

Analytical Pharmaceutical Chemistry

Research information

Applied Pharmaceutical and Biomedical Analysis

Autumn 2022

Mikael Hedeland



Analytical Chemistry

Analytical chemistry is the science of obtaining, processing, and communicating information about the composition and structure of matter. In other words, it is the art and science of determining **what** matter is and **how much** of it exists.

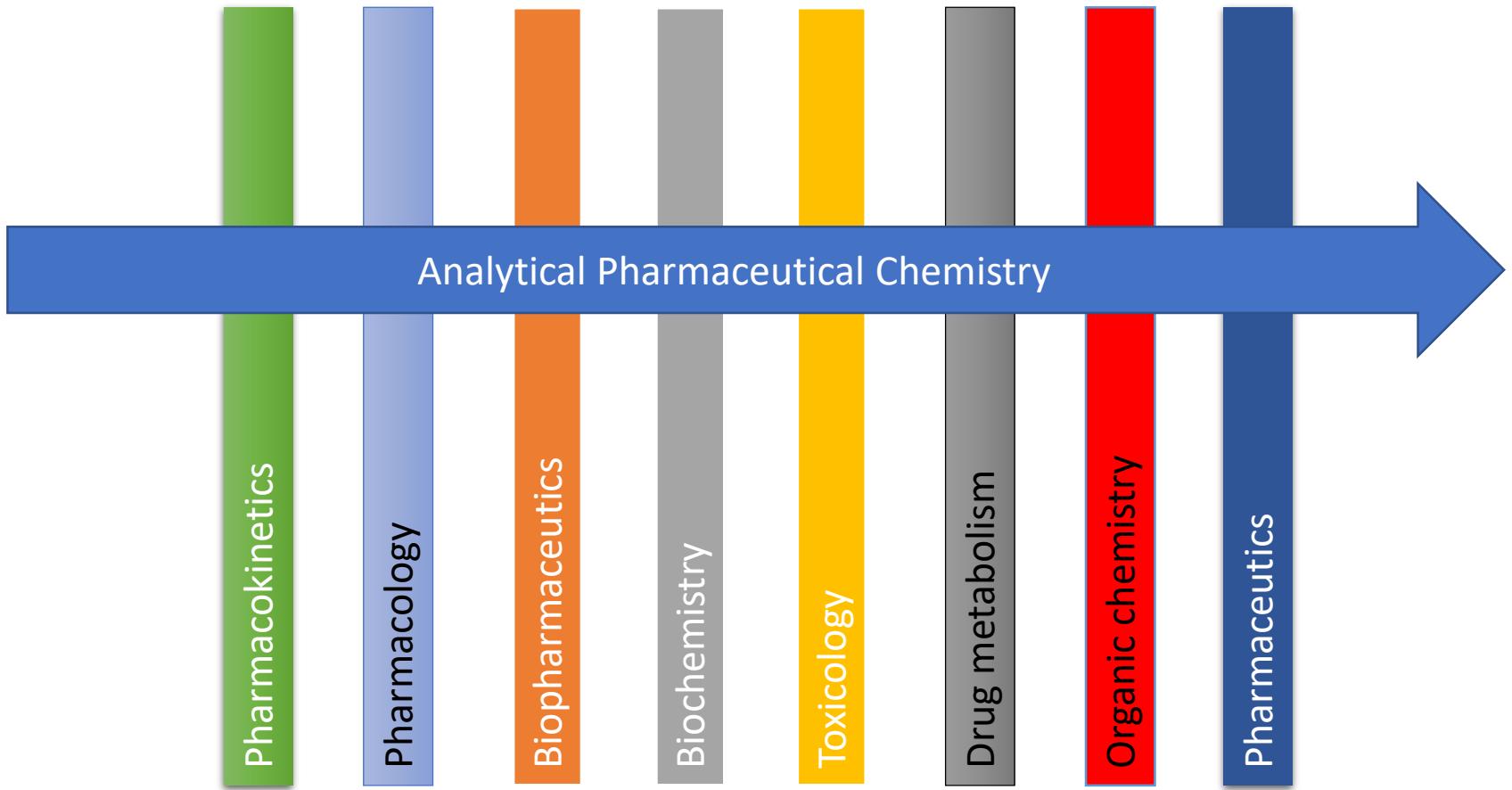
American Chemical Society

<https://www.acs.org/content/acs/en/careers/college-to-career/areas-of-chemistry/analytical-chemistry.html>

Analytical Pharmaceutical Chemistry

Analytical chemistry with pharmaceutical focus

Cross-disciplinary



Analytical Pharmaceutical Chemistry as an independent academic subject

Analytisk farmaceutisk kemi



The research group Analytical Pharmaceutical Chemistry



<https://www.ilk.uu.se/forskargrupper/afk/>



UPPSALA
UNIVERSITET

Research areas

Chromatography-Mass
Spectrometry

UHPLC-MS/(MS)



