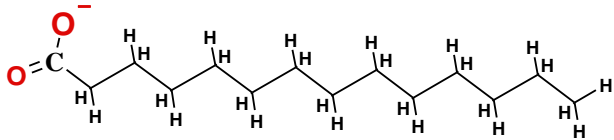


A. Cilvēka (Human) seruma albumīns HSA: pētījums:

ChemScape MDL   RasMol ; MAGE   Firefox v.3.5.5 aplikācija.

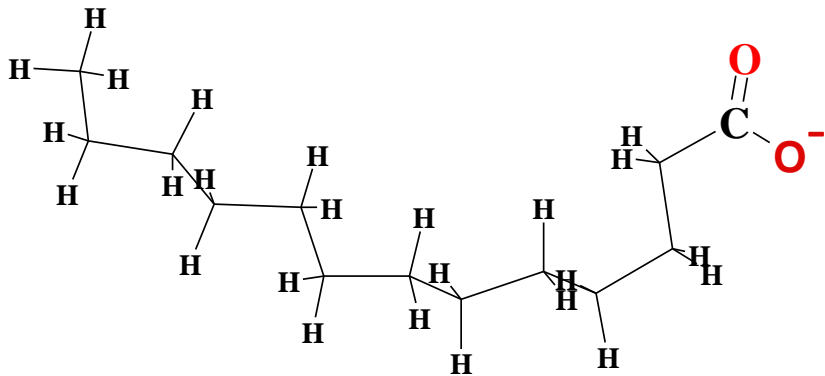
B. uzdevums RSU Āra Kakša 2025 HSA : <http://aris.gusc.lv/ChemFiles/Albumin/cycos.html>

1. Lietojot HSA Backbone Display iespēju, norādiet N-termināla domēna sākuma aminoskābi His3..... un C-termināla domēna aminoskābi Gly584.....! Cik aminoskābes veido HSA albumīna polipeptīdu 585..... (2.lpp) un cik 1E7Gmyrist.pdb primāro struktūru 584-3=581+1=582.....?
2. Kādas ir transportējamo ar HSA asins plazmā lipīdu molekulu īpašības? 1. Taukskābes, 2. warfarīns, 3. aspirīns ir difīlas ar hidrofīlu un hidrofobām (ne-polārām) funkcionālām grupām.
3. Attēlot deprotonētas miristīnskābes C14 struktūr formulu ar skābekļa atomiem anjonā!



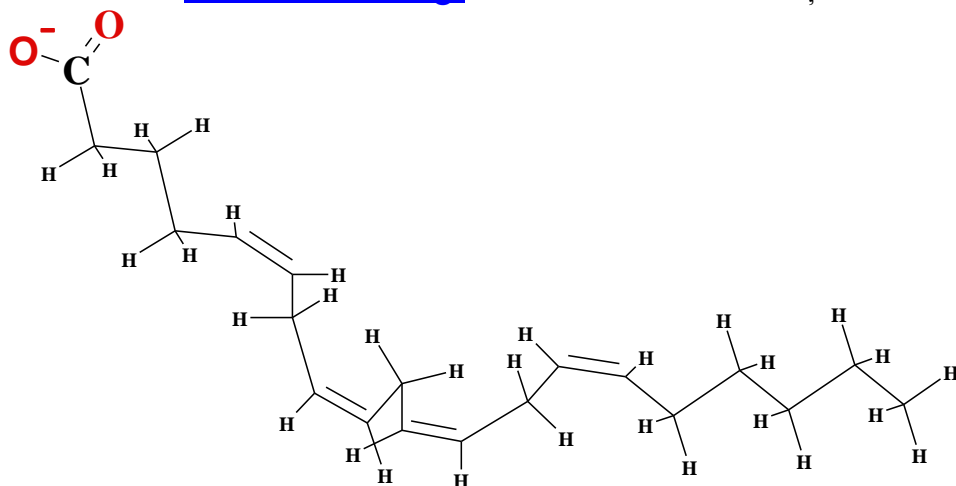
3a. Kāds maksimāls skaits taukskābju karboxilāta anjonu saistīti HSA cilvēka seruma albumīnā 1E7G.pdb? ...7.....

4. Cik alfa spirāles veido cilvēka seruma albumīnu HSA? 33 Alfa-spirāles.....
5. Cik domēni atrodas HSA molekulā un kā tos sauc? trīs domēni I, II, III
6. Kādas & cik aminoskābes ir polipeptīda virknē (sekvencē) katrā domēnā?.....
I G207-H3+1=205... II K372-E208+1=165..... III G584-V373+1=212.....
7. Kāda ir cilvēka seruma albumīna HSA cirkulējoša koncentrācija asiņu plazmā? 0.6 mM
8. Cik disulfīdu saites -S-S- saista 33 attālinātas spirāles!17 -S-S-.....
9. Kuras septiņas(6 IIA) spirāles ir homologu domēnos IA-IIA-III? IA.....
H1,H2,H3,H4,H5,H6,H7 IIAH12,H13,H14,H15,H16,H17
IIIA.....H23,H24,H25,H26,H27,H28,H29
10. Kuras četras(5) spirāles ir homologu domēnos IB-IIB-III? IBH8,H9,H10,H11
IIBH19,H20,H21,H22 IIBH30,H31,H32,H33



