

ИЗУЧЕНИЕ РАВНОВЕСНЫХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФИБРИНОВОГО ГЕЛЯ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рожок И.Е, Жмуров А.А.

Московский физико-технический институт(ГУ), Лаборатория компьютерного и математического моделирования биологических систем, Россия, 141704, Долгопрудный, Институтский пер., 9

Тромбообразование — невероятно сложный процесс, основной функцией которого является предотвращение кровотечения. После повреждения стенки сосуда запускается каскадная химическая реакция свертывания крови [1], которая кардинально меняет конфигурацию крови вблизи раны. Она становится густой, образуя тромб. Каркасом тромба является нитевидный белок фибрин, который активно исследуют по нескольким причинам. Во-первых, фибрин выполняет важную защитную функцию в нашем организме. Во-вторых, этот белок широко применяется в медицине. И наконец, фибрин начинают использовать в таких областях, как тканевая инженерия и доставка лекарств [2].

Для исследования свойств фибрина используют гель фибрина. Это трехмерная структура, образованная многочисленными переплетениями нитей фибрина, без клеток крови. Использование такого геля диктуется простотой его получения в лабораторных условиях. Механические свойства фибрина исследуются с применением различных экспериментальных и вычислительных методов. До сих пор нет точного представления о том, как наномеханика единичных мономеров фибрина влияет на механические свойства тромба.

В данной работе была разработана компьютерная модель геля фибрина. Для этого были использованы экспериментально полученные данные о геометрической структуре геля, такие как длина и диаметр нитей, количество переплетений нитей в единице объема геля. Механические параметры нитей были получены в результате вычислительных экспериментов по силовой денатурации отдельных молекул фибрина [3]. Полученная модель позволяет впервые связать механические свойства фибринового геля с наномеханическими свойствами отдельных молекул фибрина, определить влияние патологий в геометрии сгустка на его механические свойства. Кроме того, данная модель универсальна и может быть использована для изучения наномеханики других биологических молекул, образующих сложные полимерные сети, а также при разработке новых биологических материалов.

Литература.

1. *Weisel, J.W.* Fibrinogen and fibrin — *Adv. Protein Chem.*, no. 70, pp. 247–299, 2005.
2. *Janmey P.A., Winer J. P., Weisel J. W.* Fibrin gels and their clinical and bioengineering applications — *J. R. Soc. Interface*, no. 30, pp. 1–10, 2009.
3. *Zhmurov A., Kononova, O., Litvinov, R. I., Dima, R. I., Barsegov, V., Weisel, J. W.* Mechanical Transition from α -Helical Coiled Coils to β -Sheets in Fibrin(ogen) — *J. Am. Chem. Soc.*, no. 50, pp. 20396–20402, 2012.