Postgenomic Era

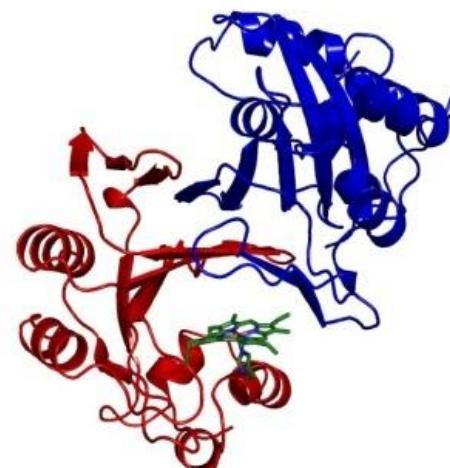
Genomic
DNA



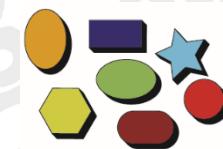
mRNA



Proteins



Metabolites



Genomics

Transcriptomics

Proteomics

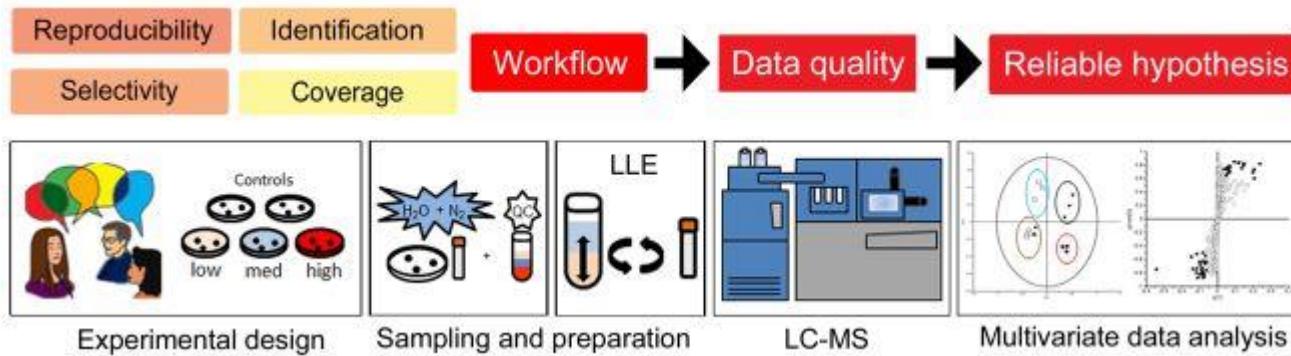
Metabolomics

Increasing chemical complexity



Metabolomics

- Simultaneous analysis of "all" small molecules in a biological sample.
- Comparison healthy/ill, treated/untreated
- Multivariate statistical methods for data analysis
- Generation of hypotheses



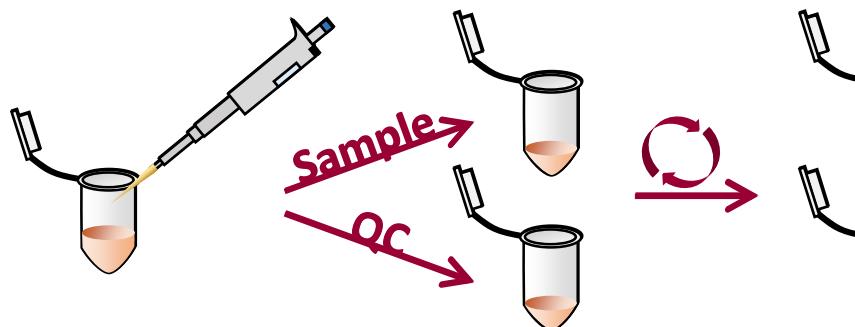
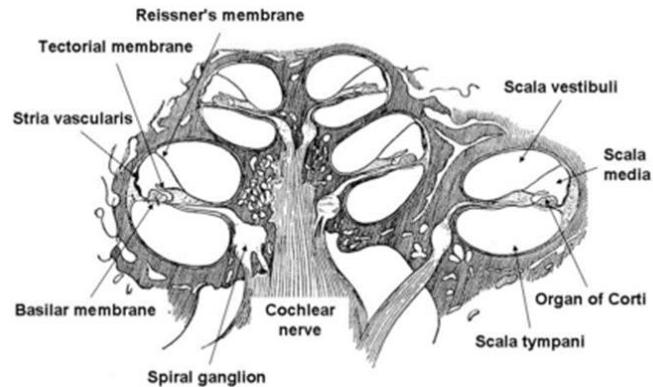
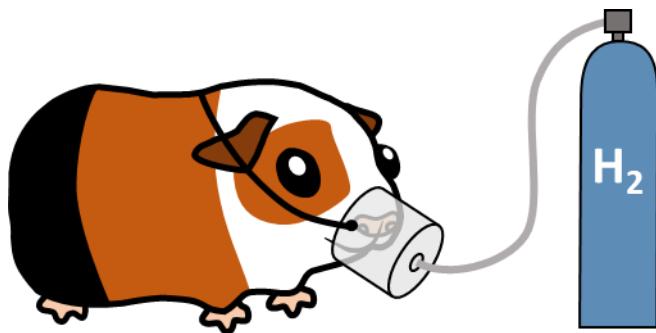
Effect of H₂ inhalation on noise-induced hearing loss

- Guinea pigs were exposed to impulse sound with and without inhalation of H₂
- Perilymph (inner ear liquid) was analyzed with HILIC-Q-TOF-MS (untargeted)
- Collaboration with Professor Göran Laurell



