

АНОТАЦІЯ

Проведено моделювання молекулярної динаміки повнорозмірного каналу TRPC4. Перш за все, методом гомологічного моделювання було відтворено С-кінцевий домен каналу, структура якого досі була не відома. Далі було створено систему із білково-мембранним комплексом, заповнену молекулами води та іонами, після чого проведено моделювання молекулярної динаміки тривалістю 15 наносекунд. У результаті було охарактеризовано особливості структури С-кінцевого домену каналу TRPC4 і визначено сайти зв'язування катіонів, що є визначальним для селективності каналу, та молекул PIP₂, які є потужними регуляторами активності каналу.

Випускна кваліфікаційна робота викладена на 54 сторінках та ілюстрована 4 рисунками. Список використаних джерел включає 49 робіт.

Ключові слова: іонні канали, моделювання.