

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**  
**НАУЧНЫЙ СОВЕТ ПО АДСОРБЦИИ И ХРОМАТОГРАФИИ**  
**ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И ЭЛЕКТРОХИМИИ ИМ. А.Н. ФРУМКИНА**



*X Международная конференция*

**Теоретические проблемы химии поверхности, адсорбции  
и хроматографии**

*24 - 28 апреля 2006 года*

*Москва – Клязьма*

## ПРЕДСКАЗАНИЕ УДЕРЖИВАНИЯ ПЕПТИДОВ В ГРАДИЕНТНОЙ ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОЙ ВЭЖХ

И.Н.Азарова<sup>1</sup>, Г.И.Барам<sup>1</sup>, Е.Л.Гольдберг<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ЗАО Институт хроматографии "ЭкоНова", г. Новосибирск

<sup>2</sup>Лимнологический институт СО РАН, г. Иркутск

В развитие уже известного метода [1] разработан метод вычисления  $V_R$  линейных пептидов в градиентной ОФ ВЭЖХ для градиентов концентрации ацетонитрила произвольной формы ( $C=C(V)$ ). Метод основан на модели удерживания пептидов, в которой предполагается, что:

- удерживание пептида определяется только набором входящих в его состав аминокислот независимо от их взаимного расположения;
- количество аминокислотных остатков в пептиде не превышает 20;
- остатки аминокислот свободно вращаются вокруг пептидной связи и не взаимодействуют друг с другом;
- фактор удерживания  $i$ -той аминокислоты определяется эмпирическим уравнением  $k'_i = k'_{0(i)} \cdot e^{S_i \cdot C}$ , где константы  $k'_{0(i)}$  и  $S_i$  находятся экспериментально).

$V_R$  пептида, состоящего из  $N$  аминокислотных остатков, вычисляли численным решением интегрального уравнения:

$$V_0 - \int_0^{V_R} \frac{dV}{\prod_1^N [1 + k'_i(C(V))]} = 0$$

Пептиды хроматографировали в следующих условиях: хроматограф "Милихром А-02" (ЗАО "ЭкоНова"); колонка:  $\varnothing 2 \times 75$  мм (ProntoSIL-120-5-C18 AQ); элюент "А" – 0.1%  $F_3CCOON$ ; элюент "Б" –  $CH_3CN$ ; скорость потока 100 мкл/мин; температура колонки 40°C; детектирование при 210 нм.

Коэффициент корреляции между вычисленными и экспериментально найденными объемами удерживания для 30 пептидов составил 0.94.

[1] Азарова И.Н., Барам Г.И., Гольдберг Е.Л. *Биоорганическая химия*, 2006, т.32, №1, с.56-63.