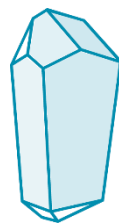


Farmaceutisko vairākkomponentu fāžu kristālinženierija efektīvākam kristālisko formu dizainam

Izp-2018/1-0312

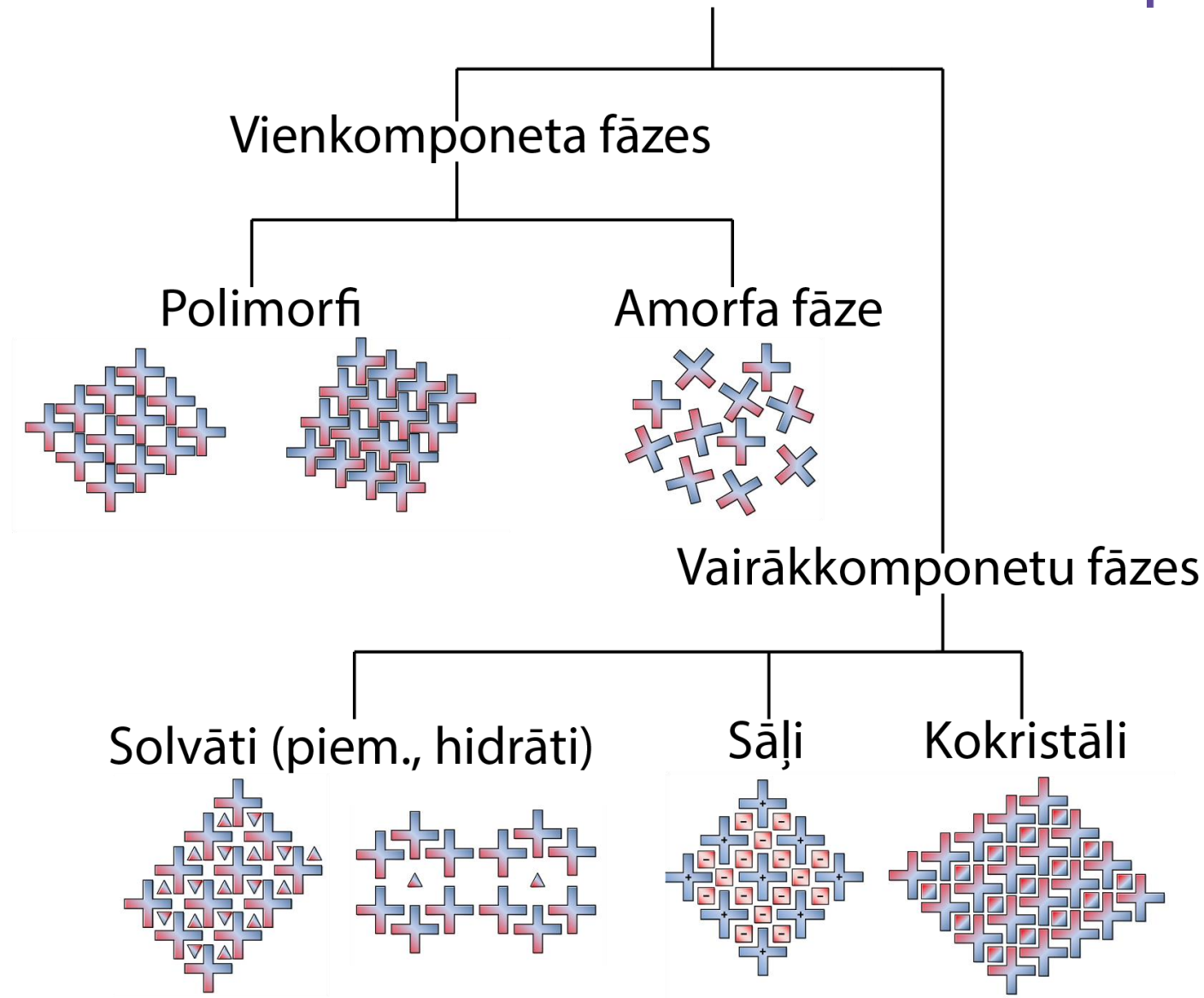


UNIVERSITY OF LATVIA
