

Podvojně vrstevnaté hydroxidy (LDH) jsou slibným materiálem pro použití jako nosič léčiv díky své schopnosti interkalace různých aniontů a také velmi nízké toxicitě pro lidský organismus. Atorvastatin (ATS) je lék používaný ke snížení hladiny cholesterolu v krvi a prevenci kardiovaskulárních onemocnění. Současné způsoby podávání ATS jsou poměrně málo efektivní, což vede k potřebě předepisování vysokých dávek ATS, a to může pacientům způsobit nepohodlí v důsledku nežádoucích vedlejších účinků léku, nejčastěji v podobě nevolnosti, zažívacích potíží nebo bolestí kloubů a svalů. Interkalace ATS do LDH by mohla usnadnit kontrolované, cílené uvolňování léku do těla pacienta, čímž by byl lék účinný i při nižší dávce, a tím by se zmírnily vedlejší účinky ATS. Molekulární simulace využívající silové pole COMPASS byly použity k posouzení tří různých modelů ATS interkalovaných do Mg_2Al LDH s koncentracemi ATS 61,99 %, 73,64 % a 70,64 %, což odpovídá mezivrstevné vzdálenosti vrstev LDH 3,751 nm, 3,808 nm a 3,823 nm, které byly převzaty z experimentů rentgenové difrakce. Byly zkoumány různé výchozí orientace ATS aniontů v mezivrstvách LDH. Nejvyšší koncentrace ATS se jevila jako nejslibnější a vedla k nejstabilnější struktuře. Optimalizace geometrie a následné molekulárně-dynamické simulace ukázaly, že anionty ATS interagují s vrstvami LDH prostřednictvím vodíkových vazeb mezi karboxylovými skupinami ATS a hydroxylovými skupinami LDH. Tato interakce byla pozorována také v experimentech nukleární magnetické rezonance, což potvrzuje platnost výsledků molekulárních simulací.