

Cząsteczki chiralne, posiadając taki sam skład chemiczny oraz identyczne odległości między atomami, różnią się na poziomie molekularnym rozmieszczeniem grup funkcyjnych, tak że niemożliwe jest nałożenie na siebie ich lustrzanych odbić. Cząsteczki te występują powszechnie w otoczeniu człowieka. Chiralne są podstawowe budulce organizmów żywych – białka i cukry, a także wiele substancji egzogennych, takich jak leki czy dodatki do żywności. Znanych jest wiele przykładów związków chiralnych, które w zależności od swojej formy mają odmienny smak czy zapach i mogą różnie oddziaływać z organizmami żywymi, co może mieć szczególne znaczenie w przypadku cząsteczek leków. Zdarza się, że jeden enancjomer wykazuje pożądaną aktywność terapeutyczną, drugi zaś jest w najlepszym przypadku nieaktywny, lub – co gorsza – wykazuje toksyczność albo niepożądane efekty uboczne.

Ze względu na tę samą budowę dwie formy chiralne danej cząsteczki, zwane enancjomerami, mają takie same właściwości fizyczne i chemiczne, a różnicuje je jedynie aktywność optyczna – skręcają one płaszczyznę światła spolaryzowanego w przeciwne strony. Rozróżnienie chemiczne enancjomerów jest możliwe tylko wtedy, gdy oddziałują one z innymi cząsteczkami chiralnymi. Powstający wówczas kompleks diastereoizomerowy wykazuje odmienną trwałość w zależności od łączących się form, co znajduje zastosowanie m.in. w metodach analitycznych i preparatywnych, umożliwiających rozdzielenie mieszanin dwóch enancjomerów, takich jak chromatografia chiralna lub rozdział chromatograficzny z dodatkiem selektora chiralnego.

Konieczność występowania wystarczająco dużych różnic w specyficzności i sile oddziaływań międzycząsteczkowych w kompleksach diastereoizomerowych jest faktem powszechnie znanym w chromatografii chiralnej. Brak jest jednak badań teoretycznych, które by systematyzowały tę praktyczną wiedzę i umożliwiały ulepszoną jakościową analizę stosowalności chromatografii chiralnej i technik pokrewnych. Tymczasem wśród stosowanych obecnie metod chemii teoretycznej istnieje co najmniej kilka takich, które umożliwiają usystematyzowane zbadanie energii stabilizacji i energii potencjalnej oddziaływania pod kątem różnic występujących w kompleksach diastereoizomerowych. Nowa metoda analizy składowych energii oddziaływania, występującego między jednym bądź drugim enancjomerem a chiralnym partnerem ma w założeniu wypełnić tę lukę w zastosowaniach teorii oddziaływań międzycząsteczkowych. Pomyślna realizacja zaplanowanych badań pozwoli na zaproponowanie dla kompleksów diastereoizomerowych nowych reguł, mających głębsze oparcie w teorii niż dotychczas stosowane reguły empiryczne. Model ten będzie mógł potem zostać wykorzystany do dokładniejszego przewidywania *in silico* selektywności rozdziału enancjomerów oraz do zaproponowania ulepszonych selektorów chiralnych. Ponieważ większość złożonych cząsteczek w układach ożywionych jest chiralna, uzyskanie dokładnego wglądu w naturę oddziaływań między chiralnymi partnerami ma nieocenione znaczenie i może stanowić podstawę do bardziej praktycznych zastosowań w przyszłości. Model ten przetestujemy dla wybranych kompleksów diastereoizomerycznych, które występują w chromatografii chiralnej.