

УДК 532.72:615.033:001.891.573

DOI: 10.17223/00213411/62/12/146

Е.В. ШИЛЬКО^{1,2}, И.В. ДУДКИН¹, А.Ю. СМОЛИН^{1,2}, К.В. КРУКОВСКИЙ¹, А.И. ЛОТКОВ¹

ОЦЕНКА ВЕЛИЧИНЫ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФфуЗИИ МОЛЕКУЛ ДОКСОРУБИЦИНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ В ОБЪЕМЕ ПОРИСТОГО НОСИТЕЛЯ *

Экспериментальное изучение явления диффузии компонентов растворов в наноразмерных порах является крайне затрудненным и в некоторых случаях невозможным. Эффективным способом получения качественных и количественных оценок характеристик диффузионного процесса является компьютерное моделирование. В работе на основе метода диссипативной динамики частиц предложена наномасштабная численная модель для оценки величины коэффициента диффузии молекул растворенного вещества в порах различного масштаба. В качестве модельной системы рассмотрен водный раствор противоопухолевого антибиотика доксорубицина в порах гидроксипатита (перспективного носителя для решения задач адресной доставки высокотоксичных препаратов). С использованием развитой модели получены оценки величины коэффициента диффузии доксорубицина в порах различного линейного размера, а также при различных значениях объемной концентрации антибиотика. Установлено, в частности, что с увеличением размера поры коэффициент диффузии доксорубицина возрастает на порядок величины и, начиная с размеров поры 300 нм, выходит на насыщение. Увеличение концентрации антибиотика с 0.1 до 5 % приводит к уменьшению величины коэффициента диффузии более чем в 1.5 раза. Развитая модель может быть использована при решении задач прогнозирования мощности выхода компонентов растворов (включая лекарственные препараты) из порового объема твердофазных носителей различного типа.

Ключевые слова: пористый носитель, доксорубицин, диффузия, компьютерное моделирование, метод частиц.

Важной проблемой современной физики, определяемой бурным развитием нанотехнологий, является понимание закономерностей процессов диффузионного переноса молекул сложных соединений в наноразмерных порах. Решение данной проблемы имеет не только высокую фундаментальную значимость, но и широкие перспективы практических приложений, связанных, в том числе, с проектированием и разработкой пористых носителей растворимых органических и неорганических молекулярных систем. Одной из ключевых задач в этом направлении является определение характерной величины коэффициента диффузии растворенного вещества и растворителя в объеме нанопористого носителя при заданных значениях концентрации растворимого и характерного размера пор.

Вследствие определяющего влияния размерного фактора, применение распространенных экспериментальных методов оценки коэффициента диффузии в нано- и субмикронных порах, а также традиционных континуальных макроскопических моделей сталкивается с принципиальными трудностями. Эффективным современным подходом к получению качественных и количественных оценок характеристик диффузионных процессов в интервале размеров пор от нано- до микроскопических (10^{-8} – 10^{-6} м) является компьютерное моделирование с применением наномасштабного метода диссипативной динамики частиц [1]. Данный популярный метод относится к группе методов «укрупненной» молекулярной динамики и широко применяется для наномасштабного моделирования «слабосвязанных» сред, в том числе органических систем. Целью данной работы являлось развитие методики проведения численной оценки характерных значений коэффициента диффузии молекул растворенного вещества в объеме пор твердофазного пористого каркаса.

В качестве модельной системы для апробации методики рассматривался водный раствор доксорубицина, распространенного противоопухолевого (антиракового) антибиотика, в поровом пространстве гидроксипатита. Выбор системы данного типа обоснован высокой актуальностью разработки эффективных методов адресной доставки и направленного транспорта высокотоксичных противоопухолевых антибиотиков в организме с использованием нано- и микропористых твердофазных носителей [2, 3]. Одним из перспективных носителей таких антибиотиков (в частности,

* Работа выполнена при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки России (соглашение № 14.607.21.0202, уникальный идентификатор проекта RFMEFI60718X0202).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>