

СОПОСТАВЛЕНИЕ РАССЧИТАННЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК УДЕРЖИВАНИЯ АМИНОКИСЛОТ НА УГЛЕРОДНЫХ СОРБЕНТАХ

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*

Для успешного разделения аминокислот, пептидов и белков в сложных смесях, а также при идентификации аминокислот в различных биообъектах и определения пептидной последовательности белков необходимо изучение особенностей электронного строения и геометрической структуры отдельных аминокислот, выявление характерных для них общих структурных закономерностей, а также изучение их адсорбционных свойств и хроматографического поведения. Целью работы является определение теоретически и экспериментально термодинамических характеристик адсорбции (ТХА) и хроматографического поведения аминокислот и их ассоциатов на углеродных сорбентах.

Молекулярно-статистическим методом рассчитаны ТХА на ГТС для аминокислот и их ассоциатов с трифторуксусной (ТФУ) и нонафторпентановой (НФПК) кислотами, которые часто являются компонентами элюента. Сравнительный анализ ТХА ассоциатов молекул и исходных соединений показывает, что значения константы Генри больше для ассоциатов аминокислот, чем для молекул исходных аминокислот. Показано, ТХА ассоциатов возрастают с увеличением углеродной цепи исследуемых соединений: значения константы Генри и теплоты адсорбции ассоциата глицина с НФПК больше, чем ТХА ассоциата глицина с ТФУ.

Методом ВЭЖХ проведен анализ удерживания ароматических и гетероциклических аминокислот на углеродном сорбенте Гиперкарбе в обращенно-фазовом варианте. Разделение проводили в градиентном режиме с подвижной фазой ацетонитрил/вода с добавлением ТФУ. Проведен сравнительный анализ констант Генри, рассчитанных молекулярно-статистическим методом и параметров удерживания аминокислот, определенных экспериментально в данной работе и в работе^{1,2} для аминокислот разных классов. Наблюдается удовлетворительная корреляция с теоретически рассчитанными значениями константы Генри (коэффициенты корреляции 0.96 и 0.97).

Таким образом, показано, что характеристики удерживания аминокислот на углеродном сорбенте Гиперкарбе, определенные методом ОФ ВЭЖХ, могут быть предсказаны на основе термодинамических характеристик адсорбции этих веществ на ГТС, рассчитанных молекулярно-статистическим методом.

1. HPLC Analysis of Biomolecules. Technical Guide // Thermo Electron Corporation. 2004. 47 P.
2. Chaimbault P., Petritis K., Elfakir C., Dreux M. // Journal of Chromatography A. 2000. V. 870. P. 245-254.