11. Ievietot steirīnskābes C18 karboksila atomus C=O, C-O!
12. Cik skābes piesaistītas HAS cilvēka seruma albumīnā 1E7I.pdb? 7

13. Ievietot arahidonskābes.tgf C20:4 struktūrā skābekļa atomus anjonā un 4 divkārsās saites!



14. Cik arahidonskābes piesaistītas HAS cilvēka seruma albumīnā 1GNJ.pdb? ...7...

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:

DAHKSEVAHRFKDLGEEFNKALVLIIFAQYLQCCPFEDHVKLVNEVTEFAKTCVADESAENCDSLHTLFGDKLCTVATL
RETYGEMADCCAKQEPERNECFLQHKDDNPRLVLRPEVDVMCTAFHDNEETFLLKLYLIEIARRHPYFYAPPELLFFAKR
YKAAFTCECCQAADKAACLLPKLDELDRDEGKASSAKQRLKCASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPAEFAEVS KLVDLT
VHTECCHGDLLECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPADLPSLAADFVESKDVCKNYA
EAKDVLGFMFLYEYARRHPDYSVVLRLAKTYETTLKCCAAADPHECYAKVDFEFKPLVEEPQNLIKQNCLEFQJGE
YKFQNALLVRYTKKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAEDYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCTES
LVNRRPFCFALEVDETYVPKEFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQALVELVKHKPKATKEQLKAVMDDFAAFVEKCK
ADDKETCFAEEGKLVAAASQAALGL

