

# ORGANIC MASS SPECTROMETRY

Albert T. Lebedev



*Moscow State M.V.Lomonosov University, Organic Chemistry  
Department, 119992 Moscow Russia*

*E-mail: [a.lebedev@org.chem.msu.ru](mailto:a.lebedev@org.chem.msu.ru)*

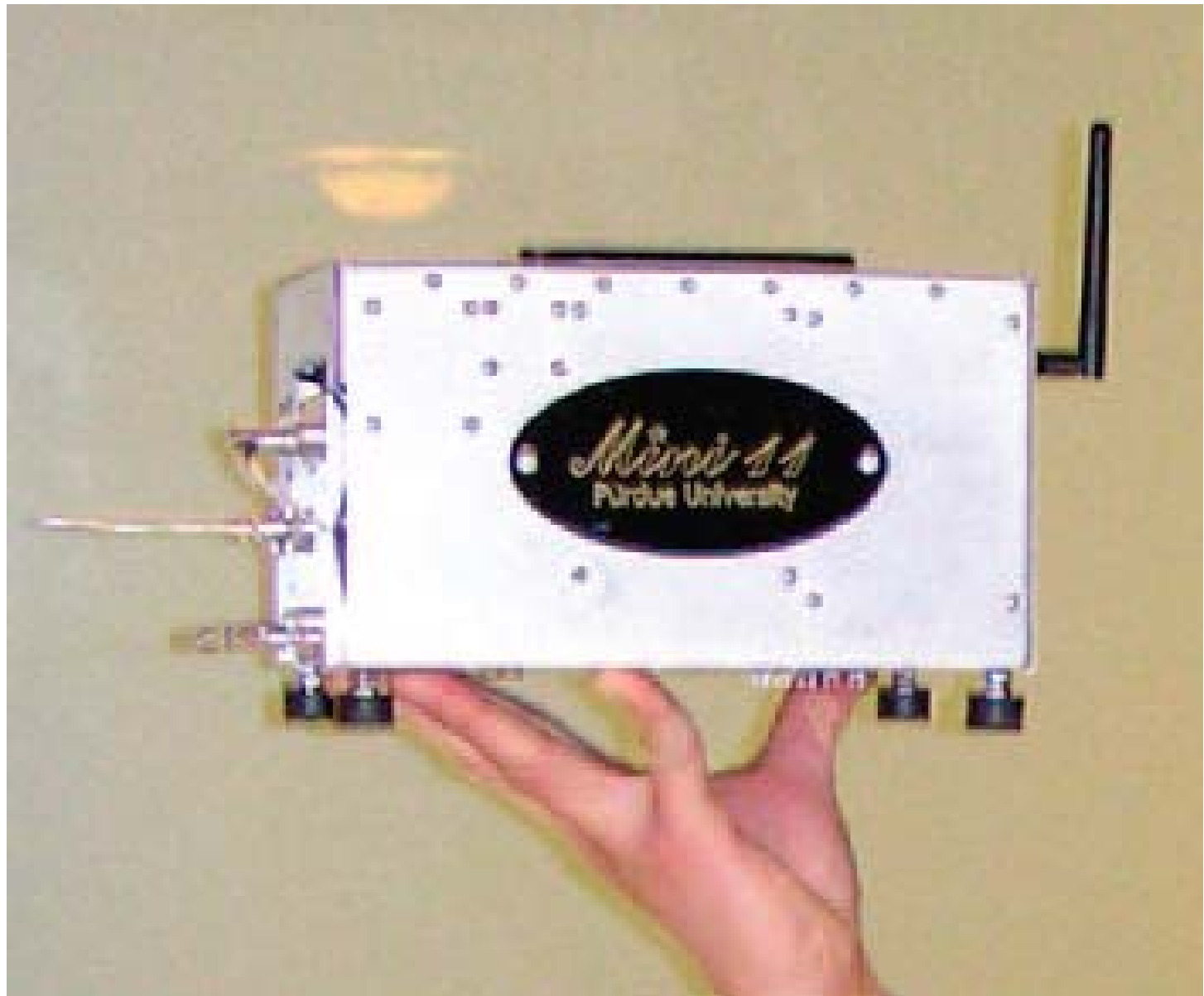
# Достоинства масс-спектрометрии

- Молекулярная масса вещества. Рекорд 110,000,000 Да
- Непревзойденная чувствительность. Рутинa  $10^{-12}$ Г,  $10^{-14}$ М. Рекорды  $10^{-18}$  г,  $10^{-21}$ М
- Структурная информация
- Прямой качественный и количественный анализ сложнейших смесей (тысячи компонентов)
- Непревзойденная скорость анализа. Несколько минут для нескольких сотен соединений
- Доступны приборы для полевых условий
- Химические и биологические соединения измеряются одним прибором

*“If you can't solve a problem by mass spectrometry, it probably isn't worth solving”*

*Fred McLafferty*

1. Химия
2. Биология
3. Медицина
4. Протеомика
5. Физика
6. Геология
7. Космические исследования
8. Допинг контроль
9. Криминалистика
10. Экология
11. Подлинность картин
12. Контроль промышленных процессов
13. Археология



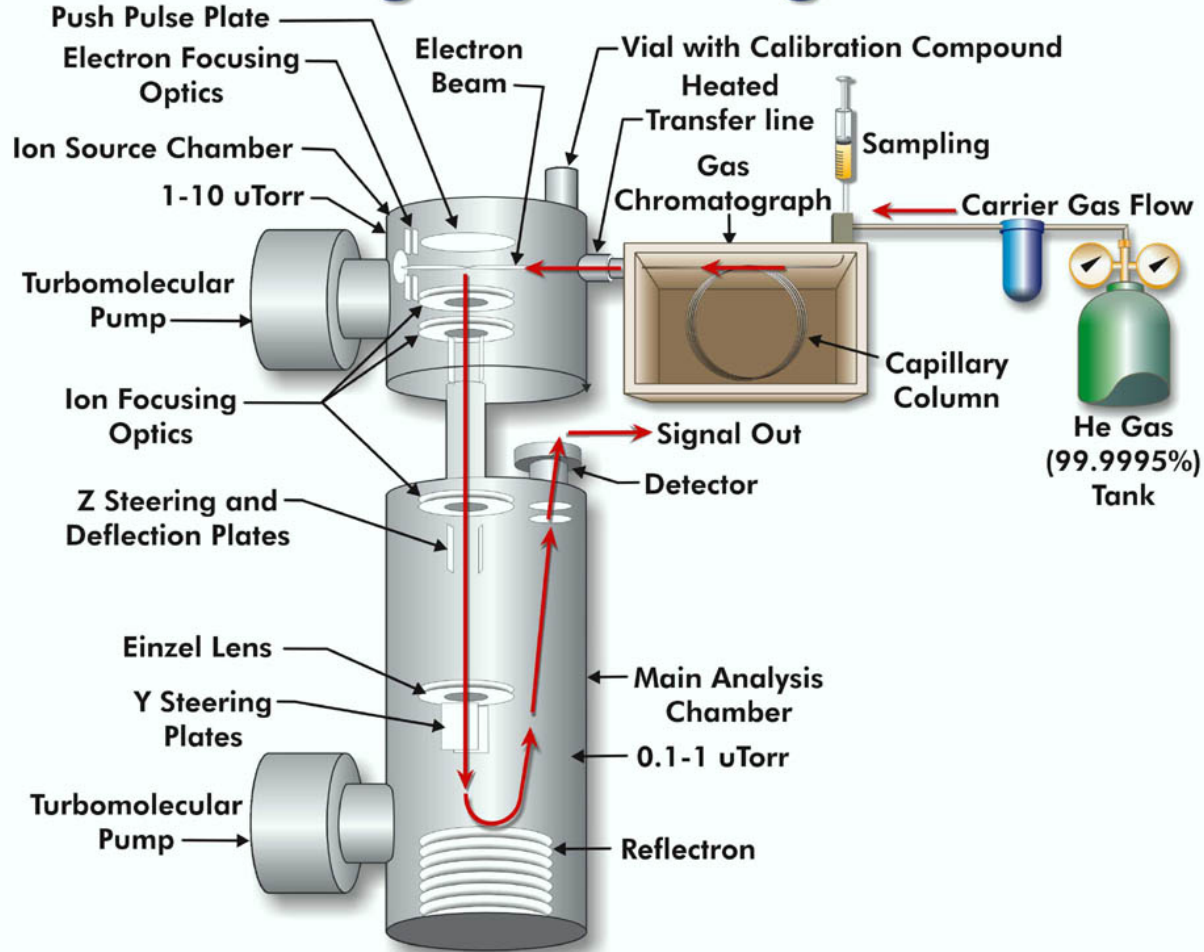


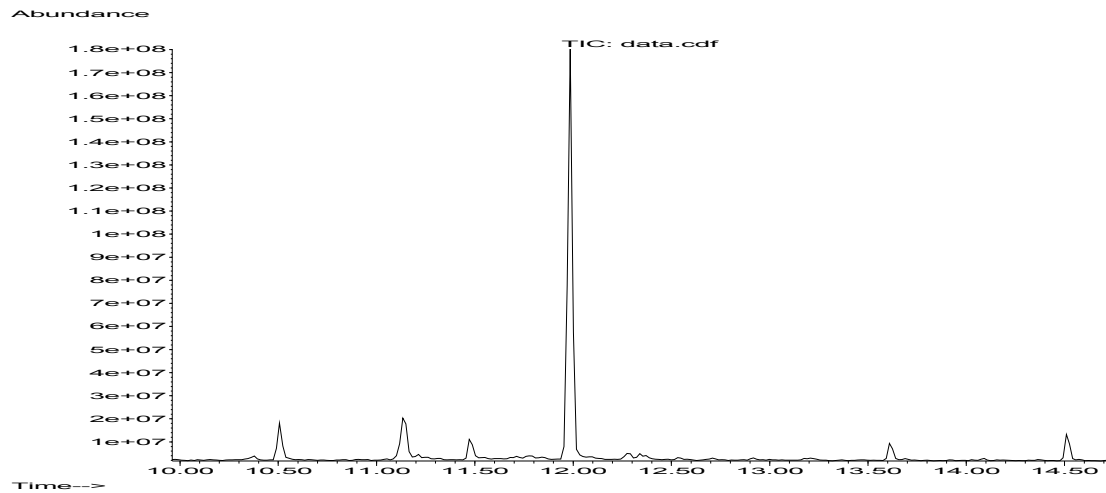
Graham Cooks carrying on environmental analysis using the Mini 11.5. Photo of Jon Dagleish



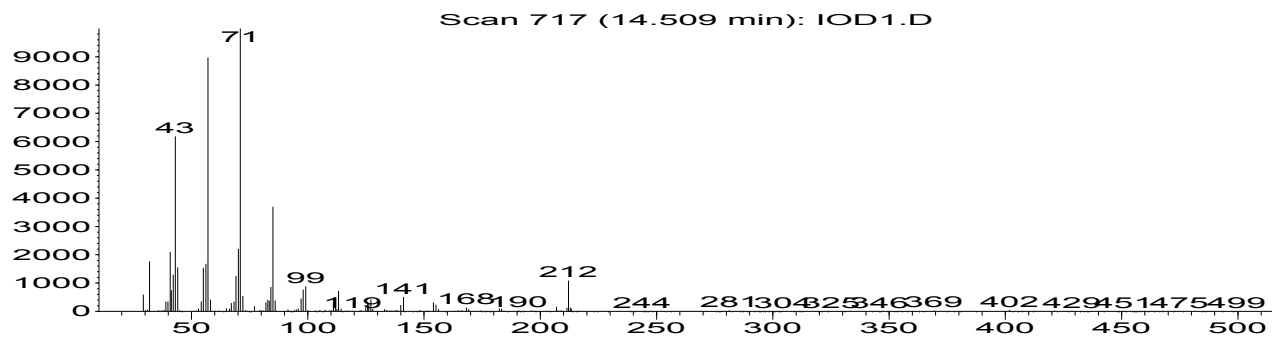
The spectrometer vessel on its transport through the village of Leopoldshafen to the research centre Karlsruhe - KATRIN project

