ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/436

АДСОРБЦИЯ ГЕМОСТАТИЧЕСКОГО СРЕДСТВА НАНОЛИСТАМИ AlOOH И $\text{Fe}(\text{OH})_2$: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА¹Цуканов А.А., ²Мамонова Е.В., ²Гаврилова Л.О., ³Садовой М.А.¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия²Инновационный медико-технологический центр

(Медицинский технопарк), Новосибирск, Россия

³Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Новосибирский государственный медицинский университет" Министерства здравоохранения Российской Федерации, Новосибирск, Россия.

Разработка наночастиц (окси)гидроксидов металлов, выступающих в качестве агрегатора коагуляционных белков и способных изменять ионный баланс биологической среды, является перспективным направлением для создания материалов с гемостатическим действием. В частности, (окси)гидроксиды Al и Fe со слоистой структурой являются хорошими кандидатами в качестве агентов для модуляции параметров биологических жидкостей [1], благодаря большой удельной поверхности [2, 3], высокой плотности поверхностного заряда [4] уникальным кислотно-щелочным или амфотерным свойствам [5], а также селективности в адсорбции биомолекул и ионов биосреды [6, 7]. Более того, недавно было показано, что такие наноматериалы могут проявлять гемостатическое действие, в частности, волокнистый материал, содержащий низкоразмерные электроположительные наноструктуры оксигидроксида алюминия ($\gamma\text{-AlOOH}$), сокращает время паренхиматозного кровотечения [8]. Кроме того, согласно результатам [9], наноструктуры бемита AlOOH , гематита Fe_2O_3 и гетита FeOOH избирательно адсорбируют и агрегируют компоненты крови, что может быть фактором, влияющим на гемостаз.

В настоящем исследовании с целью получения численных оценок, характеризующих способность наноллистов AlOOH и $\text{Fe}(\text{OH})_2$ накапливать биоактивное соединение, образуя иерархический наноагент, проведено молекулярно-динамическое моделирование с анализом изменения свободной энергии Гиббса при адсорбции-десорбции молекулы серотонина (в катионном и цвиттер-ионном состоянии) на регулярной поверхности этих наноматериалов. Используя управляемую молекулярную динамику и анализ потенциала средней силы, показано, что адсорбция серотонина AlOOH может происходить с образованием водородных связей как аминок группой с атомами кислорода поверхностных гидроксидных групп, так и кислородом фенольного кольца с водородом OH-групп наноллиста в зависимости от pH (Рис. 1). При этом взаимодействие как цвиттер-ионного, так и катионного серотонина с наноллистом гидроксида двухвалентного железа $\text{Fe}(\text{OH})_2$ характеризуется слабой адсорбцией.

Рис. 1. Оценка профилей изменения свободной энергии серотонина в катионном (а) и цвиттер-ионном (б) состояниях при адсорбции-десорбции наноллистом AlOOH .

Одним из возможных механизмов воздействия низкоразмерных гидроксидов Al и Fe на биологическую среду является адсорбция различных ее компонентов, что приводит к очистке среды и облегчению действия лекарств или биологически активных соединений, что особенно важно для гемостатических агентов. Точный механизм потенцирования действия гемостатических агентов низкоразмерными гидроксидами металлов в настоящее время не полностью ясен, поэтому представляется важным исследовать взаимодействие этих наноматериалов с биомолекулами и лекарственными средствами, в частности, с точки зрения их конкурентной адсорбции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Соглашение № 14.604.21.0156, Идентификатор проекта RFMEFI60417X0156). Исследование проводится с использованием оборудования общих исследовательских мощностей вычислительных ресурсов высокопроизводительных вычислений МГУ им. М.В. Ломоносова [10, 11].

1. M. I. Lerner et al., Nano Letters 18(9), 5401–5410 (2018).
2. O. V. Bakina et al., Advanced Powder Technology. 26(6), 1512–1519 (2015).
3. M. Krizek et al., AIP Conf. Proc. 1489(1), 88–94 (2012).
4. S. Lozhkomoev et al., Nanotechnology 27(20), 205603 (2016).
5. S. Lozhkomoev et al., Nanotechnologies in Russia 11(7–8), 506–511 (2016).
6. S. Lozhkomoev et al., Physical Mesomechanics 20(2), 134–141 (2017).
7. R. Chitrakar et al., J. of Colloid and Interface Science 298(2), 602–608 (2006).
8. M. I. Lerner et al., AIP Conf. Proc. 1623(1), 339–342 (2014).
9. S. Lozhkomoev and S. O. Kazantsev, IOP Conf. Series: Mater. Sci. and Engineer. 447(1), 012072 (2018).
10. V. Voevodin, et al. Supercomputing Frontiers and Innovations 6(2), 4–11 (2019).
11. V. Adinets et al., Numerical methods and programming: Advanced Computing 13(4), 160–166 (2012).