

JAK PRZEWIDZIEĆ ZACHOWANIA KRYSZTAŁÓW

Materiały krystaliczne są powszechnie wykorzystywane m.in. w przemyśle farmaceutycznym. Wiele z tych związków występuje w kilku polimorficznych odmianach, co jest o tyle istotne, że każda z tych odmian może mieć inną aktywność biologiczną i zachowywać się inaczej w różnych temperaturach. Niestety tych właściwości nie można przewidzieć na podstawie wyłącznie znajomości wzoru strukturalnego substancji. Potrzebne są skomplikowane obliczenia periodyczne, które też nie zawsze są w pełni wiarygodne. Dr Anna Hoser z Pracowni Krystalochemii Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego we współpracy z prof. Andersem Ø. Madsenem z Wydziału Farmaceutycznego Uniwersytetu Kopenhaskiego opracowała nową metodę przewidywania zachowań struktur polimorficznych, łączącą obliczenia periodyczne z pomiarami rentgenowskimi kryształów.

„Na podstawie znajomości wzoru strukturalnego nie jesteśmy w stanie przewidzieć struktury sieci, która będzie tworzona w procesie krystalizacji, a często nawet w momencie, gdy znamy już tę strukturę, nie jesteśmy w stanie stwierdzić, jak dany materiał będzie zachowywał się w innych warunkach, np. w innej temperaturze czy ciśnieniu. Określenie tych parametrów dla kryształów molekularnych wymaga zastosowania zaawansowanych obliczeń periodycznych, w których najpierw trzeba wymodelować drgania poszczególnych atomów w kryształach, a następnie, wykorzystując częstości dla poszczególnych drgań, obliczyć interesujące nas właściwości termodynamiczne. Obliczenia takie dla kryształów molekularnych, w których istotne są również słabe oddziaływania międzycząsteczkowe, są bardzo czasochłonne i nie zawsze możliwe do przeprowadzenia. Ponadto, wyniki obliczeń uzyskiwane dla kryształów molekularnych często obarczone są dużymi błędami” – mówi dr Anna Hoser i dodaje: „W 2016 roku zaproponowaliśmy innowacyjną metodę *Normal Mode Refinement*. W metodzie tej model drgań atomów sieci krystalicznej, uzyskany na drodze obliczeń periodycznych, udoskonalamy poprzez wykorzystanie informacji z rutynowych obecnie pomiarów strukturalnych, tj. monokrystalicznych pomiarów rentgenowskich”.

Optymalizacja i zbadanie granic stosowalności metody *Normal Mode Refinement* jest celem grantu, który dr Anna Hoser uzyskała w programie HOMING 1/2016 realizowanym przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej ze środków Programu Operacyjnego Inteligentny Rozwój. Badaczka chce sprawdzić, czy wykorzystując zaproponowaną metodę jest w stanie przewidzieć zachowanie struktur polimorficznych w szerokim zakresie temperatury i ciśnienia. „Z uwagi na niewielkie różnice w entalpii swobodnej pomiędzy odmianami polimorficznymi tej samej substancji, często zdarza się, że odmiana, która jest bardziej stabilna w niskiej temperaturze, staje się odmianą mniej stabilną w temperaturze pokojowej. Dlatego też, struktury polimorficzne stanowią doskonałe układy modelowe do zbadania przydatności metody *Normal Mode Refinement*. Jeśli okaże się, że dzięki niej możemy przewidzieć dla kilku odmian polimorficznych, która z nich jest bardziej stabilna w danej temperaturze i przy danym ciśnieniu, będzie to oznaczało, że opracowana przez nas metoda może być z powodzeniem stosowana dla wszelkiego rodzaju substancji krystalicznych” – wyjaśnia laureatka.

Dr Anna Hoser ukończyła Międzywydziałowe Indywidualne Studia Matematyczno-Przyrodnicze na Uniwersytecie Warszawskim (w specjalnościach fizyka i chemia), doktorat obroniła na Wydziale Chemii UW, a następnie odbyła staż podoktorski na Uniwersytecie Kopenhaskim w Danii.

