

ЗД-15

ВЫСВОБОЖДЕНИЕ ВИНПОЦЕТИНА ИЗ ТВЕРДЫХ ДИСПЕРСИЙ С ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОМ

Ю. А. Полковникова¹, К. Н. Корянова²

¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
394018, г. Воронеж, ул. Студенческая, 3.

²Пятигорский медико-фармацевтический институт –
филиал ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России,
357532, Ставропольский край, г. Пятигорск, пр. Калинина, 11

E-mail: juli-polk@mail.ru

Разработка лекарственных препаратов с использованием поливинилпирролидона (ПВП) является перспективным направлением современной фармацевтической науки и практике, как в направлении оптимизации биофармацевтических характеристик лекарственных препаратов, создания новых лекарственных препаратов, так и совершенствования фармацевтической технологии.

Цель исследования: определить оптимальное соотношение винпоцетина и ПВП в лекарственной форме (1:2 или 1:5) по результатам моделирования молекулярной динамики высвобождения действующего вещества в водную среду.

Моделирование молекулярной динамики высвобождения винпоцетина из ПВП осуществлялось в течение 100 нс с использованием программы Gromacs 2019 в силовом поле Gromos 54a7. Параметризация фрагмента молекулы ПВП производилась с использованием интернет-сервиса Automatic Topology Builder, после чего производилась сборка молекулы полимера из 83 мономеров с использованием программы Assemble [1].

По результатам проведенных вычислительных экспериментов были рассчитаны средние значения ван-дер-ваальсовых энергий связывания винпоцетина с носителями и с растворителем, а также средняя доля молекул винпоцетина, не связанных с носителем (таблица 1).

Таблица 1. Средние значения параметров высвобождения винпоцетина из исследуемых комплексов с полимерами

Система	Средняя энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия винпоцетина с полимером, кДж/моль	Средняя энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия винпоцетина с растворителем, кДж/моль	Средняя доля молекул винпоцетина не связанных с носителем, %
Винпоцетин-ПВП 1:2	-115,85±2,68	-29,88±1,32	0,205±0,59
Винпоцетин-ПВП 1:5	-160,11±2,85	-25,44±2,27	0,000±0,00
Винпоцетин-ПВП 1:2 pH 2,0	-82,71±2,53	-62,02±2,04	11,386±1,94
Винпоцетин-ПВП 1:5 pH 2,0	-105,57±5,10	-59,47±2,77	0,047±0,47

Полученные данные показывают, что высвобождение винпоцетина из ПВП в существенном количестве происходит только в кислой среде и при соотношении винпоцетина с полимером 1:2 по массе.

Библиографический список

1. Definition and testing of the GROMOS force-field versions 54A7 and 54B7 / N. Schmid, A.P. Eichenberger, A. Choutko [et al.] / Eur. Biophys J. – V. 40. – 2011. – P. 843-56.