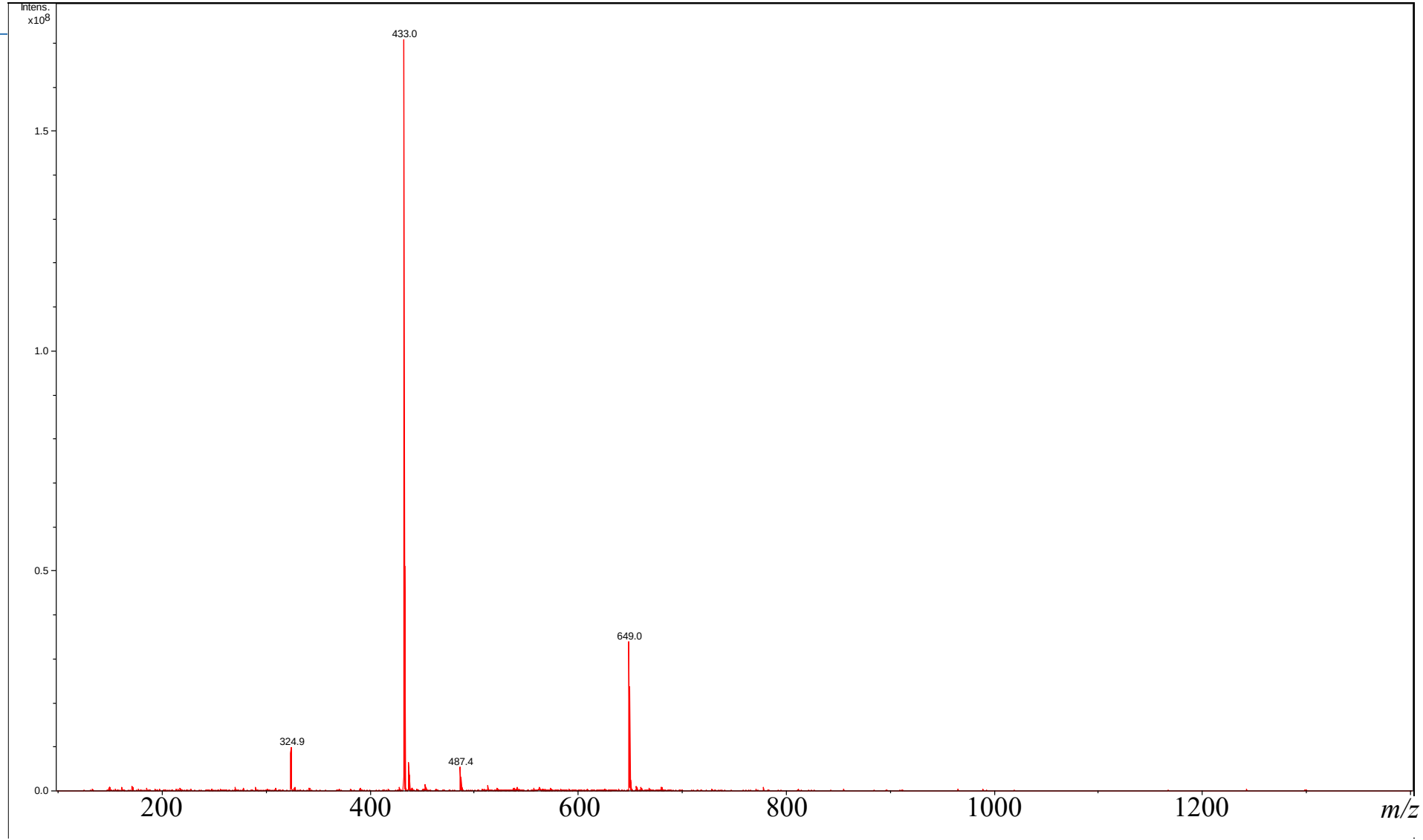
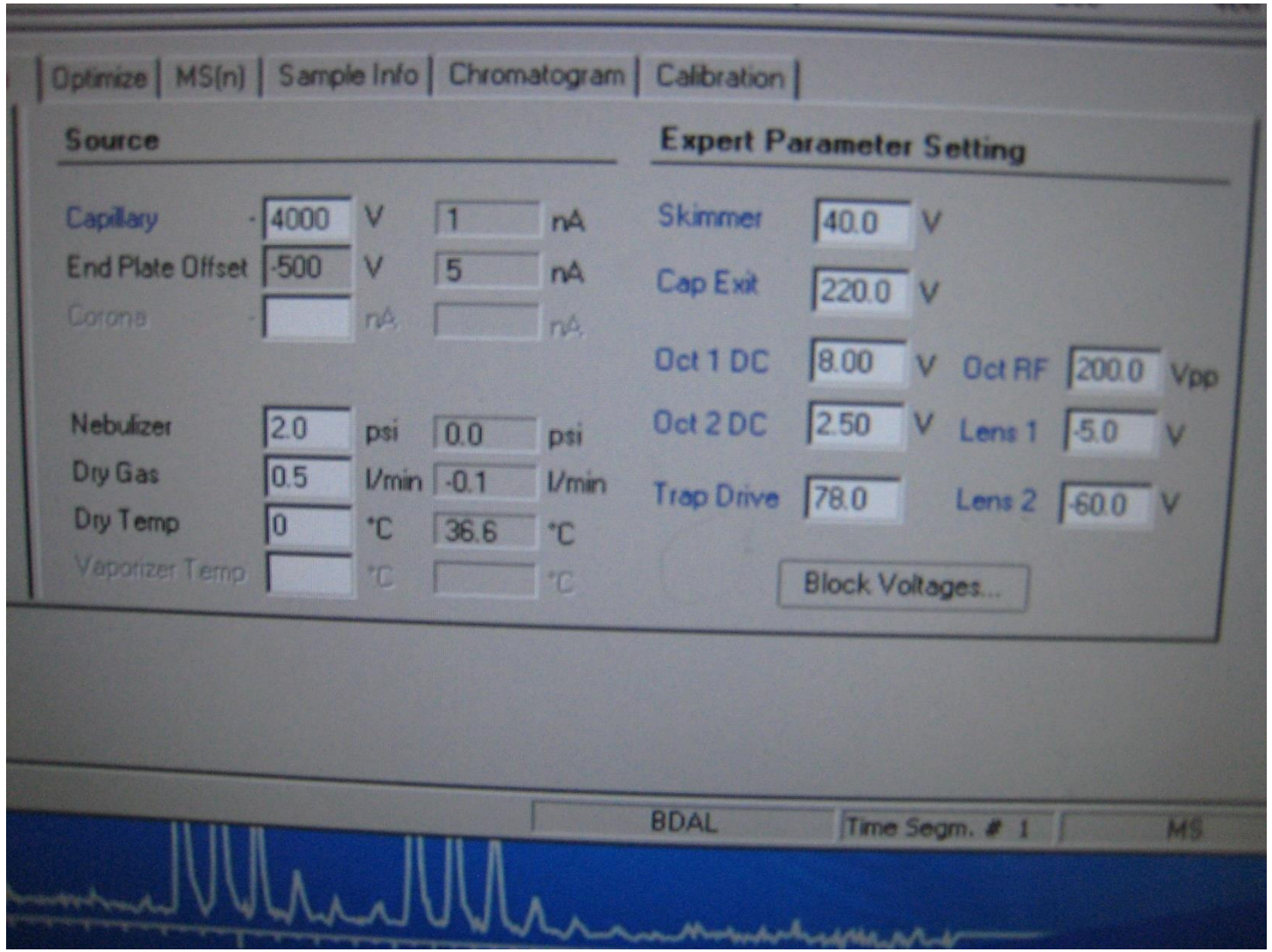
自然科学実験Ia
エレクトロスプレーイオン化法
（ESI - Ion Trap）
