

Fizikai Kémiai Tanszék

Tantárgy: **GYÓGYSZERHATÓANYAGOK POLIMORFIZMUSA**

Év, szemeszter: 3. évfolyam - 2. félév

Óraszám:

Előadás: **28**

1.hét:

Előadás: Bevezetés. A polimorfizmusfogalma. Történeti áttekintés. Polimorfizmus a mindennapi életben és a gyógyszergyártásban. Vizsgálati módszerek áttekintése. Rendeződési és konformációs polimorfizmus. Pseudopolimorfizmus, szolvatopolimorfizmus? FDA, ICH, Q6a követelmények. A ritonavir és a cefuroxim esetében. Irodalmi források.

2.hét:

Előadás: Termodinamikai megfontolások. Termogravimetriai módszerek alapelvei és alkalmazhatóságuk polimorfok vizsgálatában. A Burger-Rambergerszabályok.

3.hét:

Előadás: Szabadalmi fogalmak. Új – meglepő – hasznos. Igénypontok buktatói. Polimorfok szabadalmaztathatósága. Ranitidin hidroklorid és paroxetin hidroklorid.

4.hét:

Előadás: A kristályok növekedésének termodinamikája és kinetikája. Gócképződés – gócnövekedés, morfológia. A polimorfok képződésének kontrollálása. A kristályosítási technológiák kérdései. Az aszpartámeset.

5.hét:

Előadás: Számításikémia - polimorfok előfordulásának jóslása.

6.hét:

Előadás: A röntgendiffrakció alapjai. A fázisprobléma megoldása. Pordiffrakció. A részecskeméret hatása a pordiffrakció felvételre. 'Preferred orientation.' Mennyiségi XRPD. Sajáteredmények.

7.hét:

Előadás: Egykristály röntgendiffrakció. Polimorfok szerkezetkérdései. Hidrogénhidasszerkezetek gráfelméleti leírása. Sajáteredmények.

8.hét:

Előadás: Szerkezet meghatározás pordiffrakciós adatokból. Az elemi cella meghatározása, intenzitásinformációk nyerése, a szerkezet megoldása, Rietveld finomítás. A cimetidin szerkezete.

9.hét:

Előadás: Szilárdfázisú NMR. Alkalmazhatóság polimorfok vizsgálatában. Szteroidvázis vegyületek példája.

10.hét:

Előadás: FT-IR és Raman spektroszkópia, előnyök és hátrányok. ATR technikák. Sajáteredmények.

11.hét:

Előadás: Festékek, robbanóanyagok polimorfizmusa (angolul, szakfordítószámára is).

12.hét:

Előadás: Adatbázisok a polimorfizmus kutatásában. Kristallográfiai és szabadalmi keresések.

13.hét:

Előadás: A CSD adatbázis használata. Grafikus programok a szerkezetvizsgálatban.

14.hét:

Előadás: Esettanulmányok, hallgatói beszámolók. A csokoládé polimorfizmusa.

Követelmények

Kollokviumazelőadásanyagából.