuma aminoskābi ... Pro671 ... un **C-termināla** domēns beidzas ar aminoskābi Thr919.!

Cik aminoskābes veido androgēna receptora liganda saistošo domēnu hARLBD **2AMB.pdb** primāro struktūru... 919-671=248+1=249.....

9d. Lietojot **Backbone** Display iespēju, norādiet **N-termināla** domēna **1XQ3.pdb** sākuma aminoskābi! ... Gln671 ... un **C-termināla** domēns beidzas ar aminoskābi Gln919.!

Cik aminoskābes veido androgēna receptora liganda saistošo domēnu hARLBD **1XQ3.pdb** primāro struktūru... 919-671=248+1=249.....

10. Kādi otrējās 2° struktūras tipi atrodami **2AM9.pdb** androgēna receptorā **AR LBD**?

..... **11 alfa-spirāles**un..... **2 beta virknes plāksnītēs**.....

11. Cik **alfa spirāles** veido cilvēka seruma albumīnu **HSA**?...**11 alfa-spirāles**.....

12. Kādas **beta struktūras** un cik **beta plāksnītes, virknes** veido **LBD** molekulu?

.....**4 četras-beta virknes un divas beta-plāksnītes**.....

13. Kuras trīs ūdens molekulas ar ūdeņraža saitēm stabilizē testosterona saistīšanu **2AM9.pdb**?

..... **HOH46, HOH3, HOH14**

14. Attēlot kuras aminoskābes ar ūdeņraža saitēm saista testosterona karbonila grupu **O=C**?

Arg752.....—**N—H**··**O=C**<**TES**,Gln711.....—(**O=C**)**N—H**··**O=C**<**TES**.....

15. Attēlot kuras aminoskābes ar ūdeņraža saiti saista testosterona hidroksila grupu **-O—H** ?

Thr877.....**H—O**··**H—O—TES**, Asn705.....—(**N—H**)—**C=O**·· **H—O—TES**;

16. 45 aminoskābes veido kabatu **LBD** domēnā? No spirālēm H2, H4, H5 un plāksnītēm β1,β2

H2:Phe697.....,Ala698.....,Leu700.....,Leu701.....,Leu704.....,Leu707.....,Gly708.....,Leu712.....,

Val713.....,Val715.....,Val716.....,Ala719.....,Ala721.....;

H4:Val730.....,Met734.....,Ala735.....,Val736.....,Ile737.....,Trp741.....,Met742.....,Gly743.....,

Leu744....., Met745.....,Val746.....,Phe747.....,Ala748.....,Met749.....,Gly750.....,Trp751.....,

Phe754.....,Val757.....;

beta1:Leu762.....,Phe764.....,Ala765.....,Pro766.....;beta2 Leu768.....,Val769.....,Phe770.....;

H5:Met775.....; H9:Pro849.....,Cys852.....,Phe856.....,Leu859.....,Leu862.....,Leu863.....,

Val866.....,Pro868.....,Ile869.....,Ala870.....,Leu873.....,Phe876.....,Phe878.....,Leu880.....,

Leu881.....,Ile882.....; Ar kādu saistīšanās enerģiju **TES ; DHT; THG** dopings?:

TES -129,88..... kJ/mol; **DHT** -140,53 kJ/mol; **THG** -173,36 kJ/mol; dopings

17. Kuras divas aminoskābes veido disulfīda saiti **LBD** domēna struktūrā **1E3G.pdb**?

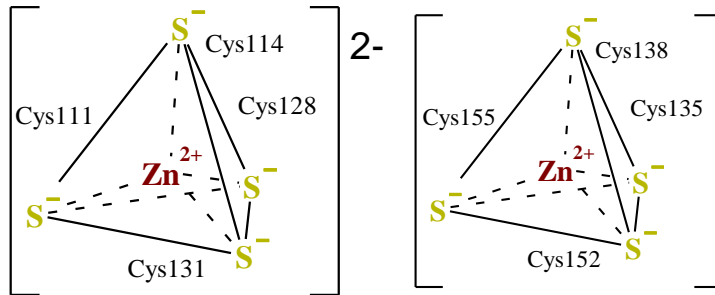
disulfīda saite starp Cys669.....- **S - S** -Cys844.....

