

A. Cilvēka (Human) seruma albumīns **HSA**: pētījums:



RasMol :



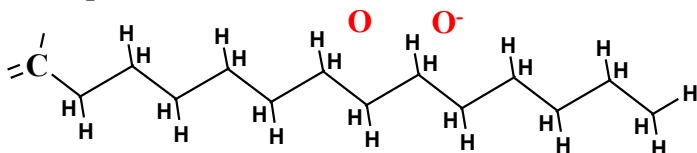
MAGE



FireFox v.3.5.5 aplikācija.

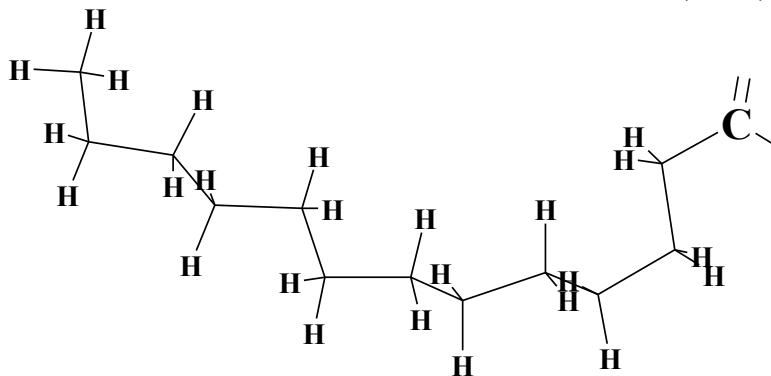
B. uzdevums RSU Āra Kakša 2025 HSA : <http://aris.gusc.lv/ChemFiles/Albumin/cyclox.html>

1. Lietojot **HSA Backbone** Display iespēju, norādiet **N-termināla** domēna sākuma aminoskābi His..... un **C-termināla** domēna aminoskābi Gly.....! Cik aminoskābes veido **HSA** albumīna polipeptīdu (2.lpp) un cik **1E7Gmyrist.pdb** primāro struktūru $584-3=581+1=.....$?
2. Transportējamo ar **HSA asins** plazmā **lipīdu** molekulu īpašības? 1.....skābes, 2....., 3.....ir **difilas** ar **hidrofilu** un **hidrofobām** funkcionālām grupām
3. Attēlot deprotonētas miristīnskābes **C14** struktūr formulu ar skābekļa atomiem anjonā!



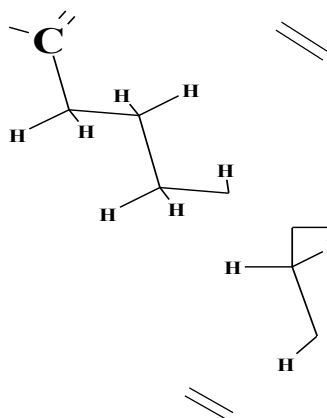
3a. Kāds maksimāls skaits taukskābju karboxilāta anjonu saistīti HSA cilvēka seruma albumīnā 1E7G.pdb?.....

4. Cik **alfa spirāles** veido albumīnu HSA? **Alfa-spirāles**
5. Cik domēni atrodas **HSA** molekulā un kā tos sauc? **domēni:**,,
6. Kādas & cik aminoskābes ir polipeptīda virknē (sekvencē) katrā **domēnā**? **I, II, III**
I G.....-H3+1=.....; II K.....-E.....+1=..... ; III G.....-V.....+1=.....
7. Kāda ir cilvēka seruma albumīna **HSA** cirkulējoša koncentrācija **asiņā** plazmā?
8. Cik disulfīdu saites –**S-S**- saista 33 attālinātas spirāles! ... Cys–**S-S**-Cys divas veido
9. Kuras septiņas(6) spirāles homologu domēnos **IA-IIA-IIIA**? **IA:** **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...;
IIA: **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...
IIIA(6): **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...
10. Kuras četras(5) spirāles ir homologu domēnos **IB-IIB-IIIB**?
IB **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...
IIB **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...
IIIB **H**..., **H**..., **H**..., **H**..., **H**...



0 0-

- 13.** Ievietot [arahidonskābes.tgf](#) C20:4 struktūrā skābekļa atomus anjonā un 4 divkārsās saites!



0 0-

- 14. Cik**
arahidonskābes
piesaistītas **HSA**
cilvēka seruma
albumīnā **1GNJ.pdb**?

