

Název práce: Molekulárně dynamické simulace iontového kanálu TRPA1

Autor: Vlastimil Zíma

Katedra: Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Vedoucí disertační práce: RNDr. Ivan Barvík, PhD., Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Abstrakt: Iontový kanál TRPA1 je jedním ze členů rodiny TRP kanálů. Tyto kanály jsou v poslední době důležitým cílem výzkumu, neboť hrají důležitou roli v rozličných buněčných a tělesných pochodech, zvláště ve smyslech. Soustředili jsme se zejména na iontový kanál TRPA1 pro jeho vliv na vnímání bolesti u lidí. Protože mechanismy stojící za otevíráním tohoto kanálu nejsou plně vysvětleny na molekulární úrovni, jejich popis je zásadní pro návrh nových léků proti bolesti. Použili jsme homologní modelování a molekulární dynamiku ve spojení s elektrofyziologickými experimenty, abychom poskytli vhled do těchto mechanismů. Přispěli jsme popisem pravděpodobného vazebného místa pro vápníkové ionty a nalezením mnoha funkčně důležitých aminokyselin zejména v sensorové doméně kanálu TRPA1, která je vnořena do membrány.

Klíčová slova: napětím otevírané iontové kanály, iontový kanál TRPA1, molekulární dynamika, homologní modelování