UPPSALA
UNIVERSITET

Metabolomics



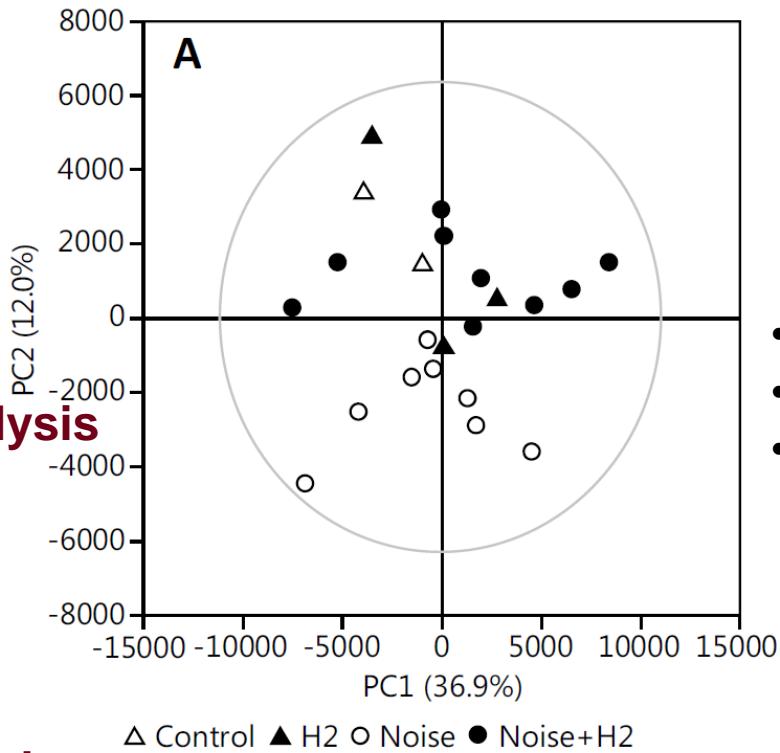
Sample preparation

Sample analysis



Metabolomics

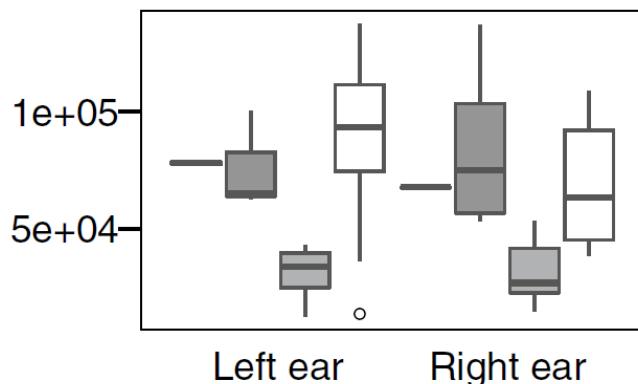
Multivariate analysis



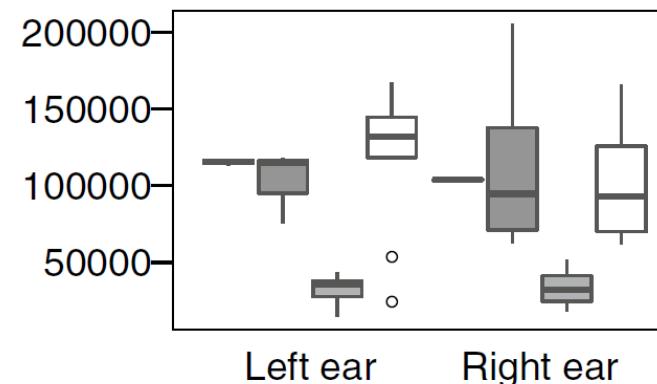
- Analysis of "all" small molecules
- Finds difference btw groups
- Biochemical explanation?

Univariate analysis

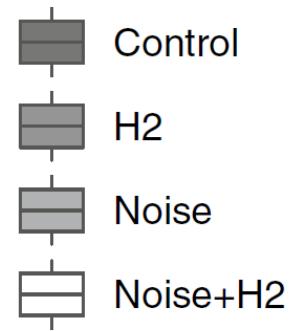
Homostachydine



Stachydine



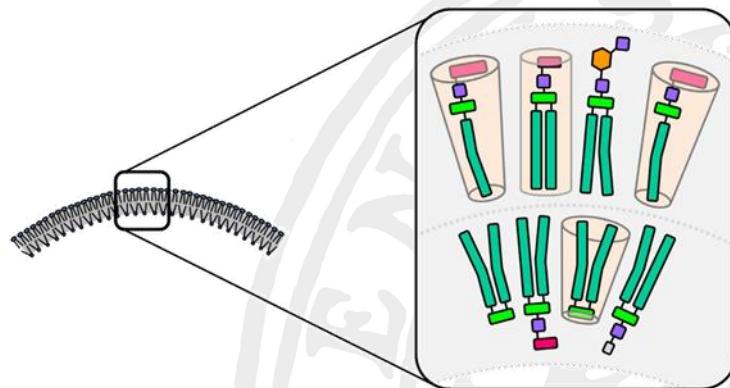
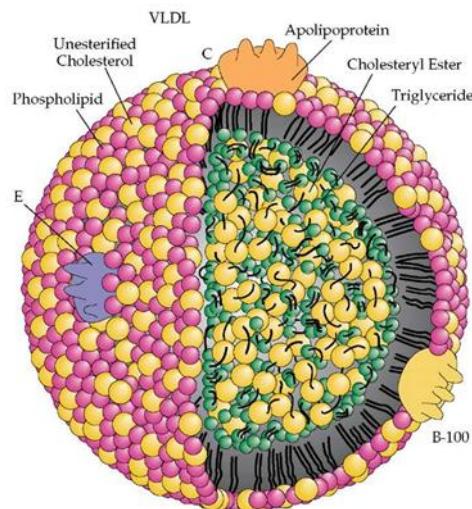
Study group





Lipidomics

- Analysis of “all” lipids in a sample.
- Regulation of lipids diseased/healthy; treated/untreated



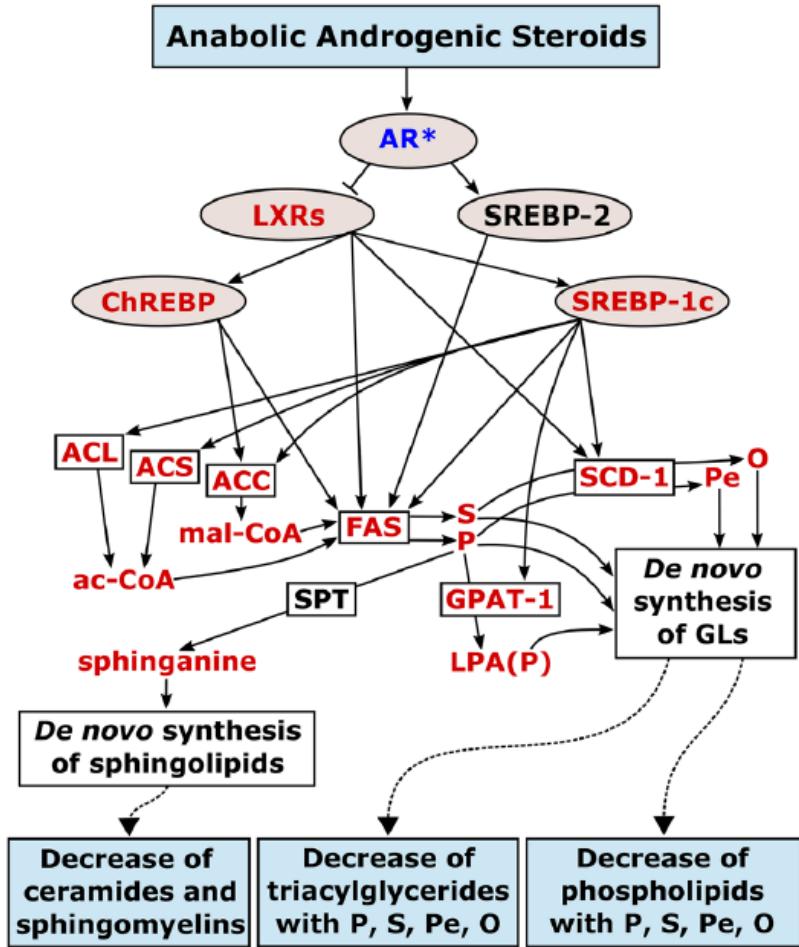
Lipidomics

Effect of anabolic androgenic steroids on the lipid profile of rats

- Nandrolone decanoate or testosterone undecanoate given to Wistar rats
- Blood plasma analyzed with RPLC-Q-TOF-MS
- Comparison of relative plasmaconcentrations of lipids
- Collaboration with Professor Mathias Hallberg