Cilvēka seruma albumīns asins plazmā raksturīgā cirkulējošā koncentrācijā 0.6 mM

<http://aris.gusc.lv/ChemFiles/Albumin/1E7GpILat.pdf> ; <http://aris.gusc.lv/ChemFiles/Albumin/1E7GpI.xls>

Virkne no 585 AA aminoskābēm Albumīna molekulā 1E7G.pdb :

DAHKSEVAHFRKDLGEENFKALVLI AFAQYLQQCPFEDHVKLVNEVTEFAKTCVADESAENCDSLHTLFGDKLCTVATL
RETYGEMADCCAKQEPERNECFLOHKDDNPPLRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYE IARRHPYFYAPELLFFAKR
YKAAFTECCQAADKAACLLPKLDELRLDEGKASSAKQRLKCSLQKFGERAFAKAWAVARLSQRFPAEFAEVSKLVTDLT
VHTECCHGDLLECADRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPADLPSLAADFVESKDVCKNYA
EAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVL LRLAKTYETTLEKCCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCLELFEQLGE
YKFQNALLVRYTKKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAEDYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTES
LVNRRPCFSALEVDETYVPKEFNAETFTFHADICTLSEKERQIKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDDFAAFVEKCK
ADKETCFEAEEGKKLVAAASQAALGL 217 pKa vērtības tabulā 1604.91 summa

Summā nepiedalās cisteīna atlikumi Cys = pK_{RR} = 8.18, kuri ir aizņemti 17 disulfīdu saitēs.

Taukskābes simulē ar 7 nonānskābes molekulām pK_a = 7*4,96 = 34,72 praktiski neatšķiras no taukskābēm.

Summā 217 pKa vērtības tabulā un pieskaita 7 taukskābes 7*4,96 =

Sasummētās 217 pKa vērtības no tabulas un pieskaitot 7 taukskābju pKa: 1604.91 + 34,72 =

Aprēķinu uzdevumi cilvēka seruma albumīna molekulai

Protolītisko konstanti pK_a izoelektrisko punktu IEP = pK_a aprēķina saskaitot sānu virkņu ΣpK_aRsānu grupa, un pK_aNterminālsNH₃ un pK_aCterminālsCOO⁻ konstanšu summu izdalot ar skābes grupu skaitu molekulā NpK_a:

$$IEP = pK_a = (\Sigma pK_{aRsānu\ grupa} + pK_{aNtermināls} + pK_{aCtermināls}) / NpK_a$$

14.1 Summārais protolītisko līdzsvaru skaits ir NpK_a = 215..... + 2..... + 7 = + 7 =

585 aminoskābes no tām 215 + 2 aminoskābes ar protolītiskām pK_a sānu grupām, 7 taukskābes pK_a = 4,96, N-termināla aspartāts D pK_aNtermināls = 9,6 un C-termināla leicīns L pK_aCtermināls = 2,36

Summa ir saskaitāma kā ΣpK_aRsānu grupa + pK_aNtermināls + pK_aCtermināls + 7*pK_a =

14.2a. Summāri vidējā skābju grupu konstante pK_{vid} = pK_a = IEP **IZO ELEKTRISKAIS PUNKTS**

IEP = 1604.91 / 217 = bez 7 taukskābēm albumīna molekulā

14.2b. IEP = 1639.63 / 224 = ar 7 taukskābēm albumīna molekulā

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:

14.3 Albumīna molekulas bez taukskābēm lādiņš ir (+), nulle „0” vai (-) fizioloģiskā pH = 7,36 vidē

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš pH = 7,36 < IEP = 7.4 lādiņš ir negatīvs (-) -COO⁻ & -NH₂.

14.4 Albumīna molekulas +7 taukskābes lādiņš ir (+), nulle „0” vai (-) fizioloģiskā pH = 7,36 vidē asins plazmā

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš IEP = 7.32 < pH = 7,36 lādiņš ir negatīvs (-) -COO⁻ & -NH₂.

14.5 Noteikt albumīna molekulas lādiņa zīmi **elektroforēzē pie pH 8,8** (+), nulle „0” vai (-)

Pasvītro eksistējošu un izdzēst neesošo:

