



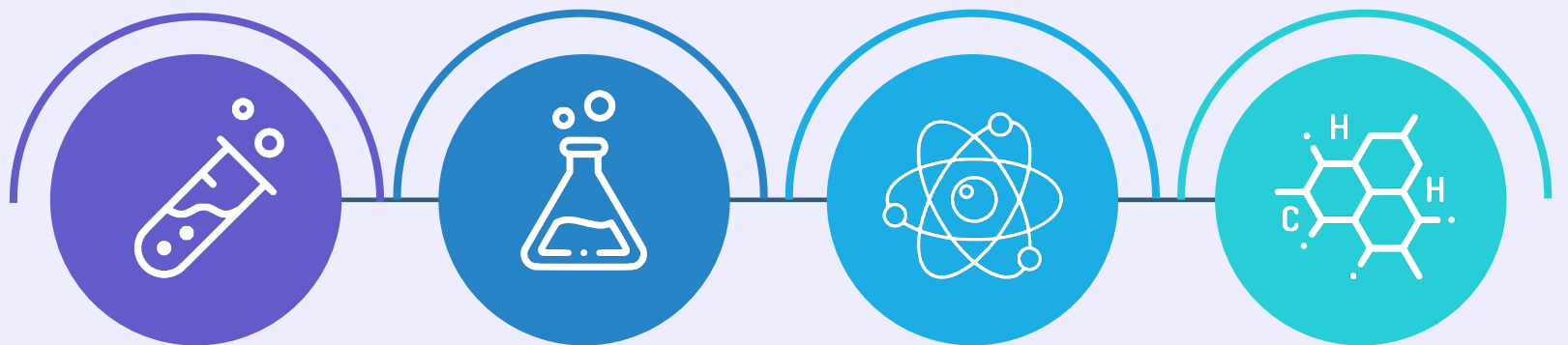
Автор: Баграмян Анита

Синтез фармацевтических сокристаллов методом измельчения с растворителем



Введение

Фармацевтические сокристаллы представляют собой подкласс сокристаллов, в которых по крайней мере один из компонентов является активным фармацевтическим ингредиентом (API), а вторая молекула-партнер - фармацевтически приемлемым коформером или эксципиентом



Проблема

Знания о синтезе сокристаллов не систематизированы, процесс обзора информации очень трудоемок

Цель

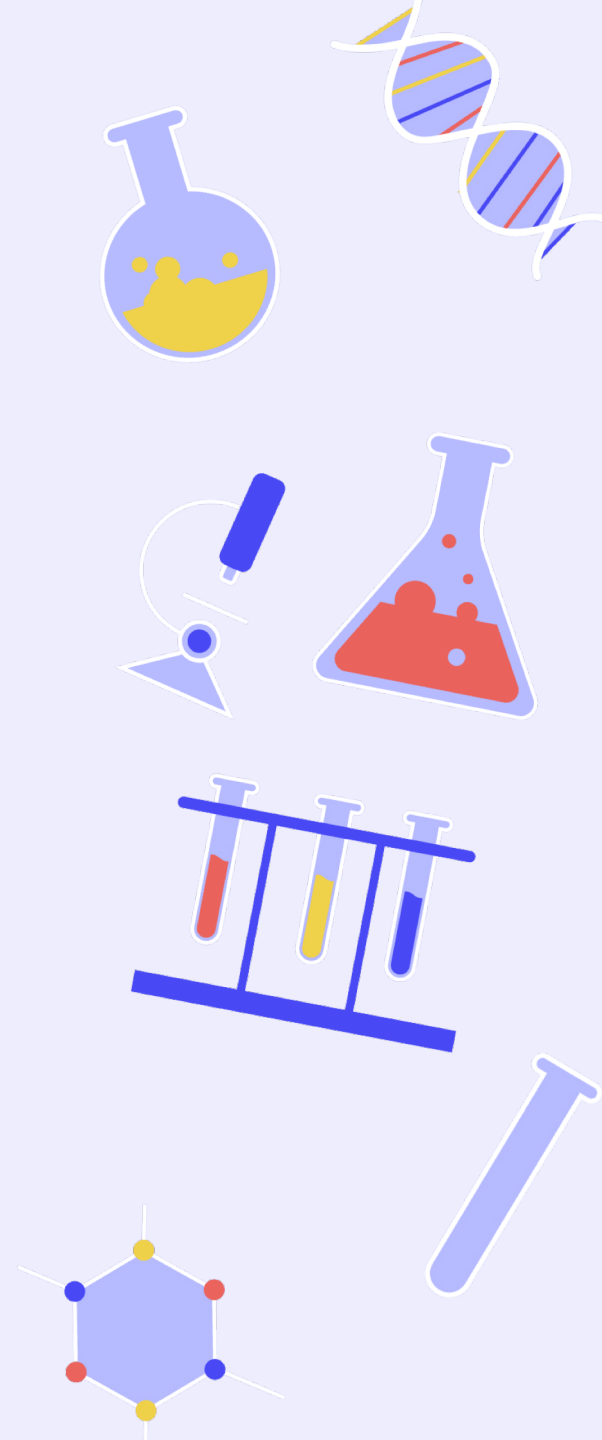
Разработка базы данных, которой смогут пользоваться другие ученые