# Pegasus III Diagram

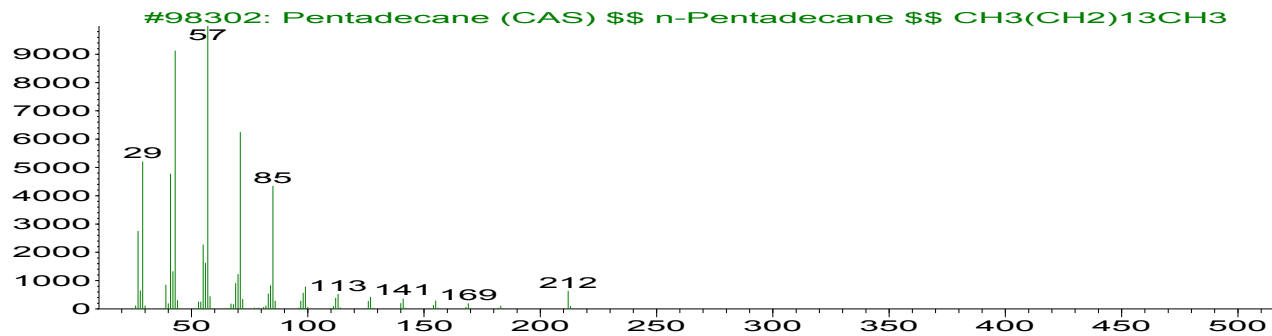




Abundance

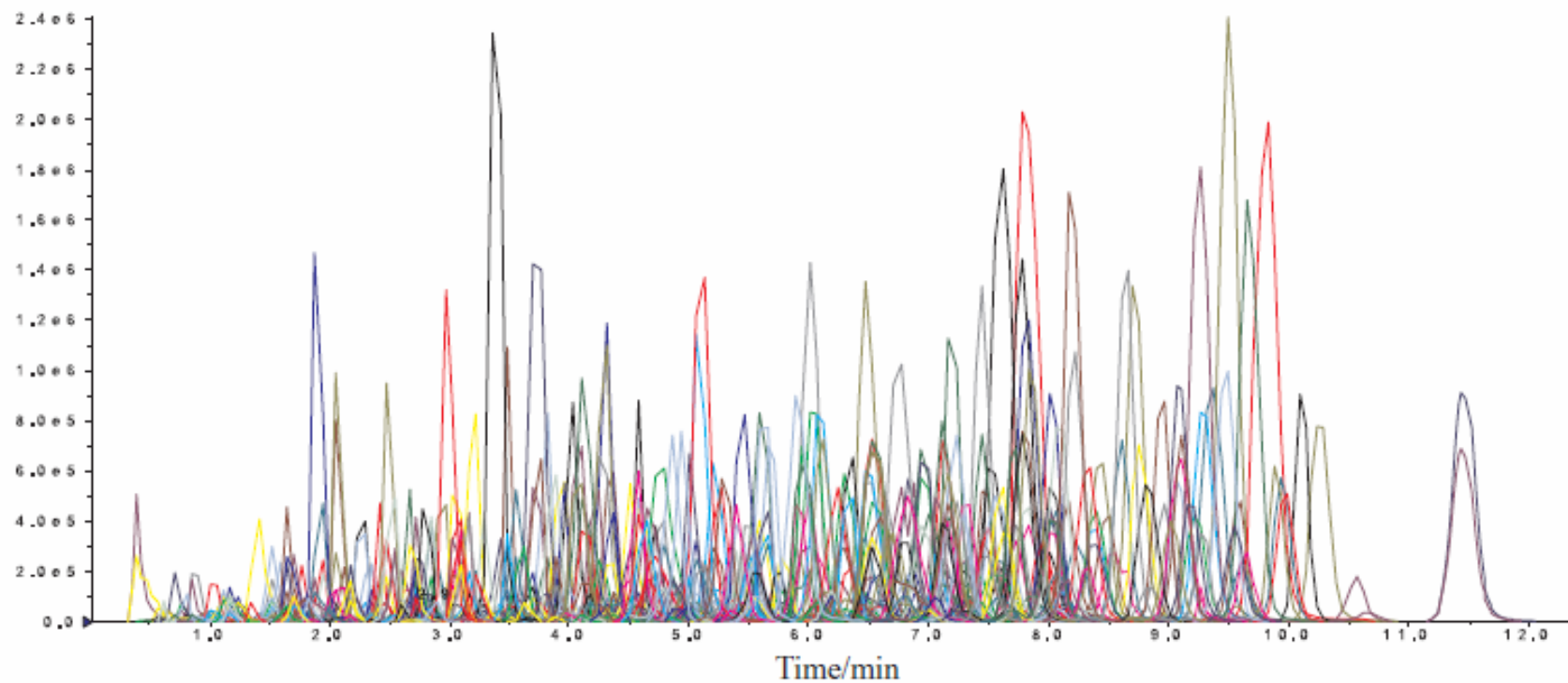


Abundance

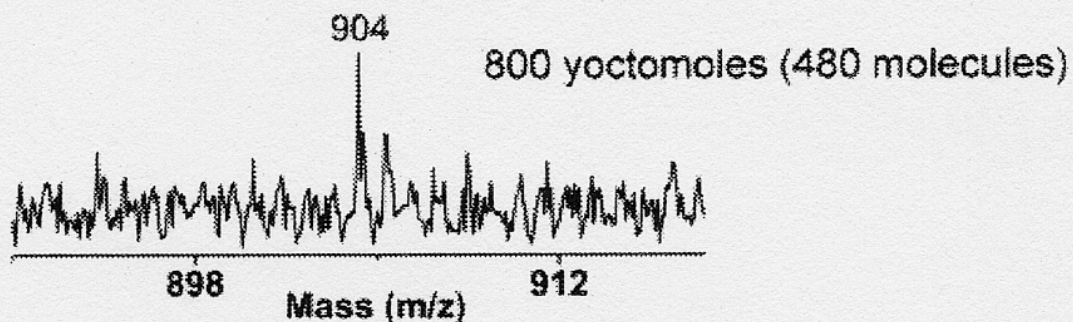
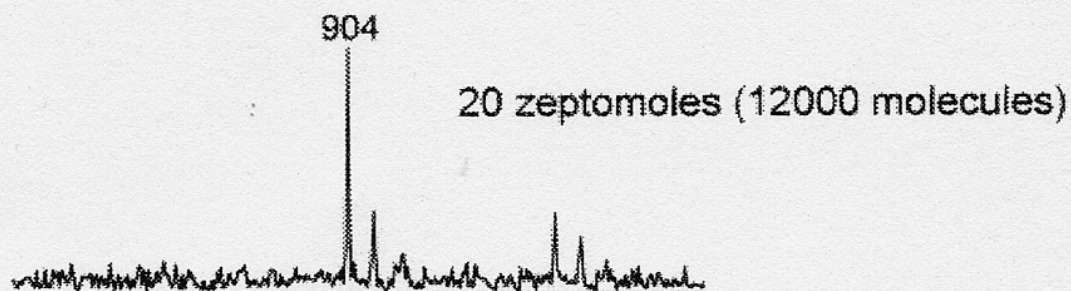
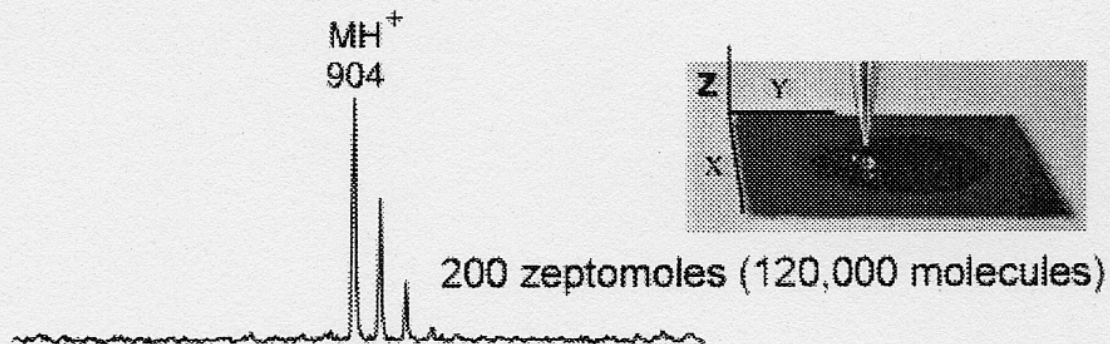
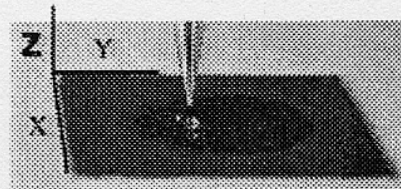




**Figure 2.10:** MRM analysis of 700 pesticides in one run. (Courtesy of AB Sciex.)



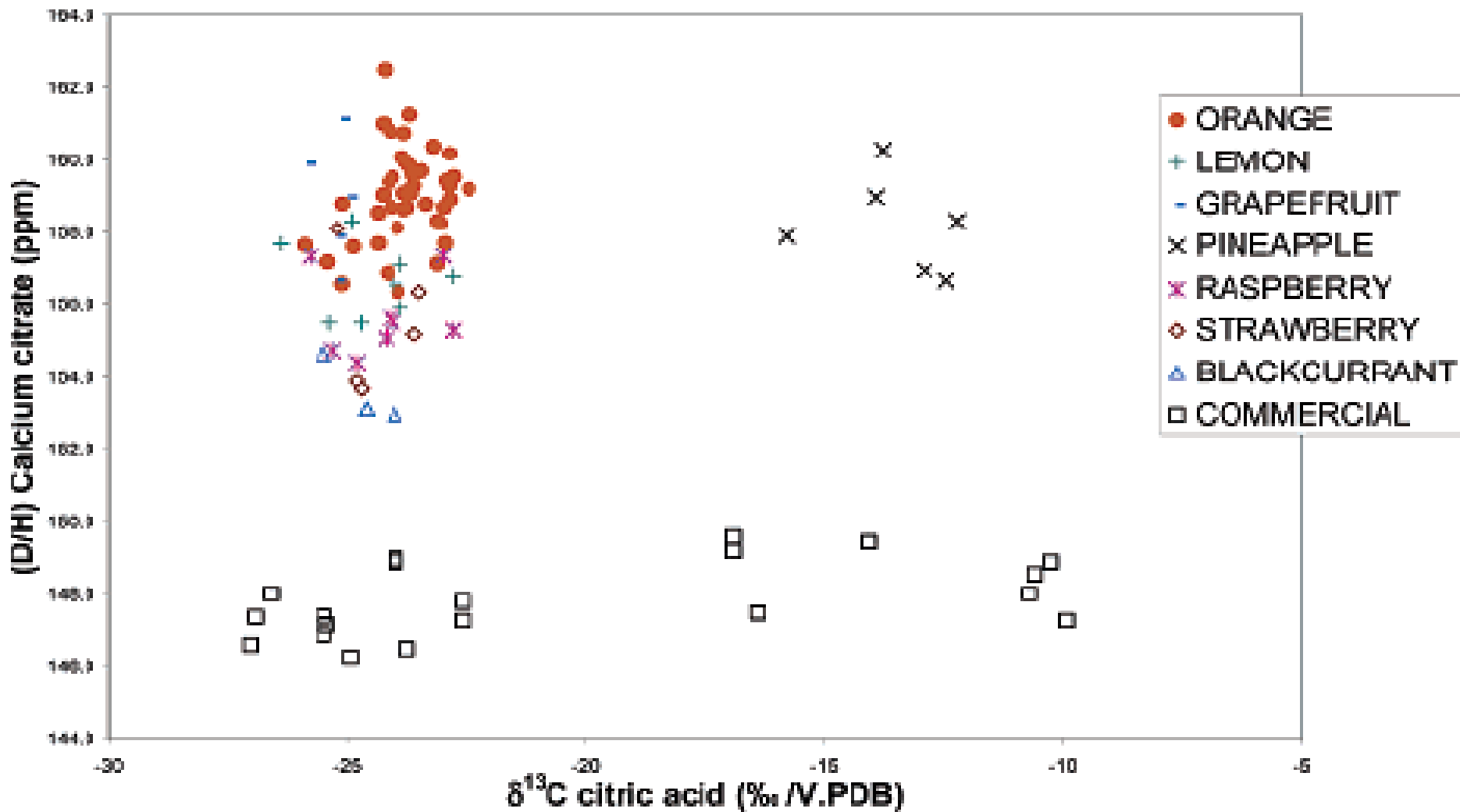
DIOS-MS on des-Arg<sup>9</sup>-Bradykinin



**Anal. Chem.**  
**76 (2004)**  
**4484 - 4489**

**Figure 2.** DIOS mass spectra obtained for 200 zmol, 20 zmol, and 800 ymol for des-Arg<sup>9</sup>-bradykinin using the perfluorophenyl silylated modified chip.

