

微纳尺度流动

CSTAM-2018-J001

肺表面活性剂修饰的纳米颗粒与细胞膜相互作用的 分子模拟研究¹⁾

白轩^{*, +}, 胡国庆^{*, +, 2)}

* (中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

+ (中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)

摘要: 呼吸系统是纳米颗粒进入人体的重要途径, 吸入的纳米颗粒首先会与肺泡表面的肺表面活性剂作用, 吸附其中的磷脂以及蛋白质分子, 在其表面形成一层脂蛋白冠。脂蛋白冠将会取代原始颗粒的表面性质, 决定纳米颗粒的生物效应, 如与细胞膜的相互作用。目前, 关于纳米颗粒表面吸附的肺表面活性剂如何影响此类相互作用的分子机制尚不明确。在此, 我们通过粗粒化分子模拟, 研究了肺表面活性剂修饰的纳米颗粒与细胞膜之间的相互作用。结果表明, 多种因素会影响细胞膜与肺表面活性剂修饰的纳米颗粒的相互作用。首先, 修饰在颗粒表面的磷脂的弹性变形会使磷脂提供的配体与细胞膜上的受体更紧密地结合, 从而促进细胞膜内吞纳米颗粒。其次, 修饰磷脂的密度会改变颗粒表面的亲疏水性以及配体密度, 分别通过非特异性和特异性作用影响细胞膜对纳米颗粒的摄入。最后, 修饰的疏水性肺表面活性剂蛋白通过与细胞膜磷脂的强粘附作用, 加速细胞膜对纳米颗粒的内吞, 但细胞膜对纳米颗粒的内吞行为主要取决于修饰的磷脂。我们的模拟结果有助于更好地理解现有的实验现象, 对于评估吸入纳米颗粒的毒性以及设计呼吸给药具有重要意义。

关键词: 耗散粒子动力学; 细胞内吞; 肺表面活性剂; 纳米颗粒。

1) 资助项目 (国家自然科学基金项目(11572334)与中科院前沿科学重点项目(QYZDB-SSW-JSC036)资助)

2) 通讯作者 Email: guoqing.hu@imech.ac.cn

CSTAM-2018-J002

振荡剪切流中微液滴变形的数值模拟¹⁾

赵庚尧²⁾, 潘定一, 邵雪明

(浙江大学航空航天学院工程力学系, 杭州, 310027)

摘要: 本文采用耗散粒子动力学 (DPD: dissipative particle dynamics) 方法研究了在不同振荡剪