РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО АДСОРБЦИИ И ХРОМАТОГРАФИИ
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ и ЭЛЕКТРОХИМИИ им. А.Н. ФРУМКИНА
ГОУ ВПО
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

«ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА ХРОМАТОГРАФИИ. ПРИМЕНЕНИЕ В НЕФТЕХИМИИ»

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
(3 – 8 июля 2005 , Самара)

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

САМАРА
2005

ПРЕДСКАЗАНИЕ ОБЪЕМОВ УДЕРЖИВАНИЯ И УФ СПЕКТРОВ ПЕПТИДОВ В ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОЙ ВЭЖХ

Г.И.Барам, И.Н.Азарова, Е.Л.Гольдберг

Лимнологический институт Сибирского отделения РАН, г. Иркутск

Разработан метод вычисления объемов удерживания пептидов с известным аминокислотным составом, а также величин их поглощения при выбранных длинах волн в области УФ спектра в обращенно-фазовой ВЭЖХ. Расчет этих параметров для каждого пептида осуществляется по вкладам входящих в его состав аминокислот (АК). Величины этих вкладов находятся экспериментально из хроматограмм свободных АК, полученных при многоволновом фотометрическом детектировании в тех же условиях, в которых хроматографируются пептиды:

хроматограф: "Милихром А-02" (ЗАО "ЭкоНова", г. Новосибирск)
колонка: ∅2x75 мм, ProntoSIL-120-5C18 AQ
элюенты: **А:** 0,2 М $LiClO_4$-0,005 М $HClO_4$; **Б:** ацетонитрил
линейный градиент: 40 мин от 5 до 100% **Б**
скорость потока: 100 мкл/мин
температура колонки: 40°С
детекция: при 210, 220, 230, 240, 250, 260, 280 и 300 нм, τ=0,18 с
объем пробы: 4 мкл

Вклады аминокислотных остатков в удерживание пептидов (Z_i, мкл) составляют от 0 (для гидрофильных АК) до 864 (для триптофана); суммарный вклад концевых групп пептида Z_{N*+C*} = 15; свободный объем колонки V_0 = 150 мкл. Расчет удерживания пептида проводится по уравнению $V_R = 209[\Sigma(Z_i) + Z_{N*+C*} + V_0]^{1/3} - 990$.

Коэффициент корреляции между вычисленными и экспериментально найденными объемами удерживания для 30 пептидов составил 0,95. Расчетные спектральные отношения пептидов соответствовали экспериментальным с погрешностью ±0,05.

Для моделирования 8-волновых хроматограмм пептидов разработана компьютерная программа "ХРОМ-П" (ЗАО "ЭкоНова", Новосибирск).