



TURKISH CHEMICAL SOCIETY
Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry
Owned by the Turkish Chemical Society
Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org
Founded in February, 2014

ENERGETICS OF ION TRANSFER THROUGH SODIUM CHANNEL

SODYUM KANALINDA İYON TRANSFERİNİN ENERJİSİ

Murat Çavuş^{1*}, Turgut Baştuğ², Serdar Kuyucak³

¹ Faculty of Education, Bozok University, Yozgat, Turkey

² Department of Material Science and Nanotechnology Engineering, TOBB ETU, Ankara, Turkey

³ School of Physics, University of Sydney, Sydney, Australia

*Corresponding author. murat.cavus@bozok.edu.tr

ABSTRACT

The crystal structure of the voltage-gated bacterial Nav channel obtained from *Arcobacter butzleri* fortunately [1]. Voltage-gated sodium channels are very important due to the onset of action potentials. Molecular dynamics modelling has been conducted to understand the structure-function relationship for this channel (as shown in figure 1). Using free energy methods, energetics of ion binding is studied and the binding energies and positions were obtained for Na^+ ions in the filter. It has been known from the experimental data that Nav and Cav channels are similar and Ca^{++} ions are permeating in the Nav channels. A potential of mean force calculation is performed for Ca^{++} ion through the channel axis of the Nav. As a result of this study we observed Ca^{++} ions have a higher binding affinity than that Na^+ . Based on these, we studied the potential of mean force for a Na^+ ion in case of a Ca^{++} ion in the filter of the channel.

We concluded that if a single calcium ion binds to the specific location of the selectivity filter of the channel, it blocks sodium permeation through sodium channel by providing high energy barrier where the calcium locate in the selectivity filter.

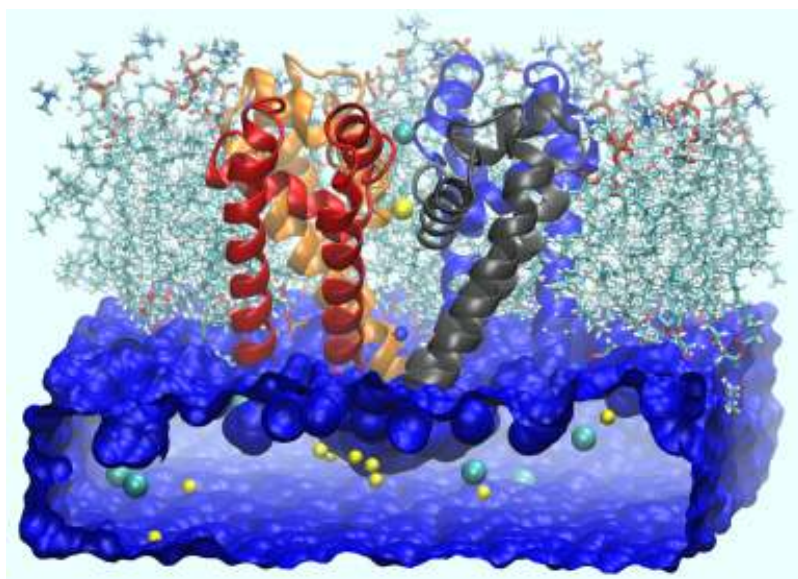


Figure 1. NavAb system.

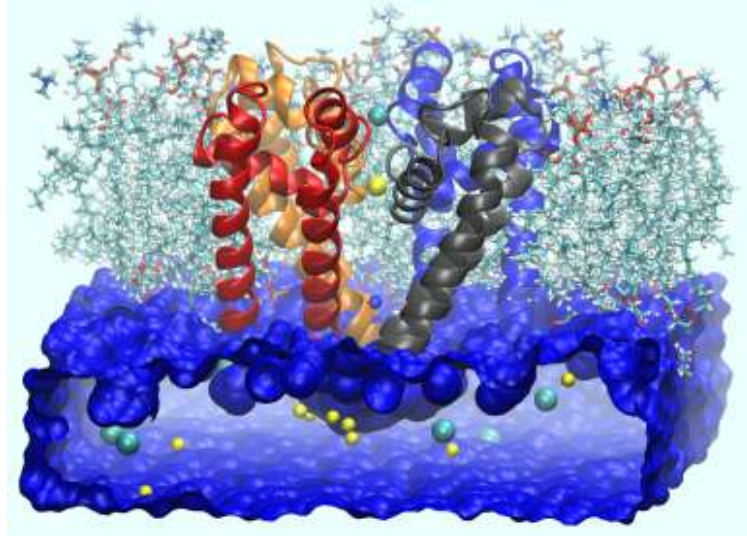
Keywords

Molecular Dynamics, potential of mean force, ion channels.

ÖZET

Voltaj-kapılı bakteriyel Nav kanalının kristal yapısı *Arcobacter butzleri*'den alınmıştır [1]. Voltaj-kapılı sodyum kanalları aksiyon potansiyellerinin başlaması için çok önemlidir. Moleküler dinamik modelleme bu kanalın yapı-fonksiyon ilişkisini anlamak için kullanılmıştır (Şekil 1'de gösterildi). Serbest enerji metodları kullanarak iyon bağlanmasının enerjisi çalışılmış, Na^+ iyonu için filtre içinde bağlanma pozisyonları ve bağlanma enerjileri elde edilmiştir. Deneysel verilerden Nav kanalının Cav kanalına benzer olduğu bilinmekte ve Nav kanalında Ca^{++} iyonu geçtiği gözlenmektedir. Ca^{++} iyonunun Nav kanalında geçmesini anlamak için kanal filtresi boyunca Ca^{++} iyonu için Ortalama Kuvvet Potansiyel hesabı (PMF) yapılmıştır. Bu çalışma sonucunda Ca^{++} iyonunun Na^+ iyonu ile karşılaştırıldığında daha yüksek bir bağlanma afinitesine sahip olduğu gözlenmiştir. Bunlardan yola çıkarak kanal fitresinde bir Ca^{++} iyonu varken Na^+ iyonunun Ortalama Kuvvet Potansiyeli çalışıldı.

Eğer tek bir kalsiyum iyonu kanalının seçici filtresinin belirli bir konumuna bağlanırsa, kalsiyumun bulunduğu bölgedeki enerji bariyerini yükselterek sodyum kanalı boyunca sodyum geçişini blokladığı sonucuna varıldı.



Şekil 1. NavAb sistemi.

Anahtar Kelimeler

Moleküler Dinamik, ortalama kuvvet potansiyeli, iyon kanalları.

Kaynaklar / References

[1] Payandeh, J., Scheuer, T., Zheng, N. and Catterall W. A., *Nature*, 475, 353-359, (2011)