18a. Kuras četras aminoskābes ir cinka pirkstiņu (**Zn** -finger) koordinācijas sfērā **Nr1**? ...
3DZY.pdb koordinācijas sfērā **Nr1** C111.....,C114.....,C128.....,C131.....

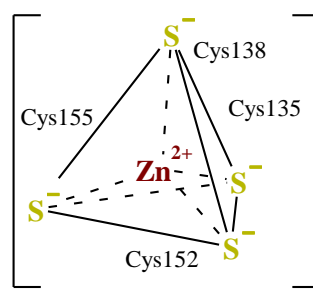
18b. Kuras četras aminoskābes ir cinka pirkstiņu (**Zn** -finger) koordinācijas sfērā **Nr2**?
koordinācijas sfērā **Nr2** C135.....,C138.....,C152.....,C155.....



19a. Ievietot **Zn** koordinācijas sfērā **Nr1** dotos sulfīda S⁻ atomus no četrām aminoskābēm un koordinācijas sfēras jona lādiņu !

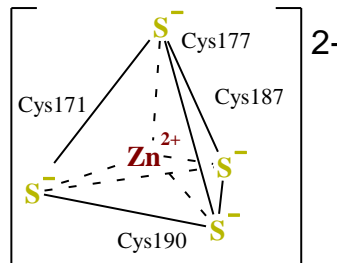


19b. Ievietot **Zn** koordinācijas sfērā **Nr2** dotos sulfīda S⁻ atomus no četrām aminoskābēm un koordinācijas sfēras jona lādiņu !



18c. Kuras četras aminoskābes ir cinka pirkstiņu (**Zn** -finger) koordinācijas sfērā **Nr3**?
koordinācijas sfērā **Nr3** C171.....,C177.....,C187.....,C190.....

19c. Ievietot **Zn** koordinācijas sfērā **Nr3** dotos sulfīda S⁻ atomus no četrām aminoskābēm un koordinācijas sfēras jona lādiņu !



20. Kurus divus simetriskos DNS sešu bāzu pāru atkārtojumus saista pie hetero dimēra peroksisomu pavairošanas aktivējošā receptora (**PPARs** Peroxi some Proliferators Activated Receptors) ar komplimentāru otru Retinoīda X Receptoru (**RXR**) lietojot viena burta simbolus adenīns **A**, timīns **T**, guanīns **G**, citozīns **C** ar kārtas numuru DNS virknē? **PPARs+RXR**

A7.....G8.....G9.....T10....C11....A12.....; A14....G15....G16....T17....C18....A19....

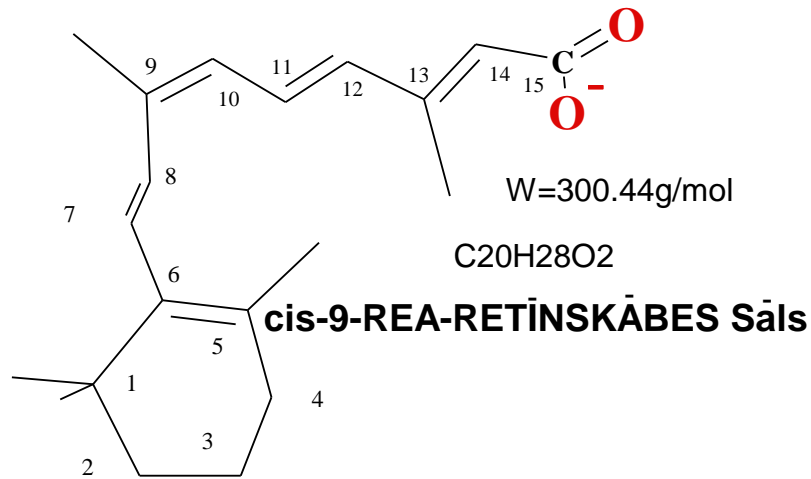
T14....C13....C12....A11....G10....T9.....; T7.....C6.....C5.....A4.....G3.....T2...