講義資料・第二部

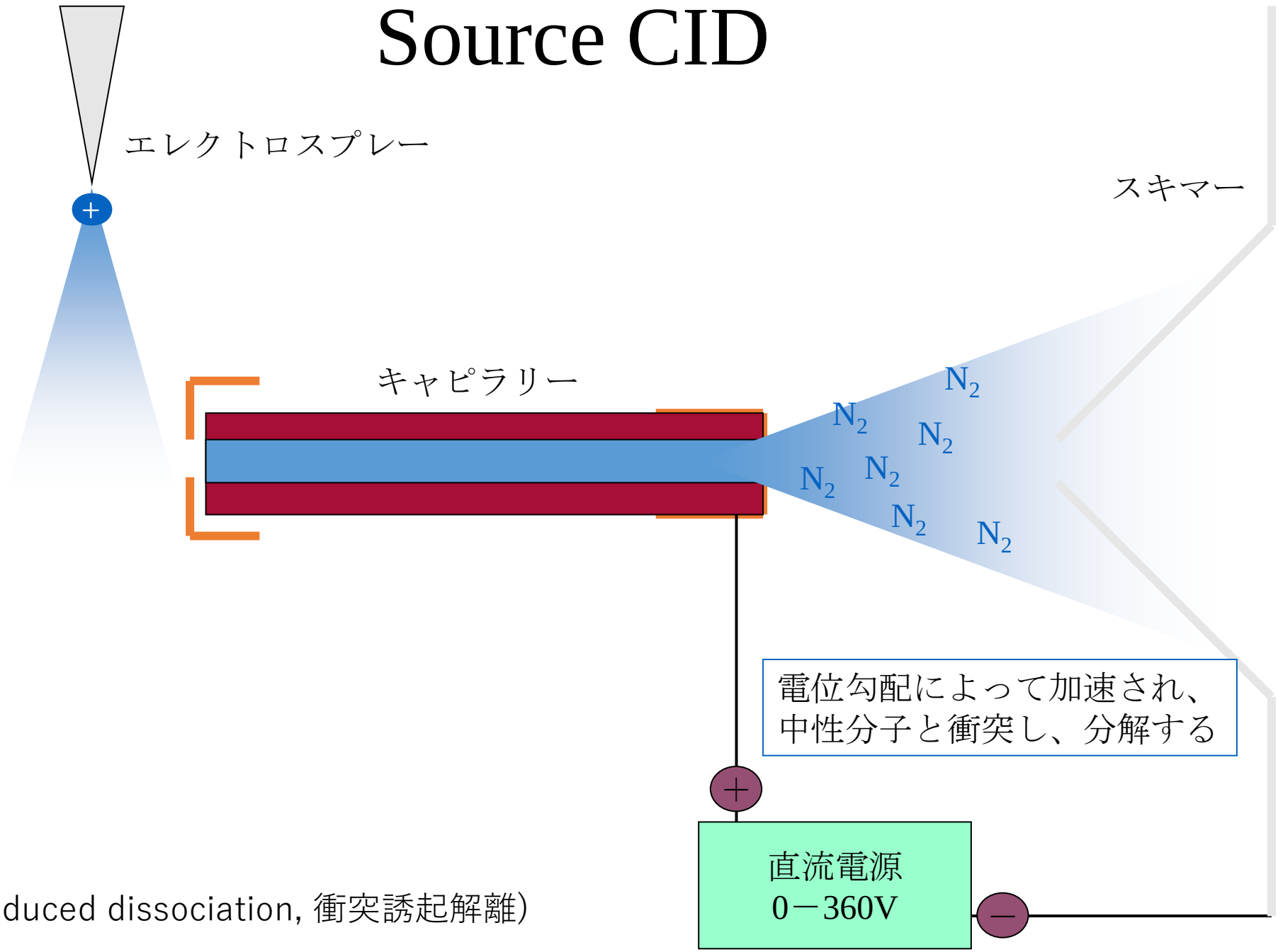
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 115 (V)



