

膜物性に対する共溶媒添加効果の分子動力学解析

(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²) ○山下 湧輝¹・岡部 涼²・笠原 健人²・松林 伸幸²
 Molecular dynamics analysis of the cosolvent effect on membrane properties (¹Faculty of Engineering Science, Osaka University, ²Graduate School of Engineering Science, Osaka University) ○Yuuki Yamashita,¹ Ryo Okabe,² Kento Kasahara,² Nobuyuki Matubayasi²

The physical properties of lipid bilayers, such as polarity and fluidity, are closely related to drug dynamics and cellular functions. Cosolvents such as alcohols significantly influence these membrane properties by interacting with the membrane. The stability and integrity of bilayers are influenced by the cosolvent concentration and chain length. On the other hand, the molecular-level insights into the cosolvent effect still remain unclear. Here, we conducted the molecular dynamics (MD) simulations for the 2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC) bilayers immersed in the different alcohol solutions. The local membrane thickness exhibits a bimodal distribution under the ethanol concentration of 10 mM, reflecting the undulation of the membrane. As the ethanol concentration increases, such an undulation is found to be suppressed.

Keywords : Molecular Dynamics Simulation; Lipid bilayer; Alcohol; Cosolvent

両親媒性を持つリン脂質の安定な凝集体である脂質膜の極性・流動性のような物性は、薬物動態や細胞機能に密接に関係している。同様に両親媒性を持つアルコール分子は、脂質膜と相互作用しこれらの脂質膜の特性に大きく影響を及ぼす。脂質二重膜の安定性や構造の完全性は、アルコールの炭化水素鎖の長さや濃度に依存するとされているが¹⁾、アルコール分子と脂質膜の相互作用が、実際にどのように脂質膜の物性に影響を与えているかについての分子論的な知見は乏しい。そこで本研究では、分子動力学(MD)計算により、炭化水素鎖長と濃度がそれぞれ異なるアルコール溶液中の2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC) 二重膜について、脂質膜の構造変化を解析した。

ここでは、エタノールを添加した場合での局所的な膜厚分布を Fig. 1 に示す。10 mM エタノール条件では、30, 47 Åにピークがあらわれており、これは膜界面がうねりを持つことを意味している (Fig. 2)。そして、エタノール濃度が高くなるにつれて、30 Åのピークが低下することから、エタノール添加は膜表面の平坦化を促進することがわかった。

1) R. Rai, *et al.*, *Langmuir*, **40**, 14057-14065 (2024).

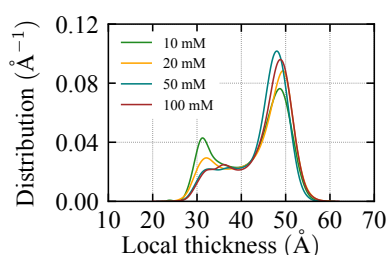


Fig 1. Distributions of local thickness.

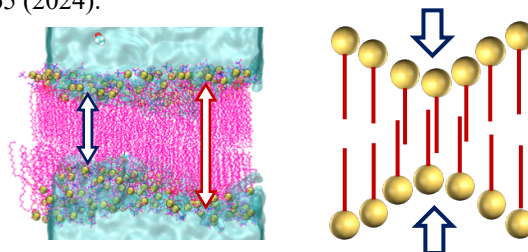


Fig 2. The snapshot of DPPC lipid bilayers (EtOH 10 mM) and schematic illustration of the surface undulation.