

РАЗРАБОТКА МЕТОДОЛОГИИ ВЫБОРА МИНЕРАЛЬНОГО СОРБЕНТА НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ИЕРАРХИЙ

Бондарев А.В.

*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
кафедра фармацевтической технологии, г. Белгород*

Ключевые слова: минеральный сорбент, метод анализа иерархий.

Резюме: целью работы является разработка методологии выбора минерального сорбента на основе анализа иерархий. Составлена иерархия проблемы выбора наиболее приемлемого вида медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами. Альтернативами являются шесть групп медицинских глин: палыгорскита, смектита, каолинита, клиноптилолита, клиноэнстатина и кремнезема. Рассмотрено пять иерархических критериев.

Resume: the aim of the work is to develop a methodology for the selection of mineral sorbent based on the analysis of hierarchies. The hierarchy of the problem of choosing the most acceptable type of medical clay with optimal sorption properties is compiled. Alternatives are six groups of medical clays: Palygorskite, Smectite, Kaolinite, Clinoptilolite, Clinoenstatin and Silica. Five hierarchical criteria are considered.

Актуальность. В процессе очистки и обогащения минерального сырья получают медицинские глины, которые можно применять в качестве активных фармацевтических субстанций для производства энтеросорбентов, в качестве вспомогательных веществ, а также активного компонента для вульнеросорбции. Также вещества с сорбционными свойствами возможно использовать для создания систем доставки лекарственных веществ, в которых основным механизмом связывания, транспорта и выделения лекарственной молекулы является сорбционный.

В настоящее время в России зарегистрирована одна фармацевтическая субстанция на основе медицинских глин – «Смектит диоктаэдрический». Помимо смектитовой группы, минеральная сырьевая база России располагает эффективными сорбционными веществами, которые соответствуют фармацевтическим требованиям [1].

Создание новых эффективных медицинских сорбентов является достаточно сложной проблемой. Детальное рассмотрение этого вопроса показывает, что начальным этапом разработки новой лекарственной формы с сорбционным действием является предварительный анализ ее сорбционных характеристик, а также физико-химических свойств сорбтива с помощью теоретических подходов. Одним из таких подходов является метод анализа иерархий. Данный метод ранее уже использовался в фармацевтической технологии для формирования составов лекарственных форм [2-3].

Цель: разработка методологии выбора минерального сорбента на основе анализа иерархий.

Задачи: 1. провести анализ сорбционных характеристик минеральных сорбентов; 2. провести построение иерархии проблемы выбора медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами.

Материалы и методы. В качестве основного математического метода выбран

метод анализа иерархий Саати. Метод анализа иерархий состоит в декомпозиции проблемы на более простые составные части и дальнейшей обработке последовательности суждений эксперта по парным сравнениям. Метод анализа иерархий служит для обоснования принятия решений в условиях определенности и многокритериальности. Алгоритм метода анализа иерархий включает в себя следующие этапы:

1. формирование иерархии целей;
2. определение приоритетов;
3. расчет локальных векторов приоритетов;
4. проверка экспертных оценок на непротиворечивость (вычисление индекса согласованности);
5. расчет приоритетов целей и мероприятий для иерархии в целом на основе синтеза локальных приоритетов.

Простейшая полная иерархия проблемы многокритериального выбора представлена на рисунке 1.

