

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ АССОЦИАТОВ АМИНОКИСЛОТ НА ИХ АДСОРБЦИЮ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТИРОВАННОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ САЖИ

Кузнецова Е.С., Ульянов А.В., Буряк А.К.

Учреждение Российской Академии Наук Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, 119991 Москва, Ленинский пр., 31, корп. 4. e-mail: eskuznetsova8@yandex.ru

Значение водородных связей для биологических систем огромно, так как они играют важную роль во внутри- и межмолекулярных взаимодействиях, например, при стабилизации белковых молекул. При анализе этих взаимодействий для сложных молекул пептидов и белков корректным является применение в качестве моделей небольших протон-связанных димерных молекул аминокислот. Используемый в работе метод молекулярно-статистического расчета термодинамических характеристик адсорбции (ТХА) веществ для молекул разных классов, в том числе изомерных, на поверхности модельного углеродного сорбента – графитированной термической сажи (ГТС) представляет фактически единственный подход для теоретического определения констант адсорбционного равновесия димеров и ассоциатов аминокислот.

Проведен расчет ТХА для ассоциатов аминокислот с уксусной, трифторуксусной, нафтафторпентановой кислотами и формамидом на ГТС с различными значениями длин водородных связей и разной конформацией. Показано что, значения константы Генри и теплоты адсорбции больше для димерных молекул, чем для исходных соединений. Прослеживается следующая закономерность адсорбции исследуемых веществ на ГТС: константы Генри и теплоты адсорбции аминокислот и их ассоциатов возрастают с увеличением молекулярного веса этих соединений. Показано, что полученные ТХА позволяют дифференцировать ассоциаты молекул. Так, для ассоциата глицина с двумя молекулами ТФУ с водородной связью $\text{NH}\cdots\text{O}$ и $\text{OH}\cdots\text{O}$ ТХА больше, чем для ассоциата глицина с ТФУ и его ассоциата с двумя молекулами ТФУ с водородной связью $\text{NH}\cdots\text{O}$.

Сопоставлены результаты, полученные методом ОФ ВЭЖХ на сорбенте Гиперкарб, и рассчитанные молекулярно-статистическим методом ТХА для исследованных аминокислот на ГТС. Наблюдается удовлетворительная корреляция между экспериментальными и расчетными значениями. Сопоставление рассчитанных и экспериментальных ТХА позволяет предположить, что образование ассоциатов исследованных аминокислот с трифторуксусной и нафтафторпентановой кислотами не изменит порядка выхода ассоциатов из колонки Гиперкарб, а только изменит абсолютные величины удерживания. Таким образом, показана возможность априорного предсказания хроматографического поведения аминокислот в обращенно-фазовой ВЭЖХ на Гиперкарбе методом молекулярно-статистического расчета констант адсорбционного равновесия.