

## 新規誘導体 6-臭素化フェルラ酸の MALDI-TOF-MS 分析用マトリックスとしての性質と有用性

(埼玉医科大学<sup>1</sup>・城西大学<sup>2</sup>) ○坂本 安<sup>1</sup>、廣澤 成美<sup>1</sup>、森口 武史<sup>1</sup>、加藤 洋介<sup>2</sup>、高山 淳<sup>2</sup>、玄 美燕<sup>2</sup>、岡崎 真理<sup>2</sup>、鈴木 悠子<sup>1</sup>、星 絢子<sup>2</sup>、坂本 武史<sup>2</sup>

The availability of 6-bromoferulic acid as a novel common-use matrix for MALDI-TOF-MS (<sup>1</sup>Saitama Medical University, <sup>2</sup>Josai University) ○Yasushi Sakamoto<sup>1</sup>, Narumi Hirose<sup>1</sup>, Takeshi Moriguchi<sup>1</sup>, Yosuke Katoh<sup>2</sup>, Jun Takayama<sup>2</sup>, Maiyan Xuan<sup>2</sup>, Mari Okazaki<sup>2</sup>, Yuko Suzuki<sup>1</sup>, Ayako Hoshi<sup>2</sup>, Takeshi Sakamoto<sup>2</sup>

The ability of 6-BFA, ferulic acid (FA), and eight other halogenated FA derivatives to ionize eight synthetic peptides was examined. Absorption measurements, MM2 structure optimizations, and proton affinity (PA) calculations were also performed for 6-BFA and FA. The usefulness of these compounds as MALDI matrices for lipids, sugar chains, polymers, cyanocobalamin, synthetic peptides, and tryptic peptides originating from two types of serum protein was also tested. Addition of bromine at the 6-position of FA was found to be the best site for halogenation as it allowed facile detection of cyanocobalamin and several peptides. 6-BFA exhibited good sensitivity to large peptides (between 3–5 kDa) and peptides containing acidic amino acids or proline. 6-BFA was also shown to be a suitable matrix for MS/MS analysis when using MALDI time-of-flight (TOF) mass spectrometry (MS) with a quadrupole ion trap (QIT) system. The properties of 6-BFA as a MALDI matrix differed from those of DHBA and CHCA. 6-BFA appears to be a useful matrix for de novo sequencing using MALDI-QIT-TOF-MS.

**Keywords :** MALDI-TOF-MS; MALDI matrix; Ferulic acid

フェルラ酸は、MALDI-TOF-MS 分析において蛋白解析用の matrix として使用されてきた。我々は、フェルラ酸の 9 種のハロゲン化誘導体を合成し、MALDI matrix としての性質を検討したが、6-臭素化誘導体 (6-BFA) は一般的に使用されて来た matrix と比較して異なる性質を有していたが、MALDI-TOF-MS 分析における有用性が確認された。ハロゲンの修飾部位に関しては、フェルラ酸の 6 位が重要であり且つ臭素誘導体が最も高いイオン化効率を示した。この 6-BFA は、シアノコバラミンやペプチドに対する親和性が特に高く、従来マトリックスでは検出が困難であった分子量 3-5kDa のペプチドに高い感度を示した。また、酸性ペプチド、プロリンを多く含むペプチドにも高感度を示し、通常使用される CHCA、DHBA とは反対の特性を持つことが確認された。また、QIT システムによる MS/MS 分析に関してもパラメーターの変更無しで使用可能である等の特徴を持つため、ペプチドのアミノ酸配列解析にも使用することができる matrix であると思われる。