

Abstrakt

Klíčovým krokem ve vývoji a produkci farmaceutických materiálů je vysoce precizní strukturní charakterizace. Strukturní složení farmaceutických substancí je nicméně velmi často složité a těžko identifikovatelné. Jako vhodný způsob k získání jednoznačné strukturní interpretace těchto systémů se jeví nukleární magnetická resonance v pevné fázi s vysokým rozlišením (ssNMR). Z tohoto důvodu je zde popsán spolehlivý nástroj – soubor ssNMR experimentů pro úplnou charakterizaci rozličných pevnolátkových farmaceutik. Důsledná optimalizace ssNMR technik je uskutečněna na velkém množství měřených vzorků obsahujících aktivní farmaceutické ingredience (APIs – active pharmaceutical ingredients) se systémy zahrnujícími APIs formulované v pevných disperzích až po čisté formy vykazující vysokou molekulární neuspořádanost. V této práci je též diskutován vliv polymerní matrice na tvorbu typů pevných disperzí umožňujících i jemné vyladění kontrolovaného uvolňování léčiva. Rozlišení mezi různými strukturními uspořádáními molekul APIs v trojrozměrné dimenzi složitých pevnolátkových farmaceutických systémů je umožněno díky jednoduché strategii – faktorové analýze (FA) aplikované na obtížně popsitelná ssNMR spektra (^{13}C CP/MAS NMR a ^{19}F MAS NMR). Výsledky těchto ssNMR zkoumání přispívají k lepšímu pochopení tuhých disperzních systémů založených na polymerních maticích a systémů s velmi záludnými a těžko popsitelnými spektry.