

Intensywny rozwój cywilizacji i nauki ze szczególnym uwzględnieniem badań farmaceutycznych, medycznych oraz żywności narzuca konieczność opracowywania nowych materiałów analitycznych. Peptydowe fazy stacjonarne stanowią grupę adsorbentów o wysokim potencjale aplikacyjnym w technikach separacyjnych. Różnorodność i mnogość struktur chemicznie związanych ligandów peptydowych pozwala syntetyzować tzw. dedykowane fazy stacjonarne. Publikowane zastosowania peptydowych materiałów obejmują układ wysokosprawnej chromatografii cieczowej (RP LC, HILIC), dwuwymiarową chromatografię cieczową (2D-LC) oraz chromatografię jonową (IC). Jednakże, obecne podejście preparatywne i aplikacyjne oparte jest na przewidywaniu, a nie konkretnych informacjach stanowiących podstawę do projektowania odpowiednich struktur chemicznie związanych ligandów.

W związku z powyższym, celem naszych badań jest stworzenie swoistej „biblioteki” danych, w której będą zawierały się informacje niezbędne do przygotowania nowych metod analitycznych określonych grup analitów z wykorzystaniem peptydowych faz stacjonarnych. Cel ten będzie realizowany poprzez przeprowadzenie systematycznej charakterystyki peptydowych wypełnień, uwzględniającej podejście preparatywne, analityczne i aplikacyjne. Etap charakterystyki preparowanych wypełnień będzie obejmował zastosowanie technik chromatograficznych i innych metod fizykochemicznych poszerzających naszą wiedzę o naturze i chemii powierzchni.

Prowadzenie badań w warunkach odwzorowujących analizę chromatograficzną pozwoli również opisać rzeczywisty rozkład ładunków na powierzchni fazy stacjonarnej, a także zachodzące procesy solwatacyjne. Istotnym uzupełnieniem badań będzie opis mechanizmu retencji biologicznie ważnych analitów o zróżnicowanej budowie i właściwościach z zastosowaniem relacji retencja – struktura (QSRR) oraz wykorzystanie automatycznych systemów wspomagających programowanie metod HPLC – ChromSword i DryLab. Przedstawione podejście będzie obejmowało również syntetyzowanie faz stacjonarnych zawierających w swej strukturze specyficzne grupy funkcyjne swoiste dla błony komórkowej (łańcuchy peptydowe). Charakterystyka takich materiałów z kolei pozwoli modelować proces transportu leków, a w konsekwencji ich metabolitów. W efekcie, preparowane wypełnienia, jak również uzyskane wyniki będą mogły znaleźć szerokie zastosowanie w analizie „omicznej”.

Kompleksowe podejście analityczne w obszarze będącym tematem badań przyczyni się do pogłębienia wiedzy na temat właściwości fizykochemicznych i chromatograficznych peptydowych faz stacjonarnych. W efekcie przeprowadzonych badań możliwe będzie opisywanie mechanizmów retencji biologicznie ważnych związków. Dzięki temu, wyeliminowany zostanie etap przewidywania procesów zachodzących w układzie chromatograficznym. Wiedza ta może zostać wykorzystana np. w laboratoriach farmaceutycznych, medycznych oraz innych jednostkach analitycznych do opracowywania metod identyfikacji i oznaczania pożądanych grup analitów z wykorzystaniem peptydowych faz stacjonarnych, jak również badania metabolizmu oraz jakości i czystości leków. Dodatkowo podejście realizowane w projekcie uwzględnia zasady „Quality by Design” (QbD), które stanowi trend w metodach analitycznych.