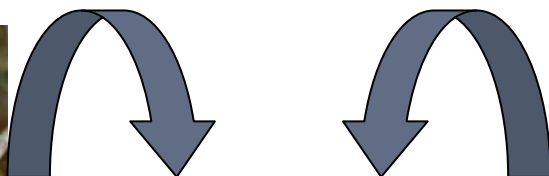
# Лимонная кислота – натуральная или нет?



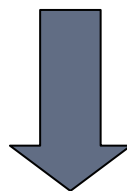
# Пробоотбор пептидов кожного секрета амфибий



*Rana arvalis*



*Rana ridibunda*



Электростимуляция

Многокомпонентная смесь пептидов

# Biological activity of amphibia's skin peptides

*Caerulein* pEQDY(SO<sub>3</sub>)TGWMDf-NH<sub>2</sub>

*(L.caerulea)* – muscle contractor/relaxant, analgesic 2000 times more active than morphine (nM) (*gall bladder operation*)

*Magainins 1, 2* (*Xenopus laevis*)

– wide-spectrum antibiotics, anticancer and antifungal peptides (μM)

*Caerins 1* (*Litoria*)

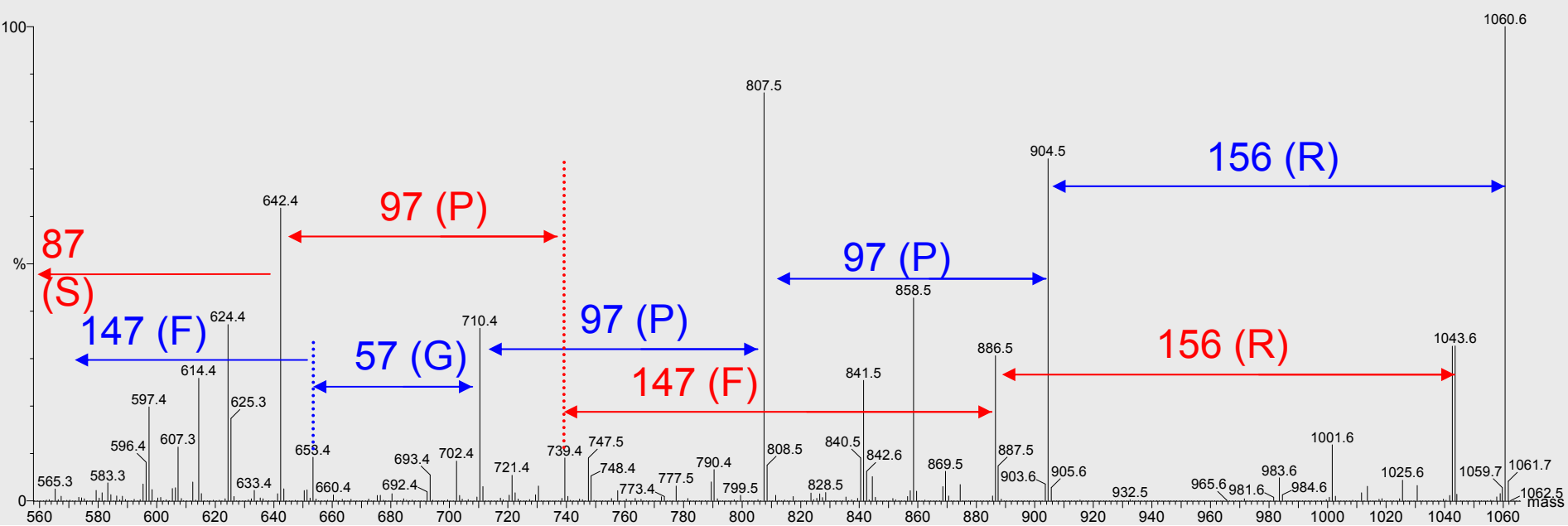
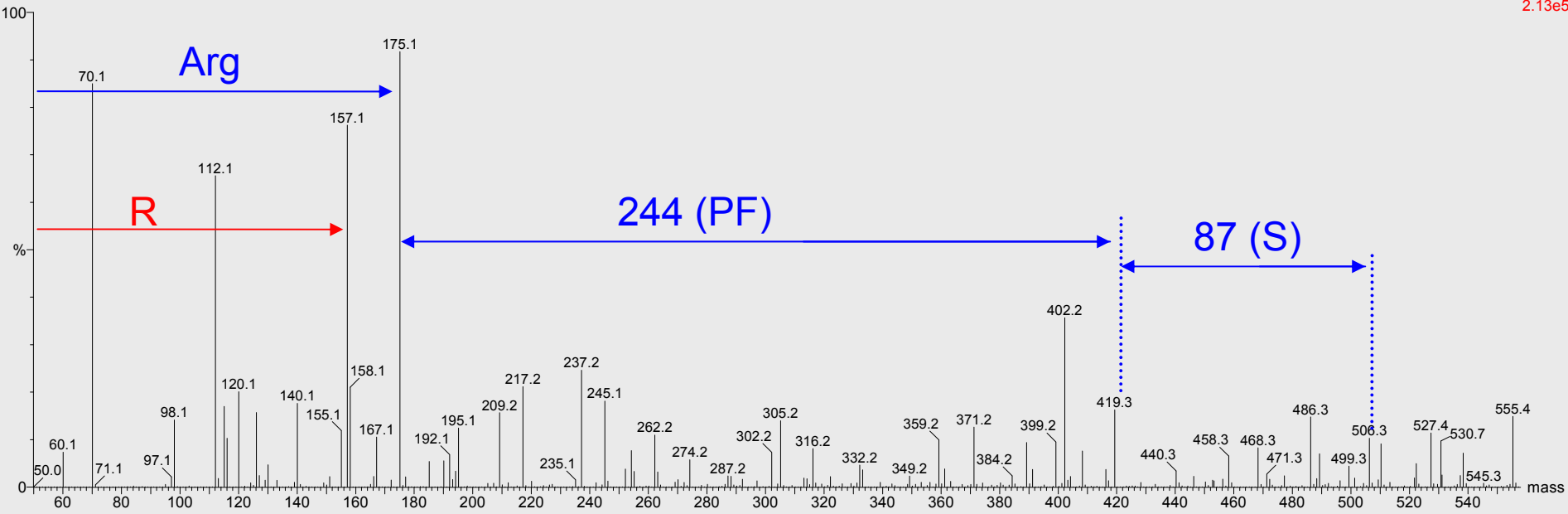
- anticancer activity (μM)

*Pseudin 2* (*Pseudis paradoxa*)

–stimulation of insulin production (nM)

**Potential drugs**

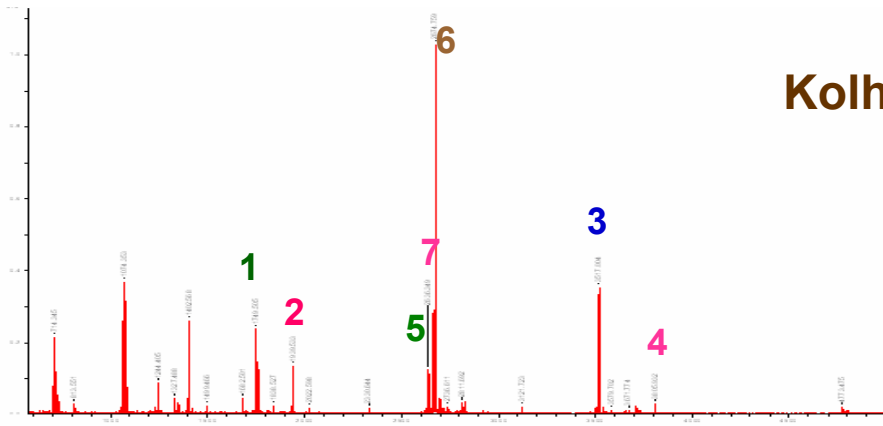
The first step to investigate the activity involves determination of primary structure of the peptides (SEQUENCING)



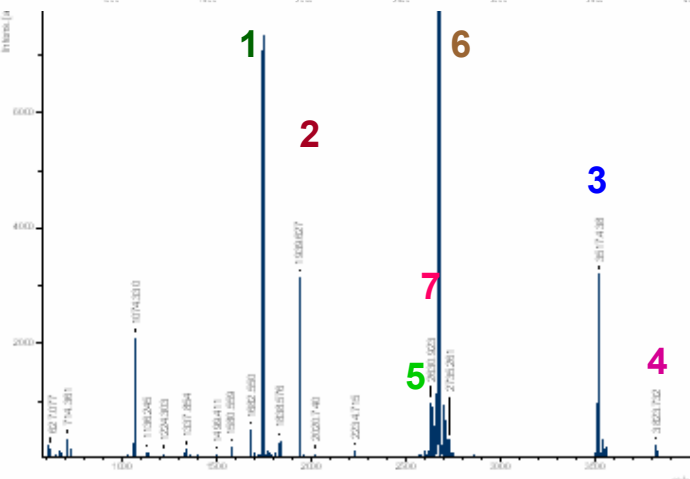
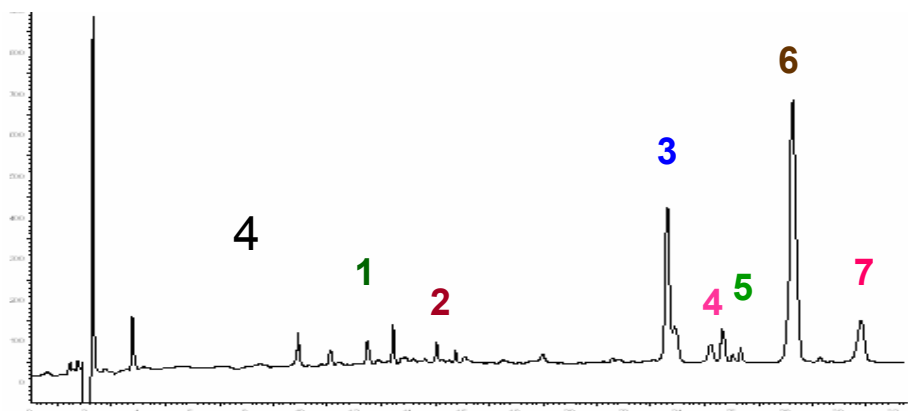
Series y: RPPGFS(PF)R-OH  
Series b: R(----)SPFR-OH