AA	pK _{COO}	pK _{NH₃⁺}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{COO}	pK _{NH₃⁺}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{COO}	pK _{NH₃⁺}	pK _{RR}	Nr	AA	pK _{COO}	pK _{NH₃⁺}	pK _{RR}	Nr			
D	0	9.6	3.65	1	R	0	0	12.48	144	55	K	0	0	10.53	286	109	K	0	0	10.53	439	163
H	0	0	6	3	R	0	0	12.48	145	56	H	0	0	6	288	110	H	0	0	6	440	164
K	0	0	10.53	4	H	0	0	6	146	57	E	0	0	4.25	292	111	E	0	0	4.25	442	165
E	0	0	4.25	6	Y	0	0	10.07	148	58	E	0	0	4.25	294	112	K	0	0	10.53	444	166
H	0	0	6	9	Y	0	0	10.07	150	59	D	0	0	3.65	296	113	R	0	0	12.48	445	167
R	0	0	12.48	10	E	0	0	4.25	153	60	E	0	0	4.25	297	114	E	0	0	4.25	450	168
K	0	0	10.53	12	K	0	0	10.53	159	61	D	0	0	3.65	301	115	D	0	0	3.65	451	169
D	0	0	3.65	13	R	0	0	12.48	160	62	D	0	0	3.65	308	116	Y	0	0	10.07	452	170
E	0	0	4.25	16	Y	0	0	10.07	161	63	E	0	0	4.25	311	117	H	0	0	6	464	171
E	0	0	4.25	17	K	0	0	10.53	162	64	K	0	0	10.53	313	118	E	0	0	4.25	465	172
K	0	0	10.53	20	E	0	0	4.25	167	65	D	0	0	3.65	314	119	K	0	0	10.53	466	173
Y	0	0	10.07	30	D	0	0	3.65	173	66	K	0	0	10.53	317	120	D	0	0	3.65	471	174
E	0	0	4.25	37	K	0	0	10.53	174	67	Y	0	0	10.07	319	121	R	0	0	12.48	472	175
D	0	0	3.65	38	K	0	0	10.53	181	68	E	0	0	4.25	321	122	K	0	0	10.53	475	176
H	0	0	6	39	D	0	0	3.65	183	69	K	0	0	10.53	323	123	E	0	0	4.25	479	177
K	0	0	10.53	41	E	0	0	4.25	184	70	D	0	0	3.65	324	124	R	0	0	12.48	484	178
E	0	0	4.25	45	R	0	0	12.48	186	71	Y	0	0	10.07	332	125	R	0	0	12.48	485	179
E	0	0	4.25	48	D	0	0	3.65	187	72	E	0	0	4.25	333	126	E	0	0	4.25	492	180
K	0	0	10.53	51	E	0	0	4.25	188	73	Y	0	0	10.07	334	127	D	0	0	3.65	494	181
D	0	0	3.65	56	K	0	0	10.53	190	74	R	0	0	12.48	336	128	E	0	0	4.25	495	182
E	0	0	4.25	57	K	0	0	10.53	195	75	R	0	0	12.48	337	129	Y	0	0	10.07	497	183
E	0	0	4.25	60	R	0	0	12.48	197	76	H	0	0	6	338	130	K	0	0	10.53	500	184
D	0	0	3.65	63	K	0	0	10.53	199	77	D	0	0	3.65	340	131	E	0	0	4.25	501	185
K	0	0	10.53	64	K	0	0	10.53	205	78	Y	0	0	10.07	341	132	E	0	0	4.25	505	186
H	0	0	6	67	E	0	0	4.25	208	79	R	0	0	12.48	348	133	H	0	0	6	510	187
D	0	0	3.65	72	R	0	0	12.48	209	80	K	0	0	10.53	351	134	D	0	0	3.65	512	188
K	0	0	10.53	73	K	0	0	10.53	212	81	Y	0	0	10.07	353	135	E	0	0	4.25	518	189
R	0	0	12.48	81	R	0	0	12.48	218	82	E	0	0	4.25	354	136	K	0	0	10.53	519	190
E	0	0	4.25	82	R	0	0	12.48	222	83	E	0	0	4.25	358	137	E	0	0	4.25	520	191
Y	0	0	10.07	84	K	0	0	10.53	225	84	K	0	0	10.53	359	138	R	0	0	12.48	521	192
E	0	0	4.25	86	E	0	0	4.25	227	85	D	0	0	3.65	365	139	K	0	0	10.53	524	193
D	0	0	3.65	89	E	0	0	4.25	230	86	H	0	0	6	367	140	K	0	0	10.53	525	194
K	0	0	10.53	93	K	0	0	10.53	233	87	E	0	0	4.25	368	141	E	0	0	4.25	531	195
E	0	0	4.25	95	D	0	0	3.65	237	88	Y	0	0	10.07	370	142	K	0	0	10.53	534	196
E	0	0	4.25	97	K	0	0	10.53	240	89	K	0	0	10.53	372	143	H	0	0	6	535	197
R	0	0	12.48	98	H	0	0	6	242	90	D	0	0	3.65	375	144	K	0	0	10.53	536	198
E	0	0	4.25	100	E	0	0	4.25	244	91	E	0	0	4.25	376	145	K	0	0	10.53	538	199
H	0	0	6	105	H	0	0	6	247	92	K	0	0	10.53	378	146	K	0	0	10.53	541	200
K	0	0	10.53	106	D	0	0	3.65	249	93	E	0	0	4.25	382	147	E	0	0	4.25	542	201
D	0	0	3.65	107	E	0	0	4.25	252	94	E	0	0	4.25	383	148	K	0	0	10.53	545	202
D	0	0	3.65	108	D	0	0	3.65	255	95	K	0	0	10.53	389	149	D	0	0	3.65	549	203
R	0	0	12.48	114	D	0	0	3.65	256	96	E	0	0	4.25	393	150	D	0	0	3.65	550	204
R	0	0	12.48	117	R	0	0	12.48	257	97	E	0	0	4.25	396	151	E	0	0	4.25	556	205
E	0	0	4.25	119	D	0	0	3.65	259	98	E	0	0	4.25	400	152	K	0	0	10.53	557	206
D	0	0	3.65	121	K	0	0	10.53	262	99	Y	0	0	10.07	401	153	K	0	0	10.53	560	207
H	0	0	6	128	Y	0	0	10.07	263	100	K	0	0	10.53	402	154	D	0	0	3.65	562	208
D	0	0	3.65	129	E	0	0	4.25	266	101	R	0	0	12.48	410	155	D	0	0	3.65	563	209
E	0	0	4.25	131	D	0	0	3.65	269	102	Y	0	0	10.07	411	156	K	0	0	10.53	564	210
E	0	0	4.25	132	K	0	0	10.53	274	103	K	0	0	10.53	413	157	E	0	0	4.25	565	211
K	0	0	10.53	136	K	0	0	10.53	276	104	K	0	0	10.53	414	158	E	0	0	4.25	570	212
K	0	0	10.53	137	E	0	0	4.25	277	105	E	0	0	4.25	425	159	E	0	0	4.25	571	213
Y	0	0	10.07	138	E	0	0	4.25	280	106	R	0	0	12.48	428	160	K	0	0	10.53	573	214
Y	0	0	10.07	140	K	0	0	10.53	281	107	K	0	0	10.53	432	161	K	0	0	10.53	574	215
E	0	0	4.25	141	E	0	0	4.25	285	108	K	0	0	10.53	436	162	L	2.36	0	0	585	216

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.

14.1 Summē 217 pK_a vērtības tabulā 1604.91..... un pieskaita 7 taukskābes $7*4,96=34,72$

Sasummētās 217 pK_a vērtības no tabulas un pieskaitot 7 taukskābju pK_a : $1604.91+34,72=1639.63$

Aprēķinu uzdevumi cilvēka seruma albumīna molekulai

Protolītisko konstanti pK_a izoelektrisko punktu $IEP=pK_a$ aprēķina saskaitot sānu virkņu $\Sigma pK_{aRsānu}$ grupu, un $pK_{aNterminālsNH_3}$ un $pK_{aCterminālsCOO}$ -konstanšu summu izdalot ar skābes grupu skaitu molekulā NpK_a :

