

JMS-S3000 Application Data

## JMS-S3000“SpiralTOF” TOF-TOF オプションを用いた 天然有機化合物の測定例

SAAF (sperm activating and attracting factor) は、ホヤの精子活性化誘引物質であり、これまでに高エネルギーCIDによる構造解析が行われている<sup>[1]</sup>。そこで、今回はカタユウレイボヤの SAAF を JMS-S3000 SpiralTOF の TOF-TOF オプションを用いて測定し、プロダクトイオンスペクトルを得た。

得られたマススペクトルを Fig. 1 に示す (外標として、PEG sulfate 600 を使用した)。 $m/z$  515.301 に  $[M-2Na-SO_3+H]^+$  のモノアイソトピックイオン (計算値 515.305) と思われるピークが観測されており、それ以外にも  $m/z$  595.255 に  $[M-2Na+H]^+$  (計算値 595.261),  $m/z$  617.237 に  $[M-Na]^+$  (計算値 617.242) に SAAF 由来のピークが観測されている。この中から、既に報告のある  $[M-2Na-SO_3+H]^+$  についてプロダクトイオンスペクトルの測定を行った<sup>[1]</sup>。プロダクトイオンスペクトルを Fig. 2 に示す。末端にある硫酸エステルに負のチャージが固定されるためにチャージリモートフラグメンテーション (CRF) が起こり、Fig. 3 で示しているように SAAF の構造を反映したピークが得られている。

以上のように、TOF-TOF オプションを用いた高エネルギーCID測定を行うことで、CRF 由来のピークが明確に観測され、天然有機化合物などの複雑な構造を持つ試料でも解析を行うことが可能となる。

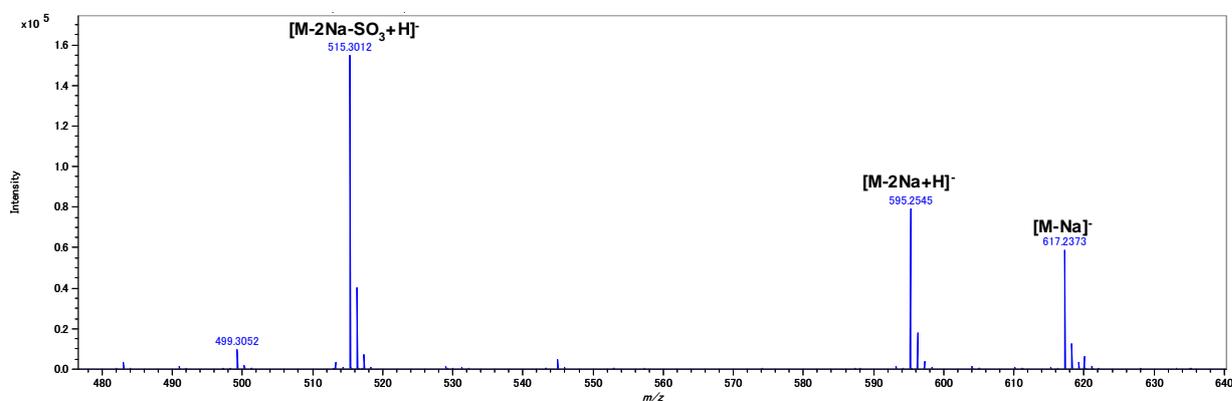


Fig.1 Mass spectrum of SAAF.

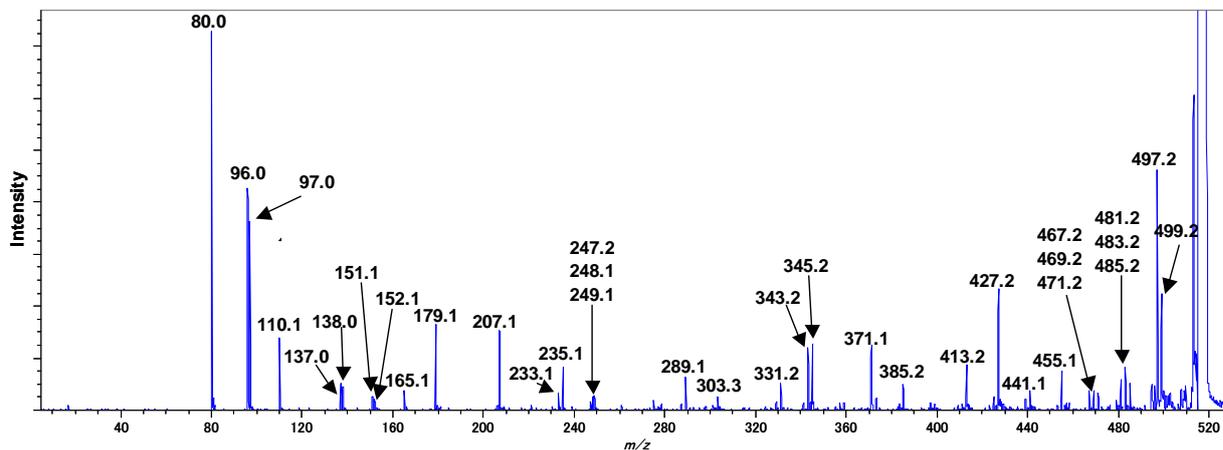


Fig.2 Product ion spectrum of  $[M-2Na-SO_3+H]^+$

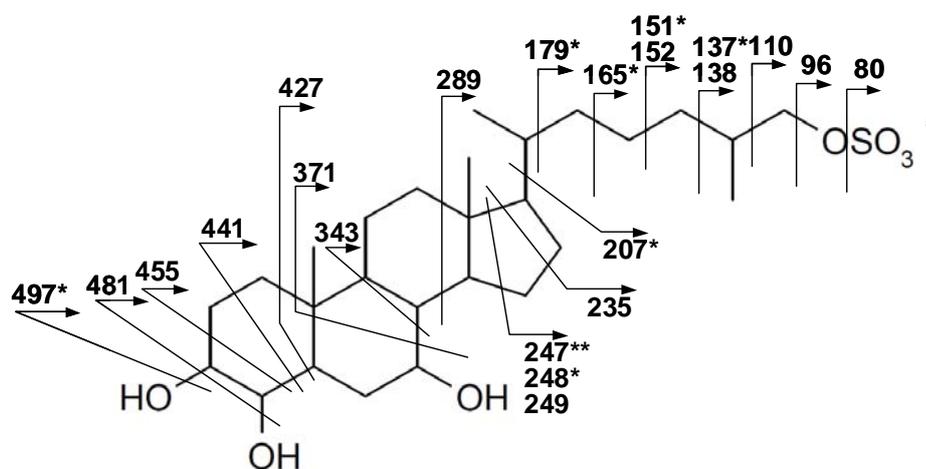


Fig.3 Structure of SAAF and fragmentation pattern (Asterisks show dehydrated ions.)

[1] M. Yoshida, M. Murata, K. Inaba, and M. Morisawa, Proceeding of the National Academy of Sciences of the United States of America 99 (2002) 14831

【謝辞】

本分析は、大阪大学大学院理学研究科物理学専攻 質量分析グループとの共同研究の成果です。  
SAAF の測定に際し、試料のご提供をいただきました大阪大学大学院理学研究科化学専攻  
生体分子科学研究室 村田 道雄様に深謝いたします。