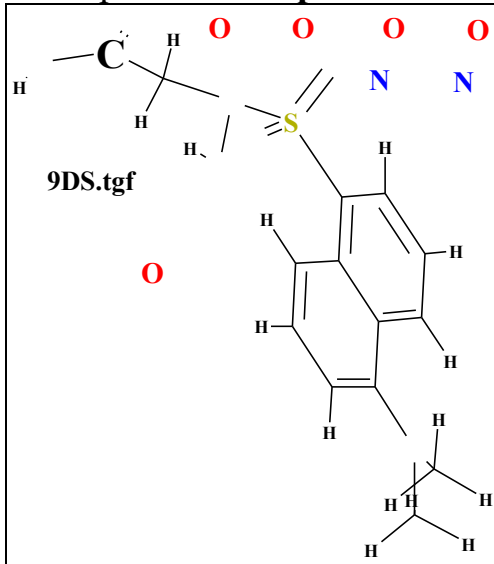
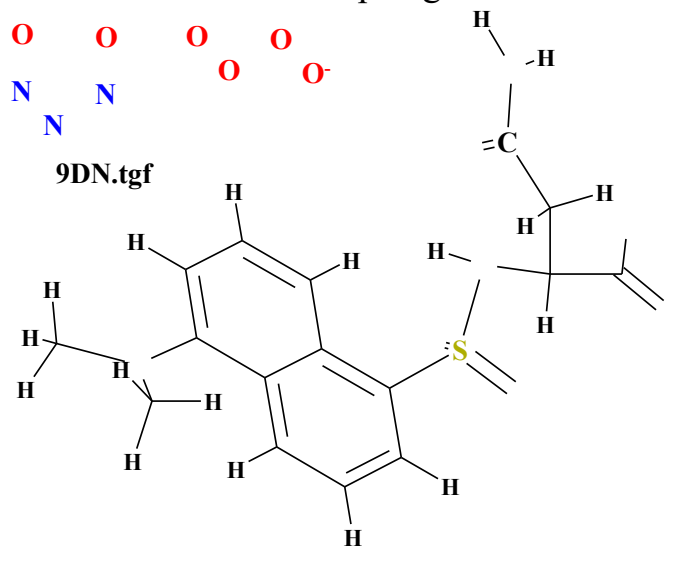
-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš IEP = 7.32 < 7.40 < pH = 8,8 lādiņš ir negatīvs (-) -COO⁻ & -NH₂.

14.6 Aprēķināt C = 10^{-7.4} M albumīna šķīduma pH ar *Ostvalda atšķaidīšanas likuma* aprēķinu koncentrācijas C

$$\text{logaritmā } pH = \frac{pK_a - \log C}{2} = \frac{7,3198 - \log 10^{-7,4002}}{2} = \frac{7,3198 + 7,4002}{2} = 14,720 / 2 = \dots\dots$$

Atraktora 7,36 albumīna koncentrācija ir C = M .

15 Ievietot Dansil-L-asparagīnā dotos atomus **9DN.pdb ! 2XVV.pdb** Proteīnu Datu Banka!

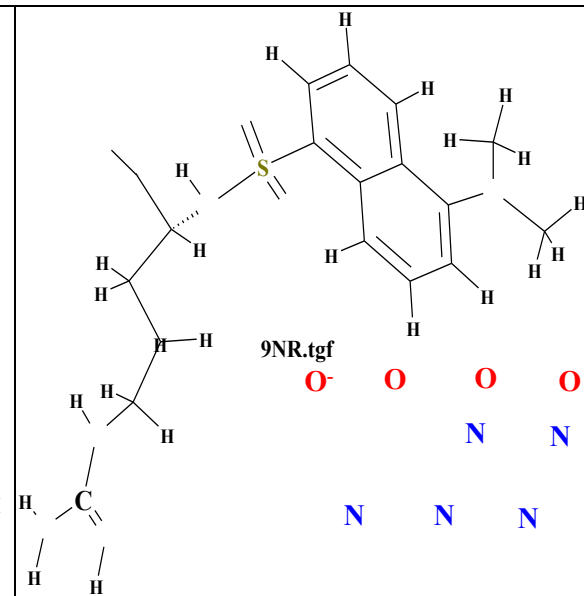
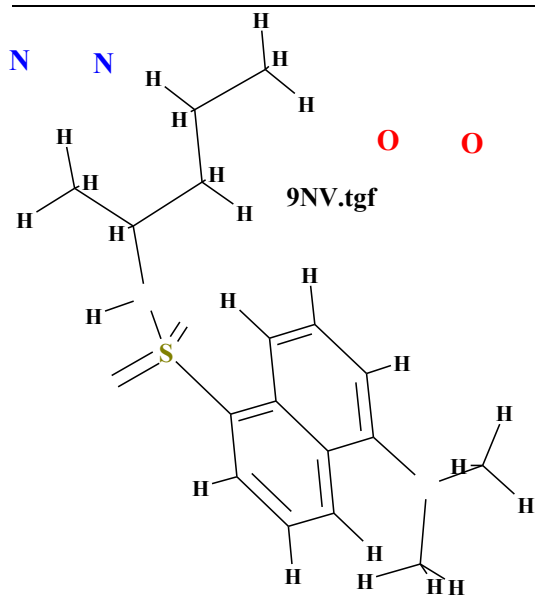


