

Substancje chemiczne mają niejednokrotnie zdolność do tworzenia różnych form krystalicznych, to znaczy takich, które różnią się sposobem ułożenia cząsteczek względem siebie. Zjawisko to nazywa się polimorfizmem i ma ogromny wpływ na właściwości fizykochemiczne substancji. Jedna forma polimorficzna może bowiem w zdecydowany sposób różnić się od drugiej pod względem twardości kryształu, jego trwałości, czy rozpuszczalności w wodzie. Jest to szczególnie istotne dla substancji stosowanych w leczeniu, gdyż może mieć realny wpływ na wynik terapii farmakologicznej. Obecnie metody chemii komputerowej coraz częściej pozwalają na przewidzenie tendencji do tworzenia form polimorficznych substancji chemicznych oraz tego jak będą takie formy wyglądać. Niestety w przypadku związków istotnych dla nauk farmaceutycznych, wiele z nich ma na tyle skomplikowaną budowę, że mocno ogranicza to wspomniane możliwości. Ten projekt badawczy ma na celu rozwój metodologii opartej o przewidywanie struktur krystalicznych (CSP, z ang. *Crystal Structure Prediction*) i jądrowy rezonans magnetyczny (NMR) w ciele stałym, która pozwoli na określenie struktury nieopisanych dotąd form polimorficznych substancji chemicznych. Jej rozwój oraz obliczenia i eksperymenty planowane w projekcie przyczynią się dodatkowo do zrozumienia preferencji pewnych cząsteczek chemicznych do tworzenia określonych form polimorficznych. Zdarza się bowiem, że cząsteczki o bardzo podobnej budowie w odmienny sposób układają się w sieciach krystalicznych i wykazują odmienne tendencje do tworzenia form polimorficznych. Przykładowo spośród dwóch związków chemicznych różniących się jedynie połączeniem pewnych atomów w cząsteczce, jeden będzie tworzył wiele form polimorficznych, a drugi będzie występował tylko w jednej jedynej formie (będzie monomorficzny). Jednym z celów tego projektu jest przybliżenie odpowiedzi na pytanie dlaczego tak się dzieje. Takie zrozumienie zaowocuje w przyszłości rozwojem dziedziny zwanej inżynierią kryształów, zajmującą się projektowaniem form krystalicznych o pożądanym właściwościach fizykochemicznych. Ponadto w wyniku realizacji projektu opisana zostanie struktura nieznanymi dotąd form polimorficznych wybranych leków, takich jak meloksykam, apremilast czy roflumilast, które są stosowane w leczeniu stanów zapalnych.