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

14.1 Summārais protolītisko līdzsvaru skaits ir $NpK_a=215.....+2.....+7=217.....+7=224$

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 2.lapas pusē ir saskaitāma kā $\Sigma pK_{aRsānu} grupu+pK_{aNtermināls}+pK_{aCtermināls}+7*pK_a=1639.63$

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

$IEP=1604.91 / 217 = 7.3958986$ bez 7 taukskābēm albumīna molekulā

14.2b. $IEP=1639.63 / 224 = 7.3197768$ 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⁻ & -NH₃⁺..... 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 asins plazmā

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:

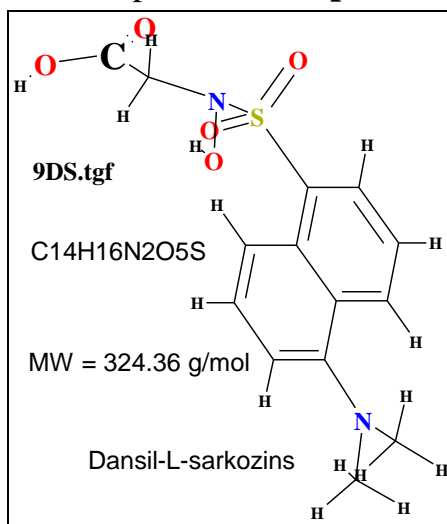
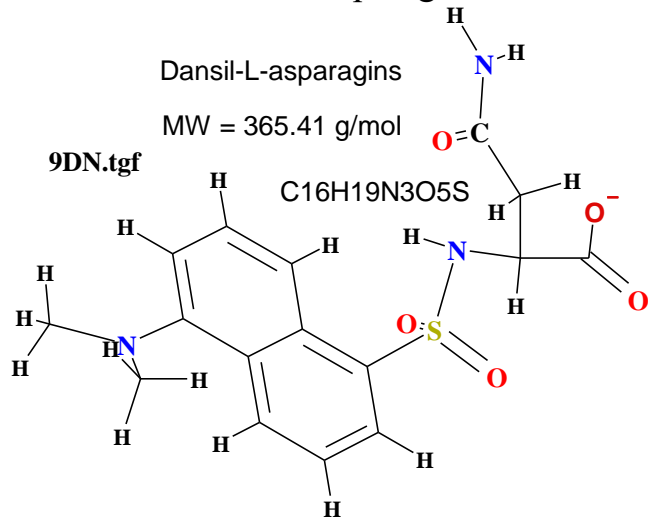
-COOH & -NH₃⁺ pozitīvs (+) lādiņš $IEP=7.32 \div 7,40 < pH=8,8$ lādiņš ir negatīvs(-) -COO⁻ & -NH₂.

14.6 Aprēķināt $C=10^{-7,4002}$ M albumīna šķīduma pH ar *Ostvalda atšķaidīšanas likuma* aprēķinu koncentrācijas

$$C \text{ logaritmā } pH = \frac{pK_a - \log C}{2} = \frac{7,3198 - \log 10^{-7,4002}}{2} = \frac{7,3198 + 7,4002}{2} = 14,720 / 2 = 7,36.....$$

Atraktora 7,36 albumīna koncentrācija ir $C=10^{-7,4002}$ M .

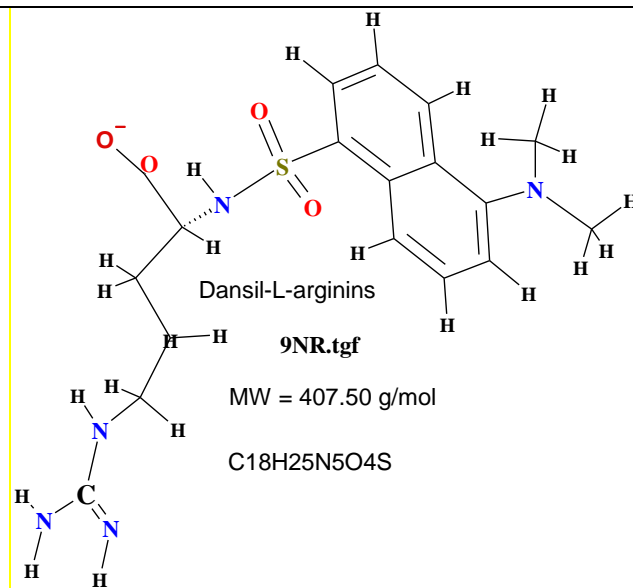
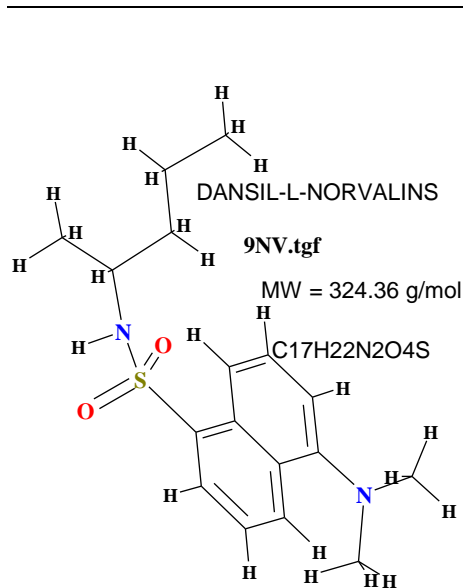
15 Ievietot Dansil-L-asparaginā dotos atomus **9DN.pdb** ! **2XVV.pdb** Proteīnu Datu Banka!