HSA molekulā

Proteīnu Datu Banka PDB!
2XVQ.pdb

16. Ievietot Dansil-L-sarkozīnā

dotos atomus **9DS.pdb!**

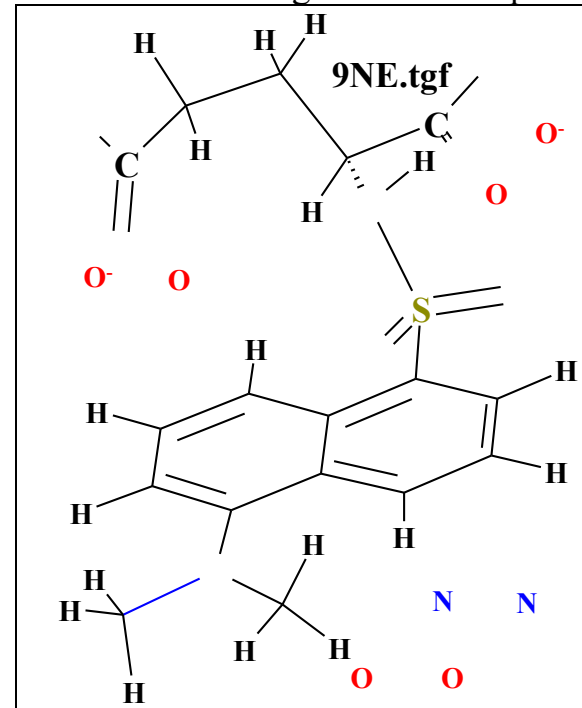
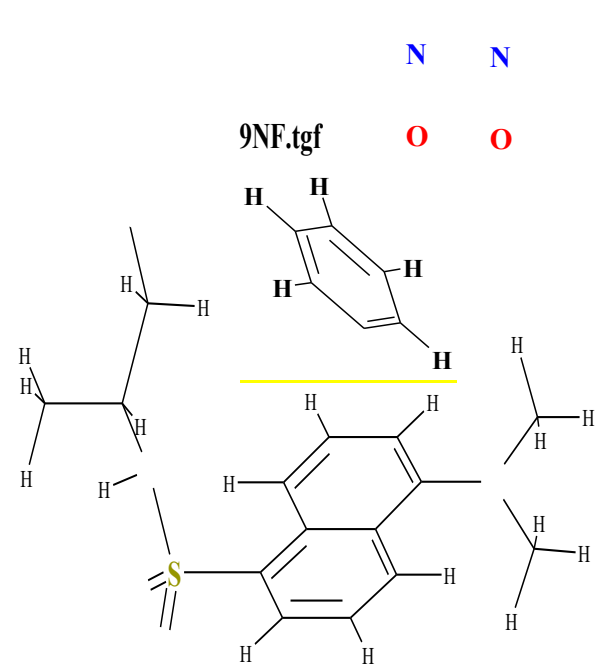