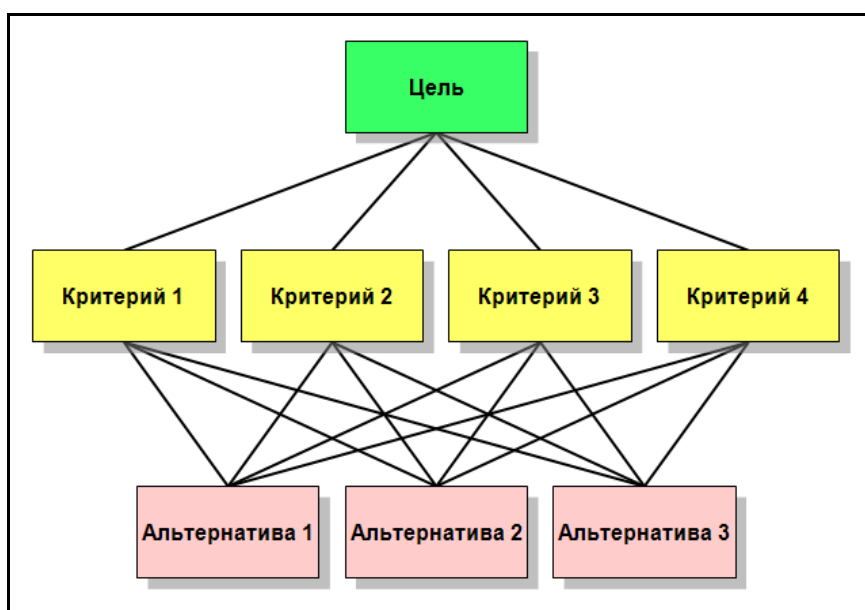


Рис. 1 – Иерархия проблемы многокритериального выбора

Для выявления количественных показателей при рассмотрении значимости различных суждений в методе анализа иерархий предлагается следующая шкала важности объектов: от 1 – объекты одинаково важны, 3 – умеренное превосходство одного над другим, 5 – существенное превосходство одного над другим, 7 – значительное превосходство одного над другим, до 9 – один объект абсолютно важнее другого и 2, 4, 6, 8 – соответствующие промежуточные значения. О правильности суждений судят по индексу относительной согласованности. Если индекс относительной согласованности менее 10%, то полученный результат по определению приоритетов достоверен. Если индекс относительной согласованности находится в нужных пределах, то составляется сводная таблица, в которую входят вектор приоритетов критериев и все векторы приоритетов альтернатив. На основе полученных данных получается балльный показатель, отражающий рейтинг альтернатив по решаемой проблеме.

Результаты и их обсуждение. Установлено, что пористая структура сорбентов обеспечивает селективное извлечение молекул соответствующего объема. Сорбционная активность возрастает с увеличением удельной площади поверхности и уменьшении размеров пор сорбента. Атомная структура основных минералов медицинских глин состоит из двух единиц. Первая структурная единица образована алюмоокислородной октаэдрической сеткой. Вторая структурная единица образована кремнекислородной тетраэдрической сеткой. Высокая сорбционная медицинских глин объясняется тем, что в кристаллах минерала обменные реакции происходят не только на внешней поверхности, но и внутри кристаллической решетки в полостях между кремнекислородными тетраэдрическими сетками.

Медицинские глины имеют три вида пор. Микропоры образуются в результате несовершенной укладки составных молекул, что приводит к отсутствию выравнивания кристаллов. Адсорбция в микропорах полностью обратима. Класс микропор можно разделить на три отдельные группы: ультрамикропоры, микропоры и супермикропоры. Ультрамикропоры (диаметр 0,5-1,4 нм) заполняются быстро, в течение первых нескольких минут адсорбции, и перекрытие потенциалов стенки поры является механизмом заполнения пор для адсорбции в микропорах. Сверхмикропоры (диаметр 1,4-2,0 нм) способствуют совместному заполнению пор, при котором происходит образование монослоя и эффективно уменьшается диаметр пор, повышая адсорбционный потенциал поры, следовательно, увеличивается адсорбция и происходит заполнение пор при низком относительном давлении.

Микропоры обеспечивают участки максимального адсорбционного потенциала для адсорбированной молекулы и внутри поры. Вследствие тесной близости стенок микропор происходит взаимодействие полиионных потенциалов, в результате перекрытия которых могут возникать поля дисперсии, приводящие к усиленной адсорбции при заданном давлении. Следовательно, диффузия в ультрамикропоры имеет значительную энергию активации, связанную с ней. Процесс заполнения пор может быть разделен на три этапа, во-первых, это формирование монослоя, во-вторых, заполнение пор совместными эффектами и в-третьих, завершение процесса заполнения пор. Мезопоры являются результатом крупных дефектов в структуре твердого тела и служат проходами, обеспечивающими транспортную систему, к микропорам. Это поры, которые приводят к возникновению явления капиллярной конденсации. Мезопоры заполняются многослойным образованием. Диаметры пор, превышающие 2 нм, но менее 50 нм согласно определению Международного союза теоретической и прикладной химии *IUPAC*, настолько велики, что при низких относительных давлениях происходит покрытие монослоя, за которым следуют другие слои и адсорбированная пленка действует как ядро, на котором может происходить капиллярная конденсация [4].

Проведено структурирование проблемы выбора в виде иерархии. Данные представлены на рисунке 2.

