Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U105841

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-09-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Механічний вплив на поліморфні модифікації бензтиазинів та оксазолів

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 08.2021

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.): 4381.358

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:

Вивчено поліморфний перехід похідного бензотиазіну (аналог піроксикаму) з моноклінної структури в триклінну протягом чотирьох тижнів після подрібнення. Моноклінний поліморф кристалізується з більш леткого розчинника, має шарувату структуру та проявляє високу антидиуретичну та анальгетичну активність. Поліморфний перехід відбувається виключно внаслідок орієнтаційних факторів та призводить до втрати біологічної активності. Для 3-(1-(трет-бутоксикарбоніл)азетидин-3-іл)-1,2-оксазол-4-карбонової кислоти виявлено поліморфний перехід у результаті подрібнення, що відбувається за рахунок конформаційних та орієнтаційних факторів. Передумовою переходу є висока конформаційна гнучкість молекули, низькі бар'єри інверсії Нітрогену та обертання замісників навколо одинарних зв'язків, а також здатність карбоксильної групи утворювати два типи супрамолекулярних синтонів. Поліморфні модифікації побудовані з молекулярних (метастабільна структура) або димерних (стабільна структура) структурних одиниць.

Реферат англійською:

The polymorphic transition of a benzothiasine derivative (analogue of pyroxicam) from a monoclinic structure in triclinic one for four weeks after grinding is studied. The monoclinic polymorph crystallizes from a more volatile solvent, has a layered structure and exhibits high anti-diuretic and analgesic activity. Polymorphic transition occurs solely as a result of orientational factors and leads to loss of biological activity. For 3- (1- (tert-butoxycarbonyl) azetidine-3-yl) -1,2-oxazol-4-carboxylic acid, a polymorphic transition as a result of grinding occurs due to conformational and orientational factors. The prerequisite for the transition is the high conformational flexibility of the molecule, low barriers of nitrogen inversion and rotation of the substituents around the single bonds, as well as the ability of the carboxyl group to form two types of supramolecular synthons. Polymorphic modifications are constructed from molecular (metastable structure) or dimeric (stable structure) building units.

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: 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

