

Niesamowicie szybki rozwój nauk chemicznych i biologicznych w XXw nastąpił między innymi dlatego, że naukowcom udało się poznać struktury kryształów, a co za tym idzie budowę cząsteczek chemicznych istotnych związków (soli nieorganicznych, prostych związków organicznych, farmaceutyków, białek, DNA, dodatków do żywności, nawozów itd...). Nie byłoby to możliwe bez metod rentgenowskiej analizy strukturalnej, teorii dyfrakcji i wszystkich pojęć skrywających się pod terminami „pomiar rentgenowski i udokładnienie struktury”. Oznacza to, że jakość danych dyfrakcyjnych a także jakość modeli struktur, czy też raczej modeli gęstości elektronowej, których używamy podczas udokładnienia jest bardzo istotna, gdyż przekłada się na jakość struktur. Pojawia się zatem pytanie – czy dane rentgenowskie/modele stosowane podczas udokładniania struktury mogą być źródłem nie tylko geometrii związków, ale również źródłem informacji o dokładnych własnościach termodynamicznych kryształu? Czy taka informacja może być uzyskana z danych rentgenowskich i może być przydatna w innych zastosowaniach naukowych i komercyjnych? Chcielibyśmy odpowiedzieć na te pytanie poprzez skupienie się na układach polimorficznych.

Polimorfizm jest to występowanie danego związku chemicznego w kilku różnych odmianach krystalicznych. Polimorfizm jest bardzo ważnym zjawiskiem, ponieważ różne odmiany polimorficzne tej samej substancji wykazują różne właściwości fizykochemiczne (temperaturę topnienia, rozpuszczalność, itp.). Odmiany polimorficzne tej samej substancji mogą także wykazywać różną aktywność biologiczną, co jest kluczowe dla przemysłu farmaceutycznego. Niestety, bardzo trudno jest przewidzieć, która odmiana polimorficzna jest bardziej stabilna w danej temperaturze, ponieważ różnice w energii swobodnej między odmianami polimorficznymi są bardzo małe. Ponadto często zdarza się, że postać, która jest bardziej stabilna w niskiej temperaturze, staje się mniej stabilna w temperaturze pokojowej. Może to prowadzić do nieoczekiwanych i niepożądanych przejść fazowych między odmianami polimorficznymi. Dlatego też nowe związki chemiczne, będące kandydatami na leki, są dokładnie testowane pod kątem polimorfizmu. Świętym Graalem pozostaje jednak nadal metoda teoretyczna, która pozwalałaby szybko przewidywać stabilność odmian polimorficznych - oszacowanie temperatury przejścia fazowego dla danego układu polimorficznego wymaga długich obliczeń energii swobodnej, zwłaszcza wkład entropowy jest bardzo trudny do uzyskania na drodze obliczeń teoretycznych.

Głównym celem tego projektu jest rozwiązanie tego problemu: zaproponowanie nowych modeli teoretycznych, które w oparciu o dane z rentgenowskich pomiarów monokrystalicznych pozwolą uzyskiwać własności termodynamiczne dla struktur krystalicznych, a co za tym idzie pozwolą szybko wyznaczać wzajemną stabilność odmian polimorficznych.

W przyszłości zaproponowane przez nas metody będą rutynowo używane do wyznaczania własności termodynamicznych. Ponadto nasze nowe modele będą mogły być stosowane rutynowo w celu uzyskania dokładniejszych parametrów strukturalnych dla kryształów związków organicznych, nieorganicznych i makrocząsteczkowych.