HSA molekulā

Proteīnu Datu
 Banka PDB!
2XVQ.pdb
 16. Ievietot
 Dansil-
 L-sarkozīnā

dotos atomus **9DS.pdb!**

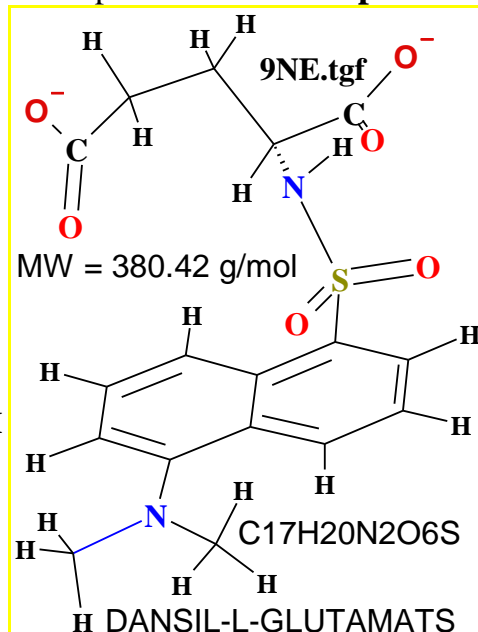
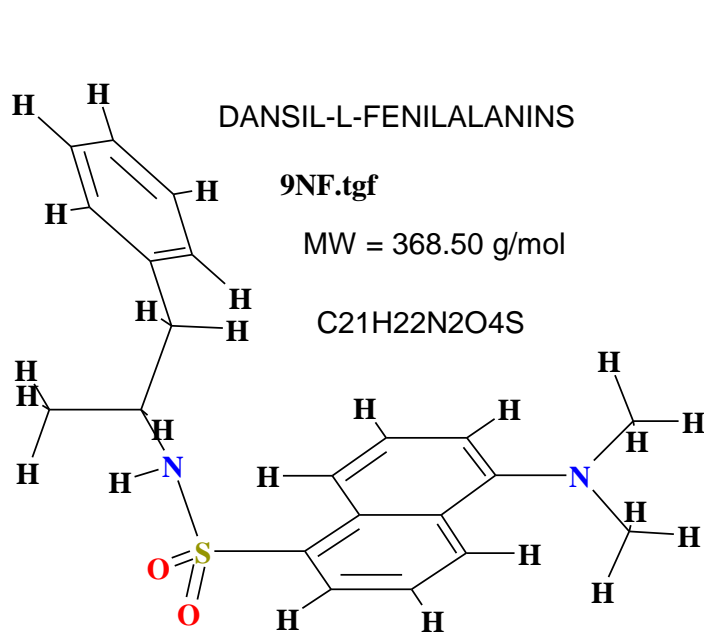


17. Ievietot Dansil-L-
 arginīnā Arg
 dotos atomus
9NR.pdb! **2XVW.pdb**
 Proteīnu Datu
 Banka PDB!

Proteīnu Datu
 Banka PDB!
2XW1.pdb

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

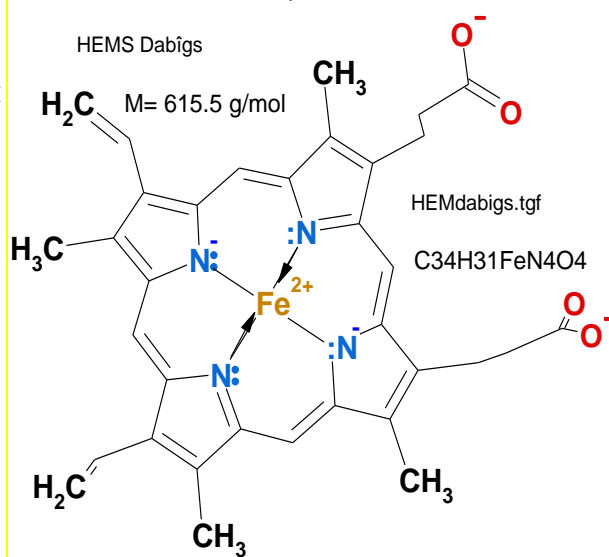
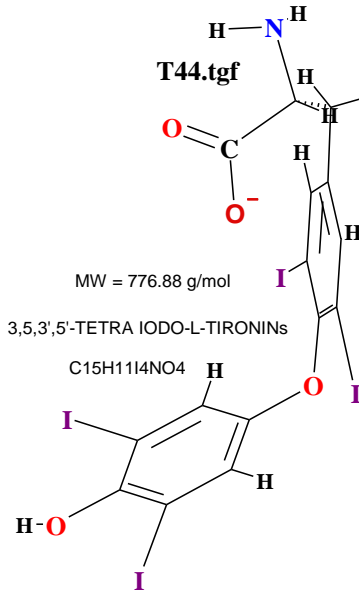
19. Ievietot Dansil-L-fenilalaninā dotos atomus **9NF.pdb** HSA! **2XW0.pdb** Proteīnu Datu Banka



PDB!