Lipidomics





Drugs in the environment

-Pharmaceuticals:

- Biological activity
- In many cases unknown effect on animals and ecosystem

-For a safety evaluation – necessary to know:

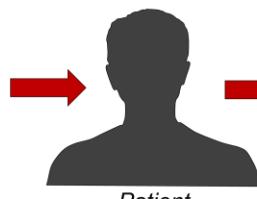
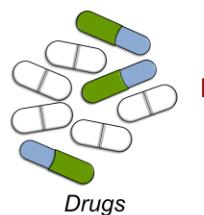
- Where are the substances?
- What concentration?
- Degradation?
- Toxic metabolites?





UPPSALA
UNIVERSITET

Drugs in the environment



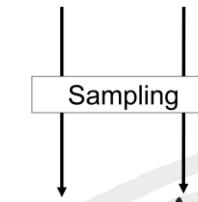
Drugs

Patient

Wastewater Treatment Plant



River



Freezing

Wash

Extraction

LC-MS analysis



UMEÅ
UNIVERSITET

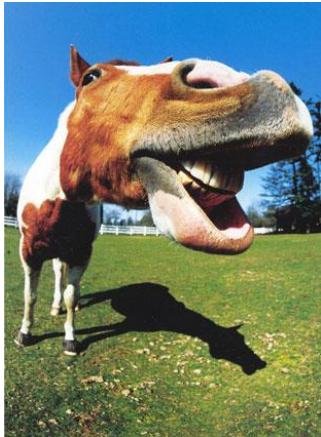
 cytiva

Drug metabolism – doping control

- Search for analytical targets
- Prolonged detection times

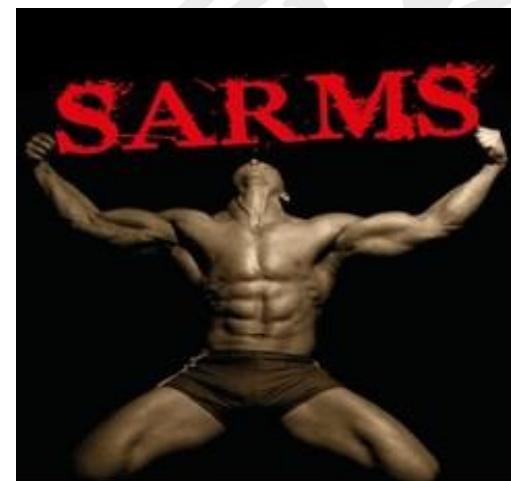


Drug metabolism – doping control



SARM

- Selective Androgen Receptor Modulators
- Anabolic effects, less side effects than anabolic steroids
- Prohibited by WADA since 2008
- Several positive cases in human athletes
- Positive cases in horses
 - Metabolized to a high extent
- No registered pharmaceuticals





Search

HOME

PSMF GUIDE

COMMUNITY

F.A.Q.

SUPPLEMENTS

PSMF CALCULATOR

PSMF RECIPES

You are here: [Home](#) / [Sarms](#) / SARMS – (Step-by-Step) Complete Beginner's Guide

SARMS – (Step-by-Step) Complete Beginner's Guide

NOVEMBER 17, 2017 BY PSMF DIET

[LEAVE A COMMENT](#)

Ads by Google

& Side Effects

A Company In

A Exercise Routine

A Marketing Business

Share

Tweet

Pin

Share





UPPSALA
UNIVERSITET



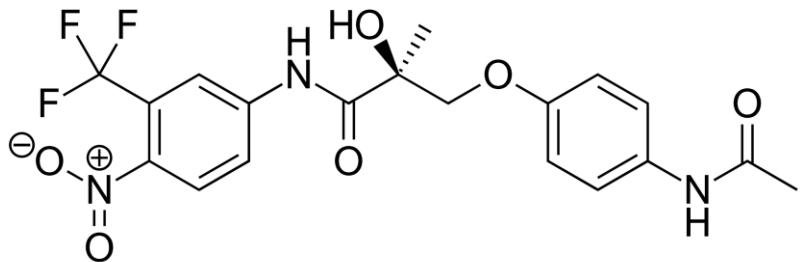
BEFORE

AFTER

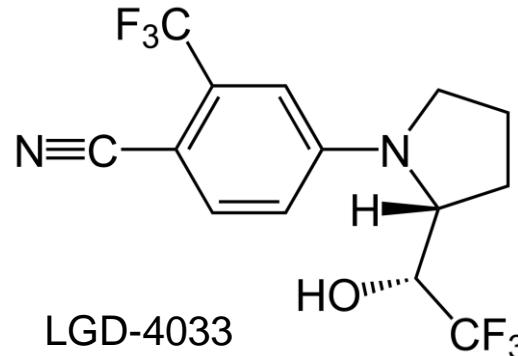


UPPSALA
UNIVERSITET

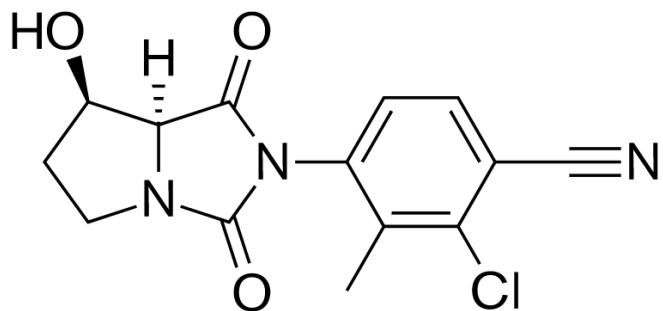
Structural classes of SARMs



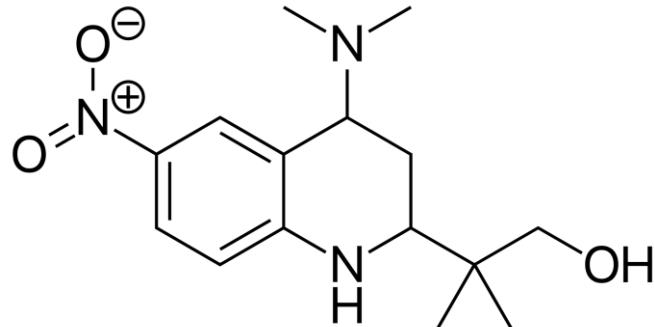
Andarine (SARM S-4)