17. Ievietot Dansil-L-arginīnā Arg dotos atomus **9NR.pdb! 2XVW.pdb** Proteīnu Datu Banka PDB!

Proteīnu Datu Banka PDB!
2XW1.pdb

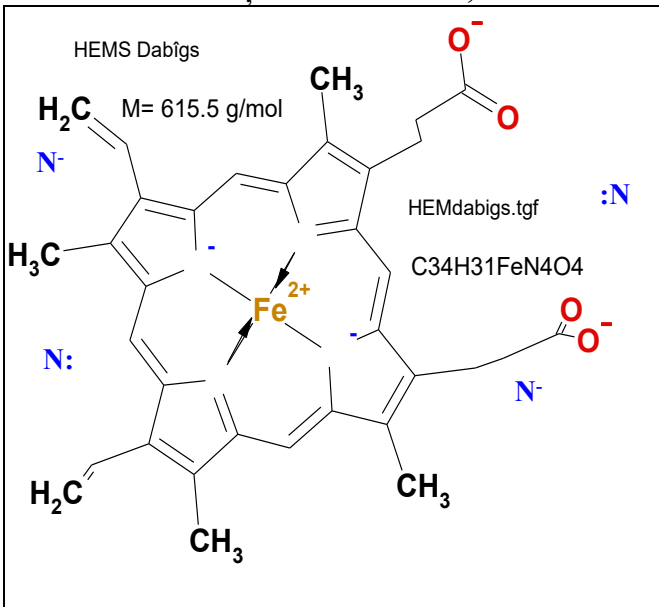
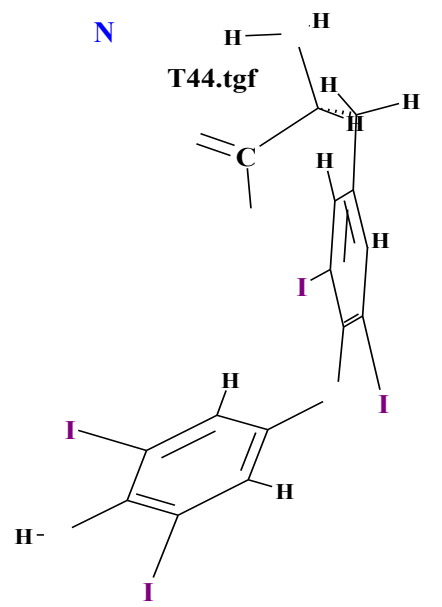
18. Ievietot Dansil-L-norvalīnā dotos atomus **9NV.pdb**

19. Ievietot Dansil-L-fenilalanīnā dotos atomus un benzola gredzenu **9NF.pdb HSA! 2XW0.pdb**



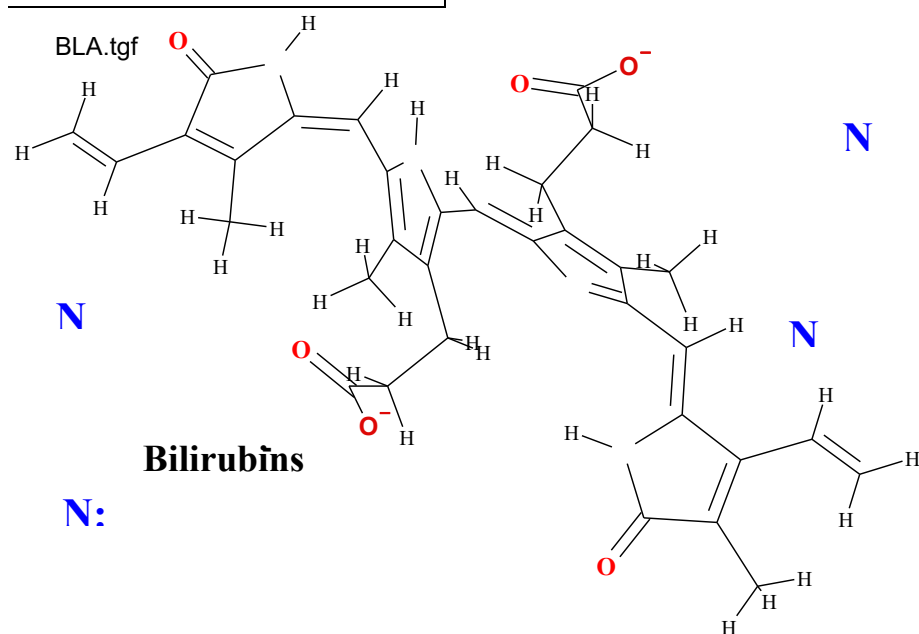
20. Ievietot Dansil-L-glutamātā Glu dotos atomus **9NE.pdb** HSA molekulā Proteīnu Datu Banka PDB
2XSI.pdb

