

## **Молекулярное моделирование потенциал зависимого калиевого канала KcsA**

**Узунян О.А.**

*студентка*

*Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия*

Потенциал зависимые калиевые каналы входят в семейство потенциал зависимых катионных (калиевых, натриевых и кальциевых) каналов, которые активируются и проводят ионы в ответ на изменение трансмембранного потенциала. Такая форма работы канала лежит в основе генерации нервного и мышечного потенциалов действия.

Простейшим представителем семейства потенциал зависимых каналов, является бактериальный калиевый канал KcsA, кристаллографическая структура которого, была получена в 1998 году. Данный белок представляет собой четыре одинаковые молекулы (субъединицы), окружающие центральную проводящую ионы пору, стенки которой “облицованы” двумя гидрофобными спиральными сегментами - S5 и S6 - каждой субъединицы. Петли, соединяющие эти сегменты образуют селективный фильтр канала. Канал может находиться в двух конформационных состояниях – открытом и закрытом.

В настоящее время механизм открытия калиевых каналов не вполне изучен и представляет собой интересную и актуальную проблему. В работе рассматривается вопрос о структурной организации потенциал зависимого канала KcsA, методах построения компьютерной модели открытой конформации, расчетов молекулярной динамики структурных изменений при открытии канала.

В работе также изучается динамика прохождения положительно заряженных ионов через канал.

Обсуждаются проблемы проведения молекулярного докинга в канале и моделирование взаимодействия блокатора калиевых каналов тетраэтиламмония с участком селективного фильтра канала KcsA.

Работа выполнена на кафедре биоинженерии (научный руководитель профессор К.В.Шайтан) при финансовой поддержке РФФИ (грант 04-04-49645), Роснауки, Правительства Москвы и US CRDF.