

АНОТАЦІЯ

Методами молекулярного моделювання (докінг, молекулярна динаміка) вивчена можливість фулерену C_{60} зв'язуватись з порою катіонного каналу TRPC4. У роботі провели молекулярний докінг у програмі AutoDock та визначили ймовірні сайти зв'язування пори каналу з фулереном. Раніше у роботі Dryn O. Dariia et al (2018) показали, що C_{60} зменшує катіонний струм через канал TRPC4, що спричинений активацією мускаринових рецепторів (mI_{CAT}). Блокада цих каналів може допомогти у вилікуванні хвороб, пов'язаний з надмірною моторикою шлунково-кишкового тракту, епілепсії, проблем з пам'яттю.

У дипломній роботі показані можливі ділянки зв'язування протягом пори каналу фулерену, вказана передбачена енергія зв'язування у цих місцях, а також візуалізовані результати роботи. Також було змодельовано канал TRPC4 у мембрані, що збагачена на холестерол.

Кваліфікаційна робота викладена на 47 сторінках, включає в себе 12 рисунків та дві таблиці. Список використаних джерел включає в себе 63 роботи.

Ключові слова: TRPC4, C_{60} фулерен, молекулярний докінг, молекулярна динаміка.