LGD-4033



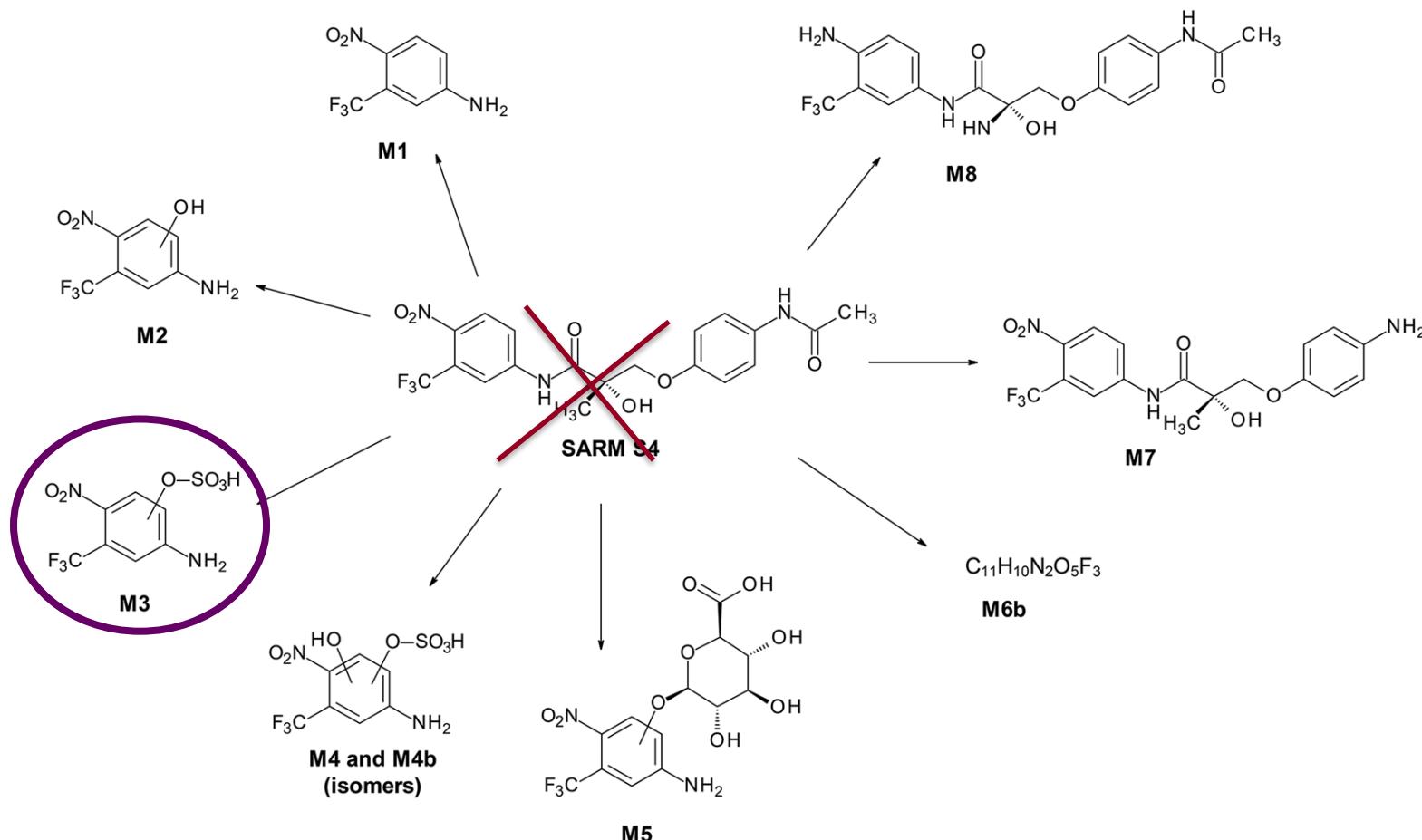
BMS-564,929



S-40503



Metabolites of SARM S4 in horse urine

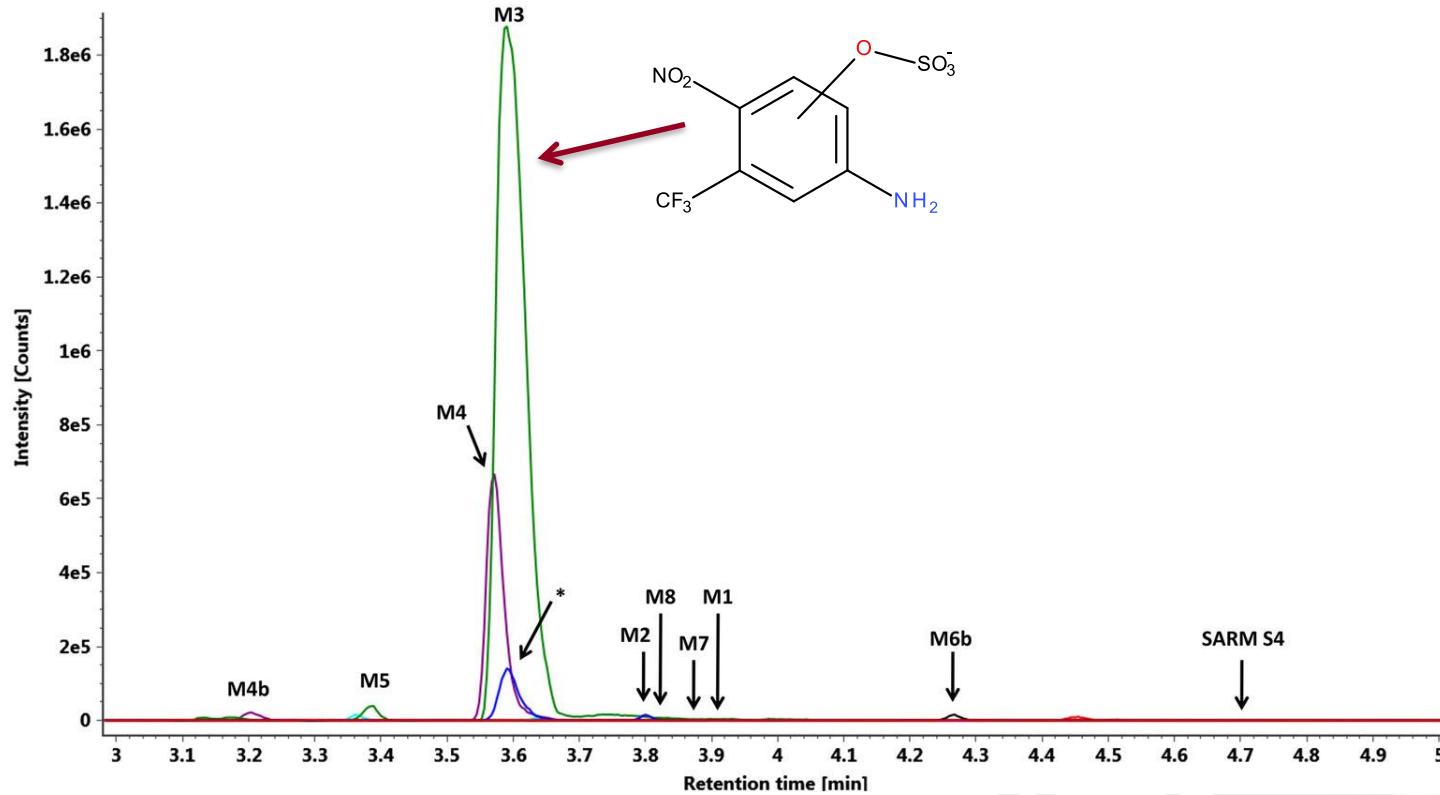




UPPSALA
UNIVERSITET

Metabolites of SARM S4 n horse urine

3h after i.v. admin



How to obtain reference substances?