Исследуемая методика

Расширение традиционных механохимических методов без р-рителей, в кот. исп. небольшое кол-во жидкости в качестве добавки для усиления и/или контроля реакционной способности

Предполагаемый результат

База данных, статья, опенсорс продукт



Исходная база данных

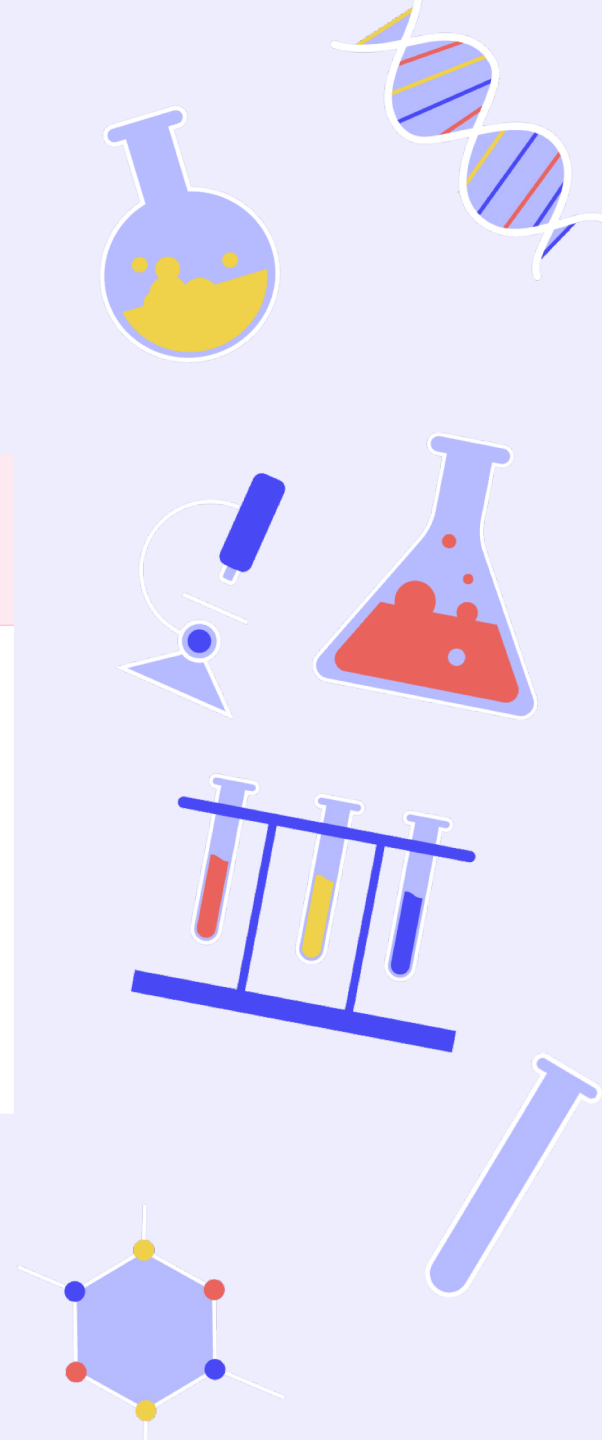
- Источники – публикации научных журналов, 35 штук
- Пар API-cof – 56
- Множество пропусков

#Проверим количество пропусков в каждом столбце

```
df.isna().sum()
```

✓ 0.0s

doi	1
API	1
cof1	1
ratio_mole	1
liquid	1
liq_amount_mL	73
mixing_apparatus	60
mixing_frequency_Hz	100
mixing_temp_C	119
mixing_time_min	49
drying_time_hour	111
drying_temp_C	106
dtype: int64	