Laboratory of
Molecular Crystals



FLPP
FUNDAMENTĀLIE UN
LIETIŠĀJIE PĒTĪJUMU
PROJEKTI

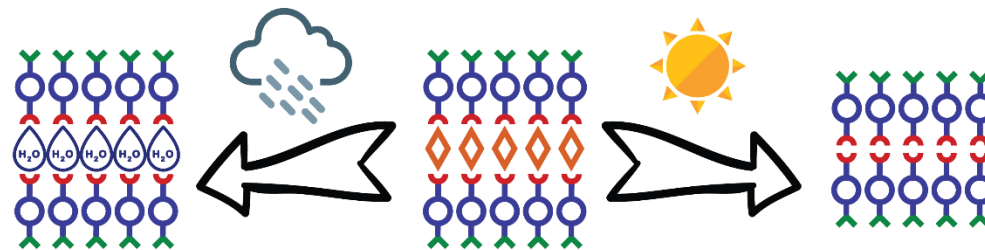
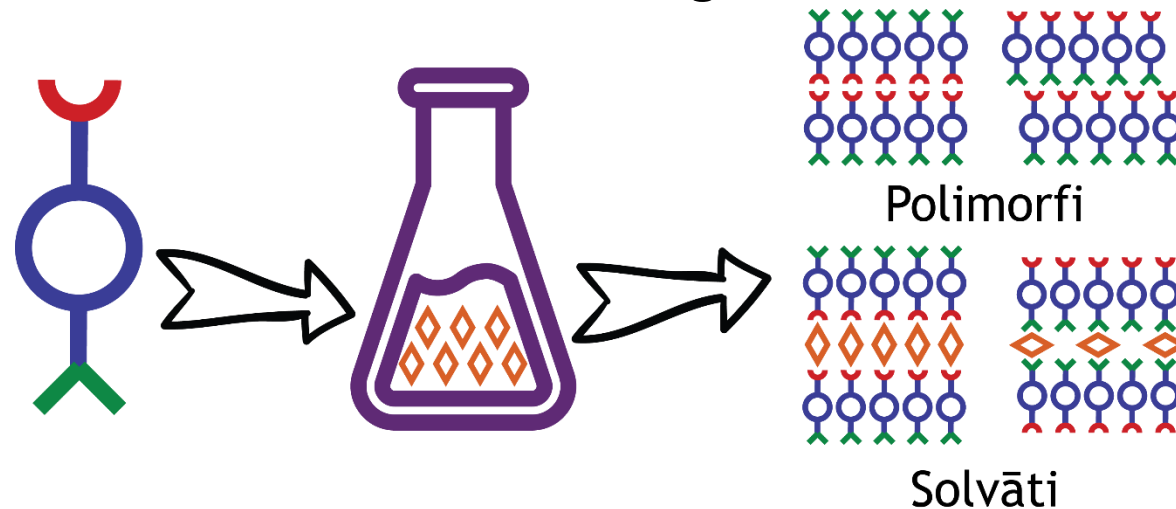
Farmaceutisko vielu formas: iespējas