21. Kuras sešas aminoskābes β-virkņu S1, S2, S3 un S4 no [Ligandu saistošā (Binding) Domēna] **LBD PPARs** saista (linchpin DNS slīd ass šplinte–spraudnis-saistot–nepieciešamo receptoru darbināšanai) ar deviņām aminoskābēm **RXR-a DBD** [DNS saistošā (Binding) Domēnā]? Un S4 virknē veido hidrofobu tā pat ūdeņraža saišu mijiedarbību ar ieslēdzošu gēnu ekspresijas aktivējošu iedarbību **3DZY.pdb** molekulās (linchpin DNS slīd ass šplinte–saistoša– nepieciešamo receptoru darbināšanai)? **LBD PPARs** sešas 6: Phe347.....,Val248.....,Asn335.....,Lys336.....,Asp337.....,Glu351.....un 9 deviņas **DBD RXR-a** : Leu196.....,Ala197.....,Asp166.....,Tyr189.....,Tyr192....., Gln193.....,Lys201.....,Arg202.....,Glu203.....

22. Ievietot

Cis-9-Retīnskābes sāļi dubult
saites no C9-10, C11-12,
C13-14 >C=C< un divus
skābekļa atomus, kurš ir
agonists PPAR-gamma!

REA_model.pdb



23.1-23.5 Veikt AR TES izoelektriskā punkta IEP=pH=pK_{a-vid} analīzi fizioloģiskajā pH=7,36
vidē. 2AM9.pdb Noteikt ūdens šķīduma pH vērtību ar cilvēka AR koncentrāciju C=10^{-6,96947} M (mol/Litrā)!

<http://aris.gusc.lv/ChemFiles/BilipidCholine/Membrane/AndrogenReceptor/2AM9pILatStudS.pdf> ;

<http://aris.gusc.lv/ChemFiles/BilipidCholine/Membrane/AndrogenReceptor/2AM9pI.xls>

SQ SEQUENCE	920	>2AM9:A PDBID CHAIN SEQUENCE	AR_TES_Human
MEVQLGLGRVYPRPPSKTYRGAFQNLFSVREVIQNPGRHPEAASAAPPASLLLLLQQQQQQQQQQQQQQQQQQQQQQQQ			
ETSPRQQQQQQGEDGSPQAHRRGPTGYLVLDDEEQPSPQSALECHPERGCVPEPGAAVAASKGLPQQLPAPPDEDDSA			
PSTLSLLGPTFPGLSSCSADLKDILSEASTMQLLQQQQQEAVSEGSSSGRAREASGAPTSSKDNLYLGGTSTISDNAKELC			
KAVSVSMGLGVEALEHLSPEQLRGDCMYAPLLGVPPAVRPTPCAPLAECKGSLDDDSAGKSTEDTAEYSPFKGGYTKGL			
EGESLGCSSGAAAGSSGTLELPSTLSLYKSGALDEAAAYQSRDYNYFLALAGPPPPPPPPHPHARIKLENPLDYGSAWA			
AAAAQCRYGDLASLHGAGAAGPGSGSPSAAASSSWHTLFTAEEGQLYGPCGGGGGGGGGGGGGGGGGGGGEAGAVAP			
YGYTRPPQGLAGQESDFTAPDVWYPGGMVSRVYPSPCTCVKSEMGLPWCMSYSGPYGDMRLETARDHVLPIDYFPPQKTC			
LICGDEASQCHYGALTCGSKVFFKRAAEGKQKYLCAASRNDCTIDKFRKNCPSCLRKCYEAGMTLGARKLKLGLNLKL			
QEEGEASSTTSPTEETTQKLTVSHIEGYEQPIFLNVLEAIEPGVVCAGHDNNQPDFAALLSSLNELGERQLVHVVKWA			
KALPGFRLNHVDDQMAVIQYSWMGLMVFAMGWRSTFTNVNSRMLYFAPDLVFNFYRMHKSRYMSQCVRMRHLSQEFGLQI			
TPQEF'LCKMALLLFSIIPVDGLKNQKFFDELRMNYIKELDRIACKRKNPTSCSRRFYQLTKLLDSVQPIARELHQFTFD			
LLIKSHMVSVDPEMMAEIIISVQVPKILSGVKPIYFHTQ			2AM9

