Abstract

In the environment, the process of combustion is the dominant pathway through which mankind continuously injects particles into the atmosphere at the present time. Recent toxicology studies suggest that the combustion-generated carbon nanoparticles(CNPs) may be toxic in pulmonary surfactant (PS) that serves as the first biological barrier in the respiratory system. However, the understanding of how CNPs perturb PS is still unclear. In the present work, we report on coarse-grained molecular dynamics simulations of dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) lipid monolayers in the presence of C_{60} fullerenes. Our simulations show that fullerenes can easily penetrate into the monolayer and stay in the lipid hydrocarbon chain region throughout the simulation, in agreement with free energy calculations. Fullerene affected both structural and dynamic properties of the lipid monolayer. Surface tension/area isotherms of the monolayer were changed only slightly by fullerenes. However, the perturbation on the physical structure of monolayer became major at high concentration of fullerene, due to fullerene aggregation. At high compression (area per molecule of 0.48 nm^2) the monolayer was unstable and collapsed forming a bilayer in the water phase. On the other hand at low compression, we observed the formation of pores, with direct contact between water and the vapor phase. Our results illustrate potentially harmful effects of CNPs on respiratory system and also the mechanism of how CNPs disturb pulmonary surfactant, which would be related to the translocation of nanoparticle from the lung to the blood circular.

บทคัดย่อ

ในสิ่งแวดล้อม การบวนการเผาไหม้ที่เกิดขึ้นปลดปล่อยอนุภาคและฟุ่นละอองออกสู่ชั่นบรรยากาศตลอดเวลา ซึ่งในการศึกษาด้านพิษวิทยาพบว่าอนุภาคนาโนคาร์บอนนาโน อาจเป็นพิษต่อยื้อหุ้มปอดซึ่งเป็นอวัยวะแรกๆของระบบการหายใจ ทั้งนี้ความรู้ และความเข้าใจเกี่ยวกับการรบกวนของอนุภาคนาโนคาร์บอนต่อเยื้อหุ้มปอดยังมีน้อยมาก ดังนั้นในงานวิจัยนี้ เราจึงศึกษาปัญหาดังกล่าวโดยใช้แบบจำลองพลวัติของโมเลกุลในระดับหยาบของชั้นไขมันเดี่ยว และโมเลกุลของฟลูเลอรีน จากผลการทดลองพบว่าอนุภาคนาโนคาร์บอนสามารถทะลุเข้าไปในชั้นไขมันเดี่ยว และอยู่ในชั้นส่วนที่ไม่ชอบน้ำของชั้นไขมันได้โดยง่าย ซึ่งสอดคล้องกับผลการคำนวณพลังงานอิสระของระบบ นอกจากนี้ยังพบว่ามีการเปลี่ยนแปลงของสมบัติทางกายภาพและโครงสร้างของไขมันชั้นเดี่ยว(เช่นการเกิดรูรั่ว และการม้วนพับของชั้นไขมันเดี่ยว) รวมถึงการเปลี่ยนแปลงของค่าไอโซเทอมของแรงตึงผิวกับพื้นที่ต่อหนึ่งโมเลกุล เมื่อมีฟลูเลอรีนจำนวนมากแทรกอยู่ โดยการเปลี่ยนแปลงดังกล่าวมีความเกี่ยวข้องกับการจับตัวเป็นกลุ่มของฟลูเลอรีน ดังนั้นจากผลการทดลองจึงสรุปว่าอนุภาคคาร์บอนมีผลทำให้อาจเป็นอันตรายต่อเยื้อหุ้มปอด และอาจมีนำสู่การเคลื่อนที่เข้าไปในระบบกระแสเลือดผ่านทางปอดได้