

ANWENDUNG EINER HPLC-ESI-MS/MS-SPEKTRENBIBLIOTHEK IM NATURSTOFF-SCREENING

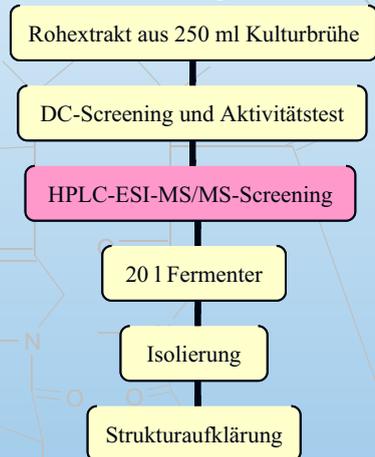


Imelda Oka, Holm Frauendorf, Hartmut Laatsch

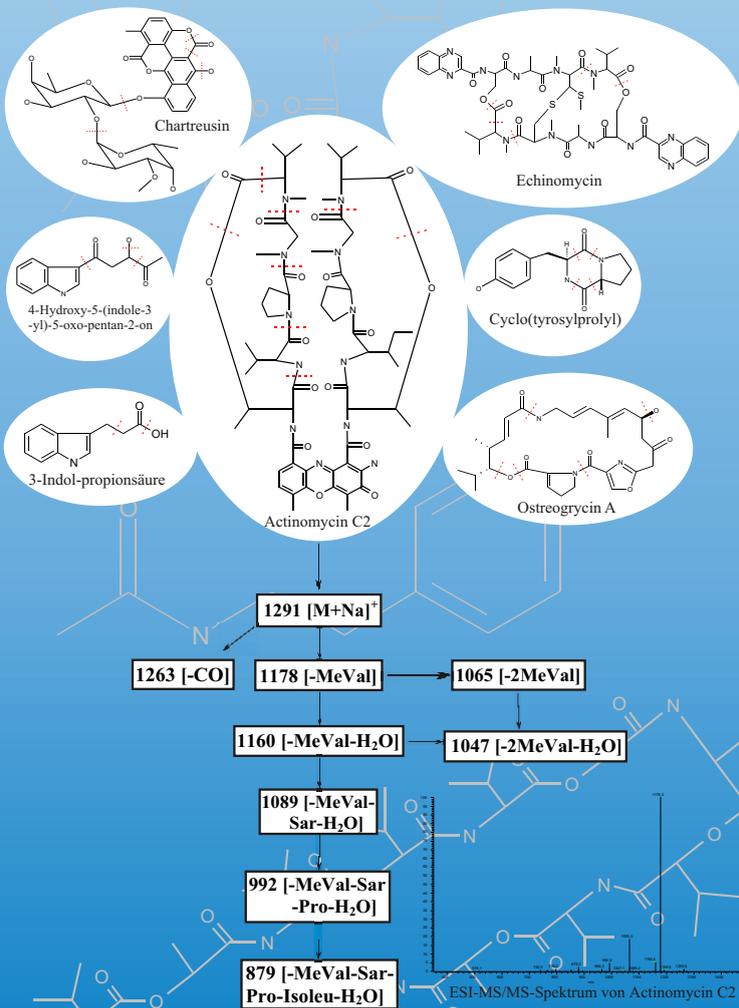
Institut für Organische und Biomolekulare Chemie, Georg-August-Universität Göttingen, Tammannstr. 2, 37077 Göttingen

Ein Forschungsschwerpunkt unserer Arbeitsgruppe stellt das Auffinden neuer biologisch und chemisch interessanter Naturstoffe in Fermentationskulturen von marinen und terrestrischen Bakterien dar. Um ein schnelleres und effizienteres Isolieren neuer Substanzen zu ermöglichen, ist es wichtig, bereits bekannte Verbindungen im Rahmen des Screenings frühzeitig zu identifizieren. Hierbei könnte die HPLC-MS/MS-Kopplung mit Electrospray-Ionisierung eine zentrale Rolle spielen.