Commercial source

-often not possible

Organic synthesis

-time consuming, expensive

*In vitro- / in vivo experiments
with organs/cells/parts of
cells, whole animals*

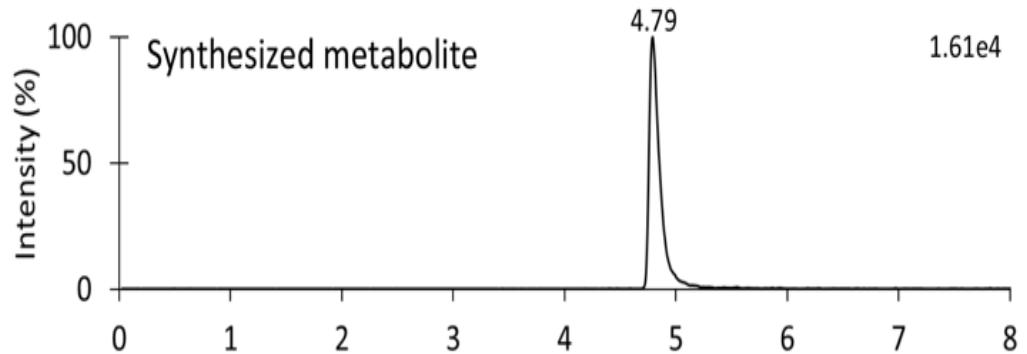
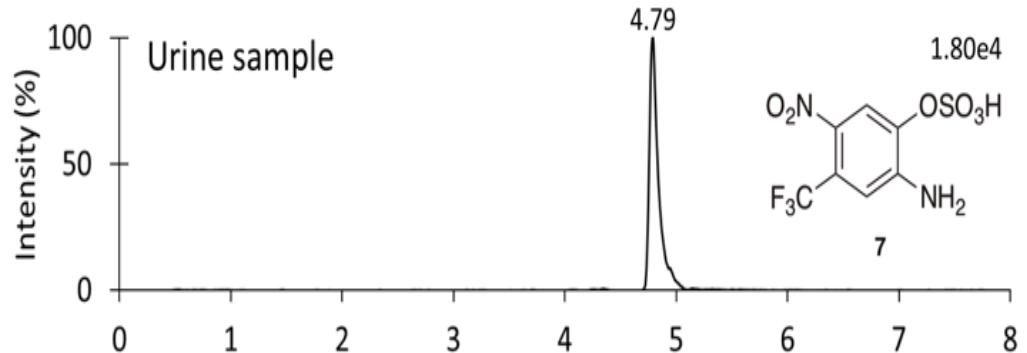
-ethical issues, expensive