} RPPGFSPFR-OH - bradykinin

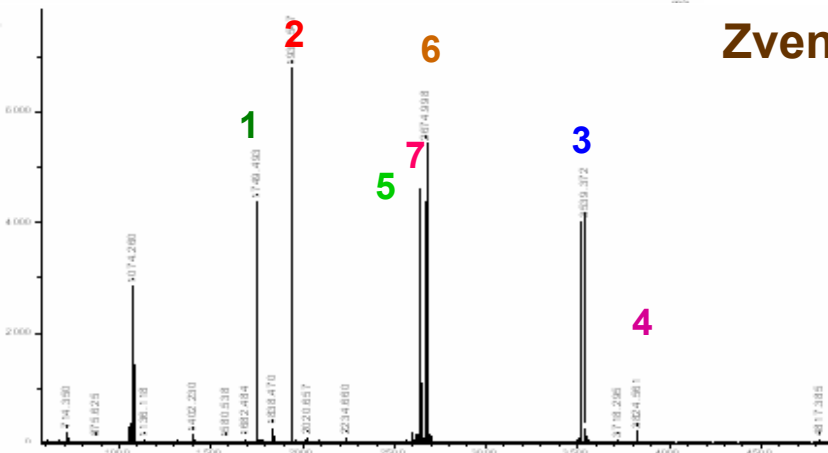
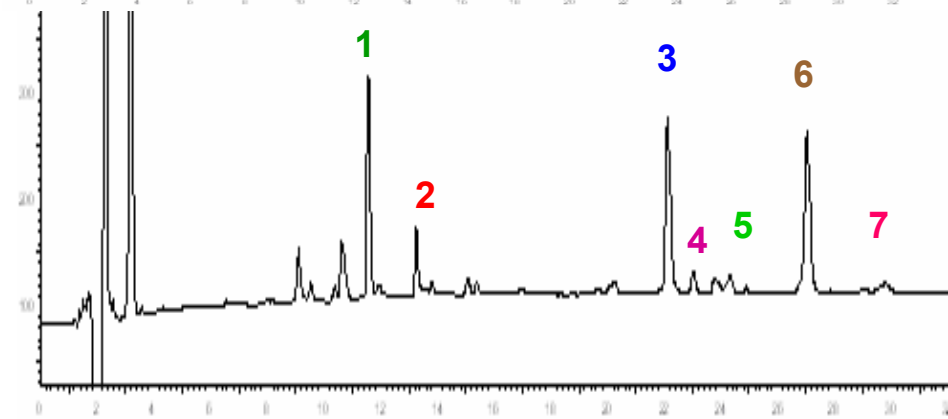
# MC Profiling: *Rana ridibunda*, different populations