Projekta mērķis un tā sasniegšana

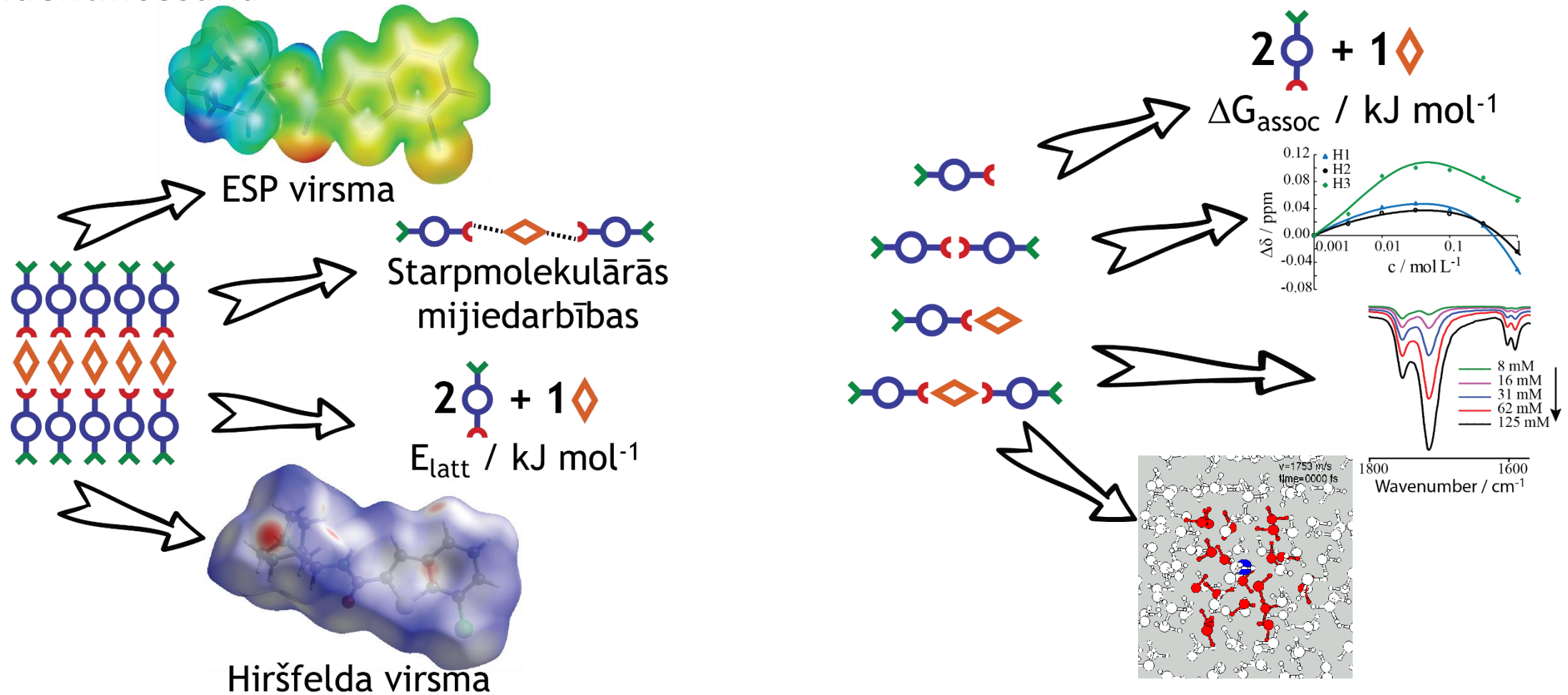
- **Mērķis:** izstrādāt vispārīgus modeļus un pieejas farmaceitisku vielu daudzkomponentu fāžu veidošanās racionalizēšanai:

