

## **Nouvelle méthodologie pour le développement automatisé de méthodes analytiques en chromatographie liquide pour l'analyse de mélanges de composés inconnus**

Benjamin Debrus<sup>1</sup>, Pierre Lebrun<sup>1</sup>, Eric Rozet<sup>1,#</sup>, Iolanda Nistor<sup>1,2</sup>, Attilio Ceccato<sup>3</sup>, Gabriel Caliaro<sup>4</sup>, Radu Oprean<sup>2</sup>, Bruno Boulanger<sup>5</sup>, Philippe Hubert<sup>1</sup>

1 : Laboratoire de Chimie Analytique, CIRM, Université de Liège, Avenue de l'Hôpital 1, B36, Tour4 +2, 4000 Liège, Belgique

2 : Université de Médecine et Pharmacie, "IULIU HATIEGANU" Cluj – Napoca, Rue Victor Babeş 8, 400012 Cluj-Napoca, Roumanie

3 : Mithra Pharmaceuticals, Rue Saint-Georges 5, B-4000 Liège, Belgique

4 : Orailac Quality Solutions, Belgique

5 : UCB Pharma SA, R&D Clinical Pharmacometrics, Allée de la Recherche 60, B-1070 Bruxelles, Belgique

# : Chargé de recherche F.R.S.-FNRS

### Résumé

De nos jours, de nombreuses stratégies d'optimisation de méthodes chromatographiques sont disponibles. Néanmoins, le développement de méthodes chromatographiques reste l'étape la plus limitante dans les processus de synthèse ou d'identification de nouvelles molécules pouvant conduire à des agents thérapeutiques ou à de nouveaux biomarqueurs et cela malgré la disponibilité de nouvelles technologies tant en chimie (chimie combinatoire, High throughput screening...) qu'en biochimie analytique (protéomique, métabolomique, herbal fingerprinting...). C'est pourquoi l'objectif de cette étude est d'éprouver une nouvelle méthodologie de développement automatisé de méthodes chromatographiques combinant la planification expérimentale, l'analyse en composantes indépendantes, l'analyse de la propagation de l'erreur prédictive et la modélisation par régression linéaire multiple. Finalement, cette méthodologie automatisée a permis de séparer avec succès les composés d'un mélange inconnu.