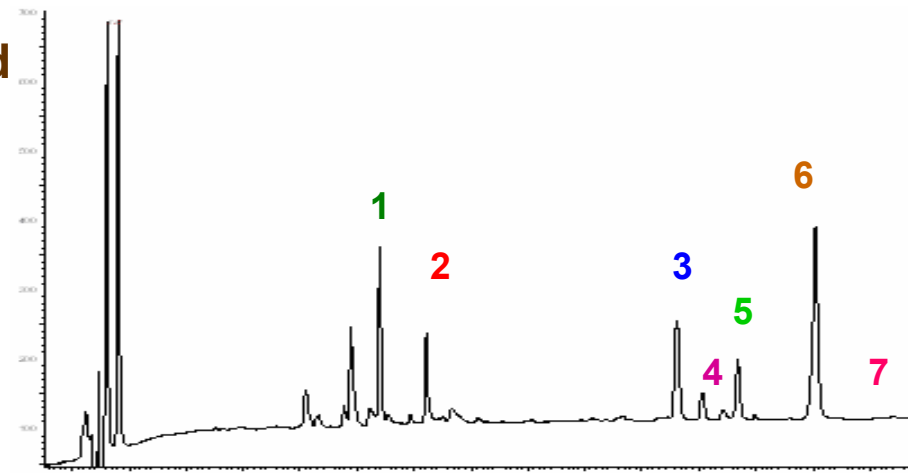
Kolhida



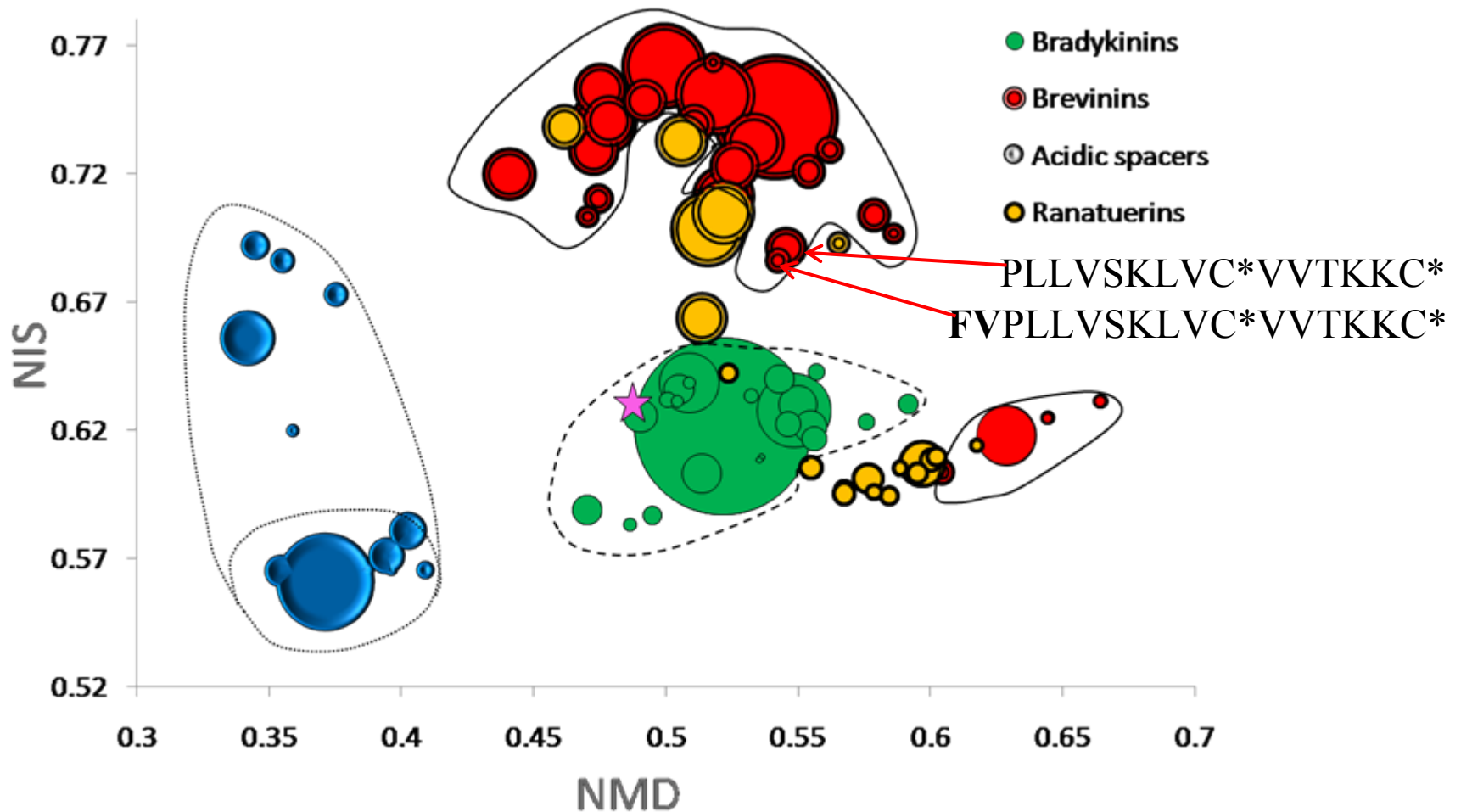
Kolomna



Zvenigorod

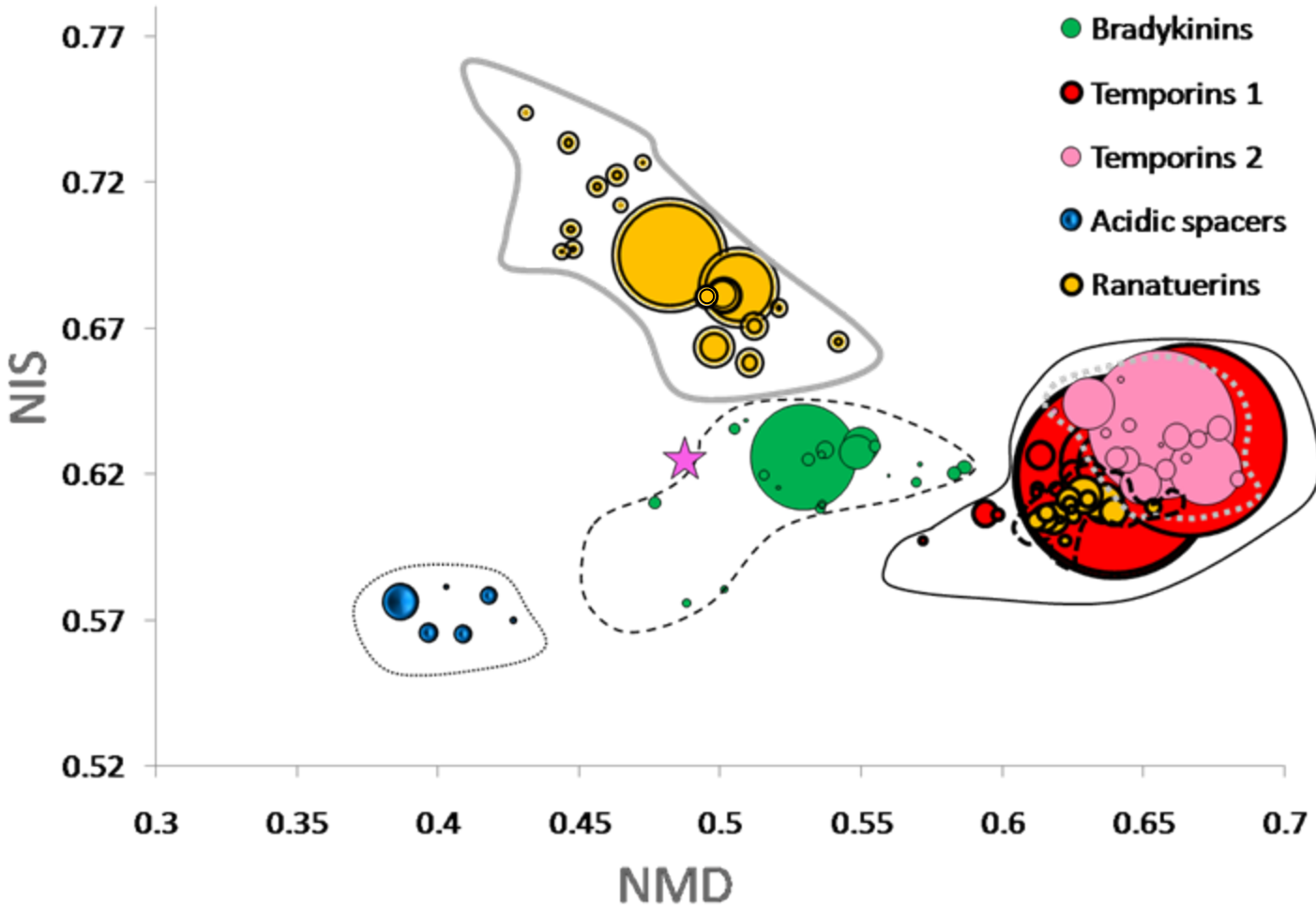


# *R. arvalis* 2D mass map

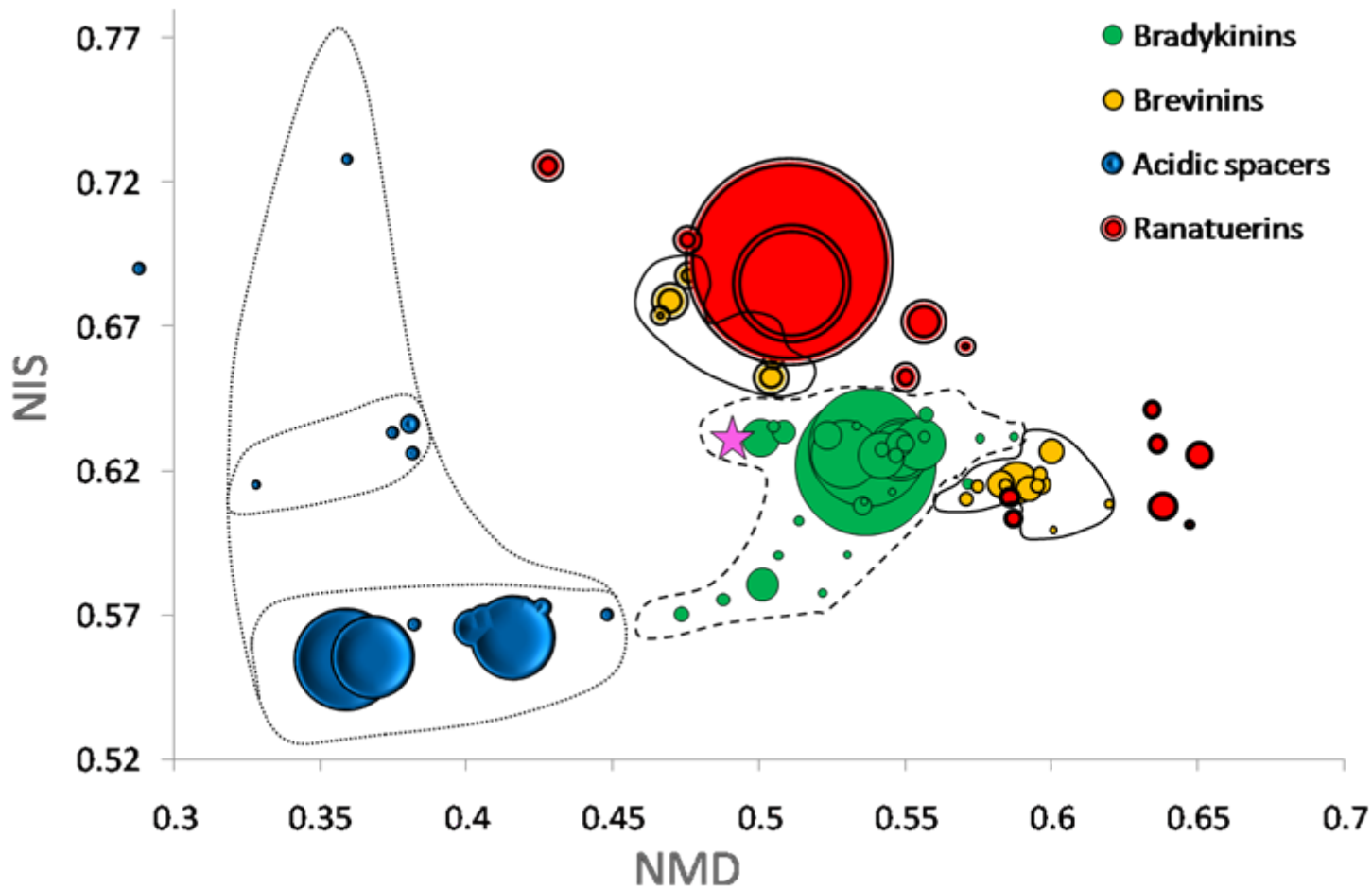


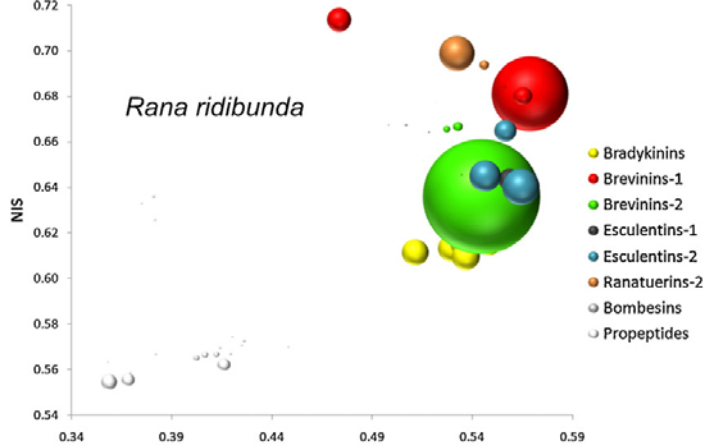


# *R. temporaria* 2D mass map

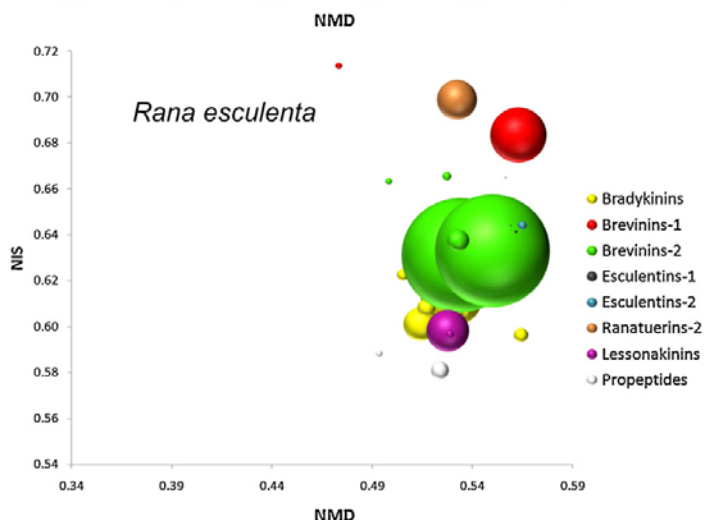
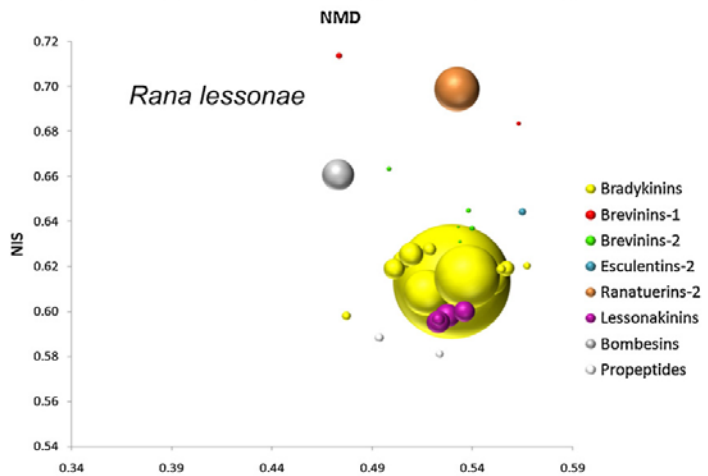


