

**Секция «Фундаментальная медицина»**

**Прогнозирование оптимального состава офтальмологической  
терапевтической системы**

**Акопова Виолетта Владимировна**

*Аспирант*

*Белгородский государственный университет, Фармацевтический факультет,*

*Пятигорск, Россия*

*E-mail: vela-mag@mail.ru*

Одним из терапевтических методов лечения офтальмологических заболеваний являются инстилляциии глазных капель, которые приводят к механическому раздражению глаз и оказывают местное и общетоксическое действие. Важной представляется разработка терапевтической транспортной системы с применением лекарственных препаратов антибактериального действия. Разработка составов систем транспорта требует современных подходов, поэтому системы, основанные на сорбционных процессах, могут быть смоделированы теоретически по расчету физико-химических величин и пространственной конфигурации молекул. Нами был предложен способ прогнозирования совместимости лекарственных веществ и различных мономеров мягких контактных линз, для чего нами были использованы методы молекулярного моделирования с целью получения физико-химических дескрипторов [1,2]. Для последующего сравнения вычисленных величин и определения материала линз, имеющего наибольшее сродство к данному биологически активному соединению, был использован кластерный анализ. Оптимизация геометрии и расчет физико-химических дескрипторов проводились для мономеров материалов контактных линз и лекарственных веществ. Анализ результатов проведения кластерного анализа показал, что в одинаковые кластеры веществ со сходными физико-химическими дескрипторами попадают лекарственные средства и мономеры материалов контактных линз. Экспериментально было показано, что существуют лекарственные вещества, сорбция которых требует применения строго определенного полимера.

Таким образом, теоретически обоснованы и экспериментально подтверждены возможности использования компьютерного моделирования для конструирования состава и технологии офтальмологических систем доставки лекарственных средств.

**Литература**

1. Погребняк А.В. Молекулярное моделирование и дизайн биологически активных веществ. Ростов-на-Дону: Издательство СКНЦ ВШ, 2003. – 228с.
2. Orozco, M., Vachs, M., Luque, F.J. Development of Optimized MST/SCRF Methods for Semiempirical Calculations. The MNDO and PM3 Hamiltonians // J.Comp.Chem.-1995.- 16.- P.563-585.

**Слова благодарности**

Выражаю благодарность своему руководителю проф. Жиляковой Е.Т., за возможность реализации моей работы, а также кафедрам технологии лекарств и физической и коллоидной химии Пятигорской ГФА и лично проф. Степановой Э.Ф. и д.х.н. Погребняку А.В. за помощь, оказанную в проведении экспериментов.