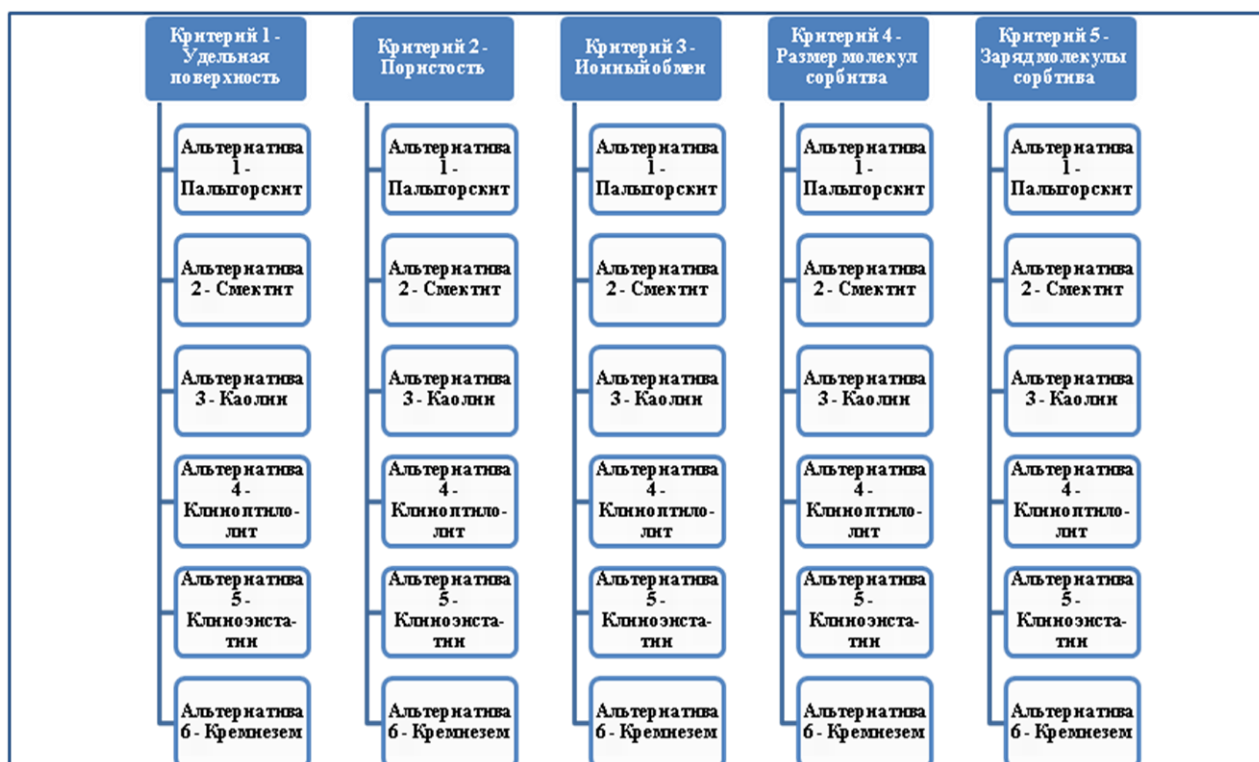


Рис. 2 – Иерархия проблемы выбора медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами

В качестве цели выбрано определение наиболее приемлемого вида медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами. Альтернативами являются шесть групп медицинских глин: палыгорскита, смектита, каолинита, клиноптилолита, клиноэнстатина и кремнезема. Рассмотрено пять иерархических критериев: удельная поверхность, пористость (размер пор), возможность ионного обмена на поверхности глины, размер молекулы сорбтива, заряд молекулы сорбтива.

Выводы: составлена иерархия проблемы выбора наиболее приемлемого вида медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами. Представлены шесть видов альтернатив и пять типов критериев. Перспективой дальнейшего исследования является изучение физико-химических характеристик медицинских глин и расчета вектора приоритетов для альтернатив по отношению к цели выбора медицинской глины с оптимальными сорбционными свойствами.

Литература

1. Бондарев А.В. Перспективы использования медицинских глин / А.В. Бондарев, Е.Т. Жилиякова, Н.Б. Демина, Е.Ю. Тимошенко // Разработка и регистрация лекарственных средств. - 2019. - № 8(4). - С. 27-31.
2. Жилиякова Е.Т. Основы методологии формирования составов лекарственных форм на базе метода анализа иерархий Саати // Вестник новых медицинских технологий. - 2009. - № 3. - С. 79-81.
3. Ковалевская Е.Г. Использование метода анализа иерархий для определения оптимального состава ородисперсных таблеток // Современные проблемы науки и образования. - 2013. - № 6. URL: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=11109> (дата обращения: 14.02.2022).
4. Бондарев А.В. Минеральные носители для пероральной доставки лекарственных веществ / А.В. Бондарев, Е.Т. Жилиякова, Н.В. Автина // Фармация. 2022. № 1. с. 10-16.