

Anesztetikumokat tartalmazó lipid membránok
vizsgálata számítógépes szimulációval

Fábián Balázs, MSc II.évf.

Témavezető: Dr. Jedlovsky Pál tudományos tanácsadó

MTA-BME Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport

Diplomamunkám során általános anesztetikumokat tartalmazó dipalmitoil-foszfatidilkolin (DPPC) membránok szimulációját végeztem el 1 illetve 1000 bar nyomáson. A vizsgált anesztetikumok a kloroform, dietil-éter, halotán illetve enflurán. Referenciarendszerként a tiszta DPPC membrán szimulációját is elvégeztem ezeken a nyomásokon.

Eredményeim alapján arra a következtetésre jutottam, hogy azonos biológiai hatásuk ellenére a különböző anesztetikumok különböző módon változtatják meg a membrán molekuláris szerkezetét. Mindemellett két olyan szerkezeti változást is megfigyeltem bármely általam vizsgált anesztetikum jelenlétében, amellyel ellenkező irányú változást okozott a nyomás növelése. Ezek a változások összefügghetnek az anesztetikumok hatásmechanizmusával, továbbá magyarázattal szolgálhatnak e hatás nagy nyomáson való, kísérletileg megfigyelt megszűnésére (Pressure Reversal) is. Az első ilyen hatás a DPPC molekulák felületi sűrűségének csökkenése, azaz a membrán laterális expansziója, míg a másik az anesztetikumok közelében lévő lipid láncok rendezettségének, nyújtottságának lokális csökkenése anesztetikumok jelenlétében. Eredményeim egyértelműen cáfolták azt a korábbi hipotézist, mi szerint az anesztetikumok nagy nyomáson asszociálódnának a membránban, azonban összhangban vannak a hatásmechanizmus lehetséges magyarázatául szolgáló, közel fél évszázados „kritikus térfogat” hipotézissel.