21. Ievietot **L-Tiroksīnā** dotos četrus skābekļa un N atomus, O O⁻ O O kuru



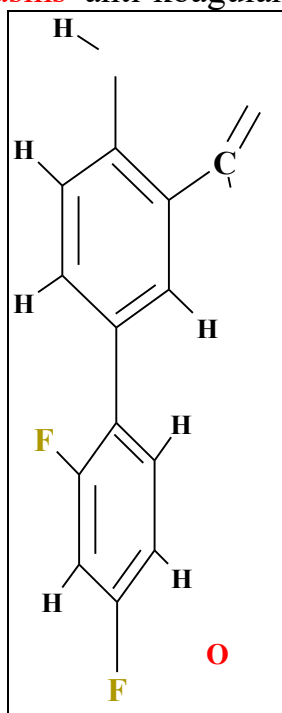
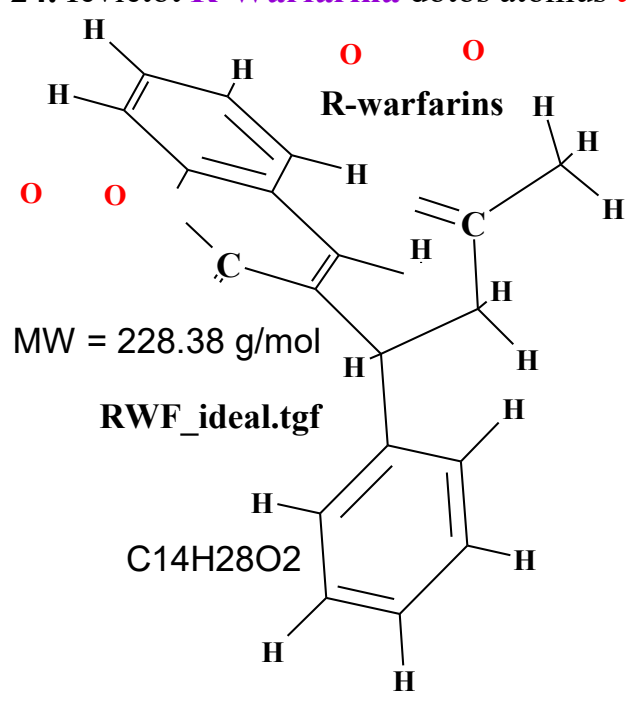
izdala folikulārās
epitēlija šūnas
vairogdziedzerī
tiroīdhormons saistīts
HSA transportam
1HK1.pdb Proteīnu
Datu Banka PDB

22. Ievietot 2 N: un
2 N⁻ pirolu atomus
hēmā koordinētus ap
dzelzs(II) atomu HSA
Proteīnu Datu Banka_
PDB 1O9X.pdb



23. Ievietot 4 pirolu slāpekļa N
atomus koordinētus hēmā ap
dzelzs(II) atomu.
Metabolīta **Bilirubīna**: **BLA.pdb**
transports
saistītu cilvēka seruma albumīnā
HSA
protoporfīrīna cikla
priekšvēstnesis cieši saistīti
olbaltumvielā. Prostētiskā grupa
Proteīnu Datu Banka_
PDB 2VUE.pdb

24. Ievietot **R-Warfarīnā** dotos atomus asins anti-koagulants cilvēka seruma albumīnā **HSA**
2BXD.pdb



Proteīnu Datu Banka PDB struktūra.

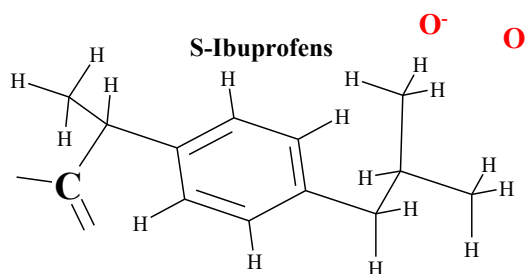
25. Ievietot **Diflunizālā** dotos
atomus
nesteroidālo pretiekaisuma
zāļu molekulā
NSAIA 1FL.pdb
cilvēka seruma albumīnā **HSA**
Proteīnu Datu Banka
PDB 2BXE.pdb

26. Ievietot **Ibuprofēna** dotos divus atomus nesteroidālas

pretiekaisuma zāles **NSAIA**

cilvēka seruma albumīnā **HSA**

2BXG.pdb Proteīnu Datu Banka **PDB** **IBP.pdb**.