a) Modeļsavienojumu kristālisko formu skrīnings un raksturošana



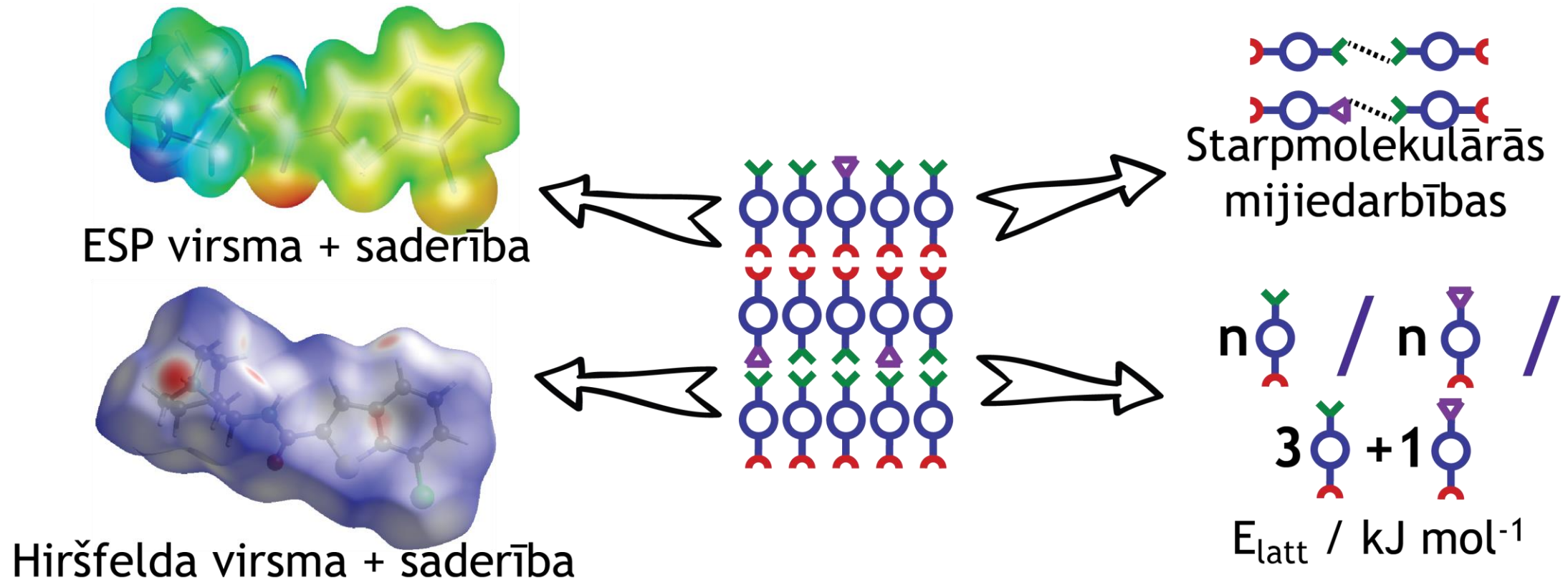
Projekta mērķis un tā sasniegšana

b) Modeļsavienojumu solvātu un hidrātu veidošanos nosakošo faktoru identificēšana



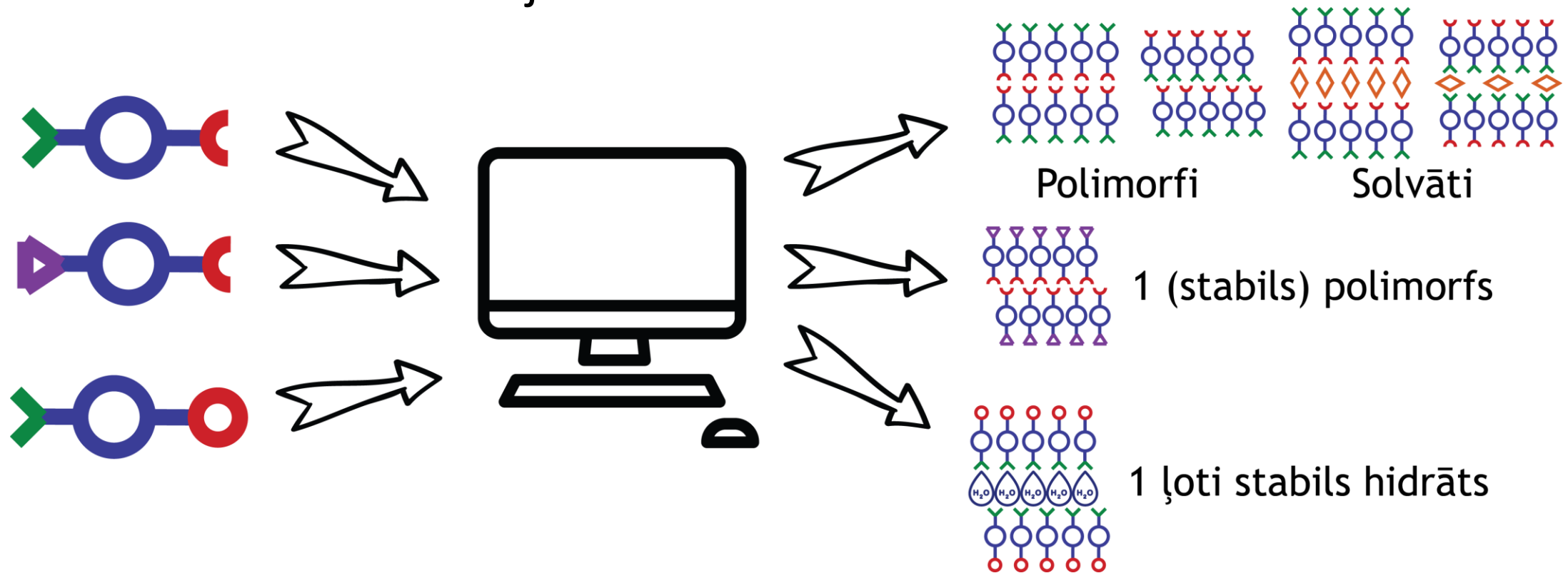
Projekta mērķis un tā sasniegšana

- c) Cieto šķīdumu veidošanos nosakošo strukturālo faktoru identificēšana izvēlētās sistēmās



