

## ユビキチンのプロトン移動反応の OPIG-DC 依存性

(横浜市立生命ナノ<sup>1</sup>) ○森下 樹里<sup>1</sup>・金森 玲子<sup>1</sup>・北村 佐樹<sup>1</sup>・井山 貴暎<sup>1</sup>・角田 渉<sup>1</sup>・米林 優人<sup>1</sup>・太田 寛人<sup>1</sup>・田子 智郁<sup>1</sup>・吉田 智哉<sup>1</sup>・野々瀬 真司<sup>1</sup>

OPIG-DC dependence of proton transfer reaction of Ubiquitin (<sup>1</sup>*Graduate School of Nanobioscience, Yokohama City University*) ○Julie Morishita,<sup>1</sup> Satoko Kanamori,<sup>1</sup> Saki Kitamura,<sup>1</sup> Takaaki Iyama,<sup>1</sup> Wataru Kadota,<sup>1</sup> Yuto Yonebayashi,<sup>1</sup> Hiroto Ota,<sup>1</sup> Tago Satofumi,<sup>1</sup> Tomoya Yoshida,<sup>1</sup> Shinji Nonose<sup>1</sup>

Proteins existing in the living body have different functions and structures than the original proteins. This is due to the interaction between proteins and water molecules existing around biomolecules. The present research aims to study the three-dimensional structure of biomolecular ions in intermolecular and intramolecular interactions and reactions with target molecules. Proton transfer reactions of ubiquitin, a biomolecule, with 1-hexylamine, a target molecule, were used in this experiment. Ubiquitin, which exists in eukaryotic cells, is a protein consisting of 76 amino acids. Protons can be added to the 12 basic residues and the N-terminal.

In this study, experiments were conducted using a home-made tandem mass spectrometer. A specific charge was selected by a quadrupole mass spectrometer after generating the multiply-charged ions with an ESI method and trapping them in an ion funnel. Then, a proton transfer reaction was carried out with 1-hexylamine in a gas cell. DC voltage of an octapole ion guide (OPIG-DC), reaction time and temperature in the gas cell were changed, and the ions were detected with a time-of-flight mass spectrometer. As a result, the reaction changed when changing the temperature and the DC voltage. This may indicate the changes in the three-dimensional structure of the ions.

**Keywords :** Ubiquitin, Proton transfer reactions

生体内に存在するタンパク質は、タンパク質同士もしくは生体分子の周りに存在する水分子との相互作用により本来とは異なる機能や構造を持つ。本研究の目的は、生体分子であるユビキチンと標的分子である 1-ヘキシルアミンのプロトン移動反応を通して分子間及び分子内の相互作用、標的分子との反応における生体分子イオンの 3 次元構造を解明する事である。真核生物の細胞に存在するユビキチンは 76 個のアミノ酸からなるタンパク質である。また、12 個の塩基性アミノ酸から構成されていて、これらと N 末端の計 13 か所にプロトンが付加する可能性がある。

本研究では自作のタンデム型質量分析装置を使用して実験を行った。エレクトロスプレーイオン化源により多電荷イオンを生成させイオンファネルにトラップをした後、四重極質量分析計で特定の電荷を選別した。そして、ガスセルで 1-ヘキシルアミンとプロトン移動反応を行った。ガスセル内にある八極子イオンガイドの直流電圧 (OPIG-DC) や反応時間、温度を変化させ、反応生成物イオンを飛行時間型質量分析計で検出をし考察を行った。結果として、温度または八極子イオンガイドの直流電圧 (OPIG-DC) の変化により反応が変化することがわかった。これより、3 次元構造の変化があったのではないかと考えた。