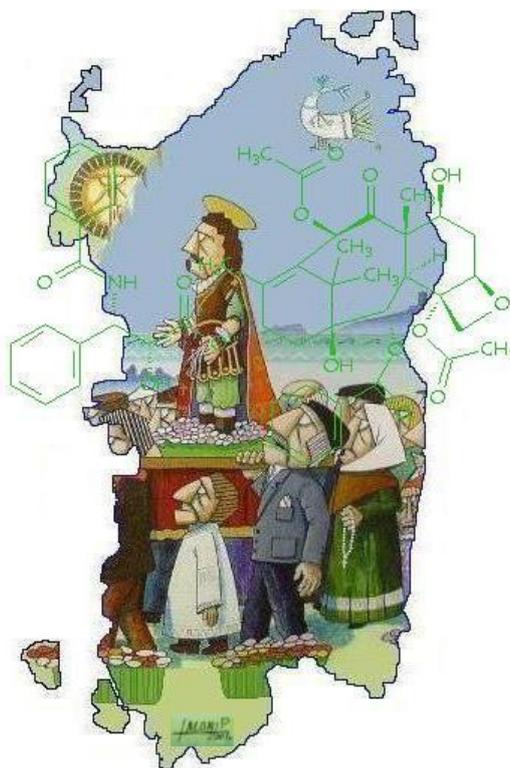




SardiniaChem 2010

GIORNATA DI STUDIO DEDICATA ALLA CHIMICA ORGANICA DELLE MOLECOLE BIOLOGICAMENTE ATTIVE

31 Maggio 2010 – Aula Magna del Complesso Universitario di Monserrato, Cagliari



COMITATO SCIENTIFICO

Salvatore Cabiddu – Università di Cagliari, Angela Bernard – Università di Cagliari
Giampaolo Giacomelli – Università di Sassari, Giovanna Delogu – CNR Sassari

COMITATO ORGANIZZATORE

Stefania De Montis – Università di Cagliari, Andrea Porcheddu – Università di Sassari
Roberto Dallochio – CNR Sassari

HANNO CONTRIBUITO ALLA REALIZZAZIONE DEL CONVEGNO:

Università di Cagliari; Dipartimento di Scienze Chimiche – Università di Cagliari; Dipartimento di Chimica - Università di Sassari; CNR – Istituto di Chimica Biomolecolare, Sezione di Sassari; Facoltà di Farmacia – Università di Cagliari; Facoltà di MM. FF. NN. – Università di Cagliari; Gruppo Sapio; Medinlab srl; Nova Chimica srl; Sigma – Aldrich; VWR – International srl

<http://people.unica.it/sardiniachem2010>
sardiniachem2010@unica.it

**CARATTERIZZAZIONE CROMATOGRAFICA DI BIFENILI ATROPISOMERICI
MEDIANTE HPLC CHIRALE: PREVISIONI COMPUTAZIONALI SULLA
ENANTIOSEPARABILITA' DEGLI ANALITI**

Paola Peluso,* Davide Fabbri,* Maria Antonietta Dettori,* Giovanna Delogu,* Sergio Cossu[§]

* Istituto di Chimica Biomolecolare *ICB* CNR - UOS di Sassari -
Traversa La Crucca, 3 - 07100 Li Punti - Sassari

[§] Dipartimento di Chimica, Università Ca' Foscari di Venezia, Dorsoduro, 2137 - 30123 Venezia
e-mail: *p.peluso@icb.cnr.it*

Lo sviluppo di un metodo chirale per l'enantioseparazione di un racemato, mediante cromatografia liquida ad alte prestazioni (HPLC), può essere un percorso non semplice, poiché informazioni *a priori* sull'enantioselettività di una data fase stazionaria chirale (CSP) per un dato analita non sono sempre disponibili. Una serie di strategie sono state proposte per aiutare gli analisti nella scelta delle migliori condizioni di analisi (strategie di *screening* automatizzate, metodi a base chemoinformatica o statistica)⁶ e, inoltre, diverse sono le tecniche per la definizione dei meccanismi alla base del riconoscimento chirale (metodologie QSER/QSRR, NMR, indagini diffrattometriche, analisi computazionale).⁷ Molte di queste metodologie, tuttavia, non hanno valore predittivo, in quanto non permettono di stabilire preventivamente quale selettore può risolvere gli enantiomeri di un composto chirale e, spesso, non parametrizzano l'effetto solvente. Alternativamente, i metodi cromatografici risultano idonei ed utili per testare l'enantioseparabilità di composti strutturalmente simili. Un approccio empirico di questo tipo permette di valutare completamente il sistema di separazione nelle sue tre componenti essenziali: fase mobile, fase stazionaria e struttura dell'analita. Inoltre, informazioni sulla natura delle interazioni tra selettore chirale ed analita possono essere ottenute attraverso modificazioni strategiche dei parametri cromatografici.

Precedentemente, questa strategia cromatografica era stata applicata con successo per studiare la risolvibilità di 29 substrati policiclici chirali sulla Chiralcel OD-H e la Chiralpak OT(+).⁸ In questo caso, operando su una classe di composti strutturalmente ben definita, era stato possibile, sulla base delle variazioni dei parametri cromatografici in funzione delle variazioni strutturali del selettando, avanzare delle ipotesi sulla natura del *contatto diastereoselettivo* che avviene durante il fenomeno

⁶ a) Matthijs, N.; Maftouh, M.; Vander Heyden, Y. *J. Chromatogr. A*, **2006**, *1111*, 48-61; b) Piras, P.; Roussel, C. *J. Pharm. Biomed. Analysis*, **2008**, *46*, 839-847.

⁷ Okamoto, Y.; Yashima, E. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1998**, *37*, 1020-1043.

⁸ Peluso, P.; Cossu, S.; Moretto, F.; Marchetti, M. *Chirality*, **2009**, *21*, 507-518.