真空導入キャピラリー出口
(Cap Exit)の電圧を変化させる

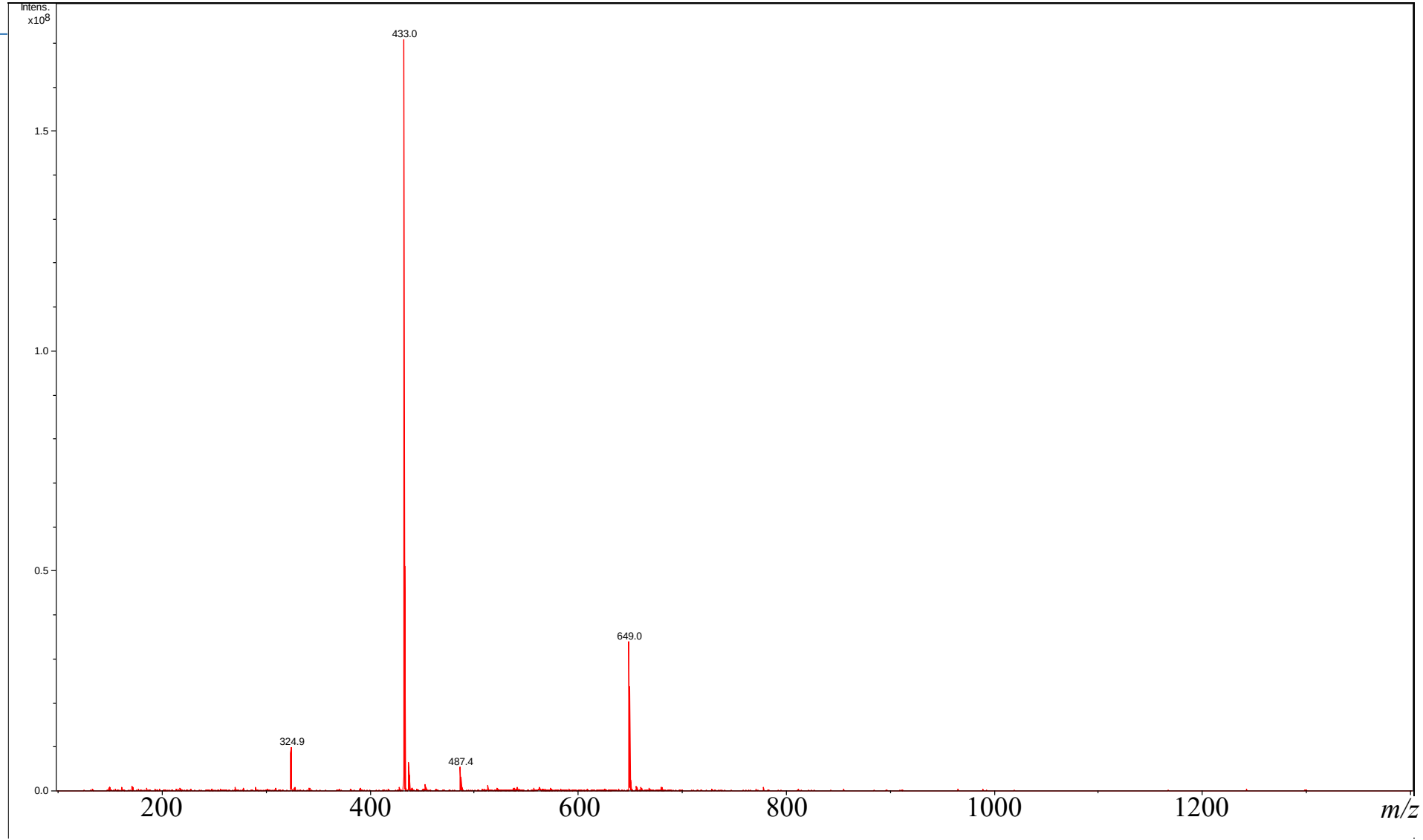


Source CID

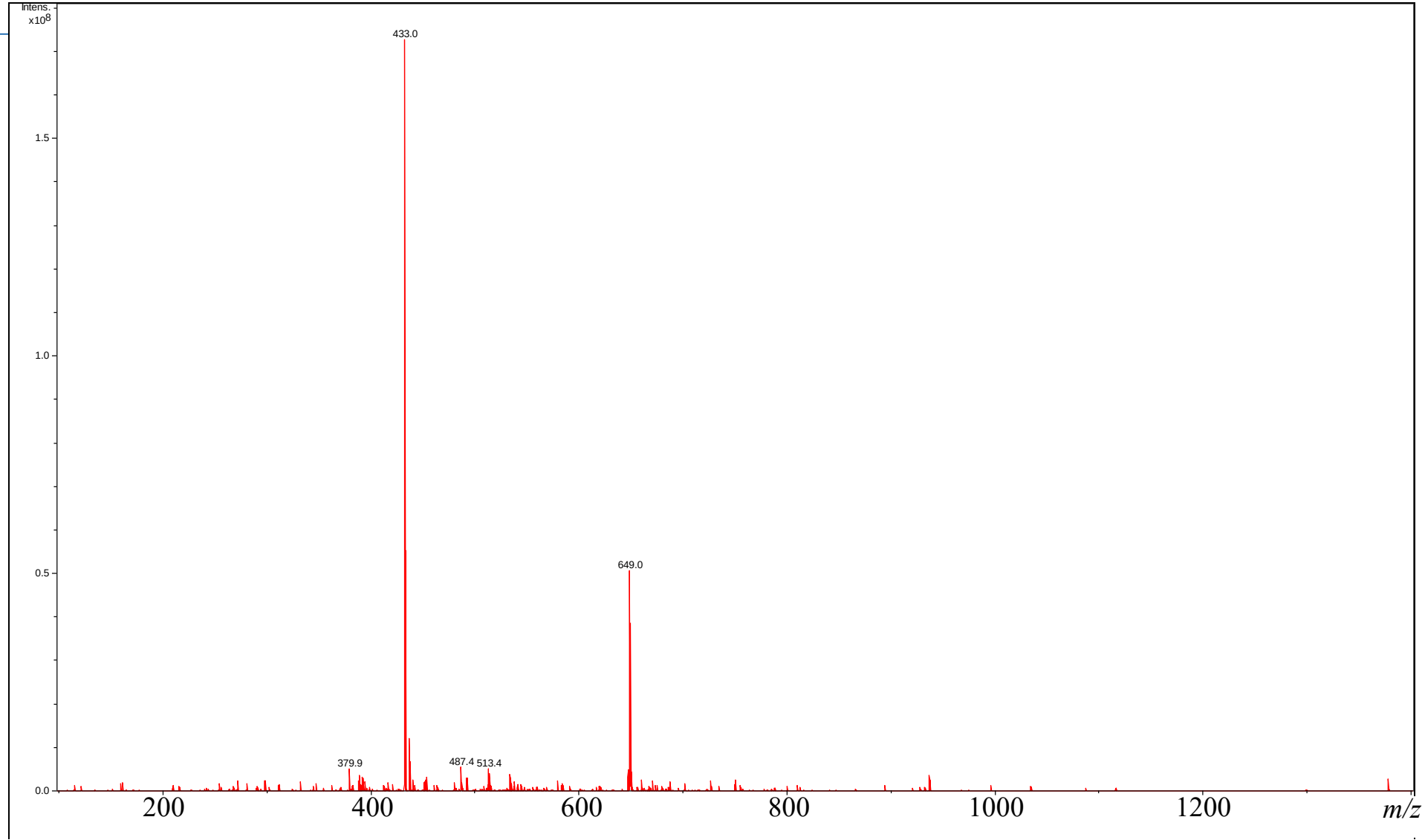