AA	pK _{aCOO}	pK _{aNH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{aCOO}	pK _{aNH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{aCOO}	pK _{aNH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{aCOO}	pK _{aNH3+}	pK _{RR}	Nr					
M	1	9,21		1	E	39	4,25	200	E	77	4,25	355	E	115	4,25	541	E	153	4,25	645	E	191	4,25	794
E	2	4,25	2		E	40	4,25	204	Y	78	10,07	359	R	116	12,48	544	E	154	4,25	654	E	192	4,25	804
R	3	12,48	9		R	41	12,48	210	R	79	12,48	362	D	117	3,65	545	E	155	4,25	655	K	193	10,53	809
Y	4	10,07	11		R	42	12,48	212	D	80	3,65	363	H	118	6	546	K	156	10,53	659	D	194	3,65	820
R	5	12,48	13		E	43	4,25	213	Y	81	10,07	364	D	119	3,65	551	H	157	6	664	K	195	10,53	823
K	6	10,53	17		K	44	10,53	222	Y	82	10,07	365	Y	120	10,07	552	E	158	4,25	666	K	196	10,53	826
Y	7	10,07	19		D	45	3,65	223	H	83	6	382	Y	121	10,07	553	Y	159	10,07	668	D	197	3,65	829
R	8	12,48	20		Y	46	10,07	225	H	84	6	384	K	122	10,53	558	E	160	4,25	669	E	198	4,25	830
R	9	12,48	31		D	47	3,65	234	R	85	12,48	386	D	123	3,65	565	E	161	4,25	679	R	199	12,48	832
E	10	4,25	32		K	48	10,53	237	K	86	10,53	388	E	124	4,25	566	E	162	4,25	682	Y	200	10,07	835
R	11	12,48	40		E	49	4,25	238	E	87	4,25	390	H	125	6	571	H	163	6	690	K	201	10,53	837
H	12	6	41		K	50	10,53	241	D	88	3,65	394	Y	126	10,07	572	D	164	3,65	691	E	202	4,25	838
E	13	4,25	43		E	51	4,25	252	Y	89	10,07	395	K	127	10,53	581	D	165	3,65	696	D	203	3,65	840
E	14	4,25	81		E	52	4,25	255	R	90	12,48	407	K	128	10,53	585	E	166	4,25	707	R	204	12,48	841
R	15	12,48	85		H	53	6	256	Y	91	10,07	408	R	129	12,48	586	E	167	4,25	710	K	205	10,53	846
E	16	4,25	93		E	54	4,25	261	D	92	3,65	410	E	130	4,25	589	R	168	12,48	711	R	206	12,48	847
D	17	3,65	94		R	55	12,48	264	H	93	6	415	K	131	10,53	591	H	169	6	715	K	207	10,53	848
H	18	6	100		D	56	3,65	266	H	94	6	436	K	132	10,53	593	K	170	10,53	718	R	208	12,48	855
R	19	12,48	101		Y	57	10,07	269	E	95	4,25	442	Y	133	10,07	594	K	171	10,53	721	R	209	12,48	856
R	20	12,48	102		R	58	12,48	280	E	96	4,25	443	R	134	12,48	599	R	172	12,48	727	Y	210	10,07	858
Y	21	10,07	107		E	59	4,25	289	Y	97	10,07	447	D	135	3,65	601	H	173	6	730	K	211	10,53	862
D	22	3,65	111		K	60	10,53	291	E	98	4,25	474	D	136	3,65	605	D	174	3,65	732	D	212	3,65	865
E	23	4,25	112		D	61	3,65	296	Y	99	10,07	481	K	137	10,53	606	D	175	3,65	733	R	213	12,48	872
E	24	4,25	113		D	62	3,65	297	Y	100	10,07	483	R	138	12,48	608	Y	176	10,07	740	E	214	4,25	873
E	25	4,25	124		K	63	10,53	301	R	101	12,48	485	R	139	12,48	609	R	177	12,48	753	H	215	6	875
H	26	6	126		E	64	4,25	304	E	102	4,25	494	K	140	10,53	610	R	178	12,48	761	D	216	3,65	880
E	27	4,25	128		D	65	3,65	305	D	103	3,65	496	R	141	12,48	616	Y	179	10,07	764	K	217	10,53	884
R	28	12,48	129		E	66	4,25	308	D	104	3,65	501	R	142	12,48	618	D	180	3,65	768	H	218	6	886
E	29	4,25	134		Y	67	10,07	309	Y	105	10,07	504	K	143	10,53	619	E	181	4,25	773	D	219	3,65	891
K	30	10,53	143		K	68	10,53	313	R	106	12,48	511	Y	144	10,07	621	Y	182	10,07	774	E	220	4,25	894
D	31	3,65	154		Y	69	10,07	316	Y	107	10,07	514	E	145	4,25	622	R	183	12,48	775	E	221	4,25	898
E	32	4,25	155		K	70	10,53	318	K	108	10,53	521	R	146	12,48	630	H	184	6	777	K	222	10,53	906
D	33	3,65	156		E	71	4,25	321	E	109	4,25	523	K	147	10,53	631	K	185	10,53	778	K	223	10,53	911
D	34	3,65	157		E	72	4,25	323	D	110	3,65	529	K	148	10,53	633	R	186	12,48	780	K	224	10,53	913
D	35	3,65	180		E	73	4,25	340	Y	111	10,07	531	K	149	10,53	634	Y	187	10,07	782	Y	225	10,07	916
K	36	10,53	182		Y	74	10,07	348	Y	112	10,07	535	K	150	10,53	639	R	188	12,48	787	H	226	6	918
D	37	3,65	183		K	75	10,53	349	D	113	3,65	537	E	151	4,25	642	R	189	12,48	789	Q	2,17	227	920
E	38	4,25	187		D	76	3,65	354	R	114	12,48	539	E	152	4,25	643	H	190	6	790		7,7505286;	227;	1757,2

