Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0120U104907

Відкрита

Дата реєстрації: 17-11-2020

Статус виконавця: 17 - головний виконавець

1. Загальні відомості

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

КПКВК: 2201300

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 10943.570

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2020	2047.870
2021	4745.400
2023	4150.300

2. Замовник

Назва організації: Національний фонд досліджень України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 42734019

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

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442981622

Телефон: 380442981622

3. Виконавець

Назва організації: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 23759880

Підпорядкованість: Національна академія наук України

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

Телефон: 380573409343

Телефон: 380573409339

E-mail: info@isc.kharkov.com

WWW: http://www.isc.kharkov.com/

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Вивчення поліморфних перетворень молекулярних кристалів для потреб фармацевтичної промисловості

Назва роботи (англ)

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

Мета роботи (укр)

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 (англ)

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 науково-технічної діяльності: 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

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	10.2020	12.2020	Проміжний звіт	Створення бази даних об'єктів для подальшого дослідження. Поліморфні переходи в ноотропних препаратах під дією тиску.
2	05.2021	08.2021	Проміжний звіт	Анальгетики ряду бензтиазинів. Похідні оксазолу.
3	09.2021	12.2021	Проміжний звіт	Молекулярні кристали, стійкі до впливу тиску. Мефенамова кислота.
4	05.2023	11.2023	Остаточний звіт	Дослідження впливу тиску за допомогою алмазної наковальні. Похідні кумарину. Похідні бензімідазолу. Методика прогнозування можливості поліморфних переходів.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 53.49.05.27, 61.45

Індекс УДК: 669.017.3:548.33, 661.12

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Чебанов Валентин Анатолійович

Керівники роботи:

Шишкіна Світлана Валентинівна

Відповідальний за подання документів: Машкіна А.Ю. (Тел.: +38 (057) 341-04-70)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.