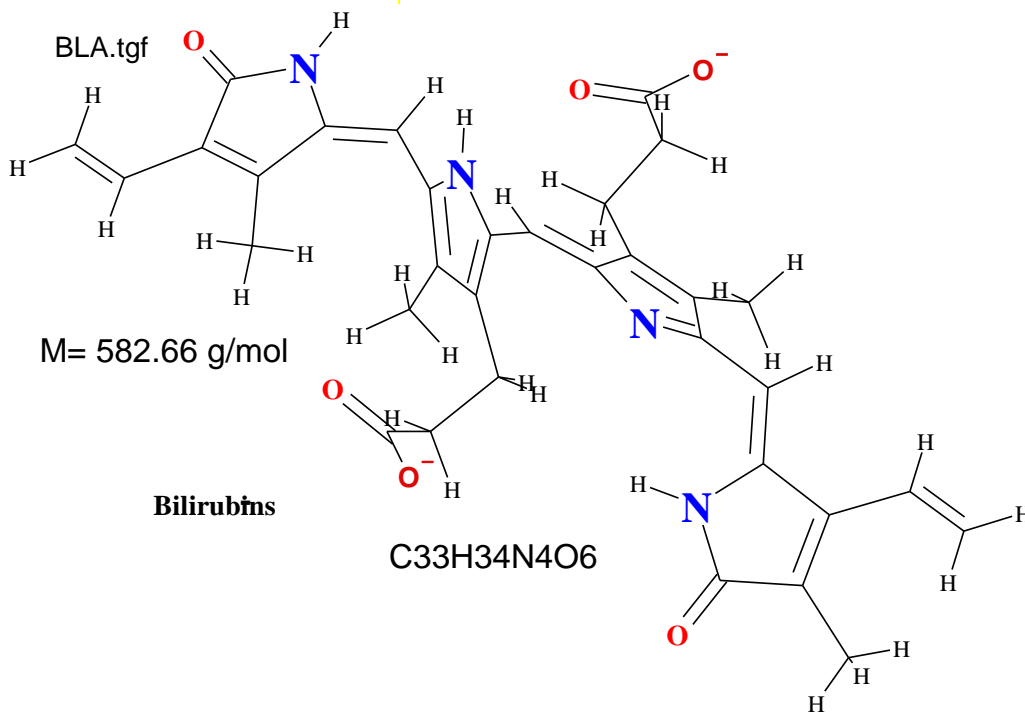
20. Ievietot
 Dansil-
 L-glutamā Glu
 dotos atomus
9NE.pdb
 HSA molekulā
 Proteīnu Datu
 Banka PDB
2XSI.pdb

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



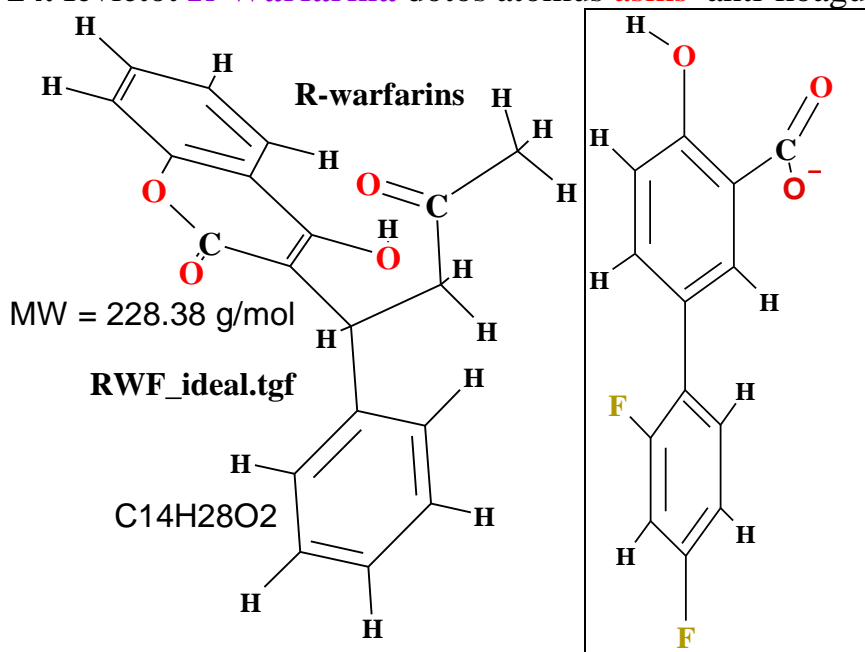
izdala folikulārās
 epitēlija šūnas
 vairogdziedzerī
 tiroīdhormons saistīts
 HSA transportam
1HK1.pdb Proteīnu
 Datu Banka PDB

