

## Моделирование закрытого ионного канала Kv11

Научный руководитель – Соколова Ольга Владимировна

*Архипова Елизавета Дмитриевна*

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет, Кафедра биоинженерии, Москва, Россия

*E-mail: Lizaannaar@yandex.ru*

Изучение структуры белковых молекул позволяет глубже понимать их строение и возможность взаимодействия с определенными лигандами. В данной работе был использован калиевый потенциал зависимый канал человека hERG (Kv11.1). Мутации в данном канале приводят к различным сердечным заболеваниям человека, в том числе и к синдрому удлиненного QT интервала. Для лечения пациентов используют лекарства, активное вещество которых связывается с каналом[1][2]. Выбор наилучшего фармакологического препарата во многом зависит от понимания строения канала. Также немаловажно изучать взаимодействия канала с различными лигандами, именно так можно подобрать наиболее подходящий и эффективный препарат.

В предыдущих исследованиях 2017 года была получена структура данного канала в открытом состоянии[] Также есть исследования где предложена модель открытого калиевого канала. Также в 2009 году были изучены последствия взаимодействий блокаторов с hERG и их влияние на физиологию человека[]. В нашей работе планируется моделирование закрытого hERG и его взаимодействия с различными лигандами, которые закрывают данный канал.

Таким образом в данной работе была предложена модель закрытого человеческого калиевого канала.

### Источники и литература

- 1) 1.Hyang-Mi Lee, Myeong-Sang Yu, Sayada Reemsha Kazmi, Seong Yun Oh, Ki-Hyeong Rhee, Myung-Ae Bae, Byung Ho Lee, Dae-Seop Shin, Kwang-Seok Oh, Hyithaek Ceong, Donghyun Lee, Dokyun Na. Computational determination of hERG-related cardiotoxicity of drug candidates BMC Bioinformatics 2019 May 29;20(Suppl 10):250
- 2) 2.Subha Kalyaanamoorthy, Khaled H Barakat Development of Safe Drugs: The hERG Challenge Med Res Rev 2018 Mar;38(2):525-555.
- 3) 3.Wang, W.W., MacKinnon, R. (2017). Cryo-EM structure of the human ether-a-go-go related K<sup>+</sup> channel. Cell, 169: 422-430.e10.
- 4) 4.Lupe Du 1 , Minyong Li, Qidong You The interactions between hERG potassium channel and blockers 2009;9(4):330-8