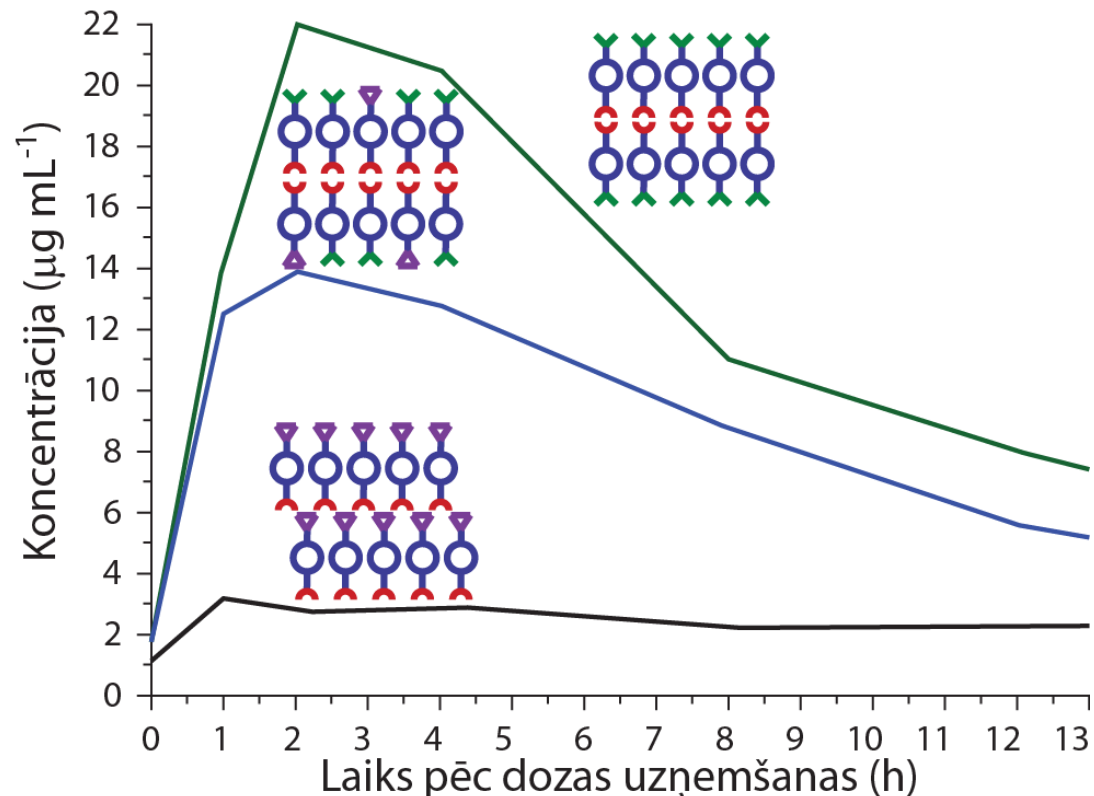
Sniegtais vai potenciālais labums nozarei un sabiedrībai kopumā

- Vienkāršāks un efektīvāks farmaceitisko daudzkomponentu fāžu dizains, uzlabojot ražošanas efektivitāti un samazinot izmaksas, kas saistītas ar gala komerciālās formas dizainu jaunām farmaceitiskām cietvielām



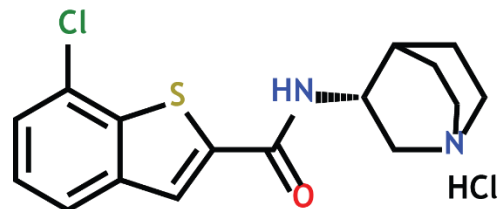
Sniegtais vai potenciālais labums nozarei un sabiedrībai kopumā

- Vienkāršāks un efektīvāks farmaceitisko daudzkomponentu fāžu dizains, uzlabojot ražošanas efektivitāti un samazinot izmaksas, kas saistītas ar gala komerciālās formas dizainu jaunām farmaceitiskām cietvielām



Padarītais

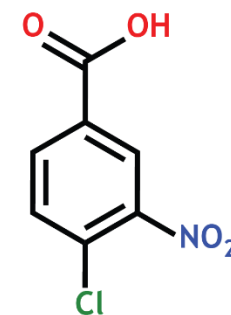
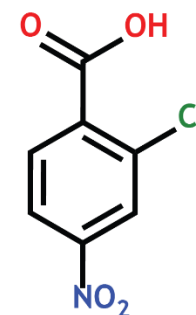
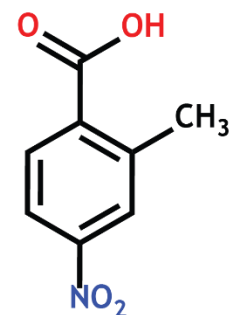
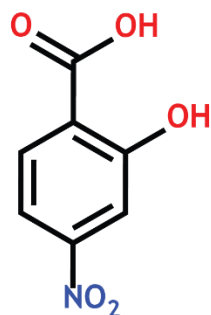
- I: solvātu un hidrātu veidošanos nosakošo faktoru identificēšana:



