## イオンモビリティスペクトロメトリーによるルイス X 糖鎖の立体 構造解析

(北陸先端大マテリアル¹・名市大院薬²・自然科学研究機構 ExCELLS³) ○豊 昊¹・ 龍岡 博亮¹・山口 拓実 <sup>1,2,3</sup>

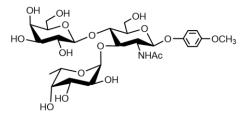
Three-dimensional structural analysis of Lewis X-related oligosaccharides by ion mobility spectrometry (\begin{subarray}{c} 1 School of Materials Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology, \begin{subarray}{c} 2 Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Nagoya City University, \begin{subarray}{c} 3 Exploratory Research Center on Life and Living Systems (ExCELLS), National Institutes of Natural Sciences) \bigcirc Hao Feng\bigcirc, Hiroaki Tatsuoka\bigcirc, Takumi Yamaguchi\bigcirc, \bigcirc.^23

Oligosaccharides are involved in various biological events mainly through carbohydrate-protein interactions. Various isomers of oligosaccharides are produced due to differences in the sequence and linking type of carbohydrate residues. Understanding the three-dimensional structure of oligosaccharides is important to elucidate their recognition mechanisms and to regulate their functions. However, due to the flexibility of their structures, suitable methods for structural analysis of oligosaccharides are limited. In this study, ion mobility spectrometry (IMS) was employed to approach the three-dimensional structure of oligosaccharides. By IMS, ionized molecules are separated based on their mobility in buffer gas according to their structures. We used Lewis X, a branched trisaccharide, as a model oligosaccharide for the structural analysis. The Lewis X trisaccharide and its isomers were synthesized and analyzed using IMS coupled with mass spectrometry.

Keyword: Oligosaccharide, Three-dimensional Structure, Ion Mobility Spectrometry, Mass Spectrometry

糖鎖は生体内で様々な役割を担っており、その機能は主にタンパク質との相互作用を通して発揮される。また糖鎖は、糖残基の配列や連結様式の違いにより、多様な異性体が存在する。そのため糖鎖の認識機構の解明や、機能の制御を考える上で、その立体構造の違いを調べることは重要である。しかし一般に、糖鎖の構造は柔軟性に富んでいるため、結晶化が容易でないなど、構造解析の手法は限られている。本研究では、イオンモビリティースペクトロメトリー(IMS)を利用した糖鎖の立体構造解析に取り組んだ。

IMS は、ガス中の分子イオンの移動度に応じて分離を行う手法であり、イオンの立体構造に依存する衝突断面積を測定することができる。分岐型三糖であるルイス X 糖鎖(Galβ1-4(Fucα1-3) GlcNAcβ)をモデルとして、IMS による分析を行った。ルイス X 型三糖(Figure 1)およびその異性体を化学合成により調製し、IMS-質量分析法によって分子イオンの移動度の違いを測定することで構造比較を行った。



**Figure 1.** The representation of Lewis X trisaccharide.