CID(collision induced dissociation, 衝突誘起解離)

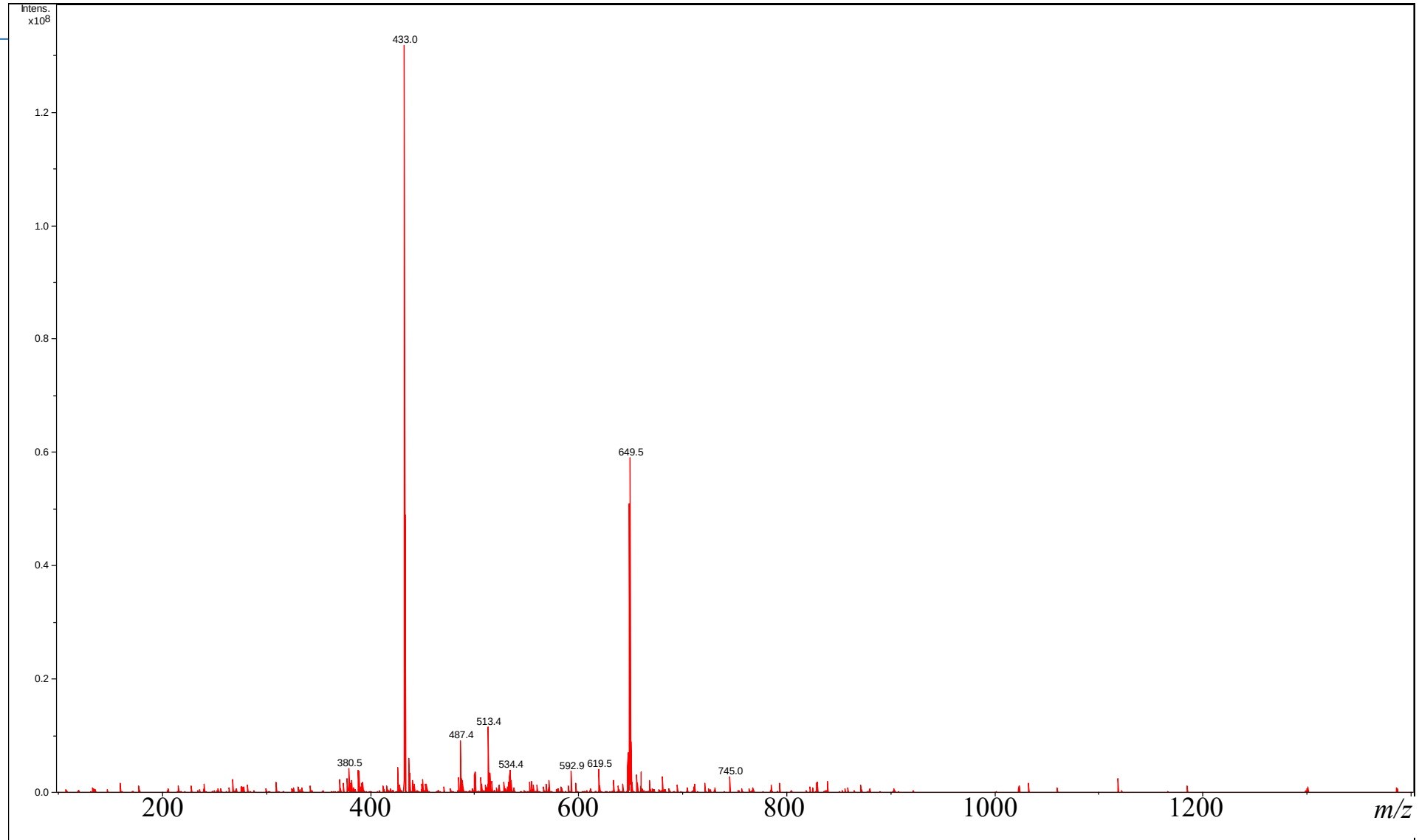
