



КАК РАБОТАЕТ ПРОГРАММА "ХРОМ-П"

Общие положения

Программа "Хром-П" предназначена для вычисления объемов удерживания (V_R) и спектральных отношений S_λ/S_{210} пептидов с известным аминокислотным составом. На основании полученных данных программа позволяет построить хроматограмму. Алгоритм вычисления значений V_R и S_λ/S_{210} описан в разделе меню "?/Справка по методу"






* * *

1. По умолчанию программа "Хром-П" устанавливается в папку C:\Program Files\Chrom-P. В эту же папку помещается папка с примерами проектов (Samples). Работа с программой начинается с запуска файла  chrom.exe.


2. Для того, чтобы ввести структуру пептида, надо выполнить команду "Файл/Создать проект" или войти в режим редакции ("Правка/Режим редакции", икона ) и напечатать последовательность аминокислот в пептиде в однобуквенном коде малыми или прописными английскими буквами. Если требуется ввести структуры нескольких пептидов, то структура каждого пептида вводится с новой строки после команды "Enter". После выхода из режима "Правка/Режим редакции" в окне "Структуры пептидов" каждому пептиду будет присвоен порядковый номер и все строчные буквы заменятся на прописные. Введенные структуры можно записать в файл *.chr по команде "Сохранить проект как...". Для работы с ранее составленным проектом надо открыть соответствующий файл по команде "Открыть проект".

Каждый проект можно снабдить текстовыми комментариями ("Правка/Комментарии...").

3. После создания или открытия проекта программа позволяет сделать следующие "Вычисления":


-  – построить хроматограмму
- и
-  – вычислить значения площадей пиков пептидов при длинах волн 210, 220, 230, 240, 250, 260, 280 и 300 нм;
-  – вычислить значения S_λ/S_{210} ;
-  – вычислить значения молекулярных масс пептидов;
-  – вычислить объемы удерживания пептидов.

Концентрация пептидов по умолчанию принимается равной 1 мМ. Для изменения значений концентраций пептидов в диапазоне 0.01-10 мМ надо ввести их новые значения в таблицу "Настройки/Концентрации...". Разделителем между целой и дробной частями числа должен быть знак ",". Измененную таблицу концентраций можно сохранить в файл *.tbc.

После ввода значений концентраций необходимо построить хроматограмму заново ().

Применяемый в программе алгоритм вычисления имеет несколько ограничений:

- удерживание пептида и его спектр зависят только от набора входящих в его состав аминокислот и не зависят от порядка их расположения в молекуле пептида;
- длина пептида не может превышать 100 остатков аминокислот;
- если вычисленное значение V_R пептида превышает 3900 мкл, то его пик на хроматограмме показываться не будет, но в "Таблице параметров" значение V_R приводится;
- удерживание пептида и его спектр вычисляются только для конкретной хроматографической системы (ее описание приведено на стр. 2) на основании стандартных "коэффициентов удерживания", стандартных "спектральных коэффициентов" и стандартных "параметров колонки", записанных по умолчанию в "Таблице структурных коэффициентов" (меню "Настройки"). При замене колонки, сорбента и элюентов, а также при изменении режима хроматографирования, значения этих коэффициентов необходимо найти вновь согласно прилагаемому описанию метода. Ширину отображаемых пиков на хроматограмме можно изменять путем изменения параметра "Дисперсия пика" в меню "Настройки/Эффективность колонки...". В качестве стандартной величины дисперсия пика принята равной 5,54 мкл. Такая дисперсия пика соответствует колонке, имеющей эффективность около 5000 теоретических колонок.

Изменение масштаба хроматограммы достигается выделением части хроматограммы при нажатой левой кнопки мыши, командой "Показать все" (икона ) или изменением масштаба осей X и Y в меню "Настройки/Настройки графика...". В этом же меню можно изменить цвета линий и их толщину, установить представление пиков пептидов на хроматограмме в виде структур пептидов или их порядковых номеров, а также перейти из многоцветного режима в одноцветный.

При просмотре хроматограммы можно переключать кнопками режимы "Показать градиент" и "Показать кривые спектральных отношений S_x/S_{210} ":

и

Переключение режимов сопровождается переключением правой оси "Y". При зуммировании правая ось "Y" не изменяется.

Количество выводимых на экран профилей УФ поглощения и количество спектральных отношений можно менять, делая отметки в полях "□" слева от их соответствующих значений, сгруппированных в линейки

и .

Для того, чтобы вставить рисунок хроматограммы в текстовый редактор (например, Microsoft Word), хроматограмму надо сначала экспортировать в

один из трех возможных файлов (*.wmf, *.emf или *.bmp), а затем вставить в текст как "Рисунок из файла...".

Каждый проект можно снабдить текстовым комментарием, который открывается из меню "Правка" или щелчком по соответствующей иконе.

Печать отчета осуществляется из окна "Файл/Печать отчета..." после выбора размера шрифта, разделов отчета и последующего перехода в окно "Просмотр и печать отчета в браузере". Отчет автоматически запоминается в файл *.html, название которого соответствует названию проекта. Расположение этого файла на диске печатается на каждом листе отчета. Из окна "Файл/Печать отчета..." отчет можно запомнить в файл *.html с собственным названием.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРОГРАММЫ

Если структурными элементами пептида являются не только канонические 20 аминокислот, но и "неканонические" или модифицированные остатки аминокислот (например, ДНС-, ФТК-, ФТГ-, NH₂- и др.), то их можно добавить следующим образом.

1. По прилагаемому методу **"Вычисление объемов удерживания и УФ спектров пептидов"** ("?/Справка по методу") для каждого нового элемента необходимо определить коэффициенты удерживания, спектральные коэффициенты и молекулярные массы.

2. Каждому новому элементу надо присвоить условный номер от 1 до 9, который выбирается из меню "Настройки/Коэффициенты структурных элементов/Добавить/Удалить". После этого этапа в таблице "Коэффициенты структурных элементов" появится соответствующая колонка.

3. В новую колонку надо ввести все необходимые данные о новом структурном элементе, после чего его можно включать в структуры пептидов, кодируя не буквой (как обычно), а цифрой.

Измененную таблицу "Коэффициенты..." надо сохранить в виде файлов *.tbl. Для возврата к работе с исходными таблицами необходимо загрузить из меню "Настройка/Коэффициенты..." файлы "Стандартные".