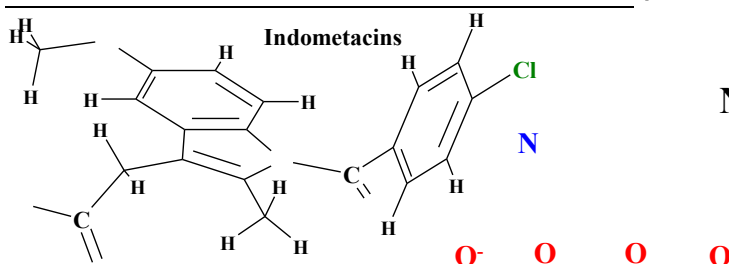


27. Ievietot **IndoMetacīnā** dotos piecus atomus

nesteroidālās pretiekaisuma zālēs

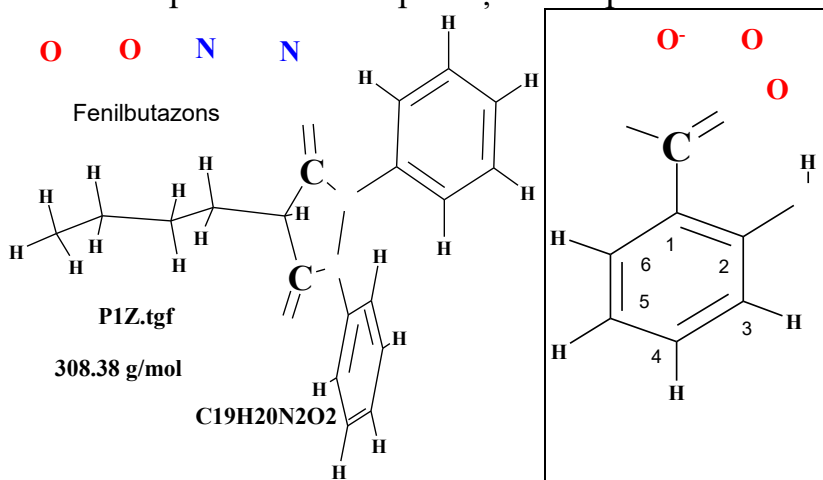
NSAIA IMN.pdb cilvēka seruma albumīnā **HSA**

Proteīnu Datu Banka **PDB** **2BXM.pdb**

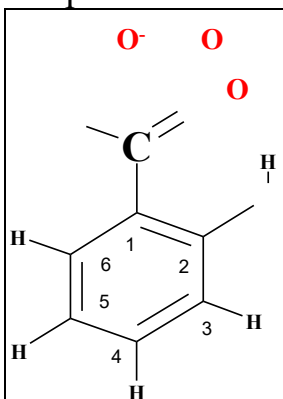


28. Ievietot **fenil Butazonā** dotos atomus nesteroidālas pretiekaisuma zāles, analgētiķis, pretdrudža-antipiretiķis **P1Z.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka

PDB **2BXM.pdb**

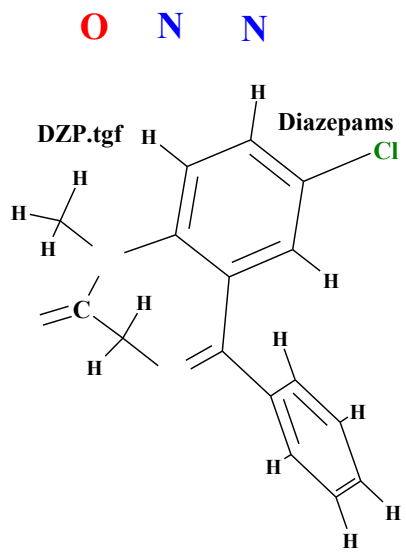


29. Ievietot **Salicilskābē** dotos atomus **2-hidroxi-benzoskābei** priekšvēstnesis pretiekaisuma zālēm aspirīns ar acilētu hidroksila grupu pie **salicilskābes** C2 - **O-H** benzola ciklā **SAL.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2I2Z.pdb**, **2BXL.pdb**

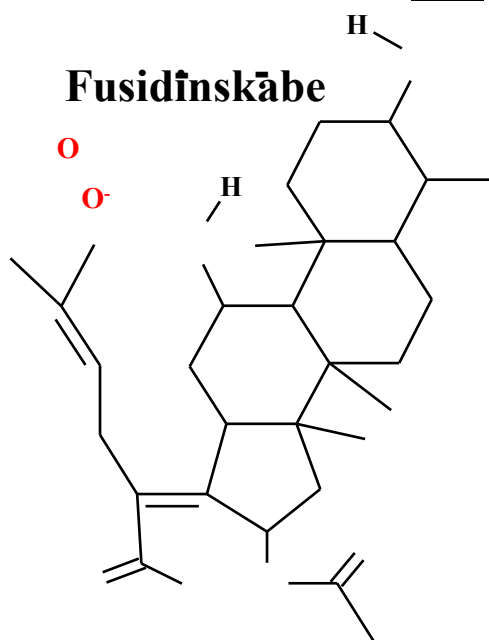


30. Ievietot **Diazepāmā** dotos trīs atomus antikonvulsants, anksiolītiķis

sedatīvs(nomierinošs), relaksants(atbrīvotība), amnēzijas: cilvēka ķermeņa medicīnas formula **DZP.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2BXF.pdb**



31. Ievietot **Fuzidīnskābē** dotos 6 atomus, antibiotiķim, anti-bakteriāls aģents, Olbaltumvielu sintēzes inhibitors formula **FUA.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA**



