

電界と電荷による活性酸素種の生体膜透過特性の変化

Change in permeation characteristics of reactive oxygen species through a biological membrane by electric field and charge

都立大¹, 大分大², 千葉工大³, 東北大⁴

○岩田 優太¹, 山内 翔太¹, 八木 一平¹, 立花 孝介², 小田 昭紀³, 佐藤 岳彦⁴, 内田 諭¹

Tokyo Metropolitan Univ. ¹, Oita Univ. ², Chiba Inst. Technol. ³, Tohoku Univ. ⁴

○Yuta Iwata¹, Shota Yamauchi¹, Ippei Yagi¹,
Kosuke Tachibana², Akinori Oda³, Takehiko Sato⁴, Satoshi Uchida¹

E-mail: iwata-yuta@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、大気圧低温プラズマの安定生成技術が確立し、その医療応用が急速に発展している。プラズマ医療では、電氣的効果や化学的効果、光による効果などが複雑に関与している[1]。しかし、複数ある要因の影響力のバランスや相互作用は不明な点が多い。特に電界や電流などの電氣的作用は十分に理解されていない。本報では電界印加時の活性酸素種の自由エネルギープロファイルと膜透過係数を、分子動力学 (MD) による分子間相互作用のシミュレーション結果から導き出した。

2. 解析手法、条件

分子間相互作用の解析に関しては、以下のよう な脂質膜モデルを構築した。H₂O₂を含む脂質二重層には、細胞を形成するリン脂質であるPOPC (1-Palmitoly-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine) を使用した。計算は以下の条件で行った。圧力は1 bar、温度は303 Kに設定した。計算時間ステップは2 fsとした。シミュレーションウィンドウ数は19で各ウィンドウでの計算時間は5 nsとした。印加電界Eは0から0.4 V/nmとした。各分子の軌道はMDで導き出された。MDでは、原子を質量点として扱い、初期条件から運動方程式より位置と速度を決定した。

また、アンブレラサンプリングを用いて、人工的なバイアス電位を重畳し、存在確率の低い高エネルギー領域でのデータを取得した[2]。MDシミュレーションにはAMBER18を使用した。

3. 解析結果および考察

図1に膜の中心からの距離に対する自由エネルギープロファイルを示す。電界の増加にともなって膜中心部の自由エネルギーが減少した。また、膜透過係数を表1に示す。印加電界がない場合に比べて、0.3 V/nmでは膜透過係数が4倍になった。これは、電界によって膜内分子の偏りが一定になり、透過しやすくなったと推察される。0.3 V/nmから0.4 V/nm にかけて膜透過係数が急増していることから、0.4 V/nm以上の電界を印加すると膜が破壊される可能性がある。

4. 今後の展望

現在、電界に加えて電解質溶液の濃度変化に伴う膜周辺の電気二重層による活性種透過特性への影響を調査しており、発表時には併せて報告する予定である。

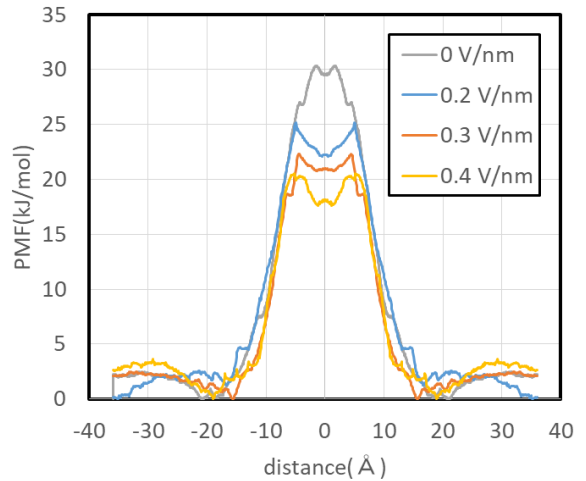


Fig. 1. Free Energy profile through the membrane

Table 1. Membrane permeability coefficients

Condition	Permeability coefficients (cm/s)
0 V/nm (H ₂ O ₂)	1.33 × 10 ⁻³
0.2 V/nm (H ₂ O ₂)	4.56 × 10 ⁻³
0.3 V/nm (H ₂ O ₂)	6.08 × 10 ⁻³
0.4 V/nm (H ₂ O ₂)	4.71 × 10 ⁻²

参考文献

[1] M. G. Kong *et al.*, *New J. Phys.*, Vol. 11, No. 11, pp. 1-35 (2009)
[2] S. Kumar *et al.*, *J.Comput. Chem.*, Vol. 13, No. 2, pp. 1011-1021 (1992)