

Nr rejestracyjny: 2015/18/E/ST4/00449; Kierownik projektu: dr hab. Paweł Wiczling

Wysokosprawna chromatografia cieczowa w odwróconym układzie faz (RP HPLC) jest jedną z najczęściej używanych technik chromatograficznych. Współcześnie około 60-80% wszystkich rozdziel chromatograficznych jest przeprowadzanych właśnie w układzie RP HPLC. Wynika to z jej uniwersalności, relatywnie niskich kosztów analiz i stosunkowo małego stopnia skomplikowania procedury analitycznej.

Optymalizacja warunków rozdzielania jest ważnym etapem w opracowywaniu każdej metody separacji analitów w RP HPLC. Wciąż stosowana metoda „prób i błędów” ma liczne niedoskonałości, takie jak duża liczba eksperymentów, czasochłonność, trudność w dobraniu warunków do przeprowadzenia wstępnych eksperymentów, oraz często brak faktycznie optymalnej separacji. W praktyce używa się różnych rodzajów oprogramowania do optymalizacji warunków rozdzielania. Dzięki komputerowemu wsparciu można uzyskać teoretyczny chromatogram na podstawie serii eksperymentów wstępnych, wykazujący separacje, które nieosiągalne byłyby przy użyciu metody „prób i błędów”. Jednak te programy optymalizacyjne wymagają stosunkowo dużej liczby wstępnych eksperymentów. Twierdzimy, że liczba ta może być ograniczona poprzez odpowiednie wykorzystanie wnioskowania bayesowskiego.

W ramach projektu zaproponowany zostanie jeden ogólny statystyczny model opisujący kompleksowo zachowanie się dużej grupy zróżnicowanych strukturalnie analitów w kolumnie chromatograficznej w funkcji szeregu parametrów kontrolujących retencję: jak temperatura, rodzaj i zawartość modyfikatora organicznego, wartość pH, typ kolumny, itp. Taki (nieliniowy) model efektów mieszanych pozwala przede wszystkim zrozumieć wpływ podstawowych parametrów fizykochemicznych układu separacyjnego na retencję, ale także wpływ struktury analitu, wraz ze zmiennymi poszczególnymi parametrami determinującymi przebieg procesu rozdzielania. Według naszej koncepcji badawczej ten model może być następnie wykorzystywany do przewidywania retencji w oparciu o techniki bayesowskie, które polegają na połączeniu informacji z ilościowymi zależnościami struktura-retencja (QSRR), wyprowadzonych dla wcześniej analizowanych związków, czyli w oparciu o tzw. rozkład a priori oraz o wyniki dowolnej (możliwie małej) liczby eksperymentów wstępnych.

Zaproponowana w granicy tematyki optymalizacji rozdzielania dla dowolnych zmian pH, rodzaju i zawartości modyfikatora organicznego oraz temperatury, jest badaniem nowatorskim w chromatografii w skali wiatowej. Badania te miałyby duże znaczenie poznawcze dla chemii fizycznej i analitycznej, gdy mają na celu głębsze zrozumienie istoty oddziaływania analit-faza stacjonarna-faza ruchoma w dla różnych składów fazy ruchomej. Szczególnym aspektem nowości naukowej projektu jest bayesowska strategia optymalizacyjna, która pozwoli uzyskać rozdzielanie o wymaganej jakości przy wykorzystaniu minimalnej liczby eksperymentów wstępnych.