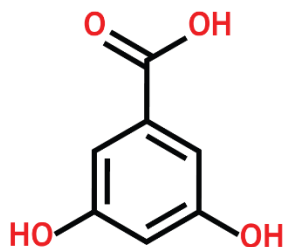
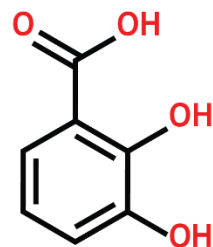
R-enceneklīna HCl



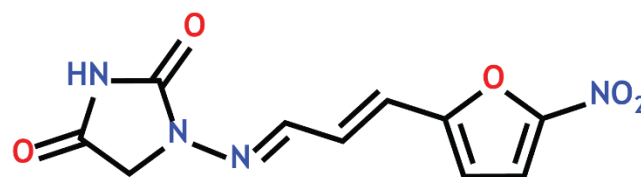
CRYSTAL
GROWTH
& DESIGN



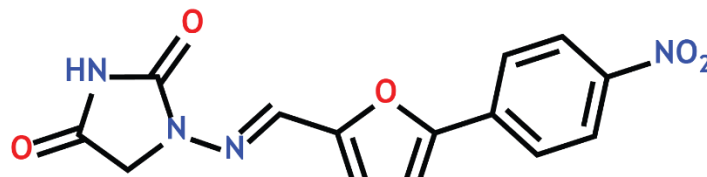
2-aizvietotas NBA-es / CNBA-es



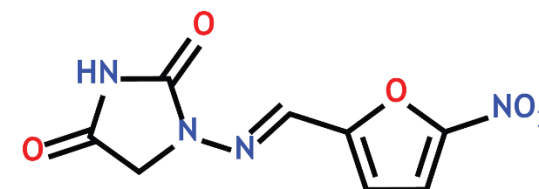
dOHBA-es



furagīns



dantrolēns

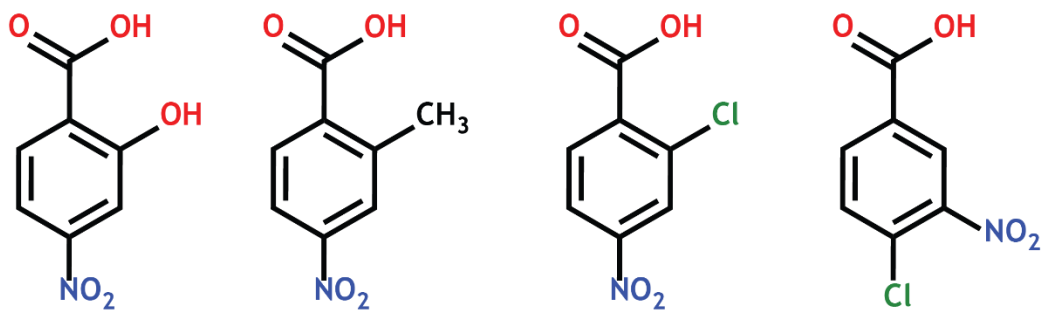


nitrofurantoīns

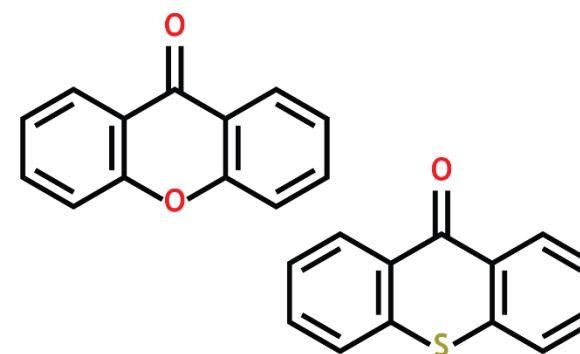


Padarītais

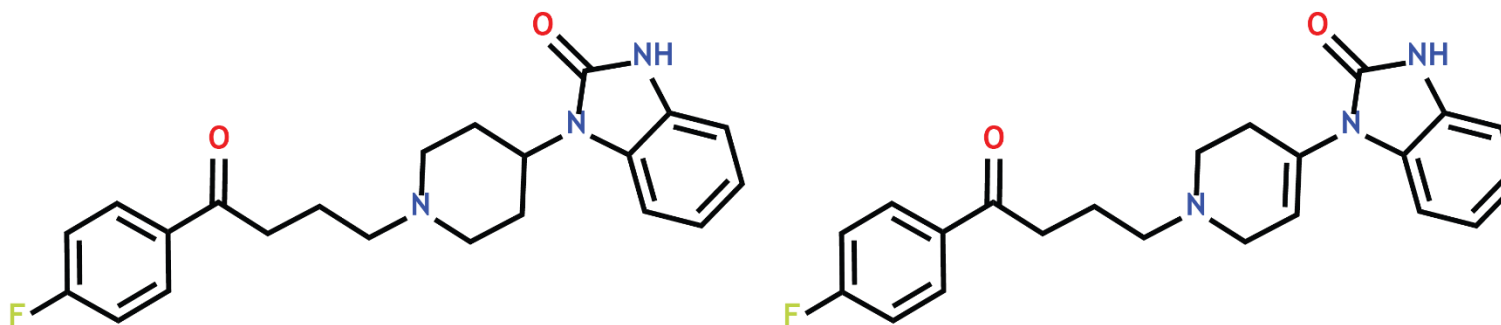
- II: Cieto šķīdumu veidošanos nosakošo strukturālo faktoru identificēšana:



Cl/CH₃/OH NBA-es



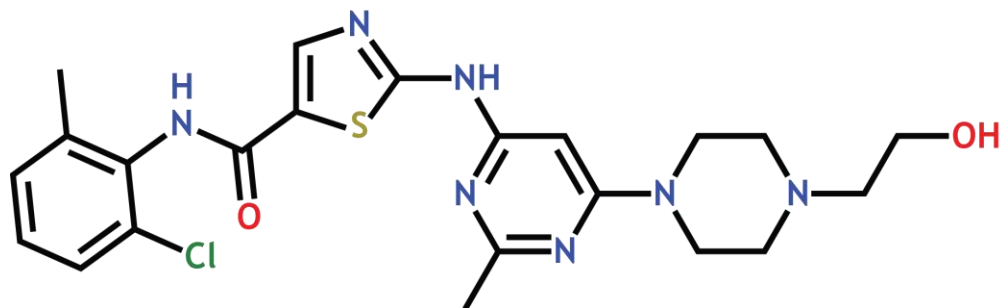