Что было сделано

01

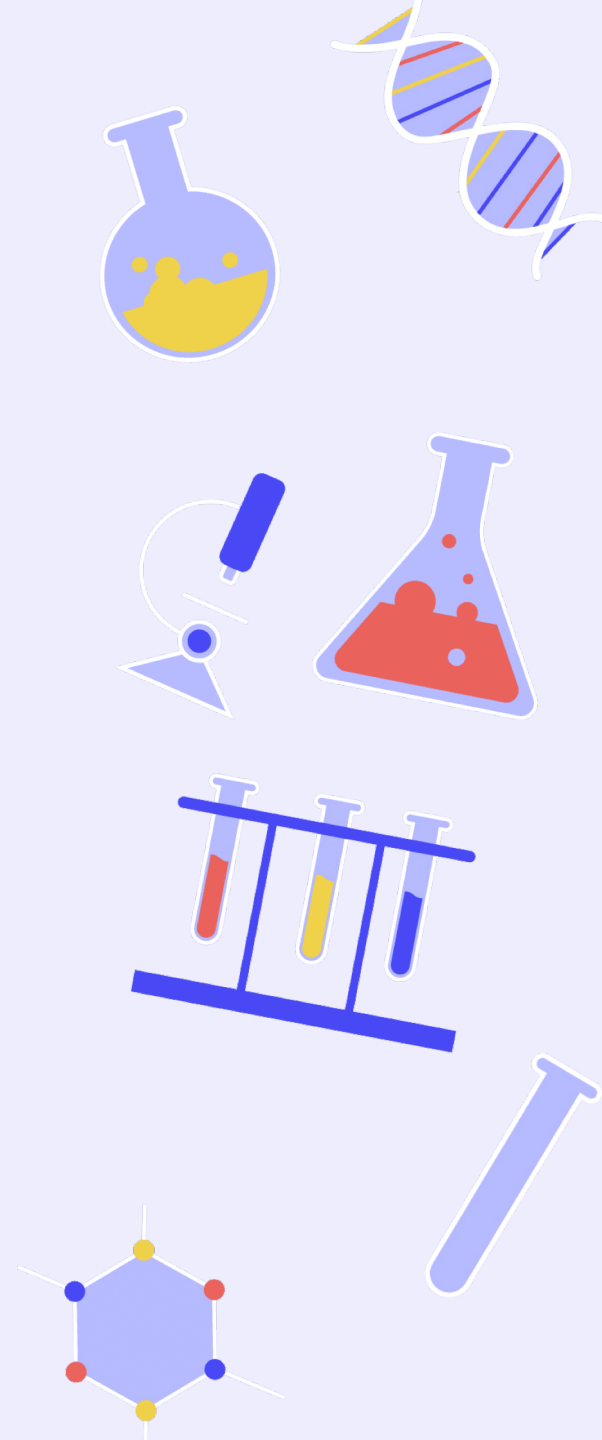
Удаление ненужных параметров для грамотной обработки

02

Заполнение пропусков приемлемыми методами

03

Статистический анализ



Будущее проекта

В данный момент решается задача по настройке автопарсинга, а затем включение в базу информации о кристаллических структурах полученных молекул, а также интегрирование других методик синтеза сокристаллов для последующего построения модели предсказания методики синтеза

```
client = OpenAI(
    api_key="|",
    base_url="https://api.vsegpt.ru/v1",
)

prompt = "You are helpful assistant in chemistry, specializing in cocrystals"

messages = []
messages.append({"role": "user", "content": prompt})

response_big = client.chat.completions.create(
    model="openai/gpt-3.5-turbo", # id модели из списка моделей
    messages=messages,
    temperature=0.7,
    n=1,
    max_tokens=3000, # максимальное число ВЫХОДНЫХ токенов. Для большинства
    extra_headers={"X-Title": "My App" }, # опционально – передача информации
)

response = response_big.choices[0].message.content
print("Response:", response)
```

Response: Final answer:

```
**Experiment 1: Co-crystal and Salt Formation via LAG (Liquid-Assisted Grinding)**
- **Coformers**: Trans-aconitic acid (TACA) and Nicotinamide (NA)
- **API-Coformer Ratio**: 1:1 and 1:2
- **Solvent**: Various liquids including acetonitrile, dioxane, ethanol, methanol,
- **Amount of Solvent**: Approximately 2–3 mL of solvent per 30–40 mg of powdered m
- **Mixing Apparatus**: Mortar and pestle.
- **Mixing Time**: Approximately 30 minutes.
- **Mixing Frequency**: Not specified; manual grinding.
- **Temperature**: Room temperature.
- **Drying Time and Temperature**: Not specified.

**Experiment 2: Solution Crystallization**
- **Coformers**: TACA and NA
- **API-Coformer Ratio**: 1:1 and 1:2
- **Solvent**: THF and methanol in a 1:1 mixture.
- **Amount of Solvent**: 100 mL of solvent.
- **Mixing Apparatus**: Not specified.
- **Mixing Time**: Not specified; allowed to evaporate slowly for one week.
- **Drying Time and Temperature**: Not specified.

**Experiment 3: Thermal Analysis (TGA and DSC)**
- **Sample**: 1:1 TACA-NA hydrated molecular salt.
- **Temperature Range for TGA**: 25–450 °C.
...
- **Drying Time and Temperature**: Not specified.
- **Conditions**: Grinding with varying amounts of water and heating at 80 °C for a

Each experiment is described separately, focusing on the parameters relevant to the
```

Спасибо за внимание!