

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПОКРЫТИЯ МЕДИЦИНСКИХ СТЕНТОВ НА ОСНОВЕ ПВП С ВВЕДЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Ан Е.Э.<sup>1</sup>, Звонарева Д.А.<sup>1</sup>, Запороцкова И.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Волгоградский государственный университет  
E-mail: [an19111997@gmail.com](mailto:an19111997@gmail.com)

## INVESTIGATION OF MECHANISMS OF INTERACTION OF COMPONENTS OF DRUG COATING OF MEDICAL STENTS BASED ON PVP WITH INTRODUCED CARBON NANOTUBES

An E.E.<sup>1</sup>, Zvonareva D.A.<sup>1</sup>, Zaporotskova I.V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Volgograd State University

The results of theoretical calculations of the interaction process of the components of the drug coating of biliary stents-polyvinylpyrrolidone, carbon nanotubes, doxorubicin, performed using the quantum chemical method of MNDO. It is proved that such a complex is stable.

В качестве лекарственного покрытия для медицинских желчевыводящих стентов было предложен лекарственный комплекс на основе полимера поливинилпирролидона с лекарственным препаратом доксорубицином, допированном углеродными нанотрубками [1-3].

Для доказательства эффективности подобного комплекса и изучения механизмов процессов нами были выполнены расчеты процесса взаимодействия ПВП с компонентами покрытия с использованием квантово-химического метода MNDO [4]. Для расчетов использованы программные пакеты Gamesse, Gaussyan, GaussView. Были изучены процессы взаимодействия в сложном комплексе "поливинилпирролидон + углеродная нанотрубка + доксорубицин". Процесс моделировался пошаговым приближением фрагмента ПВП, состоящего из трех структурных единиц, к адсорбционному комплексу «УНТ + доксорубицин» (рис.1а). Энергия взаимодействия, или энергия адсорбции, рассчитывается по формуле:

$$E_{\text{адс}} = E_{\text{(ад.к)}} - (E_{\text{адсорбат}} + E_{\text{адсорбент}})$$

В результате выполненных расчетов была получена зависимость, представленная на рис.1б. Анализ кривой показал, что на ней присутствует минимум, соответствующий расстоянию 2,4 Å и энергии  $E_{\text{адс}} = -0,48$  eV, иллюстрирующий возникновение адсорбционного взаимодействия с образованием устойчивого комплекса "поливинилпирролидон + углеродная нанотрубка + доксорубицин", являющегося основой лекарственного покрытия медицинских билиарных стентов.

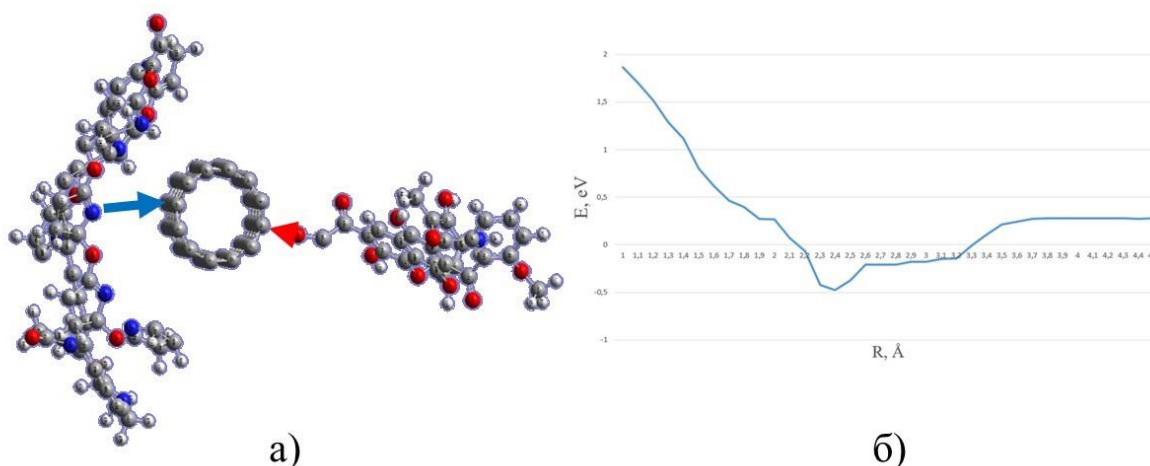


Рис. 1. а) модель оптимизированного комплекса "доксорубицин + УНТ + ПВП"; б) энергетическая кривая взаимодействия ПВП с комплексом "УНТ + доксорубицин", приводящего к образованию сложного комплекса.

1. Кедик С. А., Жаворонок Е.С., Седишев И.П. и др. Разработка и регистрация лекарственных средств №3, 18-35 (2013).
2. Елецкий А. В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства, УФН 172(4), 408 (2002).
3. Buehler V. Kollidon. Polyvinylpyrrolidone for Pharmaceutical Industry, BASF, Ludwigshafen, Germany, (1996).
4. Koch W. A., Holthausen M. // Weinheim: Wiley-VCH (2002).

## ЗАДАЧА ПРЕСЛЕДОВАНИЯ ПРОСТЕЙШИХ ОРГАНИЗМОВ ДЛЯ СЛУЧАЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Мелких А.В.<sup>1</sup>, Анисимов А.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.  
E-mail: [Dyhansky@mail.ru](mailto:Dyhansky@mail.ru)

## THE PROBLEM OF THE PURSUIT OF SIMPLEST ORGANISM FOR THE CASE OF A CHEMICAL RECEPTION

Melkikh A.V.<sup>1</sup>, Anisimov A.F.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin, Yekaterinburg, Russia.

This article presents the results of research of the algorithm by which pursuit of one simplest organism by another can be described. The dependence of the accuracy of this algorithm on various parameters as well as the ways of its optimization are investigated.