



УДК 577.112.6.088.3:543.544.42

## **ПРЕДСКАЗАНИЕ ОБЪЕМОВ УДЕРЖИВАНИЯ ПЕПТИДОВ В ГРАДИЕНТНОЙ ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОЙ ВЭЖХ**

© 2008 г. **И. Н. Азарова\*<sup>#</sup>, А. Ю. Кучкина\*\*<sup>#</sup>, Г. И. Барам\*<sup>#</sup>, Е. Л. Гольдберг\*\*\*<sup>#</sup>**

*\*ЗАО Институт хроматографии “ЭкоНова”, 630090, Новосибирск, ул. Николаева, 8;*

*\*\*Новосибирский государственный университет, Новосибирск;*

*\*\*\*Лимнологический институт СО РАН, Иркутск*

Поступила в редакцию 27.02.2007 г. Принята к печати 07.09.2007 г.

Разработан метод вычисления объемов удерживания линейных пептидов известного состава, содержащих не более 25 аминокислот, в градиентной обращенно-фазовой ВЭЖХ для градиентов концентрации ацетонитрила произвольной формы. Расчет проводили на основе статистической модели, параметрами которой служили экспериментально полученные зависимости констант удерживания индивидуальных аминокислот от концентрации ацетонитрила. Предложенный метод использован для прогнозирования хроматографического поведения 34 пептидов в четырех различных градиентах концентрации ацетонитрила в подвижной фазе. Полученные коэффициенты корреляции между предсказанными и экспериментальными объемами удерживания выше 0,9, а средняя относительная погрешность прогнозирования менее 15%.

*Ключевые слова: пептиды, ВЭЖХ, прогнозирование параметров удерживания.*