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 115 (V)



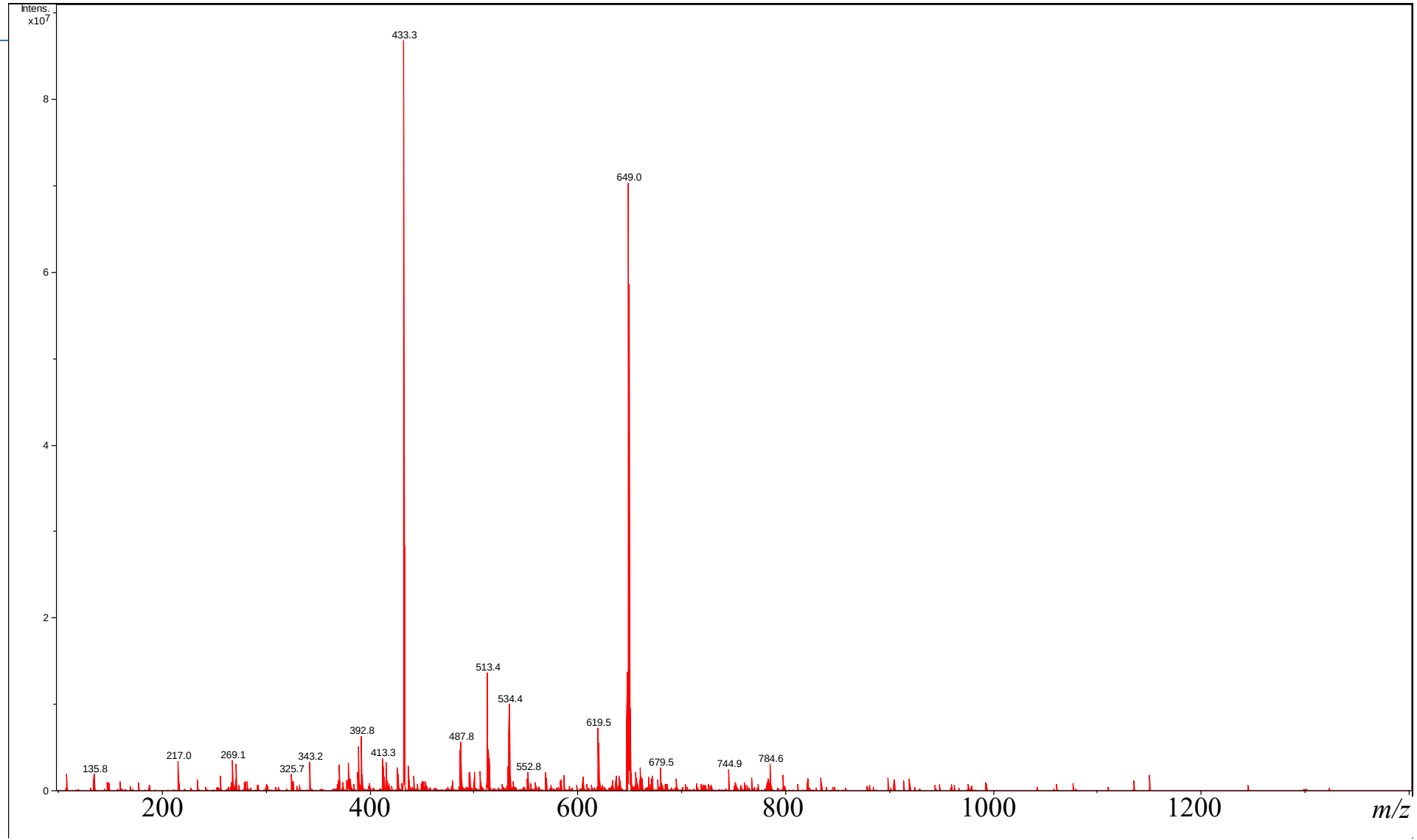
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