Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106597

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Молекулярні кристали, стійкі до впливу тиску. Мефенамова кислота.

Початок етапу: 09.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380573409343, 380573409339

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 361.100

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вивчення поліморфних перетворень молекулярних кристалів для потреб фармацевтичної промисловості

Назва роботи англійською:

Study of polymorphic transitions of molecular crystals for the needs of the pharmaceutical industry.

Реферат українською:

Квантово-хімічними методами вивчено кристалічні структури ібупрофену та мефенамової кислоти, молекули яких подібні пірацетаму за здатністю формувати міжмолекулярні взаємодії, але в кристалах яких поліморфний перехід під дією тиску не було виявлено на відміну від кристалів пірацетаму. За даними розрахунків парних енергій взаємодій між молекулами поліморфна форма I ібупрофену має шарову будову, а поліморфна форма I мефенамової кислоти має колончато-шарову будову димерних будівельних одиниць. Моделювання можливих деформацій кристалічної структури виявило критерії, що вказують на стійкість до впливу тиску. Такими критеріями є відсутність локального мінімуму енергії на енергетичному профілі зсуву шарів в області стартової геометрії та високий енергетичний бар'єр зсуву шарів. В залежності від величини енергетичного бар'єру кристали залишаються без суттєвих змін (ібупрофен, до 4 ГПа) або розпадаються (мефенамова кислота, 3 ГПа).

Реферат англійською:

Quantum chemical methods have been used to study the crystal structures of ibuprofen and mefenamic acid, whose molecules are similar to piracetam in their ability to form intermolecular interactions, but in whose crystals a polymorphic transition under pressure was not detected, unlike piracetam crystals. According to the calculations of the pairwise interaction energies between molecules, the polymorphic form I of ibuprofen has a layered structure, and the polymorphic form I of mefenamic acid has a columnar-layered structure of dimeric building units. Modeling of possible deformations of the crystal structure revealed criteria that indicate resistance to pressure. Such criteria are the absence of a local energy minimum in the region of the starting geometry on the energy profile of the shear of the layers and a high energy barrier of the shear of the layers. Depending on the value of the energy barrier, the crystals remain without significant changes (ibuprofen, up to 4 GPa) or disintegrate (mefenamic acid, 3 GPa).

Індекс УДК: 669.017.3:548.33, 661.12

Коди тематичних рубрик: 53.49.05.27, 61.45

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Шишкіна Світлана Валентинівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Молекулярні кристали, стійкі до впливу тиску. Мефенамова кислота.

Назва НТП англійською: Molecular crystals resistant to pressure influence. Mefenamic acid.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Результати можуть бути представлені зацікавленим у них фармацевтичним підприємствам України для використання отриманої інформації в процесі розробки і виробництва лікарських препаратів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Більшість лікарських препаратів виробляється у твердих та м'яких формах, що мають переваги під час транспортування, зберігання та використання. Але виробництво твердих форм стикається з технологічними проблемами, однією з яких є здатність кристалічних структур до поліморфних перетворень під дією різних факторів, в тому числі, тиску. Неконтрольовані поліморфні переходи можуть призвести до втрати якості фармацевтичної продукції і стати причиною значних економічних збитків. Розробка підходів до дослідження кристалічних структур, що приведуть до можливості передбачити поведінку певної кристалічної структури під дією впливу має не тільки фундаментальне наукове значення, а й повинно допомогти підібрати технологічні параметри таким чином, щоб запобігти небажаним перетворенням кристалічних структур і таким чином забезпечити виробництво якісних фармацевтичних препаратів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:**
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**
- **Наявність бізнес-плану:**
- **Техніко-економічне обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи	Чебанов Валентин Анатолійович
Перелік осіб-виконавців	
Відповідальний за підготовку облікових документів	Машкіна А.Ю.
Телефон	+38 (057) 341-04-70
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

