

## ЗД-28

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ВИНПОЦЕТИНА ИЗ СПЛАВА С В-ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ****Ю. А. Полковникова<sup>1</sup>, К. Н. Корянова<sup>2</sup>, Е. С. Василевская<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,  
394018, г. Воронеж, Студенческая, 3.

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

<sup>3</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Омский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения  
Российской Федерации, 644099, г. Омск, ул. Ленина, 12.  
E-mail: juli-polk@mail.ru

Твердые дисперсии – это би- или многокомпонентные системы, состоящие из ЛВ и носителя, представляющие собой высокодиспергированную твердую фазу ЛВ или твердые растворы с частичным образованием комплексов переменного состава с материалом носителя. В качестве носителей для их получения применяются растворимые полимерные матрицы на основе поливинилпирролидона, полиэтиленгликолей,  $\beta$ -циклодекстрина, метилцеллюлозы и др., а также относительно простые вещества, например, мочевины, лактоза [1].

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

Для моделирования высвобождения винпоцетина из сплавов с полимерами был использован метод крупнозернистой молекулярной динамики в силовом поле Martini 2.2 с использованием программы Gromacs 2019, а также силовое поле GROMOS 54a7 [2].

Сборка моделируемых систем производилась с использованием программы Gromacs 2019. В состав моделируемой системы были включены молекулы  $\beta$ -циклодекстрина, а также молекулы винпоцетина основания либо его катионы и ионы Cl.

Полученные данные показывают, что для  $\beta$ -циклодекстрина наблюдается наиболее прочное связывание винпоцетина по результатам моделирования, а доля молекул, высвободившихся из данного носителя, минимальна. Наблюдается повышенное высвобождение молекул винпоцетина в кислой среде и при увеличении соотношения в сплаве в сторону винпоцетина. Равновесие при высвобождении винпоцетина из исследуемого носителя наступает быстрее при соотношении винпоцетина с носителем 1:5, по сравнению с соотношением 1:2. Эффективность высвобождения винпоцетина при pH 2,0 выше по сравнению с высвобождением в нейтральной среде.

**Библиографический список**

1. Huang Y., Dai W.G. Fundamental aspects of solid dispersion technology for poorly soluble drugs. Acta Pharm Sin B. – 2014. – V. 4(1). – P.18-25.
2. The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations / S.J. Marrink, H.J. Risselada, S. Yefimov [et al.] // J. Phys. Chem. B. – 2007. – V.111. – P. 7812–7824.