22. Attēlot 2 N: un 2 N-
 pirolu atomus hēmā
 koordinētus ap dzelzs(II)
 atomu HSA
 Proteīnu Datu Banka PDB
109X.pdb



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

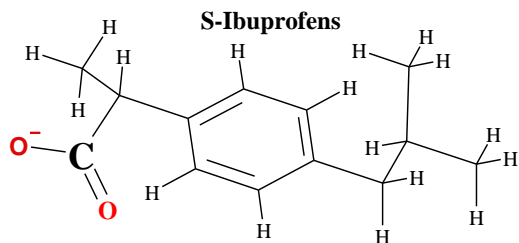
24. Ievietot **R-Warfarīnā** dotos atomus **asins** anti-koagulants cilvēka seruma albumīnā **HSA**
2BXD.pdb



Proteīnu Datu Banka PDB struktūra.

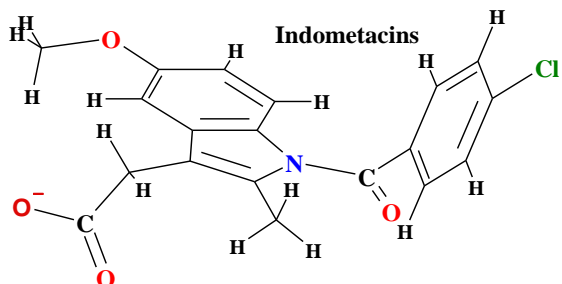
25. Ievietot **Diflunizālā** dotos atomus
 nesteroidālo pretiekaisuma
 zāļu molekulā
NSAIA 1FL.pdb
 cilvēka seruma albumīnā **HSA**
 Proteīnu Datu Banka
 PDB **2BXE.pdb**

26. Ievietot **Ibuprofēna** dotos atomus nesteroidālas pretiekaisuma zāles NSAIA cilvēka seruma albumīnā **HSA**

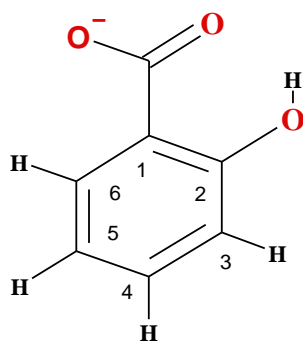
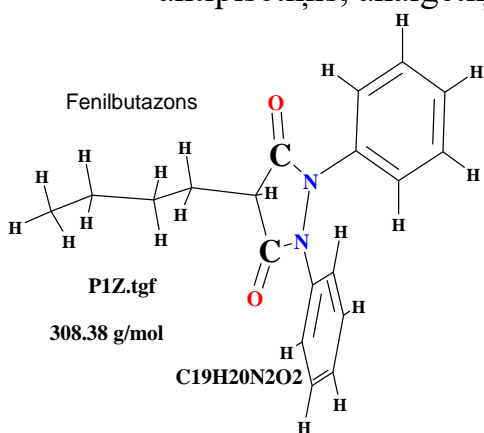


2BXG.pdb Proteīnu Datu Banka **PDB** **IBP.pdb**.

27. Ievietot **Indometacīnā** dotos piecus atomus nesteroidālas pretiekaisuma zāles NSAIA **IMN.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2BXM.pdb**

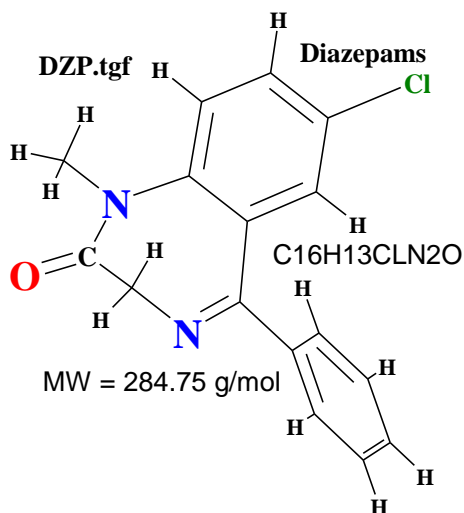


28. Ievietot **fenil Butazonā** dotos atomus nesteroidālas pretiekaisuma zāles, antipisētīķis, analģētiķis **P1Z.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2BXM.pdb**.