2AM9 : A | PDBID skābju konstanšu vērtību skaita 227 pK_a summa 1757,2 dod vidējo vērtību pK_{avid}=7,7505286;

Protolīzes vidējo konstanti pK_{avid} izoelektrisko punktu IEP aprēķina kā summu konstantēm: sānu virknēs $\Sigma pK_{aRside\ group}$, $pK_{aNterminālsNH_3^+}$ un $pK_{aCterminālsCOO^-}$ dalītu ar protolītisko skābju grupu skaitu NpK_a :

$$pK_{avid} = (\Sigma pK_{aRside\ group} + pK_{aNtermināls} + pK_{aCtermināls}) / NpK_a$$

Aprēķinu uzdevumi cilvēka AR TES nukleārais receptors saista testosteronu 99,342-kDa molekulu

23.1 Summārais protolītisko līdzsvaru skaits ir $NpK_a = 225 + 2 + \dots = 227 + \dots$

920 aminoskābes no tām 225+2 aminoskābes ar protolītiskām pK_a sānu grupām,

N-termināla metionīns M $pK_{aNtermināls} = 9,21$ un C-termināla glutamīns Q $pK_{aCtermināls} = 2,17$

Summa ir saskaitāma kā $\Sigma pK_{aRside} + pK_{aNtermināls} + pK_{aCtermināls} = 1757,2 + \dots$

23.2 **IZO ELEKTRISKAIS PUNKTS** $pK_{vid} = IEP = 1757,2 / 227 = 7,75053 + \dots$

Vidējā skābju grupu konstante $pK_{vid} = IEP = (\Sigma pK_{aRside\ group} + pK_{aNtermināls} + pK_{aCtermināls}) / NpK_a = 7,75053$

Aminoskābju un olbaltumvielu izoelektriskā punkta pH vērtībā $pH = IEP$ jonu lādiņu summa ir nulle „0”

0 — skābā vidē plus (+) — nulles lādiņš „0” $IEP = pH$ — bāziskākā vidē mīnuss (-) — 14 pH skala

-COOH & **-NH₃⁺** pozitīvs lādiņš **-COO⁻** & **-NH₂** lādiņš ir negatīvs **-COO⁻** & **-NH₂**

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

23.3 AR TES molekulas lādiņš ir (+), nulle „0” vai (-) fizioloģiskā $pH = 7,36$ vidē asins plazmā

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & **-NH₃⁺** pozitīvs (+) lādiņš $pH = 7,36 < IEP = 7,75 + \dots$ lādiņš ir negatīvs (-) **-COO⁻** & **-NH₂**.

23.4 Noteikt AR TES molekulas lādiņa zīmi **elektroforēzē** pie **pH 8,8** (+), nulle „0” vai (-)

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & **-NH₃⁺** pozitīvs (+) lādiņš $IEP = 7,75 < pH = 8,8 + \dots$ lādiņš ir negatīvs (-) **-COO⁻** & **-NH₂**.