Proteīnu Datu Banka **PDB** **2VUF.pdb**

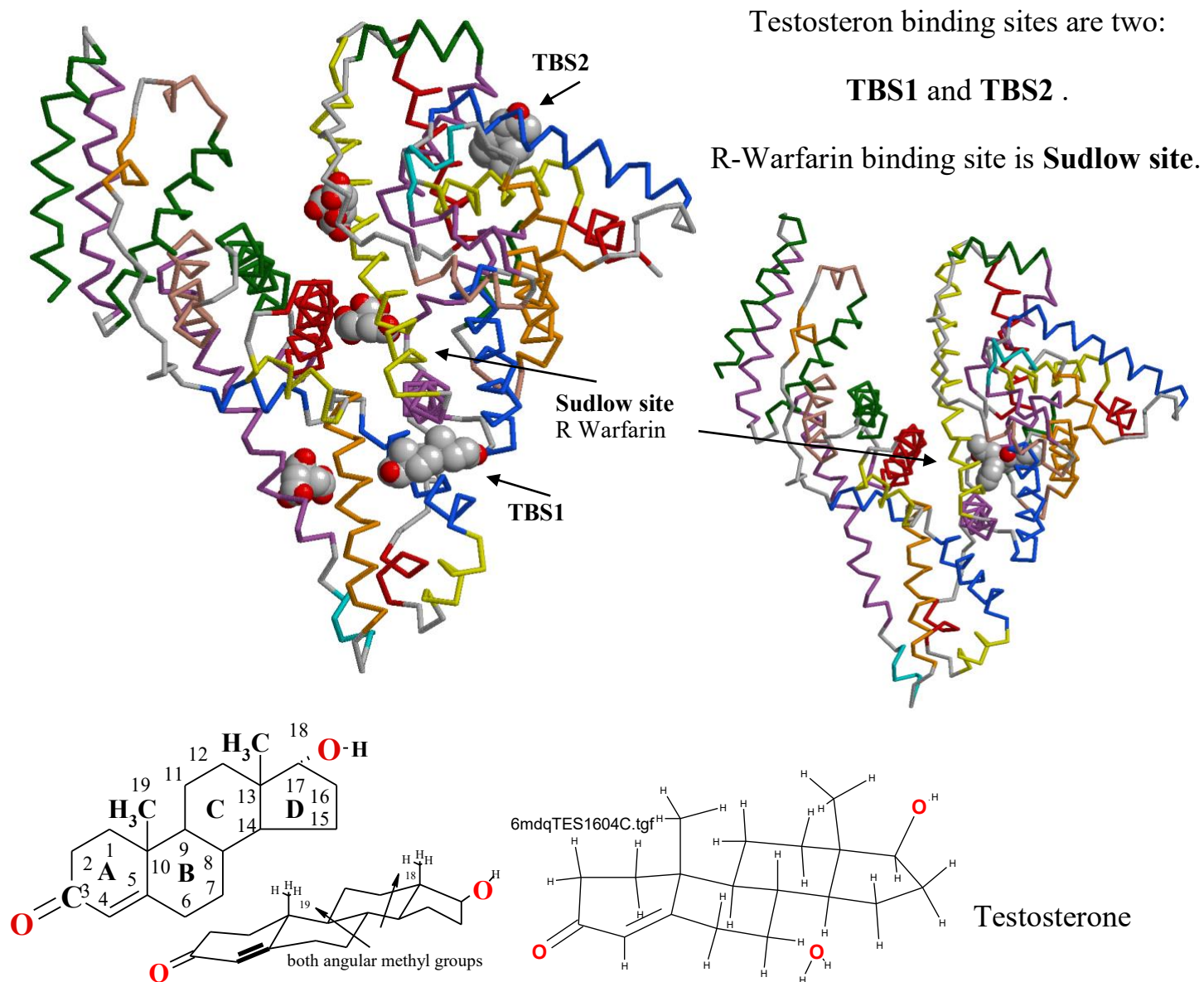


Fig. 5 ESA domains and testosterone binding sites. The testosterone (yellow) and citrate molecules (magenta) are shown with atoms as spheres. Warfarin (from structure of HSA complexed with warfarin, PDB ID: [2BXD](#)), which is bound at Sudlow site I,⁶ is shown with atoms as blue spheres. Testosterone was predicted to bind in Sudlow site I by Peters.¹ The interactive collection of superpositions of the ESA–testosterone complex and other SA complexes with selected compounds that bind in TBS1 or TBS2 is available at ; <https://molstack.bioreproducibility.org/c/hYYh/>. and in: [Chem Sci. 2019 Feb 14; 10\(6\): 1607-1618.](#)