

---

多肽分子之间的协作性对其生物膜活性的影响。这些发现将深化我们对多肽抗菌机制的了解，为开发高效低毒的新型抗菌药物提供指导。

**关键词：**抗菌肽；细胞膜；相互作用机制

## EO02

### 磷脂粗粒化模型及自组装模拟

何学浩

天津大学理学院化学系 300350

磷脂分子是一种典型的两亲性分子，研究磷脂分子的介观自组装对深入认识和调控两亲性分子介观胶束结构具有重要基础价值。在过去几年中，我们发展了一种高效的隐式溶剂型粗粒化三粒子磷脂模型，粗粒化磷脂分子的力场通过拟合实验和全原子模拟数据获得。模拟结果表明该粗粒化磷脂模型能够高效再现磷脂分子囊泡的形成过程，其具有模拟复杂介观囊泡的结构形成和演变的能力。在此之后，我们采用该粗粒化模型成功模拟研究了多层磷脂囊泡的熟化过程，并通过动力学理论进行了深入分析，加深了复杂囊泡熟化动力学规律的认识。

**关键词：**磷脂；粗粒化模型；自组装；熟化

## EO03

### 纳米粒子与细胞相互作用的物理机制的研究

丁泓铭,马余强

苏州大学物理学院 215006

近些年来，纳米医学目前得到了大家越来越多的重视。与传统材料相比，纳米材料由于其独特的物理化学性质，使其在生物传感，细胞成像，药物运输等方面有着显著的优势。不过纳米材料同时也可能带来一定的毒副作用（包括对体内蛋白、基因、细胞器的破坏）。这就要求我们在实际应用纳米材料的时候，能够寻找到运输效率与降低毒副作用之间的平衡。因此理解纳米材料与生物体，尤其是与细胞间的相互作用对在生物医药领域更好地利用纳米材料有着非常重要的科学意义。在本次报告中，我们将首先从理论模拟角度来探讨如何有效地设计纳米材料使其能够高效地运输进入细胞中去；在这一部分，我们将重点讨论细胞运输过程中纳米粒子与蛋白、细胞膜间相互作用的内在物理机制以及纳米粒子对生物大分子、细胞膜及细胞器等的影响。此外，结合最近与实验学家的合作，我们将进一步给出纳米材料的设计新思路。最后，我们将对该领域的研究做出总结和展望。

**关键词：**细胞；纳米材料；蛋白环；分子模拟；细胞实验

## EO04

### 脂筏促进细胞粘附蛋白的键合

李龙<sup>1</sup>,胡晶磊<sup>2</sup>,宋凡<sup>1</sup>

1.中国科学院力学研究所, 2.南京大学

细胞膜锚定蛋白之间的键合调控着细胞粘附和信号传导，对键合作用的深刻认识有助于理解细胞间通讯所驱使的多种生理过程。脂筏作为细胞膜上富含胆固醇和饱和磷脂的微相区，被认为是募集蛋白质分子以实现生物功能的重要平台。一个重要而未决的问题是脂筏如何影响细胞膜锚定给体和受体蛋白的键合平衡常数。我们采用经典的生物膜介观模型，使用 Monte Carlo 方法研究多组分膜的粘附，发现细胞膜锚定给体和受体蛋白在脂筏上的优先分配通过与热激发引起的细胞膜形状涨落协作而显著提高键合常数。有趣的是，键合常数甚至可以大于基底支撑膜上相同蛋白的键合常数。与单组分细胞膜的情况相反，细胞膜的形状涨落有助于锚定给体和受体蛋白的键合。我们的研究表明，真实细胞可以通过调控脂筏的性质，比如其在细胞膜上的面积分数、尺寸以及与蛋白的亲合性，来控制粘附蛋白的键合。

**关键词：**细胞粘附；脂筏；膜蛋白；特异性键合

## EO05

### 剪切诱导下增容剂对聚合物共混体系相行为的影响

陆腾,周永祥,郭洪霞

中国科学院化学研究所 100190

我们采用动力学模拟方法对增容剂存在下的聚合物共混体系剪切诱导相变行为进行了研究，并主要关注增容剂刚性对微乳区相结构的影响。首先，我们绘制了静态条件下聚合物三元对称(A5/B5/A15-b-B15)共混体系相图，得到了与文献报道一致的无序、层状、双连续微乳通道和相分离四个区域。通过对静态微乳相逐步施加剪切作用，我们发现：1) 很小的剪切作用就会使微乳通道关闭，使原本各向同性的双连续结构沿剪切方向取向；2) 随剪切速率增