



Status der LC-MS in der täglichen Praxis: Möglichkeiten und Limitierungen bei Struktur- aufklärung, Identifizierung und Quantifizierung

Prof. Dr. Michael Oehme

*Organische Analytische Chemie, Departement Chemie, Universität Basel,
Neuhausstr. 31, 4057 Basel*

Die fast explosionsartige Verbreitung der Kopplung hochauflösende Flüssigchromatographie mit Massenspektrometrie (LC-MS) in den letzten 10 Jahren hat nicht nur viele neue Anwender gebracht, sondern auch eine gewisse Verunsicherung: Was ist eigentlich möglich? Vorträge zeigen meist Spitzenleistungen, die in der Routine aus Kostengründen oder wegen fehlender Technologie gar nicht möglich sind.

Dieser Vortrag gibt zunächst eine Übersicht über den Status der Strukturaufklärung von vollkommen oder teilweise unbekanntem Verbindungen mittels LC-MS. Die Identifizierung von neuen Designerdrogen [1] von Isoflavonen in Pflanzenextrakten [2] oder von Mycotoxinen in Getreide sollen zeigen, dass sich die Strategien, die angewendet werden müssen, deutlich von denjenigen der klassischen GC-MS unterscheiden. Zudem werden die Möglichkeiten und Limitierungen von LC-MS Spektrensammlungen kurz diskutiert

Die Vorteile der Anwendung der Mikro-LC mit Kapillaren werden in den letzten Jahren in der Literatur immer wieder unterstrichen, wobei zwar spektakuläre Resultate gezeigt werden, über deren Alltagstauglichkeit sich aber ausgesprochen wird. An Hand der Entwicklung eines "Phase 1"-Tests für die Pharmaindustrie basierend Mikro-LC-MS mit einer 0,2 mm ID Kapillare soll gezeigt werden, wie gross der Aufwand für den Aufbau einer robusten Methodik ist und wie sich diese im Langzeittest mit biologischen Proben bewährt [3]. Es wurden dabei Trennungen mit nicht gesplitteten Gradienten mit Flüssen von wenigen $\mu\text{l}/\text{min}$ verwendet.

Schliesslich werden auch noch einige Artefakte präsentiert, welche zu systematischen Fehler und Störungen führen können [4].

- [1] S. Kölliker, M. Oehme. Structure elucidation of nanogram quantities of unknown designer drugs based on phenylalkylamine derivatives by ion trap multiple mass spectrometry. *Anal. Bioanal. Chem.* on-line published 21 January 2004.
- [2] Differentiation of isomeric flavone/isoflavone aglycones by MS² ion trap mass spectrometry and a double neutral loss of CO. F. Kuhn, M. Oehme, F. Romero, E. Abou-Mansour, R. Tabacchi. *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 17, 1941-1949 (2003).
- [3] Performance and reliability of splitless microliter gradient pumps in a metabolic stability study using cytochrome P450/3A4 and capillary liquid chromatography-mass spectrometry. F. Kuhn, M. Oehme, M. Schleimer. *J. Chromatogr. A* 1018, 203-212 (2003).
- [4] Trace analysis by HPLC-MS: Contamination problems and systematic errors. M. Oehme, U. Berger, S. Brombacher, F. Kuhn, S. Kölliker. *Trends Anal. Chem.* 21, 322-331 (2002).