UPPSALA
UNIVERSITET

Synthesis of Metabolite M3



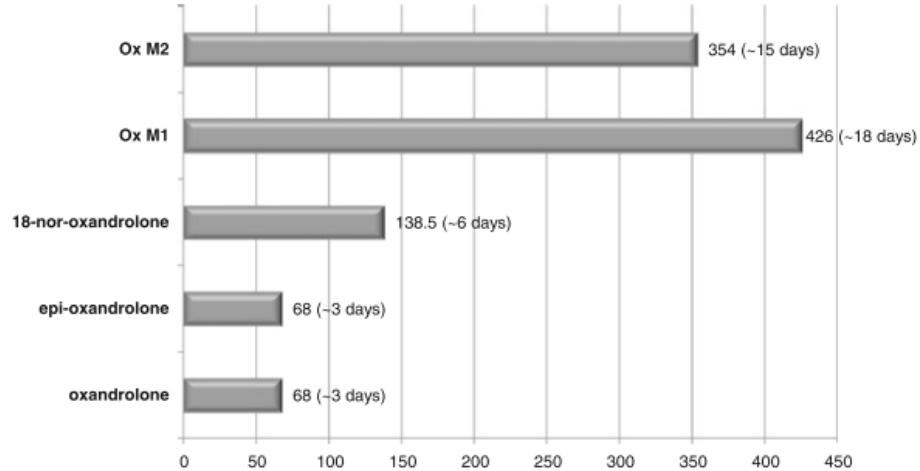
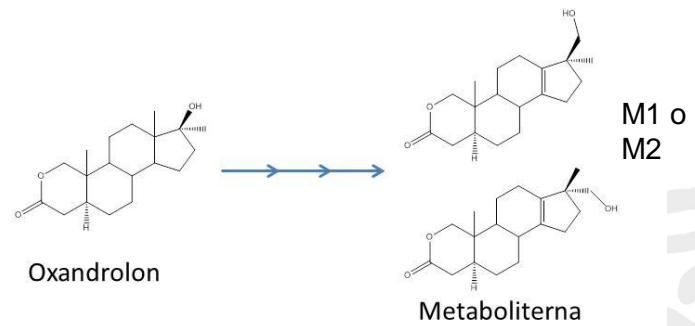
Fungi against doping

- Fungi of the family *Cunninghamella* to produce metabolites
 - Give drug metabolites identical to those formed by animals/humans
 - Advantages: Simple to handle, cheap, no ethical issues, easy to scale up



Fungi against doping

- Produced a metabolite of oxandrolone
 - Characterized as reference material
- Problem
 - Short detection window with earlier target
 - New metabolites prolongs detection time



Guddat S, Fußhöller G, Beuck S, Thomas A,
Geyer H, Rydevik A, Bondesson
U, Hedeland M, Lagojda A, Schänzer W,
Thevis M, Anal Bioanal Chem. 2013
Oct;405(25):8285-94



Fyra från Aten-OS fråntagna medaljer

Fyra medaljörer från OS i Aten 2004 fråntogs på onsdagen sina medaljer av Internationella olympiska kommittén (IOC). Nya analyser av dopningsprover har påvisat spår av anabola steroider.

Välkommen till SvD. Du har hamnat på den här sidan via Google.

Sök fler artiklar om guldmedaljör i kula Aten på SvD.se [Till SvD:s startsida](#)

5 december 2012 kl 19:43 , uppdaterad: 5 december 2012 kl 20:57

De fyra är Jurij Belonog, ukrainsk guldmedaljör i kula, Ivan Tichon, vitryss som tog silver i slägga, samt vitryssan Irina Jatjenko och ryskan Svetlana Kriveljova, som tog brons i diskus respektive kula.

[Rekommendera](#) 0

[Tweetta](#) 1

Kopiera sidans adress

[E-post](#) [Druck](#) [A](#) [T](#)

FRIIDROTT

Blir av med OS-guld efter dopningsavlöjanden

Publicerat: onsdag 5 december 2012 kl 19:27 , Radiosporten

Fyra medaljörer från OS i Aten 2004 har fråntagits sina medaljer av Internationella olympiska kommittén.

Nya analyser av dopningsprover har påvisat spår av anabola steroider.

De fyra är Jurij Belonog, ukrainsk guldmedaljör i kula, Ivan Tichon, vitryss som tog silver i slägga, samt vitryssan Irina Jatjenko och ryskan Svetlana Kriveljova, som tog brons i diskus respektive kula.

Det är andra gången som Belonog fråntas en OS-medalj på grund av dopning. Efter bronset i Peking 2008 åkte lämnade han också ett positivt prov.

En femte medaljör i Aten-OS riskerar också att diskvalificeras. Dennes namn kommer att tillkännagas senare, på grund av en försening i hanteringen av dopningsprovet.

Efter OS i Aten har alla tester från spelen förvarats nedfrysta i dopningslaboratoriet i Lausanne under en tid av åtta år.

I och med att analysmetoderna förfinats har IOC har beordrat omtest av 105 prover från Aten, som är det spel som haft dopningsfall i den olympiska historien.

Radiosporten/TT



Jurij Belonog, Ukraina, blir av med sitt OS-guld från 2004. Arkivfoto: Scanpix

Mer om friidrott

[Ny turkisk dopningsskandal](#)

[Ingen Tornéus – men Flink får tävla i Zürich](#)

[Längsta släggkastet på 17 år](#)

[Roggé: "Hon borde inte ha sagt så"](#)

[Emma GT: "Hade varit fegt att inte göra det"](#)

[Prenumerera](#)



► Se senaste förstasidorna

Följ Expressen på facebook

[Gilla](#) 27K

Alpink
Friidrott
Handboll
Långdistans
Skidskytte
Tennis

Mälservice
Allsvenskan live
SHL Live
Fotboll Live
Hockey Live
Sport Live

Skriv ut text



Foto: Alexander Hassenstein

Fyra från Aten-OS fråntagna medaljer

Fyra medaljörer från OS i Aten 2004 fråntogs på onsdagen sina medaljer av Internationella olympiska kommittén (IOC). Nya analyser av dopningsprover har påvisat spår av anabola steroider.

ANNONS:

NY LOOK MED
LÅNGT HÅR!

Allt inom ishockey

Heta kampanjer

Snabb leverans



UNT.
125
1896–2013

GULD-
SPÄDEN
2015

Start Uppland Sport Kultur & Nöje Åsikt Ekonomi Leva Mat & Dryck Familj Omvärld 24UNT Bost

SENASTE NYTT 21:46 Akademiska vill värvä donatorer | 21:37 Motionsfest för riksdayen | 21:33 Här kastas sten mot



(3/3) Axel Rydevik.

