

Mechanochemia jest jednym z najbardziej dynamicznie rozwijających się kierunków naukowych, który otwiera szerokie możliwości w syntezie nowych materiałów. Dzięki tej metodologii możliwe jest otrzymywanie szerokiej gamy związków organicznych, nieorganicznych, kompleksów metali, leków. Reakcje prowadzone w młynach kulowych w ciele stałym przebiegają na ogół czysto oraz wydajnie. Niewątpliwą zaletą procesów mechanochemicznych jest aspekt ekologiczny związany z wykluczeniem udziału znacznych ilości rozpuszczalników, stosowanych w klasycznej syntezie organicznej.

W naszym projekcie skupimy uwagę na optymalizacji reakcji oraz mechosyntetycznym przygotowaniu krótko- oraz długołańcuchowych peptydów, a także kokryształów farmaceutycznych dwóch wybranych leków (apremilast i linezolid). Prowadzone przez nas badania będą miały na celu uproszczenie procedur w przygotowaniu wspomnianych układów, które w klasycznym podejściu są czasochłonne oraz niejednokrotnie niskowydajne.

Oba typy procesów zaplanowane w niniejszym projekcie (synteza układów peptydowych i otrzymywanie kokryształów farmaceutycznych) będą przez nas badane z wykorzystaniem zaawansowanych technik instrumentalnych i obliczeniowych. Celem naszego projektu jest poznanie na poziomie molekularnym mechanizmów decydujących o charakterze procesów chemicznych w ciele stałym oraz czynników wpływających na przebieg reakcji i końcową postać produktu. Zrozumienie istoty procesów będzie podstawą do opracowania nowych rozwiązań metodologicznych poszerzających zakres stosowalności mechanochemii w fazie skondensowanej. Podstawową techniką będzie spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego w ciele stałym (SSNMR) wspomagana takimi technikami jak rentgenografia monokryształów, substancji sproszkowanych, analizy termiczne oraz modelowanie komputerowe. Obok opracowania nowych metod syntezy w ciele stałym owocem naszych badań będzie uzyskanie nowych form krystalicznych wspomnianych wyżej leków, o lepszych parametrach fizykochemicznych niż te znane dotychczasowo. Dodatkowo nasz projekt ma wymiar edukacyjny. W trakcie jego realizacji stworzona zostanie grupa badawcza, która korzystając z naszego „know-how” w dziedzinie spektroskopii NMR w ciele stałym będzie poznawała tajniki spektroskopii SSNMR, a po jego zakończeniu będzie w stanie rozwijać i propagować tę metodologię w innych laboratoriach w Polsce i na świecie.