

# 23P-pm01S

小角 X 線散乱測定と FMO-DPD シミュレーションによる脂質 /Cholesterol 混合二重膜における物性の解析

○新庄 永治<sup>1</sup>, 奥脇 弘次<sup>2</sup>, 土居 英男<sup>2</sup>, 望月 祐志<sup>2,3</sup>, 古石 誉之<sup>1</sup>, 福澤 薫<sup>1,3</sup>, 米持 悦生<sup>1</sup> (<sup>1</sup>星薬大, <sup>2</sup>立教大理, <sup>3</sup>東大生研)

[背景・目的] Cholesterol は脂質二重膜の安定性に影響を及ぼすことが知られているが、Cholesterol 自体の脂質膜に対する影響およびメカニズムについて不明なところが多い。そこで Cholesterol が脂質二重膜に与える影響を検討するために、本研究では小角 X 線散乱 (SAXS) 及び粗視化分子シミュレーションの一種である FMO-DPD 法を使用して脂質分子単独の二重膜と Cholesterol 混合系の二重膜における物性を解析した。

[実験] シミュレーションでは、モデル脂質として中性リン脂質である DPPC、DOPC、及び Cholesterol を取り上げた。粗視化成分間の相互作用を示す  $\chi$  パラメーターは DPPC、DOPC 及び Cholesterol をそれぞれ 6 つの粗視化ビーズに分割し、複数配向の水を考慮した上で、非経験的なフラグメント分子軌道(FMO)法を用いて高精度に算定した。膜の構造は、J-OCTA の COGNAC モジュールを用いて計算した。SAXS は高エネルギー加速器研究機構の BL10C にて測定した。

[結果] シミュレーションの結果、単成分系において二重膜の脂質 1 分子が占める面積 (膜面積:  $\text{\AA}^2$ ) の値は DPPC と比べて不飽和結合をもつ DOPC の方が大きくなり、実験値を定性的に再現した。2 成分混合系において、SAXS 測定の結果から脂質分子と Cholesterol の混合膜においては、単成分系の二重膜と比較して、DPPC/Cholesterol 膜は流動性が低下し、DOPC/Cholesterol 膜は流動性の上昇を示した。さらに FMO-DPD 法でも同様な傾向を示した。