Schema der Naturstoffisolierung aus Mikroorganismen

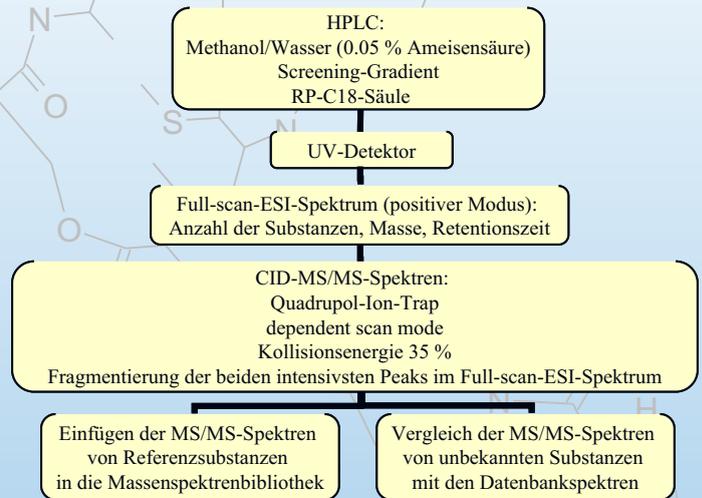


Fragmente und Fragmentierungswege

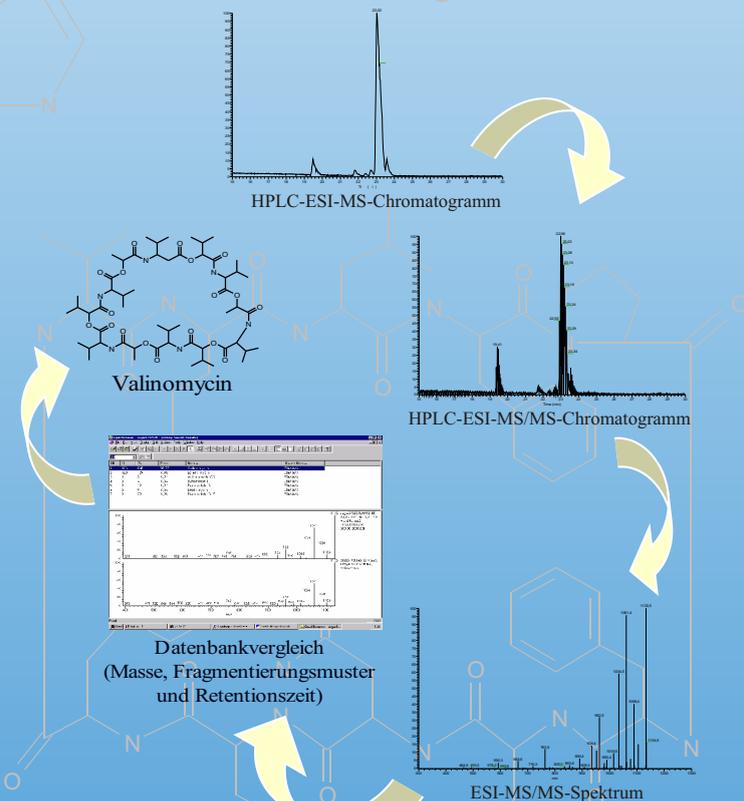


Die aufgestellten Fragmentierungsmechanismen werden im Einzelfall durch parallel durchgeführte ESI-FT-ICR-MS/MS-Untersuchungen abgesichert.

Schematischer Verlauf der Messung



Beispiel der Datenbanksuche eines Rohextrakts von *Streptomyces* sp. GW 37/3237



Fragmentierung der zwei intensivsten Ionen im dependent scan mode wird durchgeführt, denn:

- [M+H]⁺- und [M+Na]⁺-Ionen von einer Substanz zeigen oft verschiedene Fragmentierungen und Intensitäten
- In manchen Fällen ist die Intensität des Dimer-Peaks größer als die des Monomers
- Die Intensität der Peaks von Hintergrund- und überlappenden Ionen ist in einigen Fällen größer als die der untersuchten Ionen

Schlussfolgerung und weitere Zielsetzungen:

- Die erstellte MS/MS-Datenbank konnte bereits erfolgreich im Screening auf Bakterien-Sekundärmetabolite eingesetzt werden.
- Für zusätzliche Strukturinformationen und die gleichzeitige Erfassung schlecht ionisierbarer Verbindungen ist die Kombination mit DAD-UV/VIS-Spektren geplant.
- Aus den MS/MS-Spektren sollen Fragmentierungsmechanismen abgeleitet werden, die sich auch zur Strukturaufklärung neuer strukturverwandter Verbindungen nutzen lassen.