

ТЕСТИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА БИОСОВМЕСТИМОСТЬ IN VITRO: ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Степанов А.В., Дмитриева А.И., Шемухин А.А.¹, Попов А.П., Юманов Д.С.,
Коваленко А.В.

ЧГСХА, Россия, 428003, г. Чебоксары, ул. К, Маркса, 29, for.antonstep@gmail.com
¹НИИЯФ МГУ им. М. В. Ломоносова, Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, дом
1, строение 2, shemuhin@gmail.com

Углеродные нанотрубки могут быть использованы для создания биосенсоров и биосовместимых композитов. Однако существуют неоднозначные данные об их биосовместимости с клетками животных и бактерий. Для проверки на биосовместимость в данной работе применены два подхода: эксперимент и моделирование. В качестве модельного организма взята культура бактерий непатогенной *E. Coli*. Экспериментальный подход основан на применении МТТ-теста и тестированию гидрофобности поверхности с образцами нанотрубок. Для эксперимента взяты ориентированные многостенные углеродные нанотрубки на подложке из кремния (НИИЯФ МГУ), часть образцов была модифицирована ионным облучением ионами благородных газов для функционализации поверхности. Целью эксперимента и моделирования было сравнение биосовместимости нанотрубок облученных ионами и необлученных. Для проведения МТТ-тестов использовался МТТ-тест (MTT Cell Proliferation Assay, Abcam) и стандартная методика по ГОСТ Р ИСО 10993.4-99.

Для моделирования использовался программный код LAMMPS [1] с применением многочастичного потенциала ReaxFF [2], учитывающего ковалентные, Ван-дер Ваальсовы связи водородные связи, электростатическое взаимодействие. Рассчитывалась энергия адгезии нанотрубок с фибронектином, который представлен как в бактериях, так и в клетках животных.

Полученные результаты позволили судить о степени биосовместимости различных видов многостенных углеродных нанотрубок как с точки зрения моделирования, так и с точки зрения эксперимента.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [3].

Литература

1. *Plimpton S.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics* **117**, **1**, 1995. pp. 1-19.
2. *van Duin A.C.T., et al.* ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons // *The Journal of Physical Chemistry A* **105**, **41**, 2001. pp. 9396-9409.
3. *Voevodin V.I. et. al.* Supercomputer Lomonosov-2: Large Scale, Deep Monitoring and Fine Analytics for the User Community // *Supercomputing Frontiers and Innovations* **6**, **2**, 2019. pp. 4–11.