 180 (V)



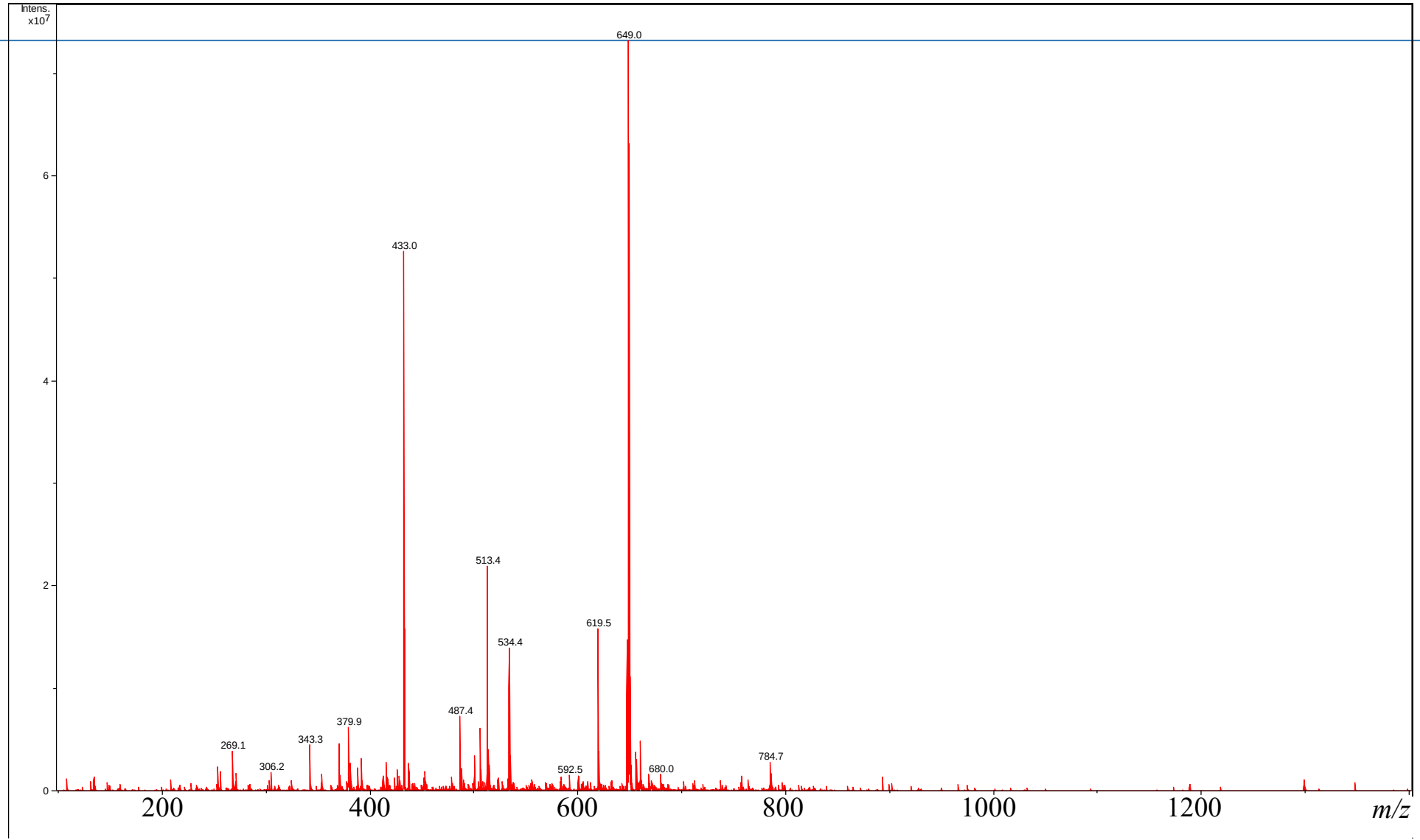
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 