Реєстраційна картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-11-2020

II. Підстава для проведення робіт

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

У тому числі по роках:	
2020	2047.870 тис. грн.
2021	4745.400 тис. грн.
2023	4150.300 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 10943.570 тис. грн.	

III. 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, 380442981622

IV. 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

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. 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.

Мета роботи українською:

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.

Мета роботи англійською:

The production of drugs in hard and soft forms, having certain advantages, faces issues related to the peculiarities of the crystal structure of organic compounds. The most significant problem is the polymorphic transformations of molecular crystals, able to lead to a new crystal form, which has other physicochemical characteristics and exhibits different properties than planned. Such the transformations can occur at certain stages of the

technological process associated with the mechanical impact on the crystal form (grinding, compaction, tableting, etc.) and results in changes of product characteristics until the complete loss of expected properties and, consequently, in the reduction of the pharmaceutical products quality. The combination of experimental methods for the study of the mechanical impact or pressure on molecular crystals with quantum chemical studies of particularities of crystal structure and modelling of the possible deformations of the crystal can determine factors that indicate the possibility of changes of the crystal structure. This makes it possible to predict such the undesirable processes, to determine their conditions and to adjust the regulatory characteristics of the technological process to prevent the polymorphic transition. Thus, the aim of the project is the development of a complex approach using experimental and computational methods for the study and prediction of the polymorphic transitions in molecular crystals, that has extreme importance in the practice of the pharmaceutical industry and can become a useful tool for the improvement of the quality of solid and soft forms of drugs.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фундаментальні знання в області інженерії кристалів, фармацевтичне виробництво

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи 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

Номер етапу: 2

Назва етапу: Анальгетики ряду бензтиазинів. Похідні оксазолу.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 08.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

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

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

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 669.017.3:548.33, 661.12

Коди тематичних рубрик: 53.49.05.27, 61.45

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Чебанов Валентин Анатолійович

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 Юрченко Т.А.