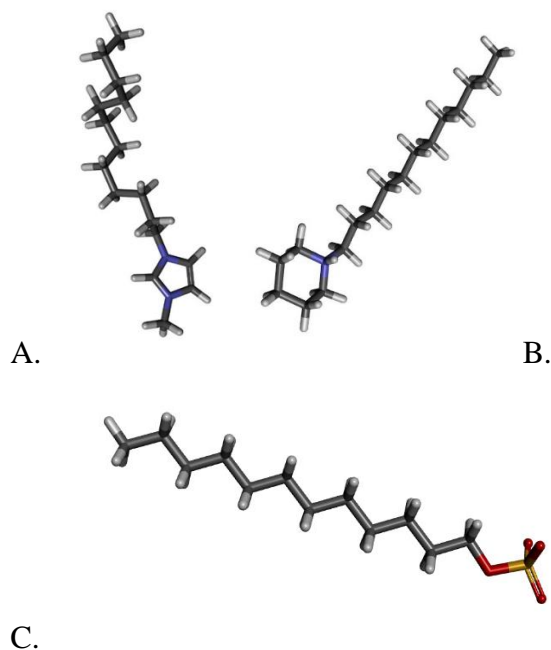
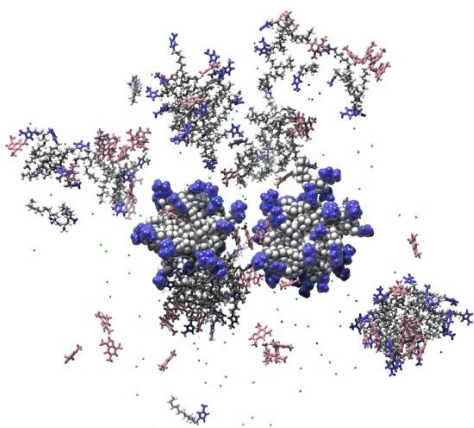


## Предсказване коефициента на разпределение мицела/вода във водни разтвори - платформа за доставяне на лекарства, базирана на симулации на молекулярна динамика

Колектив с ръководител Мирослава Недялкова, ФХФ - СУ "Св. Климент Охридски"



**Figure 1:** A-1-децил-3-метилимидазолиев катион, B-1-додещилпиридиниев катион, C-натриев додещил сулфат (SDS)



**Фигура 2:** Представяне на мицел от йонна течност и лекарство: кофеин

### ❖ Описание

In silico logP моделите (моделите на коефициенти на разпределение), базирани единствено на химични структури, се превърнаха в съществена част от лекарствения дизайн. Лимитираната и ниска

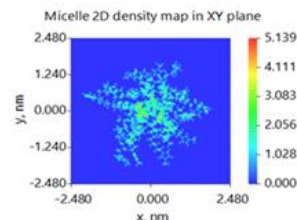
разтворимост във вода е характеристика на повече от 40% от новите лекарства. Класическият метод за повишаване на разтворимостта и пропускливостта при откриване на лекарствени средства на хидрофобни лекарства е чрез използване на мицелни структури, основани на повърхностно активно вещество. Предсказването на log P между мицела/вода в рамките на Молекулярно динамични симулации е основният фокус на изследването. Екип от Факултета по химия и фармация на Софийския университет работи основно по тази задача в сътрудничество с екип от Университета на Мериленд, Балтимор, който е част от Компютърно подпомаган дизайн на лекарства, Университета на Мериленд.

### ❖ Използване на инфраструктурата

PHYSON беше използван за получаване на резултатите чрез провеждане на МД симулации. PHYSON е компактен 216 ядрен високопроизводителен Linux клъстер, предназначен за подпомагане на научни изследвания. Машината е създадена като част от Моделиране и анализ на безвъзмездни средства за сложни системи, финансирани от Национален фонд за научни изследвания.

### Резултати и бъдеща работа

- Симулации за капсулирането на пет лекарства с ограничена разтворимост в три различни мицели с различна структура (две йонни течности и SDS);
- Разработен алгоритъм за 2D карта на плътността на изследваните системи.



**Фигура 3:** 2D density карта