190 (V)



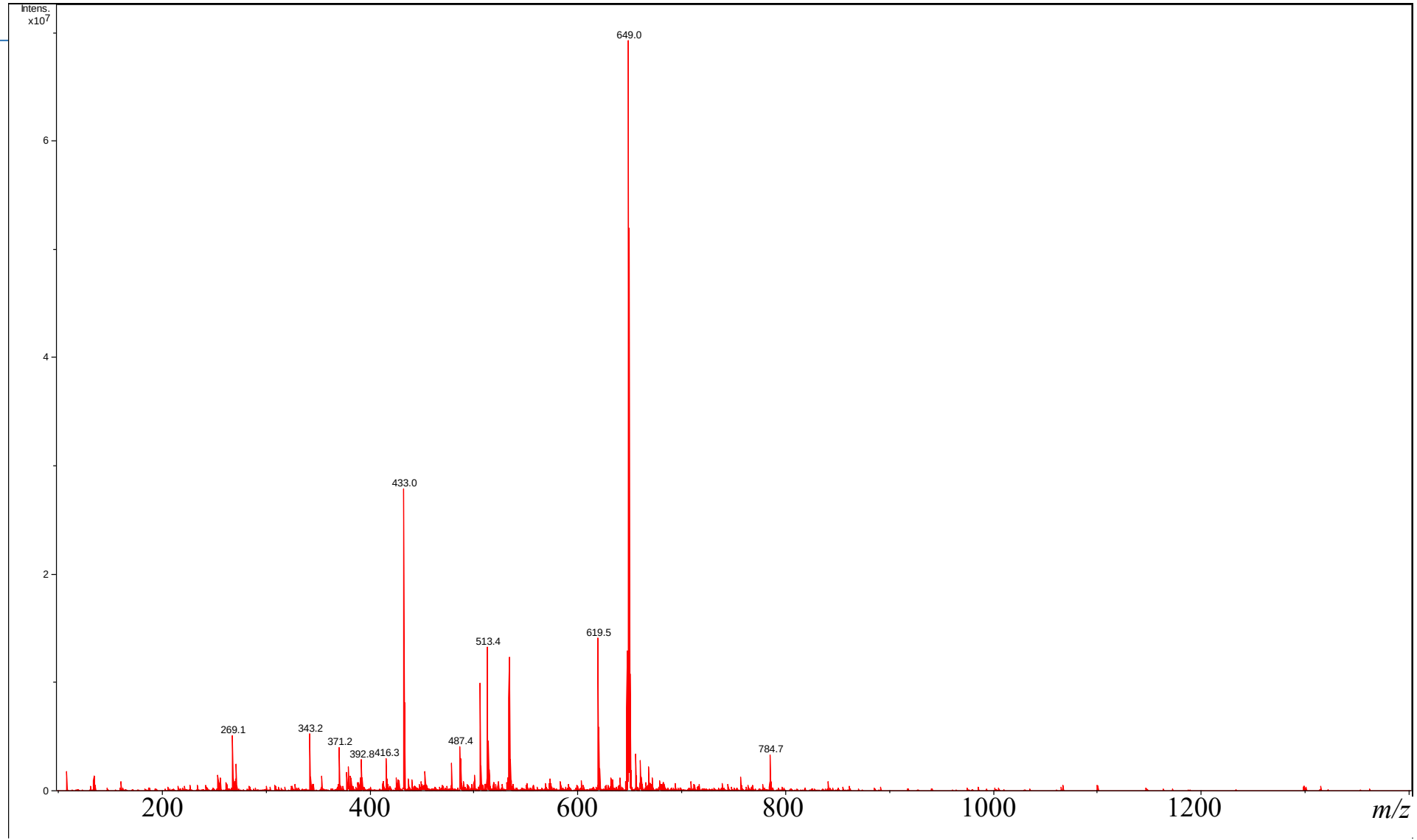
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 200 (V)



