Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U101182

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення бази даних об'єктів для подальшого дослідження. Поліморфні переходи в ноотропних препаратах під дією тиску.

Початок етапу: 10.2020

Закінчення етапу: 12.2020

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, Київська обл., 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.): 2047.87

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:

Об'єкт дослідження – поліморфні перетворення в молекулярних кристалах при подрібненні або під дією тиску; поліморфний перехід в пірацетамі. Мета етапу – вивчити та систематизувати літературні дані щодо досліджень дії тиску на молекулярні кристали різного типу. Дослідити об'єкти, що мають вплив на центральну нервову систему і для яких визначені кристалічні структури до и після поліморфного переходу під дією тиску. Методи дослідження – база даних створена з використанням відкритих джерел; теоретичні дослідження будови молекулярних кристалів та моделювання процесу деформації під дією тиску проведено класичними методами квантової хімії та в періодичному наближенні. Створено базу, що містить дані про 3258 об'єктів, досліджених під дією тиску або подрібнення. Відібрано об'єкти, зареєстровані як лікарські сполуки (1284), для яких проведено квантово-хімічні розрахунки з метою визначення типу кристалічної структури. Структури поділено на три групи: 1) молекулярні кристали, для яких є дані щодо поліморфного переходу під дією тиску; 2) молекулярні кристали, для яких є дані щодо поліморфного переходу внаслідок подрібнення; 3) молекулярні кристали, для яких поліморфний перехід за даними експериментальних досліджень виявлено не було. Вивчення пірацетаму показало, що всі шість структур, досліджених під дією тиску, мають шарову будову. Поліморфний перехід можливий лише внаслідок зсуву в кристалографічному напрямку a в площині ab і призводить до суттєвого послаблення водневих зв'язків та посилення дисперсійних взаємодій. Енергетичний бар'єр зсуву досить низький, а найвища енергія взаємодії в модельній системі димер молекул/фрагмент шару має від'ємне значення. Проведені дослідження є новим комплексним підходом до вивчення поліморфних переходів і не мають аналогів.

Реферат англійською:

The object of the study - polymorphic transformations during grinding or under pressure in molecular crystals; polymorphic transition in piracetam. The purpose of the first stage is to study and systematize the literature data on studies of the effect of pressure on molecular crystals of different types. To investigate objects that affect the central nervous system and for which crystal structures have been determined before and after the polymorphic transition under pressure. Research methods - the database is created using open sources; theoretical studies of the structure of molecular crystals and modeling of the deformation process under the pressure influence were carried out by classical methods of quantum chemistry and using the periodic boundary. A database created contains data on 3258 objects studied under pressure or grinding. Objects registered as drug compounds (1284) were selected for which quantum chemical calculations were performed to determine the type of crystal structure. The structures are divided into three groups: 1) molecular crystals, for which there are data on the polymorphic transition under the pressure influence; 2) molecular crystals, for which there are data on the polymorphic transition due to grinding; 3) molecular crystals for which a polymorphic transition according to experimental studies was not detected. A study of piracetam showed that all six structures studied under pressure have a layered structure. The polymorphic transition is possible only due to the shift in the crystallographic direction a in the ab plane and leads to a significant weakening of the hydrogen bonds and strengthening of the dispersion interactions. The shift energy barrier is quite low, and the highest energy of interaction between molecules dimer and layer fragment in the model system is negative. The conducted researches are a new complex approach to studying of polymorphic transitions and have no analogues.

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 підприемствам України для використання отриманої інформації в процесі розробки і виробництва лікарських препаратів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Виробництво лікарських препаратів в твердих та м'яких формах, маючи певні переваги, стикається з проблемами, пов'язаними з особливостями кристалічної будови органічних сполук. Найбільш суттєвою проблемою є поліморфні перетворення молекулярних кристалів, здатні призвести до отримання нової кристалічної форми, що має інші фізико-хімічні характеристики і проявляє відмінні від запланованих властивості. Такі перетворення здатні відбуватися на певних стадіях технологічного процесу, пов'язаних з механічним впливом на кристалічну форму (подрібнення, компактування, таблетування, тощо) і призводити до зміни характеристик продукту аж до повної втрати очікуваних властивостей і, як наслідок, зниження якості фармацевтичної продукції. Поєднання експериментальних методів дослідження механічного впливу або тиску на молекулярні кристали з квантово-хімічними дослідженнями особливостей кристалічної структури та моделюванням можливих деформацій кристалу здатне визначити фактори, що вказують на можливість зміни кристалічної будови. Це дає змогу передбачити такі небажані процеси, визначити умови їх протікання і відкорегувати регламентні характеристики технологічного процесу, щоб запобігти поліморфному переходу. Таким чином, основною метою проєкту є розробка комплексного підходу з використанням експериментальних і розрахункових методів до вивчення і прогнозування поліморфних переходів в молекулярних кристалах, що має надзвичайне значення в практиці фармацевтичної промисловості і здатне стати корисним інструментом для підвищення якості твердих та м' яких форм лікарських 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