# *R. ridibunda* 2D mass map

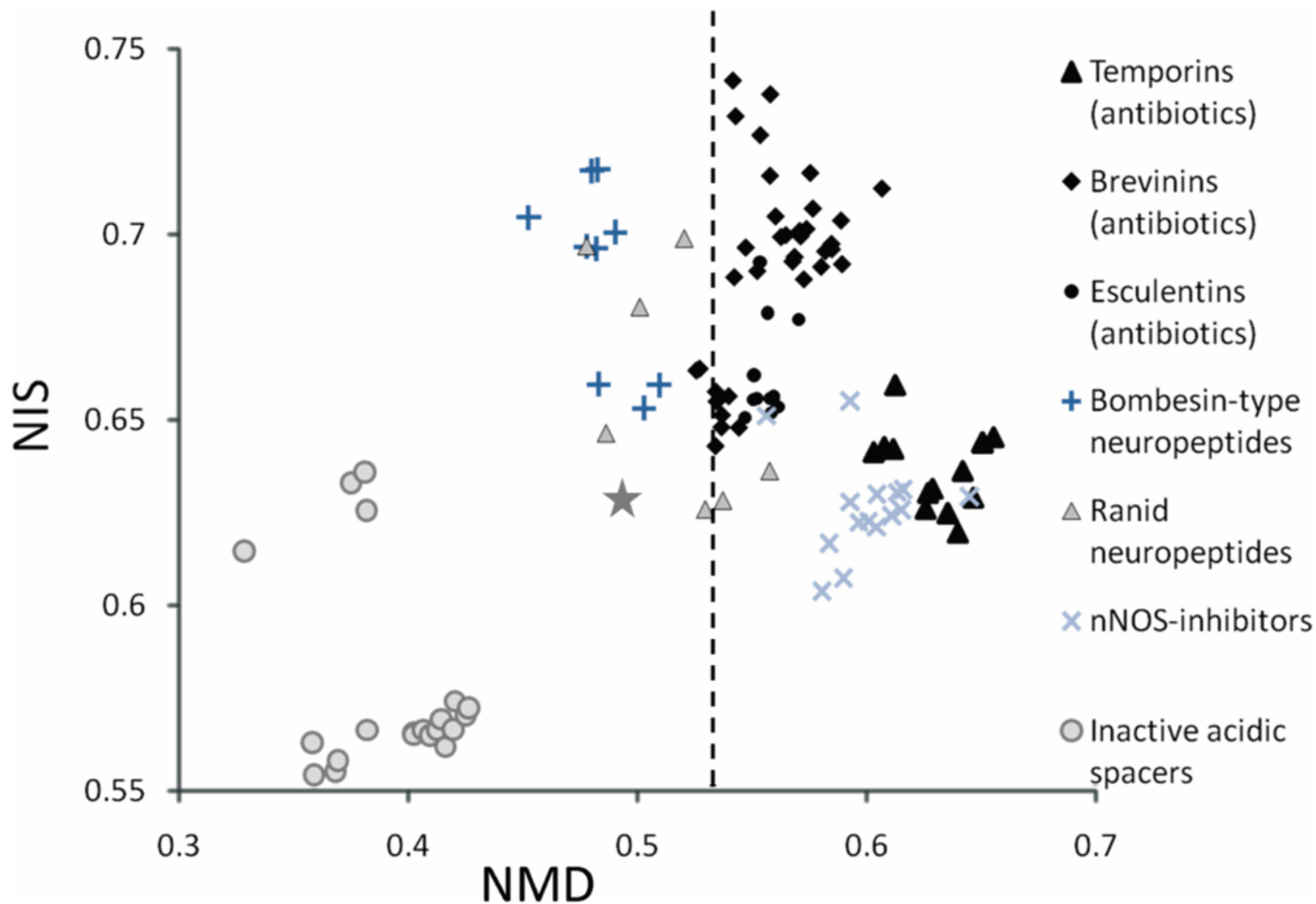




## Пептидомы трех родственных видов лягушек

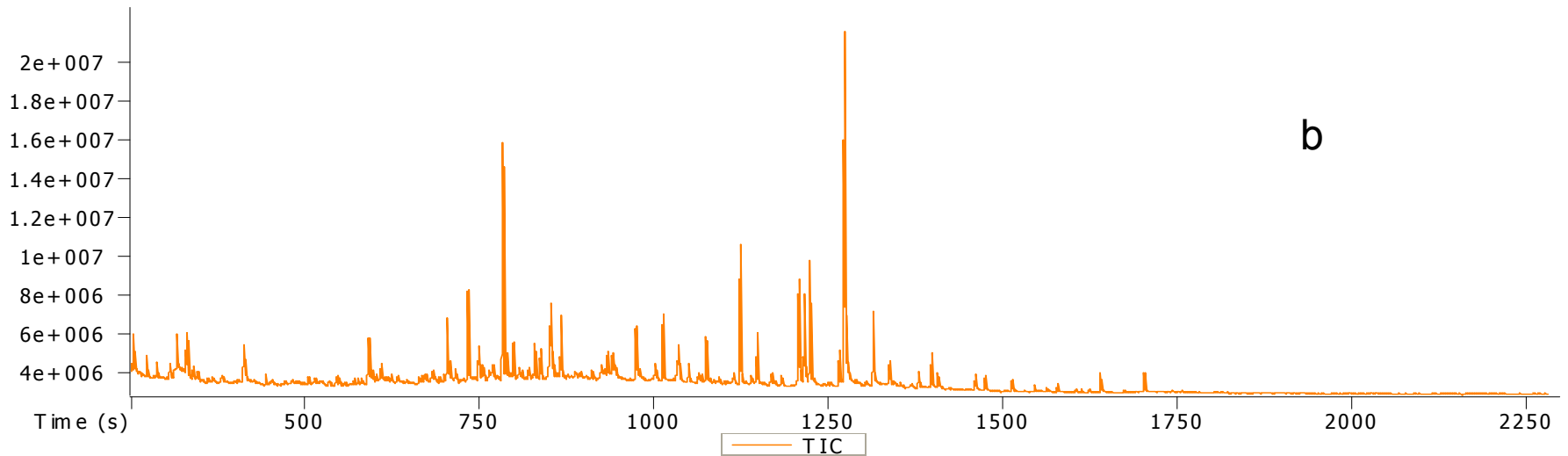
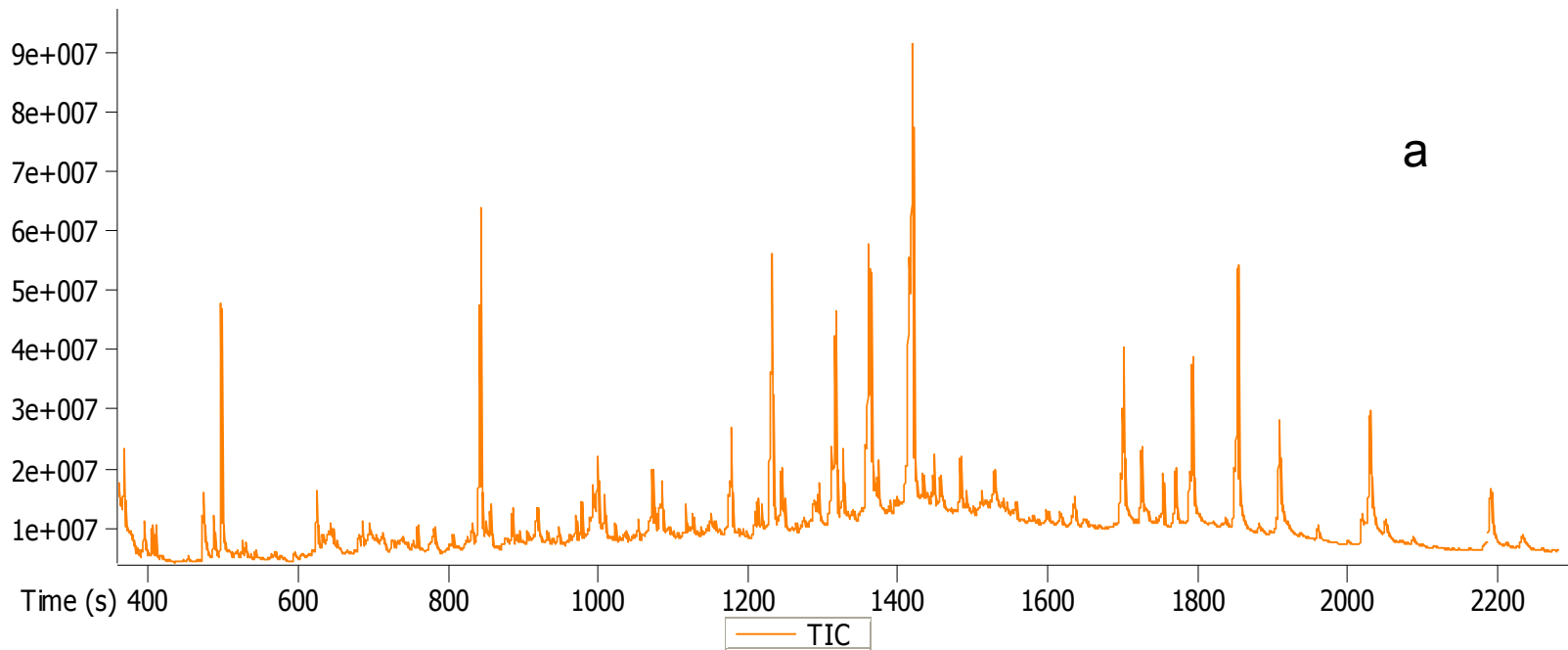


## 2D mass map of the known bioactive frog peptides

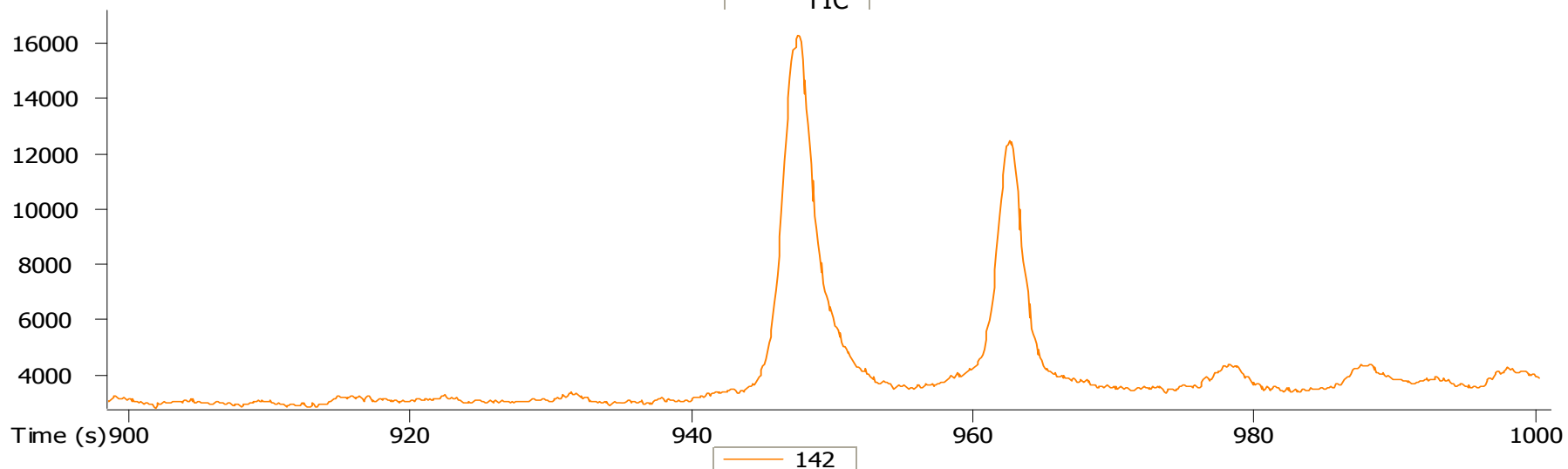
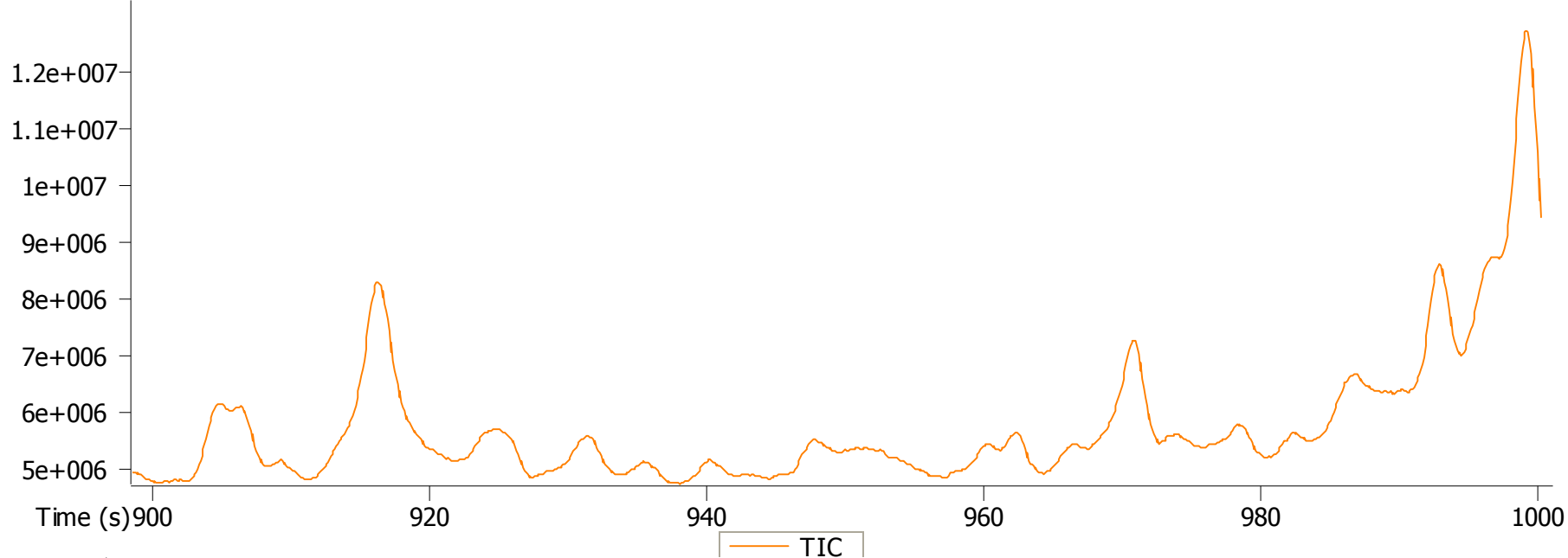


