



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

## **BINDING MECHANISM OF CALCIUM AND SODIUM ION OF CavAb CHANNEL**

### **CavAb KANALINA KALSIYUM VE SODYUM İYONUNUN BAĞLANMA MEKANİZMASI**

Turgut BAŞTUĞ<sup>1\*</sup>, Murat ÇAVUŞ<sup>2</sup>, Serdar KUYUCAK<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Material Science and Nanotechnology Engineering, TOBB ETU, Ankara, Turkey

<sup>2</sup> Faculty of Education, Bozok University, Yozgat, Turkey

<sup>3</sup> School of Physics, University of Sydney, Sydney, Australia

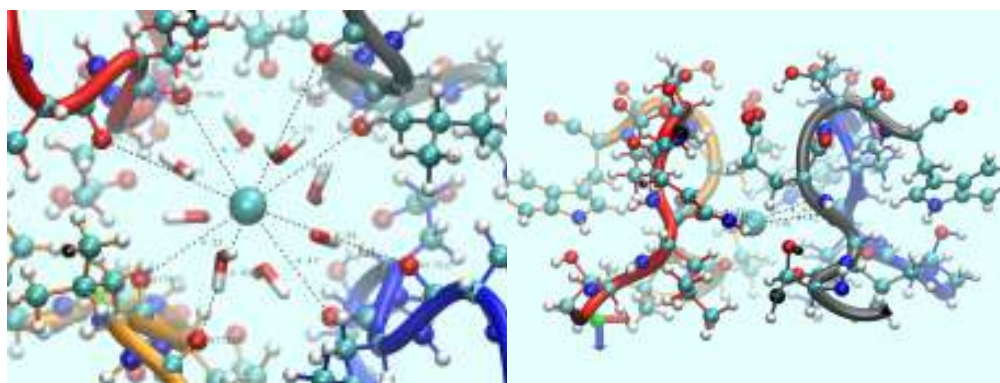
\*Corresponding author. [tbastug@etu.edu.tr](mailto:tbastug@etu.edu.tr)

## **ABSTRACT**

Voltage-gated calcium channels are the primary mediators of depolarization-induced calcium entry into neurons [1]. While calcium channels are of critical importance to brain function, their inappropriate expression or dysfunction gives rise to a variety of neurological disorders, including, pain, epilepsy, migraine, and ataxia.

Molecular dynamics methods are the only physically valid methods for studying the structure function relations in ion channels. Applications of these methods to sodium and calcium channels are presented, which illustrate the multi-ion nature of the permeation mechanism in selective biological channels (as shown in Figure 1).

In this study, we present binding energies of single and multi-ion  $\text{Na}^+$  to the  $\text{Ca}^{++}$  channels. Furthermore we interpret binding energies for constructing structure-function relationship of this channel.



**Figure 1.** CavAb filter system.

## **Keywords**

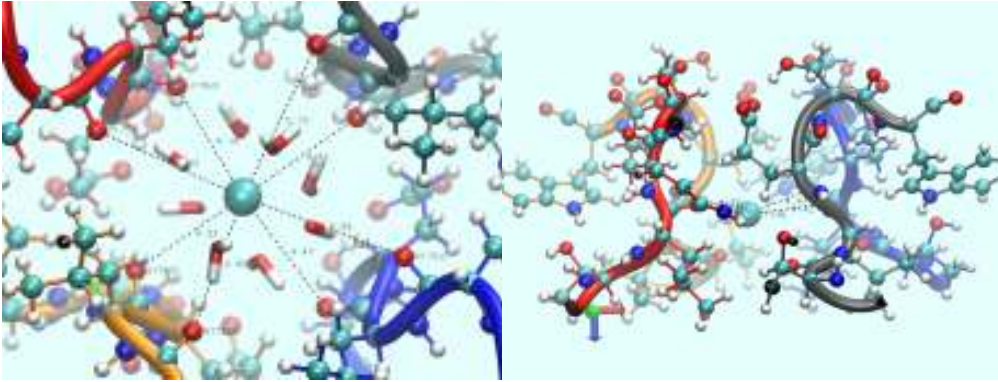
Molecular Dynamics, potential of mean force, umbrella sampling, ion channels.

## ÖZET

Voltaj-kapılı kalsiyum kanalları, nöronlara kalsiyum girişinin birincil düzenleyicileridir [1]. Kalsiyum kanalları beyin fonksiyonları için hayati öneme sahipken onların hasarı veya bozuklukları; acı, epilepsi, migren, ataksi gibi birçok nörolojik hastalığa neden olur.

Moleküler dinamik metotlar iyon kanallarının yapı-fonksiyon ilişkilerini çalışmak için tek fiziksel olarak geçerli tekniktir. Seçici biyolojik kanalların geçiş mekanizmasının çok iyonlu doğasını gösteren sodyum ve kalsiyum kanalları bu yöntemlerin uygulamaları olarak sunulmuştur (Şekil 1'de gösterildi).

Bu çalışmada,  $Ca^{++}$  kanalı için tek ve çok iyonlu  $Na^{+}$  bağlama enerjileri sunuldu. Ayrıca bu kanalın yapı-fonksiyon ilişkisi oluşturmak için bağlanma enerjileri yorumlandı.



Şekil 1. CavAb filter sistemi.

## Anahtar Kelimeler

Moleküler Dinamik, ortalama kuvvet potansiyeli, şemsiye örnekleme, iyon kanalları.

## Kaynaklar / References

[1] Tang, L., Gamal El-Din, T.M., Payandeh, J., Martinez, G.Q., Heard, T.M., Scheuer, T., Zheng, N., Catterall, W.A., *Nature*, 505, 56-62, (2011).