

Cel projektu. Diament i grafit to struktury krystaliczne tego samego pierwiastka (węgla), ale mające inaczej ułożone jego atomy w sieci krystalicznej. Już samo takie ułożenie atomów może znacząco wpłynąć na właściwości kryształów, powodując, że pierwszy z nich jest jednym z najtwardszych materiałów jakie znamy, zaś drugi jest miękki i łamliwy. To samo jest prawdą dla cząsteczek organicznych, które również mogą w różny sposób układać się w sieci krystalicznej, tworząc różne formy krystaliczne zwane polimorfami. Jest to szczególnie istotne, jeśli zjawisko polimorfizmu dotyczy leków, gdyż wówczas forma krystaliczna może mieć decydujący wpływ na stosowalność takiego leku, wpływając na jego rozpuszczalność w wodzie, stabilność, twardość, łatwość w obróbce itp. Proces eksperymentalnego poszukiwania form polimorficznych jest długi i drogi, a ponadto nigdy nie można być pewnym, że wszystkie możliwe warunki krystalizacji zostały przetestowane. Obecnie dostępne metody obliczeniowe oferują możliwość teoretycznego przewidzenia form polimorficznych, ale nie mówią nic o tym jak takie formy otrzymać w laboratorium. Nasze badania mają na celu znaleźć zależność między przewidywanymi strukturami krystalicznymi a najlepszą metodą ich krystalizacji.

Opis badań. W ramach badań planujemy szukać cząsteczek potencjalnie monomorficznych, czyli takich które krystalizują tylko w jednej postaci krystalicznej. Stosując komputerowe przewidywanie struktur krystalicznych będziemy szukać takich cząsteczek dla których tylko jedna stabilna struktura krystaliczna jest oczekiwana. Planujemy także poszukiwać cząsteczek, które w eksperymentach tworzą tylko jedną strukturę krystaliczną, ale przewidywania teoretyczne wskazują możliwość tworzenia innych form polimorficznych. Dla obu zestawów cząsteczek przeprowadzimy eksperymenty krystalizacyjne w różnych warunkach aby znaleźć potencjalne formy polimorficzne lub udowodnić, że badane cząsteczki są w istocie monomorficzne. Chcemy także sprawdzić nowe metody otrzymywania polimorfów trudnych do krystalizacji. W rezultacie zamierzamy utworzyć bazę danych łączących strukturę krystaliczną różnych polimorfów z warunkami krystalizacji.

Powody, dla których jesteśmy zainteresowani tą tematyką badawczą. Krystalizacja to niezwykle złożony proces, z wieloma czynnikami wpływającymi na uzyskane wyniki. Aby móc ten proces zrozumieć, a co za tym idzie przewidzieć jego wynik i móc na ten wynik wpływać zgodnie z naszymi potrzebami, musimy najpierw uzyskać wgląd w czynniki decydujące o jego przebiegu. Nasze badania są drogą do zrozumienia procesu krystalizacji i jego związku ze strukturami krystalicznymi, które w jego wyniku powstają.

Najważniejsze spodziewane efekty. W wyniku przeprowadzonych badań spodziewamy się znaleźć odpowiedź na pytanie czy cząsteczki monomorficzne w ogóle istnieją i jeśli tak to co jest w nich specjalnego. Mamy również nadzieję na zrozumienie dlaczego niektóre formy polimorficzne są tak trudne do otrzymania w laboratorium i jak możemy zastosować przewidywania komputerowe do sterowania krystalizacją. Planowana baza danych zawierająca szczegółowe warunki krystalizacji może w przyszłości pomóc w racjonalnym planowaniu eksperymentów krystalizacyjnych i w głębszym zrozumieniu procesów krystalizacji.