Trådsvamp fällde fuskare

06:00 | 14-05-19 Kommentera

[Lyssna](#)

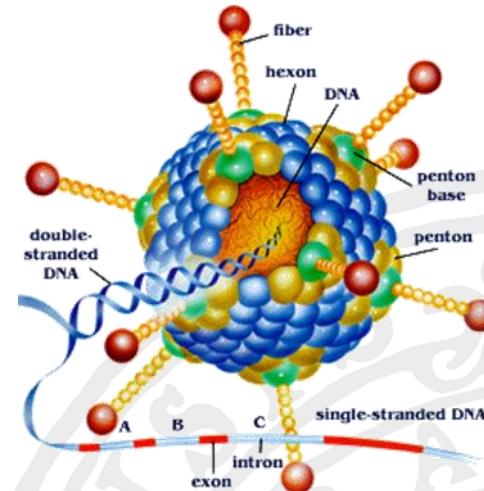
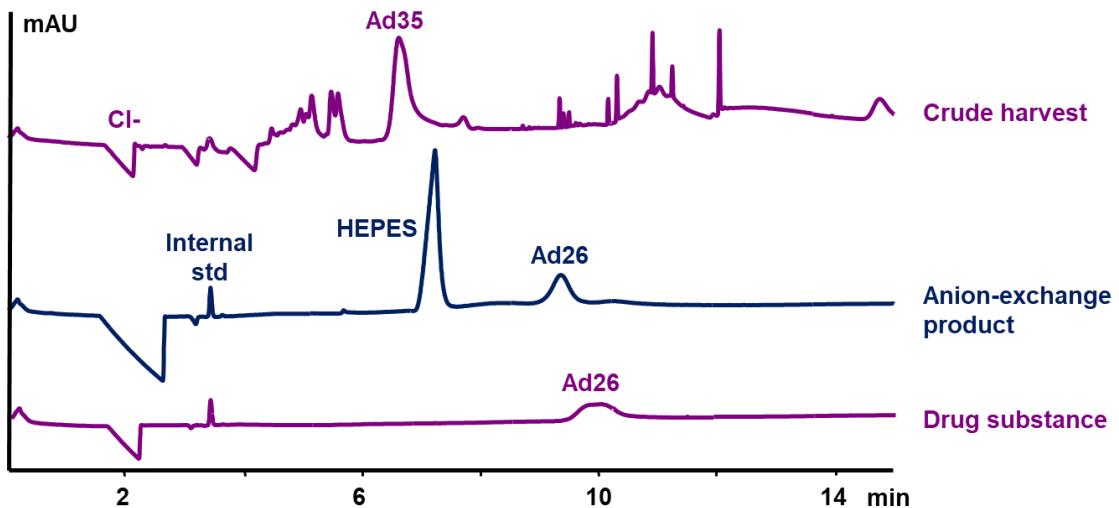


TIPS!

FORSKNING En oansenlig svamp och ett doktorandarbete vid Uppsala universitet spelade en avgörande roll när två medaljörer vid OS i Aten åtta år senare kunde avslöjas som dopade.

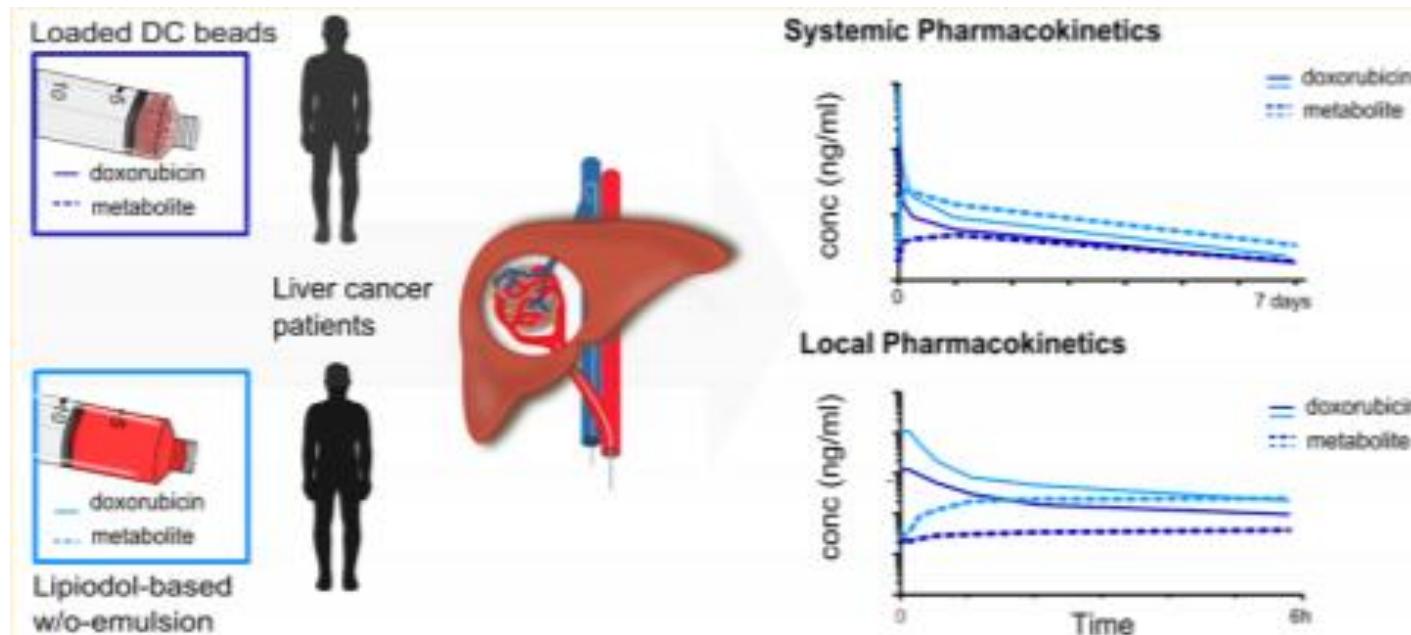


The implementation of a capillary electrophoresis method for quantification of intact adenoviruses in upstream and downstream processing



Docent Cari Sänger van de Griend
Janssen Vaccines and Prevention
Kantisto BV, the Netherlands

Analysis within pharmacokinetics/biopharmaceutics



E. Lilienberg, I. R. Dubbelboer, A. Karalli, R. Axelsson, T. B. Brismar, C. Eberling Barbier, A. Norén, F. Duraj, M. Hedeland, U. Bondesson, E. Sjögren, P. Stål, R. Nyman, H. Lennernäs, Mol. Pharmaceutics 14 (2017) 448-458

Analytical Pharmaceutical Chemistry

<https://www.ilk.uu.se/forskargrupper/afk/>