23.5 Aprēķināt $C = 10^{-6,96947}$ molī / Litrā AR TES šķīduma pH *Ostvalda atšķaidīšanas likumā* logaritmam no C.:

$$pH = \frac{pK_a - \log C}{2} = \frac{7,7505286 - \log 10^{-6,96947}}{2} = \frac{7,7505286 + 6,96947}{2} = 14,72 / 2 = 7,36 + \dots$$

7,36 Atraktora cilvēka RXRD koncentrācija ir $C = 10^{-6,96947} + \dots$ M .

24.1-24.5 Veikt RXRD 1XQ3.pdb izoelektriskā punkta IEP=pH=pK_a-vid analīzi fizioloģiskajā pH=7,36 vidē . Noteikt ūdens šķīduma pH vērtību ar cilvēka RXRD koncentrāciju C=10^{-6,994762} M (mol/Litrā)!

<http://aris.gusc.lv/ChemFiles/BilipidCholine/Membrane/AndrogenReceptor/3DZYpILat.pdf> ;
<http://aris.gusc.lv/ChemFiles/BilipidCholine/Membrane/AndrogenReceptor/3DZYpI.xls>

SQ SEQUENCE 462 >1XQ3.pdb : A PDBID CHAIN SEQUENCE										RXRA_HUMAN													
MDTKHFLPLDFSTQVNSSLTSP TGRGSMAPSLHPSLPGIGSPQLHSPISTLSSPINGMGPPFSVSISSPMGPHSMSVP																							
TTPTLGFSTGSPQLSSPMNPVSSSEDIKPPGLGNGVLKVPAPSGNMAFSTKHICAICGDRSSGKHYGVYSCEGCKGFFK																							
RTVRKDLTYTCRDNKDCLIDKRQRNRCQYCRYQKCLAMGMKREAVQEERQRGKDRNENEVESTSSANEDMPVERILEAEL																							
AVEPKTEYVEANMGLNPSSPNPVTNICQAADKQLFTLVEWAKRIPHFSELPLDDQVILLRAGWNELLIASFHSRSTAV																							
KDGILLATGLHVHRNSAHSAGVGAI FDRVLTLELVSKMRDMQDKTELGLCLRAIVLFNPD SKGLSNPAEVEALREKVYASL																							
EAYCKHKYPEQPGRFAKLLRLPALRSIGLKCLEHLFFFKLIGDTPIDTFLMEMLEAPHQMT																							
RXRA_Human										RXRA_Human													
AA	pKa _{COO-}	pKa _{NH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pKa _{COO-}	pKa _{NH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pKa _{COO-}	pKa _{NH3+}	pK _{RR}	Nr	AA	pKa _{COO-}	pKa _{NH3+}	pK _{RR}	Nr				
M	1	9,21	1	E	23	4,25	153	R	45	12,48	202	E	67	4,25	251	R	89	12,48	348	H	109	6	406
D	2	3,65	2	K	24	10,53	156	E	46	4,25	203	D	68	3,65	263	E	90	4,25	352	K	110	10,53	407
K	3	10,53	4	K	25	10,53	160	E	47	4,25	207	D	69	3,65	273	K	91	10,53	356	Y	111	10,07	408
H	4	6	5	R	26	12,48	161	E	48	4,25	208	K	70	10,53	274	R	92	12,48	358	E	112	4,25	410
D	5	3,65	10	R	27	12,48	164	R	49	12,48	209	E	71	4,25	281	D	93	3,65	359	R	113	12,48	414
R	6	12,48	25	K	28	10,53	165	R	50	12,48	211	K	72	10,53	284	D	94	3,65	363	K	114	10,53	417
H	7	6	34	D	29	3,65	166	K	51	10,53	213	R	73	12,48	285	K	95	10,53	364	R	115	12,48	421
H	8	6	48	Y	30	10,07	169	D	52	3,65	214	H	74	6	288	E	96	4,25	366	R	116	12,48	426
H	9	6	75	R	31	12,48	172	R	53	12,48	215	E	75	4,25	291	R	97	12,48	371	K	117	10,53	431
E	10	4,25	105	D	32	3,65	173	E	54	4,25	217	D	76	3,65	295	D	98	3,65	379	E	118	4,25	434
D	11	3,65	106	K	33	10,53	175	E	55	4,25	219	D	77	3,65	296	K	99	10,53	381	H	119	6	435
K	12	10,53	108	D	34	3,65	176	E	56	4,25	221	R	78	12,48	302	E	100	4,25	388	K	120	10,53	440
K	13	10,53	118	D	35	3,65	180	E	57	4,25	228	E	79	4,25	307	E	101	4,25	390	D	121	3,65	444
H	14	6	122	K	36	10,53	181	D	58	3,65	229	H	80	6	315	R	102	12,48	393	D	122	3,65	448
K	15	10,53	132	R	37	12,48	182	E	59	4,25	233	R	81	12,48	316	E	103	4,25	394	E	123	4,25	453
H	16	6	133	R	38	12,48	184	R	60	12,48	234	K	82	10,53	321	K	104	10,53	395	E	124	4,25	456
D	17	3,65	140	R	39	12,48	186	E	61	4,25	237	D	83	3,65	322	Y	105	10,07	397	H	125	6	459
R	18	12,48	141	Y	40	10,07	189	E	62	4,25	239	H	84	6	331	E	106	4,25	401	T	2,11	126	462
K	19	10,53	145	R	41	12,48	191	E	63	4,25	243	R	85	6	333	Y	107	10,07	403				
H	20	6	146	Y	42	10,07	192	K	64	10,53	245	R	86	12,48	334	K	108	10,53	405				
Y	21	10,07	147	K	43	10,53	194	E	65	4,25	247	H	87	6	338								
Y	22	10,07	150	K	44	10,53	201	Y	66	10,07	249	D	88	3,65	347								