# Экологические тематики лаборатории

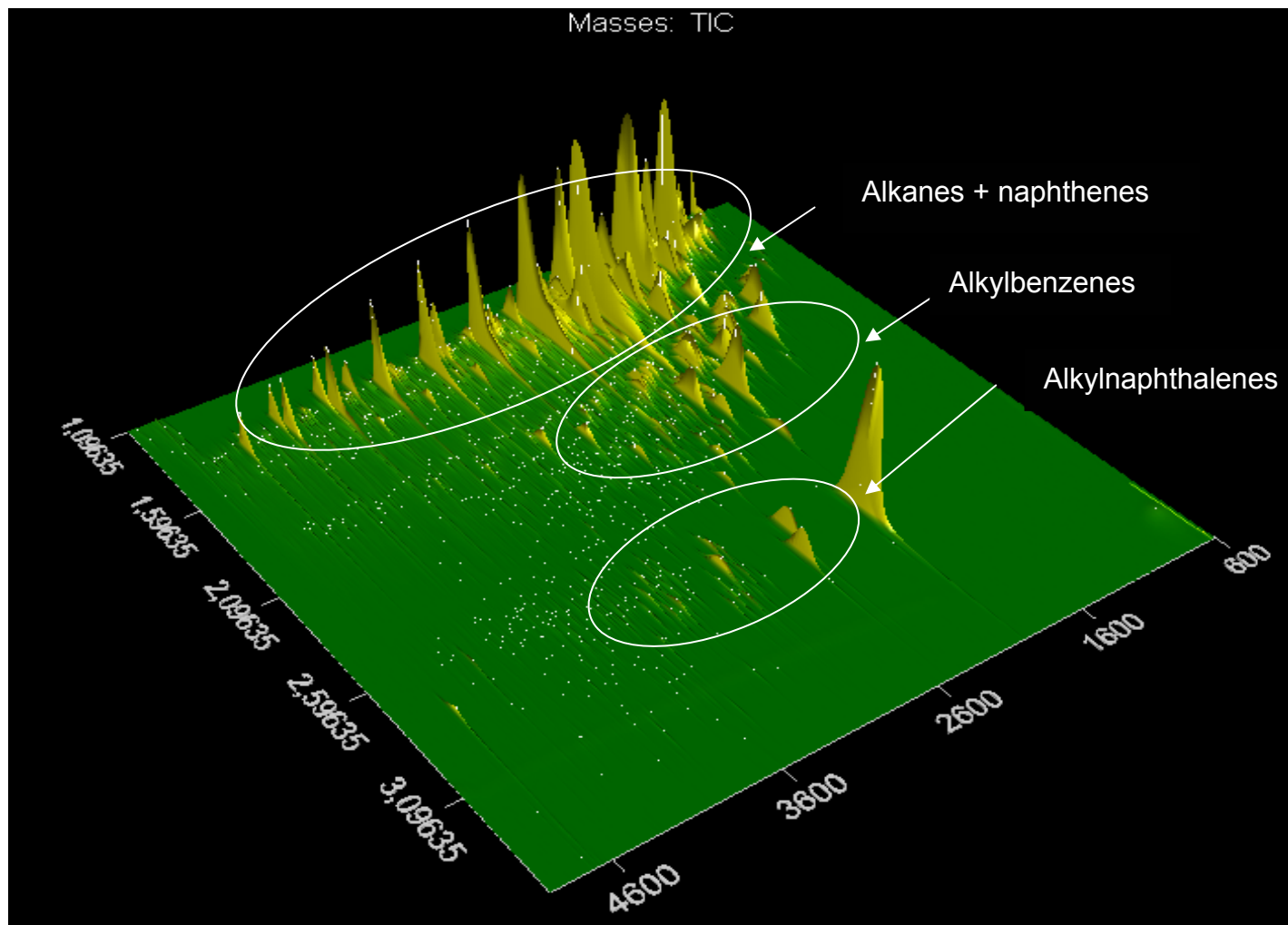
1. Изучение побочных продуктов дезинфекции воды
2. Создание списков приоритетных загрязняющих веществ для реки, завода, города, моря и т.д.
3. Аккумуляирование экотоксикантов по трофической цепи экосистемы Байкала
4. Экологическое картирование Северного Каспия
5. Почему умерли дельфины в дельфинарии?
6. Почему китайское лекарство не работает?
7. Почему чукчи не могут есть китов?
8. Почему происходят заморы рыб?
9. Из чего состоят звуковые валики XIX века?
10. Как детектировать соединение если его количество в пробе в миллионы раз меньше, чем сотен других?
11. Чем мы дышим?
12. Какие соединения выделяют детские игрушки?
13. Почему снег на юге Финляндии чище чем в Заполярных областях?
14. Что происходит в окружающей среде с УФ-протекторами



TIC chromatograms of 36 km (a) snow and fresh snow (b)