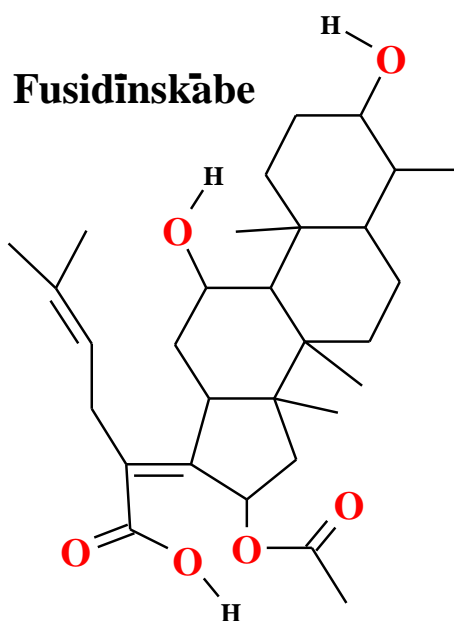


29. Ievietot **Salicilskābē** dotos atomus **2-hidroxi-benzoskābei** priekšvēstnesis pretiekaisuma zālēm aspirīns ar acilētu hidroksila grupu pie **salicilskābes** C2 -**O-H** benzola ciklā **SAL.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2I2Z.pdb**, **2BXL.pdb**

30. Ievietot **Diazepāmā** dotos 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,



Olbumvielu sintēzes inhibitoru formula **FUA.pdb** cilvēka seruma albumīnā **HSA** Proteīnu Datu Banka **PDB** **2VUF.pdb**

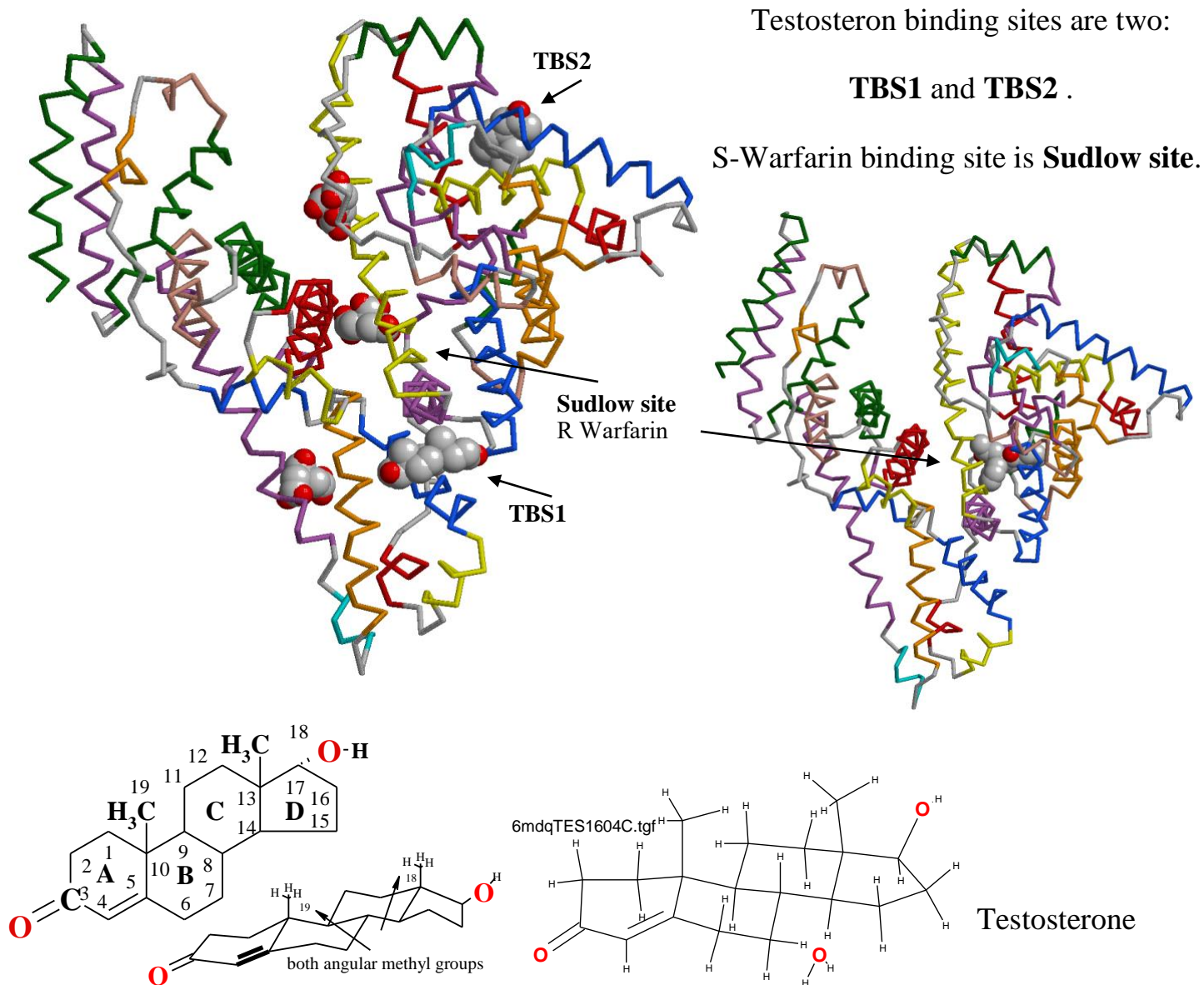


Fig. 5 ESA domains and testosterone binding sites. The testosterone (yellow) and citrate molecules (magenta) are shown with atoms as spheres. Warfarin (from structure of HSA complexed with warfarin, PDB ID: [2BXD](#)), which is bound at Sudlow site I,⁶ is shown with atoms as blue spheres. Testosterone 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.](#)