pK_a-vid=7,725; pK_a skaita 126 summa 973,38

Protolīzes vidējo konstanti pK_{avid} izoelektrisko punktu IEP aprēķina kā summu konstantēm:

sānu virknēs ΣpK_aside group,, pK_aNterminālsNH₃⁺ un pK_aCterminālsCOO⁻ dalītu ar protolītisko skābju grupu skaitu NpK_a:

$$pK_{avid} = (\Sigma pK_{a\text{side group}} + pK_{a\text{Ntermināls}} + pK_{a\text{Ctermināls}}) / NpK_a$$

Aprēķinu uzdevumi cilvēka RXRD 1XQ3.pdb nukleārais receptors saista retinātu 50,829-kDa molekulu

24.1 Summārais protolītisko līdzsvaru skaits ir NpK_a=124.....+2.....= 126.....

462 aminoskābes no tām 124+2 aminoskābes ar protolītiskām pK_a sānu grupām,

N-termināla metionīns M pK_aNtermināls=9,21 un C-termināla treonīns T pK_aCtermināls=2,11

Summa ir saskaitāma kā ΣpK_asānu virknee+pK_aNtermināls+pK_aCtermināls = 973,38.....

24.2 IZO ELEKTRISKAIS PUNKTS pK_{vid} = IEP=973,38 / 126 =7,7252381.....

Vidējā skābju grupu konstante pK_{vid} =IEP=(ΣpK_aside group+pK_aNtermināls+pK_aCtermināls)/NpK_a=7,725238

Aminoskābju un olbaltumvielu izoelektriskā punkta pH vērtībā pH=IEP jonu lādiņu summa ir nulle „0”

0—— skābā vidē plus (+)—— nulles lādiņš „0” IEP=pH—— bāziskākā vidē mīnuss (-)—— 14 pH skala

-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs lādiņš-COO⁻ & -NH₂.....lādiņš ir negatīvs -COO⁻ & -NH₂

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

24.3 AR TES molekulas lādiņš ir (+), nulle „0” vai (-) fizioloģiskā pH=7,36 vidē asins plazmā

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš pH=7,36 < IEP=7.725..... lādiņš ir negatīvs(-) -COO⁻ & -NH₂.

24.4 Noteikt AR TES molekulas lādiņa zīmi elektroforēzē pie pH 8,8 (+), nulle „0” vai (-)

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš IEP=7,725 < pH=8,8 lādiņš ir negatīvs(-) -COO⁻ & -NH₂.

24.5 Aprēķināt C = 10^{-6,99476} moli / Litrā AR TES šķīduma pH Ostvalda atšķaidīšanas likumā logaritmam no C.:

$$pH = \frac{pK_a - \log C}{2} = \frac{7,725238 - \log 10^{-6,99476}}{2} = \frac{7,725238 + 6,99476}{2} = 14,72 / 2 = 7,36.....$$

7,36 Atraktora RXRA_HUMAN koncentrācija ir C=10^{-6,99476}M .