

## JMS-S3000“SpiralTOF”を用いたペプチドのMS/MS測定例

## 【はじめに】

ペプチドに対して、JMS-S3000 “SpiralTOF” の TOF-TOF モード測定を行ったところ、高エネルギー衝突誘起解離 (CID) に特有な a イオンシリーズなど、構造情報を反映したプロダクトイオンが観測された。

本 MSTips では、ACTH18-39 の測定及び解析結果について報告する。

## 【試料】

試料 : ACTH18-39

(Arg-Pro-Val-Lys-Val-Tyr-Pro-Asn-Gly-Ala-Glu-Asp-Glu-Ser-Ala-Glu-Ala-Phe-Pro-Leu-Glu-Phe)

マトリックス剤 :  $\alpha$ -Cyano-4-hydroxycinnamic acid (CHCA)

## 【測定と結果】

Fig.3に得られたプロダクトイオンスペクトルを示す。プリカーサーイオン  $m/z$  2456.2 ( $[M+H]^+$ ) から、種々のプロダクトイオンが観測されている。Fig.3中の各プロダクトイオンのラベルは全てBiemann標記による (Fig.1)。

ACTH18-39ではN末端側に塩基性アミノ酸であるArginineが存在しているため、Biemann標記におけるN末端側のフラグメントイオンに相当するaイオン、bイオン及びdイオンシリーズが主に観測されている。高エネルギーCIDに特有のaイオンシリーズは、a2~a21まで観測された。さらにaイオンが開裂することで生じるdイオンもまた、複数観測された。さらに  $m/z$  100付近では、高エネルギーCIDに特有のImmonium ion (Fig.2) も観測された。

JMS-S3000 “SpiralTOF”のTOF-TOFモードは、①高エネルギーCID、②高いプリカーサーイオン選択能、③扇形電場によるMALDI-TOF特有のポストソースディケイ由来のイオンを排除、という3つの特長を有している。有機化合物の定性分析においては、①の特長から構造に関する多くの情報を得ることが可能であり、②及び③の特長から、得られるプロダクトイオンスペクトルは解析が容易なシンプルなものとなる。以上からJMS-S3000 “SpiralTOF” は、有機化合物の構造解析に対して極めて有効なツールと成り得る。

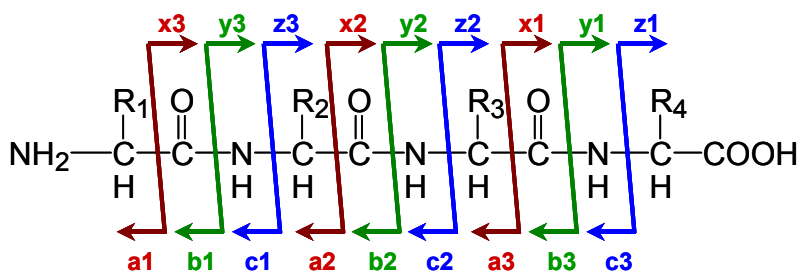


Fig.1 Fragment ion series.

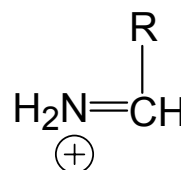


Fig.2 Immonium ion.

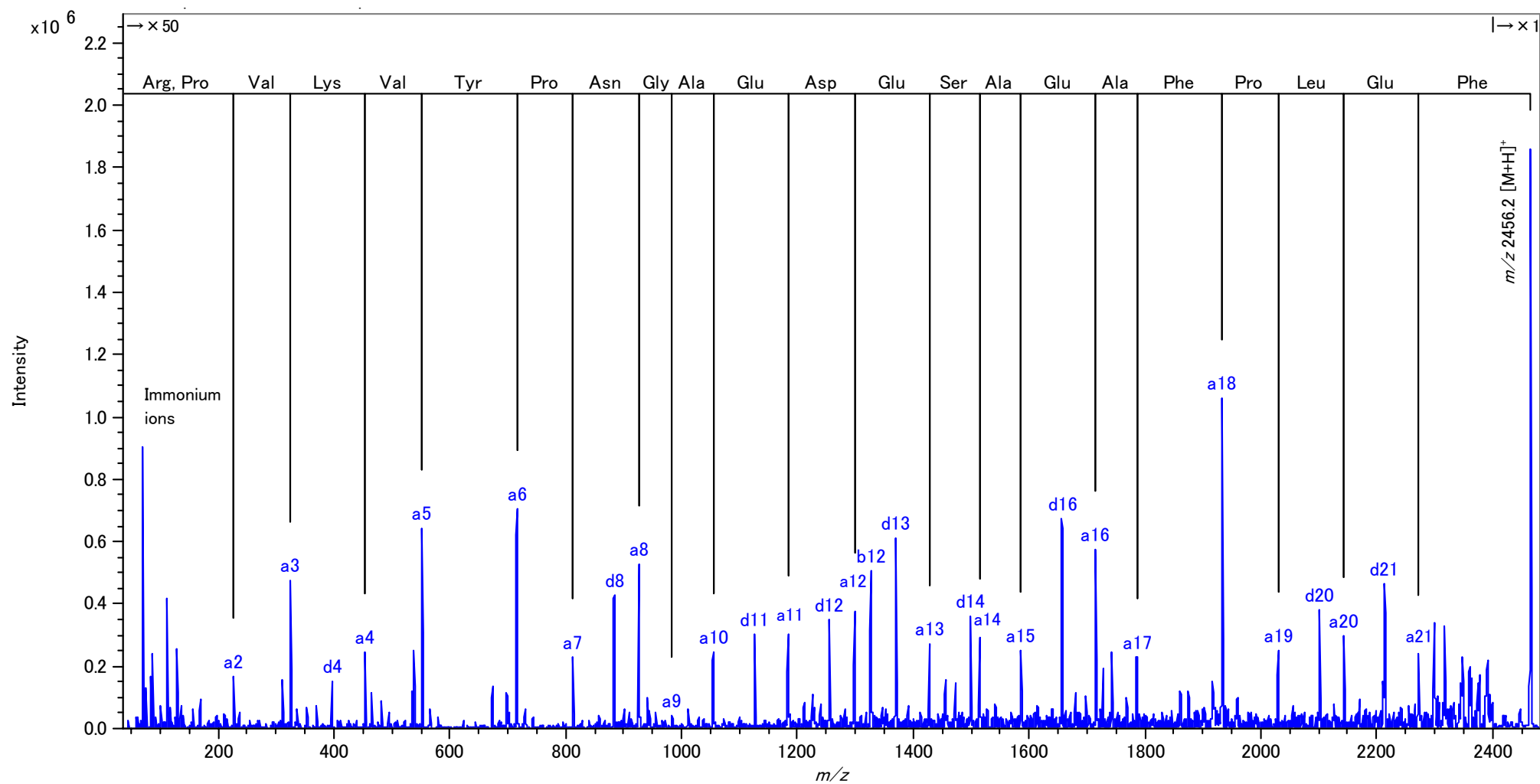


Fig.3 Product ion spectrum of ACTH18-39 ( $m/z$  2456.2,  $[M+H]^+$ ).

ACTH18-39: Arg-Pro-Val-Lys-Val-Tyr-Pro-Asn-Gly-Ala-Glu-Asp-Glu-Ser-Ala-Glu-Ala-Phe-Pro-Leu-Glu-Phe