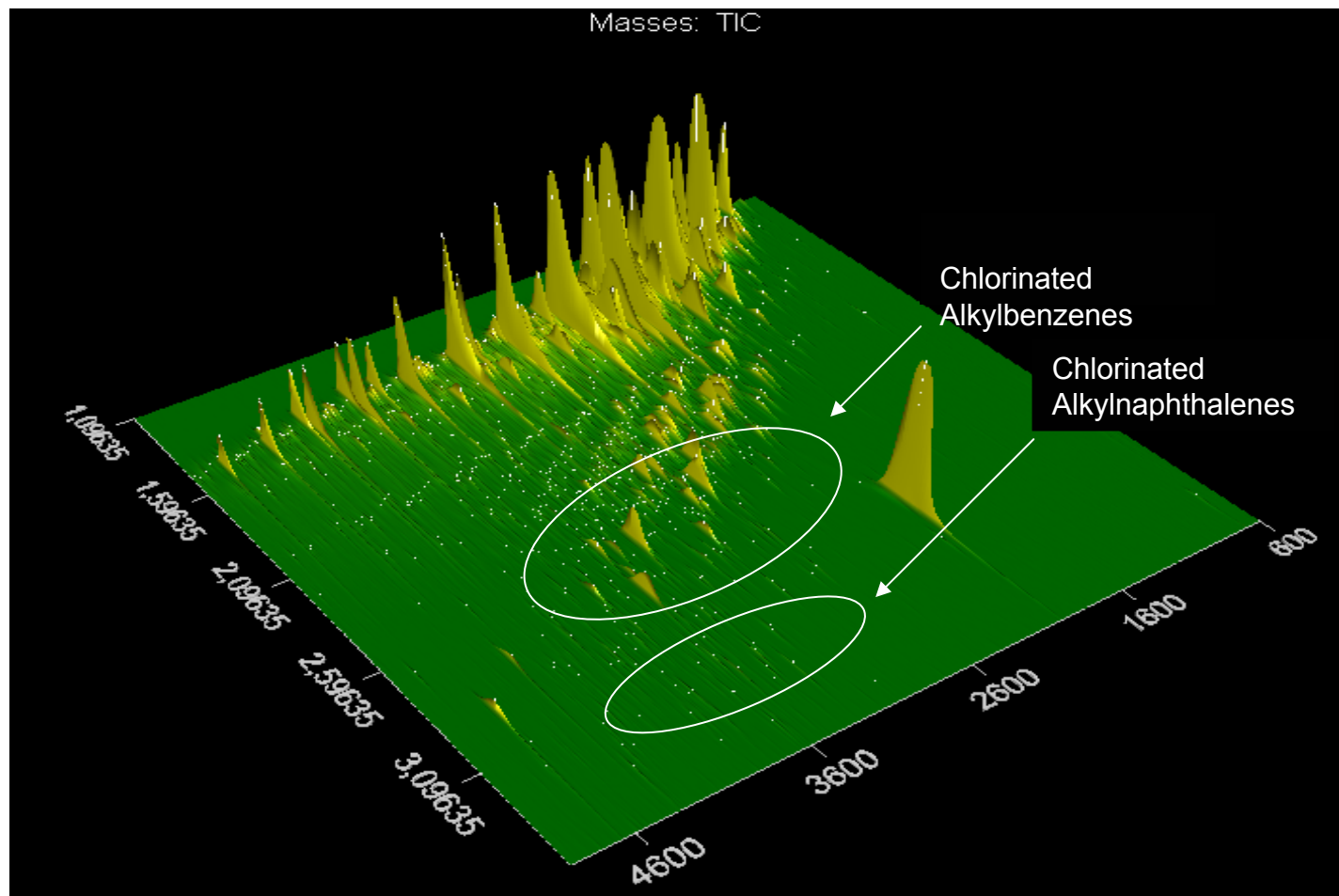


TIC and m/z 142 ion plots to determine methylnaphthalenes



**Three-dimensional chromatogram of the diesel oil sample**



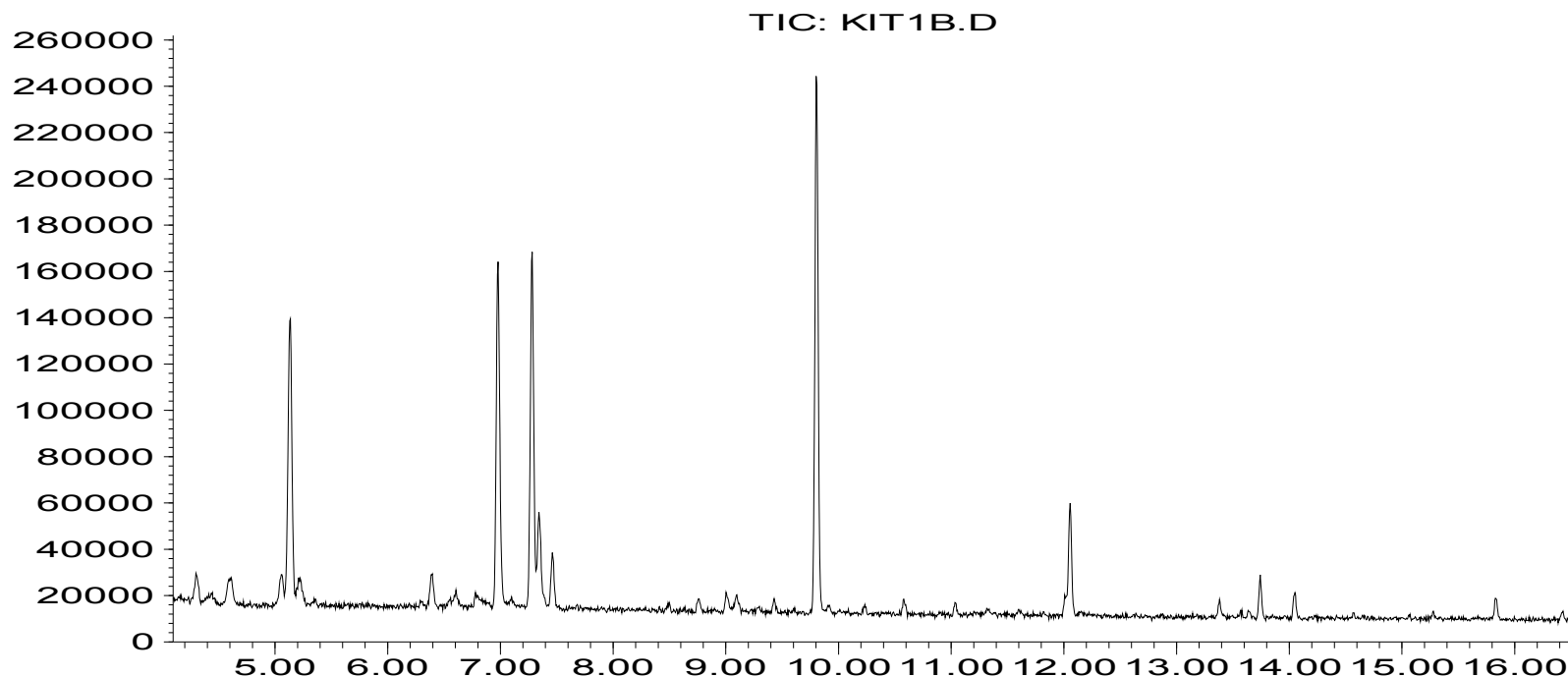


**Three-dimensional chromatogram of the diesel oil sample after its aquatic chlorination with molecular chlorine**



Chukotka. Whale hunting

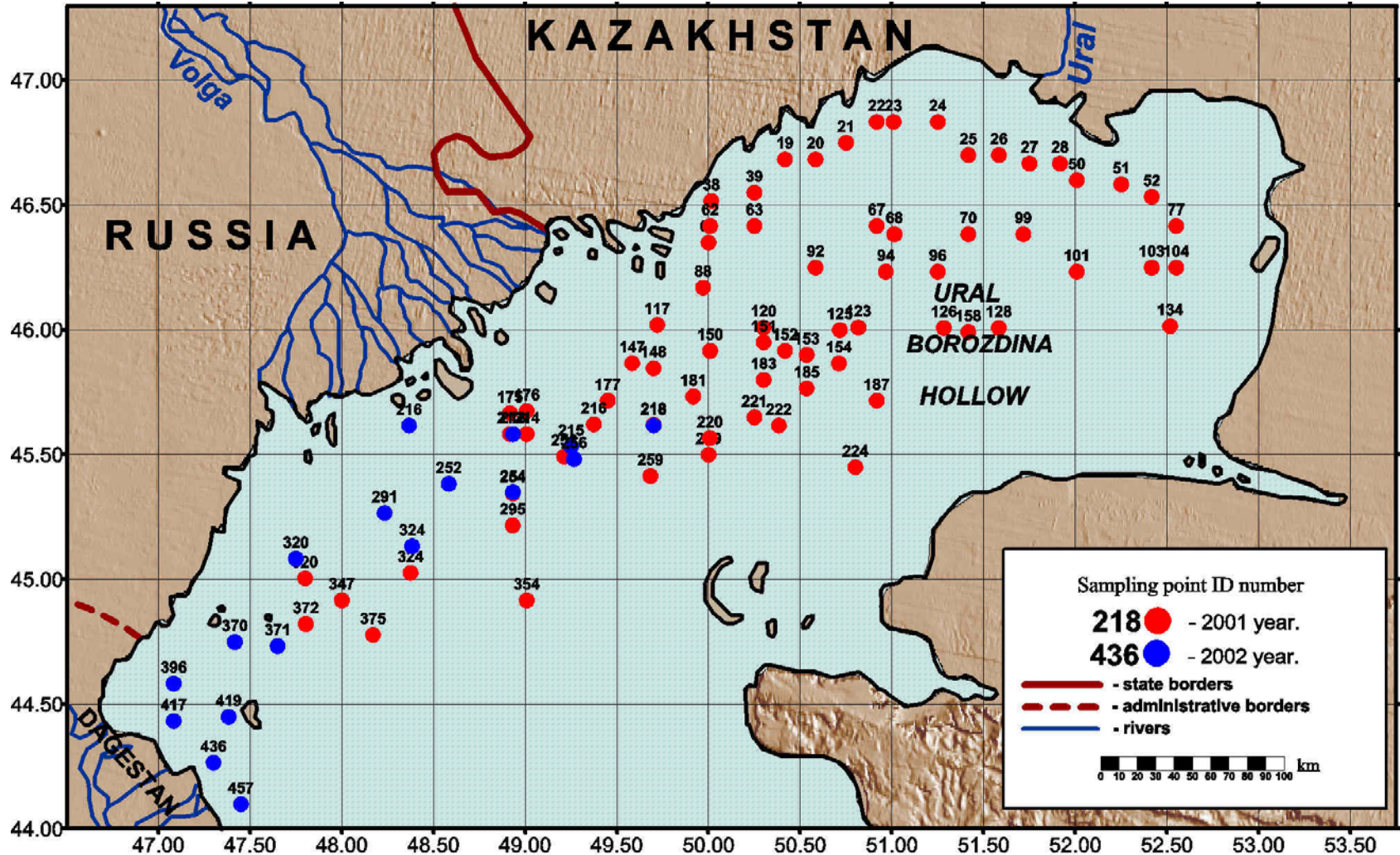
Abundance



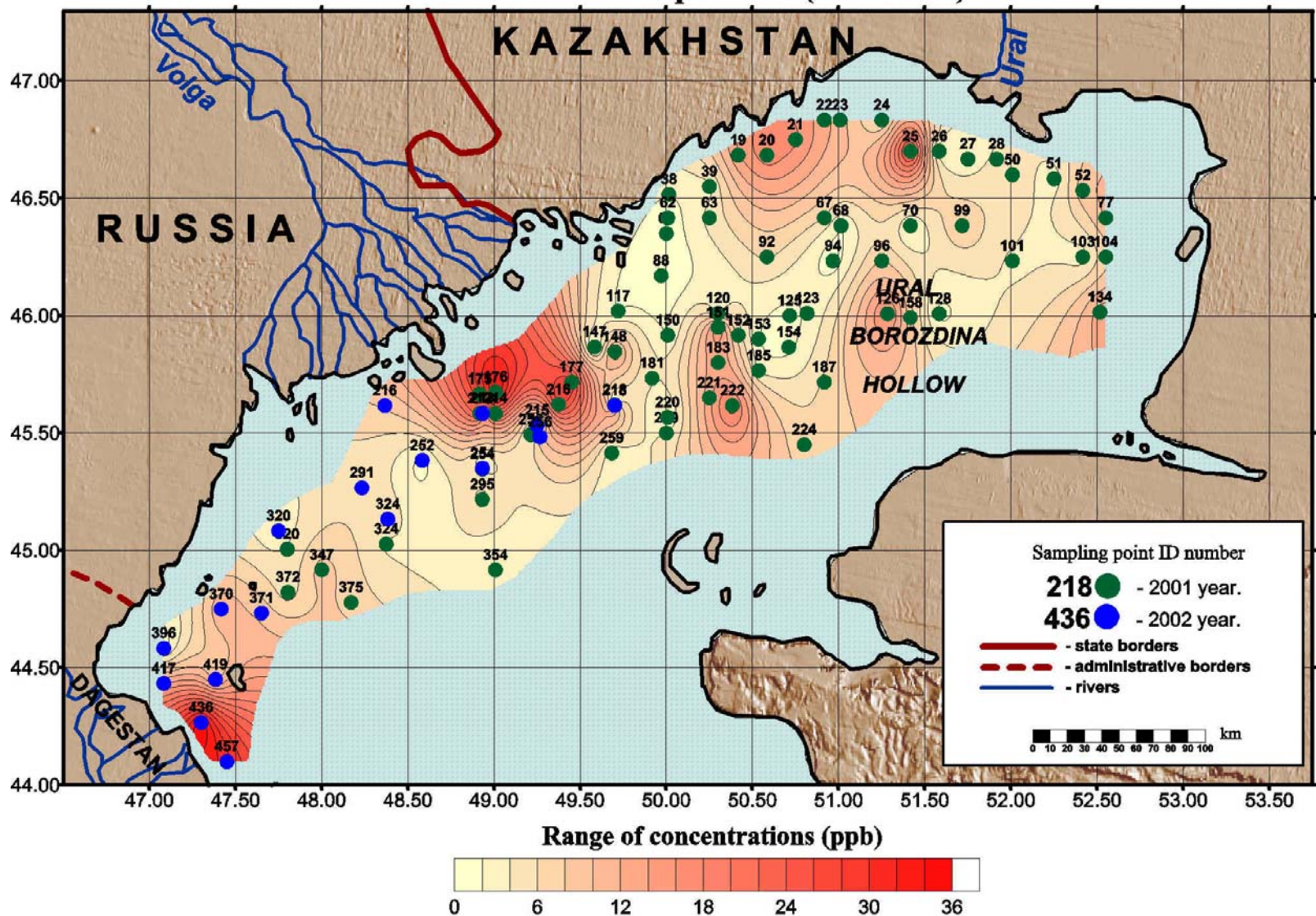
Time-->

TIC Chromatogram of the volatile compounds in the blubber of “stinky” gray whale. From the left: isobutanal, butanal, 2-methylbutanal, 3-methylbutanal, 2-ethylfuran, pentanal, pentan-2-one, isomeric branched hexanals (4), hexanal (base peak), isomeric branched octanals (3), octanal, alkylketones (3), nonanal

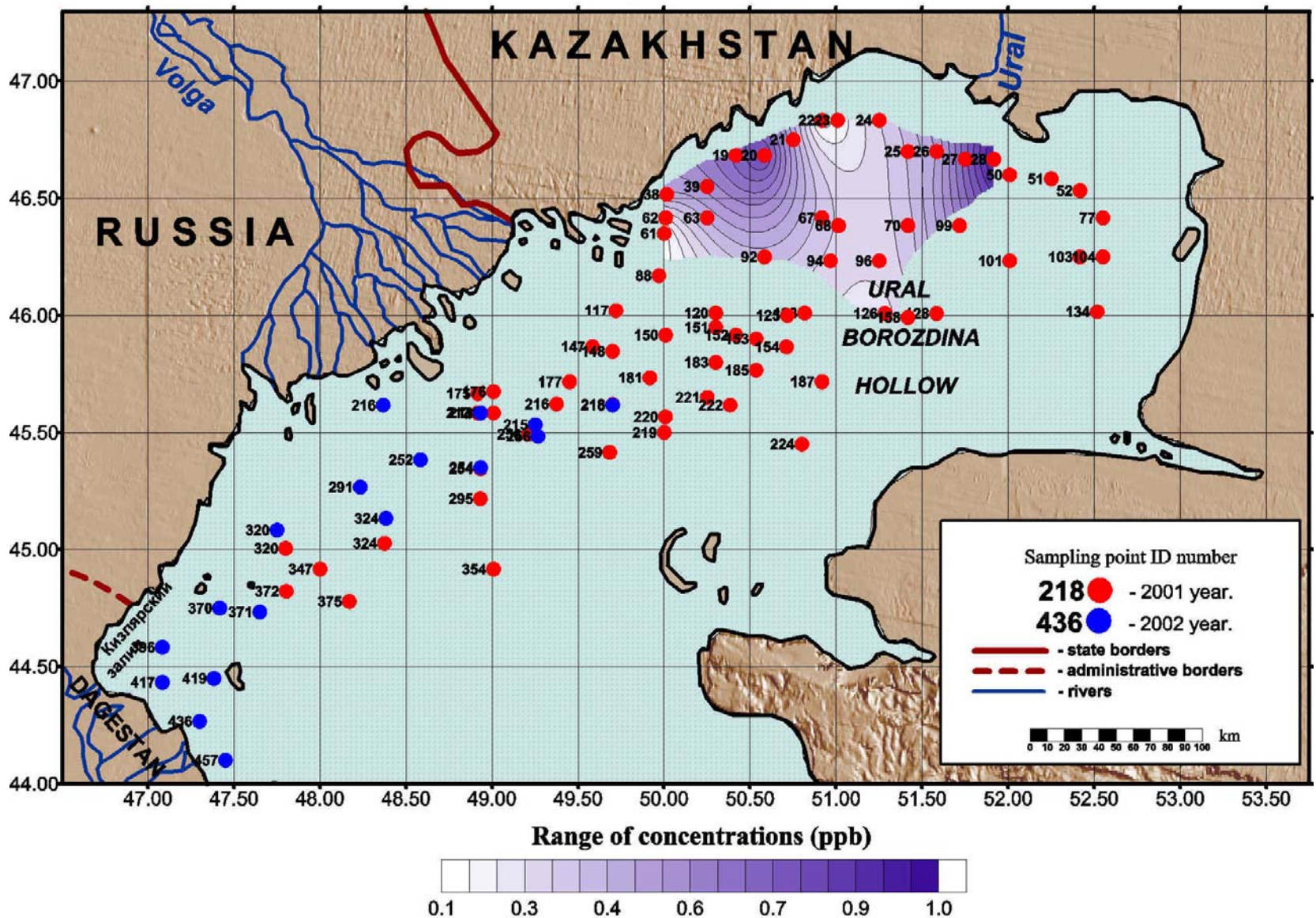
# The Map of the sampling sites in the North Caspian Sea (2001-2002)



The map of the levels of polycyclic aromatic hydrocarbons in sediments of the North Caspian Sea (2001-2002)



## The map of the levels of DDT and metabolites in sediments of the North Caspian Sea (2001-2002)



Thank you

