

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТУБУЛЕНОВ В СТОМАТОЛОГИИ

Какорина О.А.¹, Какорин И.А.¹, Запороцкова И.В.¹

¹) Волгоградский государственный университет, Волгоград, 400062, Россия

E-mail: olesya.08@mail.ru

STUDY OF THE POSSIBILITY OF USING CARBON NANOTUBULENES IN DENTISTRY

Kakorina O.A.¹, Kakorin I.A.¹, Zaporotskova I.V.¹

¹) Volgograd State University, Volgograd, 400062, Russia

One of the most common dental problems is tooth decay. Therefore, it is relevant to search for new dental materials with the best properties, or to search for ways to modify known substances to protect teeth from caries. As such a modifying additive, we propose using carbon nanotubes.

Зубная эмаль (или просто эмаль) — внешняя защитная оболочка коронковой части зубов человека. Твёрдость зубной эмали определяется высоким содержанием в ней неорганических веществ (до 97 %), главным образом кристаллов гидроксиапатита (ГА) — $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$, модифицированного магнием, фтором, углеродом и некоторыми другими элементами. Гидроксиапатиты очень восприимчивы к кислотам и начинают разрушаться под их воздействием [1].

В работе рассматривается процесс взаимодействия муравьиной и молочной кислот с гидроксиапатитом и углеродными нанотрубками (УНТ). Процесс взаимодействия моделировался следующим образом: молекулы кислот приближались к молекуле гидроксиапатита с расстояния 2,8 Å с шагом 0,1 Å. Анализ результатов оптимизации геометрии системы обнаружил, что в процессе приближения молекулы муравьиной кислоты к ГА атакуемый атом Са углубился примерно на 0,3 Å, при этом связанные с ним атомы изменили свое первоначальное положение. Связь Са-О увеличивается и разрывается. В результате этого взаимодействия наблюдается частичное разрушение ГА. Результаты расчетов взаимодействия молочной кислоты с ГА, установили факт физической адсорбции. Полная оптимизация геометрии показывает, что атомы кальция ГА смещаются из своих положений и связь Са-О разрушается. Таким образом контакт зубов с данными кислотами приводит к разрушению эмали.

Также было изучено взаимодействия молочной и муравьиной кислот с поверхностью УНТ. Молекула кислот приближалась к атомам трубки, находящемуся в центре кластера нанотубулена, что позволяет минимизировать влияние краевых эффектов. Процесс адсорбции моделировался поэтапным приближением кислот с шагом 0,1 Å к поверхности трубки. Геометрические параметры системы оптимизировались на каждом шаге. С помощью проведенных расчетов были построены профили поверхности потенциальной энергии процессов адсорбции.

Анализируя энергетические кривые обнаружено, что молекула муравьиной и молочной кислоты не адсорбируется на поверхности трубки, что обосновывается отсутствием минимума на энергетических кривых, иллюстрирующего факт образования химической связи между молекулой кислоты и атомом трубки. Таким образом можно использовать УНТ в качестве защитной среды от воздействия кислот на зубную эмаль. Поэтому необходимо выяснить как взаимодействует гидроксиапатит и УНТ. Для взаимодействия был предложен следующий механизм: УНТ и элементарная ячейка ГА располагались относительно друг друга на расстоянии 2 Å. Проведенная полная оптимизация геометрии в этом состоянии показала, что УНТ и ГА объединились в адсорбционный комплекс. Таким образом можно предложить использовать УНТ для покрытия зубной эмали для защиты от воздействия вредных кислот.

1. В.Н. Трезубов, М.З. Штейнгарт, Л.М. Мишнев Ортопедическая стоматология. Прикладное материаловедение: Учебник для медицинских вузов, СПб.: Специальная литература (1999).

MODELING OF CERIUM OXIDE NANOPARTICLES PHARMACOKINETICS

Kasyanova V.V.¹, Bazhukova I.N.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

E-mail: ValentinaKasianova@yandex.ru

Cerium oxide nanoparticles pharmacokinetics model was developed. The biodistribution of nanoparticles in various organs and tissues of the body after intravenous injection was evaluated. The parameters that have the greatest influence on the nanoparticles distribution were determined.

A comprehensive study of nanoparticles properties has shown the great potential of their use in medicine. Cerium oxide nanoparticles are one of the promising materials in this field due to their ability to interact with reactive oxygen species (ROS) and perform the functions of enzymes. It was shown that these nanoparticles are able to protect cells from ROS and thereby prevent diseases associated with oxidative stress [1]. However, the use of these nanomaterials in medicine requires data about their toxicity and distribution in the body after injecting. A physiologically based pharmacokinetic modeling (PBPK) is a convenient tool for solving this problem. Simulation data provide important information on the absorption, distribution, metabolism, and excretion of nanoparticles. So, this study is devoted to modeling the systemic distribution of intravenously injected cerium oxide nanoparticles.

The PBPK model of nanoparticles was implemented using Matlab SimBiology® R2018b software. The model consists of several compartments: lungs, spleen, liver,