ksantons/tioksantons



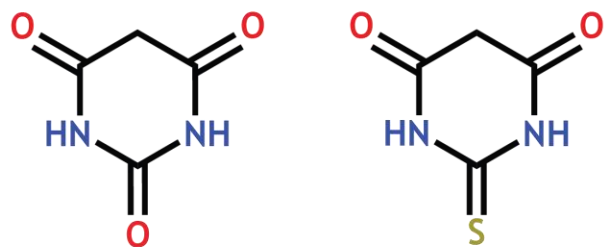
benperidols/droperidols



Aktuālie izaicinājumi



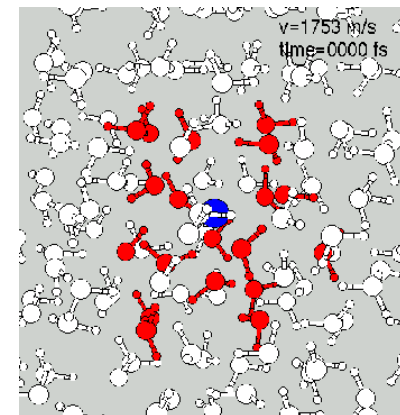
dasatiniba solvātu veidošanās



ksantons/tioksantons



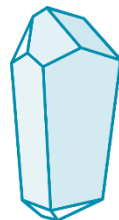
Daudzkomponentu fāžu veidošanās nosakošo kopīgo faktoru identificēšana



Molekulārās dinamikas simulāciju analīze / simulāciju parametru modificēšana



Paldies par uzmanību!



UNIVERSITY OF LATVIA
Laboratory of
Molecular Crystals

100  LATVIJAS
UNIVERSITĀTE
ANNO 1919



Latvijas Zinātnes
padome



FLPP
FUNDAMENTĀLIE UN
LIETIŠKIE PĒTĪJUMU
PROJEKTI