Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005738

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження впливу тиску за допомогою алмазної наковальні. Похідні кумарину. Похідні бензімідазолу. Методика прогнозування можливості поліморфних переходів.

Початок етапу: 05.2023

Закінчення етапу: 11.2023

Вид звітного документа: Остаточний 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.): 4150.300

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:

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 тиску має не тільки фундаментальне наукове значення, а й повинно допомогти підібрати технологічні параметри таким чином, щоб запобігти небажаним перетворенням твердих фармацевтичних субстанцій і таким чином забезпечити виробництво якісних фармацевтичних препаратів.

Реферат англійською:

Most drugs are produced in solid and soft forms, which have advantages during transportation, storage and use. But the production of solid forms faces technological problems, one of which is the ability of crystalline structures to undergo polymorphic transformations under the influence of various factors, including pressure. Uncontrolled polymorphic transitions can lead to a loss of quality of pharmaceutical products and cause significant economic losses. The development of approaches to the study of crystal structures that will lead to the possibility of predicting the behavior of a certain crystal structure under the influence of pressure is not only of fundamental scientific importance, but should also help to select technological parameters in such a way as to prevent unwanted transformations of solid pharmaceutical substances and thus ensure the production of high-quality pharmaceuticals drugs

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: Вивчення поліморфних перетворень молекулярних кристалів для потреб фармацевтичної промисловості.

Назва НТП англійською: Study of polymorphic transitions of molecular crystals for the needs of the pharmaceutical industry.

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: Основою проєкту є застосування квантово-хімічних методів для дослідження молекулярних кристалів. Вивчення енергій взаємодій між молекулами замість геометричних характеристик водневих зв'язків різних типів, галогенних зв'язків, стекінг взаємодій тощо дає змогу перейти на новий рівень розуміння кристалічної будови. В рамках розробленого методу енергії взаємодій між молекулами розраховуються методами ab initio, що забезпечує високу точність, та результати візуалізуються за допомогою енергетично-векторних діаграм. На основі цього аналізу виділяються сильно зв‘язані фрагменти кристалічної структури і моделюється їх зсув відносно одна одної. Застосування методики до низки об‘єктів дозволило визначити фактори, які можна використати для прогнозування можливості поліморфних перетворень під дією тиску. Використання розробленого підходу для АФІ дозволить запобігти значних фінансових втрат внаслідок випадкового отримання неефективної кристалічної форми АФС на стадії подрібнення або таблетування.

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