

ПРИМЕНЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ СОРБЕНТОВ В АНАЛИЗЕ АМИНОКИСЛОТ И ИХ АССОЦИАТОВ МЕТОДАМИ ВЭЖХ, МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ MALDI И МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОГО РАСЧЕТА

Е.С. Кузнецова, А.К. Буряк

*Лаборатория синтеза и исследования сорбентов ИФХЭ РАН, 119991 Москва,
Ленинский проспект, д.31, корп.4, e-mail: eskuznetsova8@yandex.ru*

В настоящее время углеродные сорбенты находят широкое применение для анализа аминокислот, пептидов и белков методами высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) и масс-спектрометрии матрично-активированной лазерной десорбции/ионизации (МАЛДИ). Целью работы являлось исследование влияния геометрии и химии поверхности углеродных материалов на анализ аминокислот и их ассоциатов методами ВЭЖХ, МАЛДИ и молекулярно-статистического расчета.

Молекулярно-статистический расчет термодинамических характеристик адсорбции (ТХА) веществ для молекул разных классов, в том числе изомерных, на поверхности модельного углеродного сорбента – графитированной термической сажи (ГТС) является фактически единственно надежным подходом для теоретической оценки констант адсорбционного равновесия аминокислот и их ассоциатов. Рассчитаны ТХА аминокислот, их ассоциатов с трифторуксусной кислотой (ТФУ), нонафторпентановой кислотой (НФПК) и их изомеров на ГТС. Методом ВЭЖХ проведено разделение аминокислот (фенилаланин, тирозин, триптофан) на углеродном сорбенте Гиперкарбе с удельной поверхностью 120 м²/г, имеющем близкую к ГТС химию поверхности. Установлена удовлетворительная корреляция между экспериментальными характеристиками удерживания аминокислот на Гиперкарбе и ТХА этих веществ, рассчитанных молекулярно-статистическим методом

При идентификации аминокислот методом МАЛДИ использовали углеродные сорбенты – ГТС с удельной поверхностью 7.6 м²/г и неграфитированные сажи ПМ-75 и Vulcan XC 72R с удельной поверхностью 75 и 265 м²/г, состоящие из наноразмерных частиц (диаметром ≤ 50 нм). Показано, что применение неграфитированных саж приводит к резкому возрастанию интенсивности пиков протонированных молекулярных ионов и аддуктов с катионами щелочных металлов по сравнению с проведением эксперимента на ГТС и нержавеющей стали. Это, возможно, обусловлено увеличением удельной поверхности саж ПМ-75 и Vulcan XC 72R, присутствием на поверхности различных функциональных групп, прежде всего карбоксильных (–COOH, –COONa, –COOK) и образованием супрамолекулярных структур между ассоциатами аминокислот и наночастицами саж.