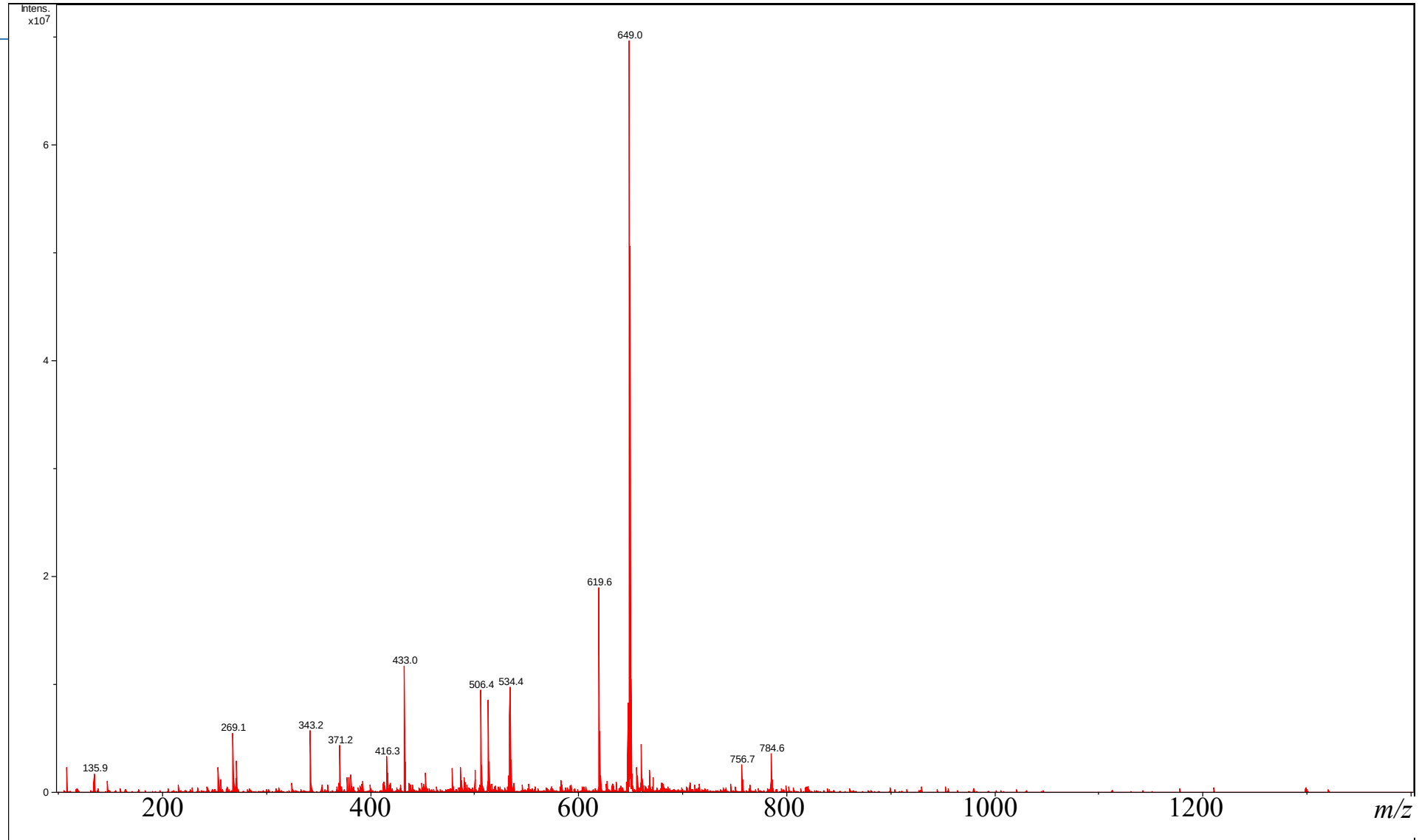
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 210 (V)



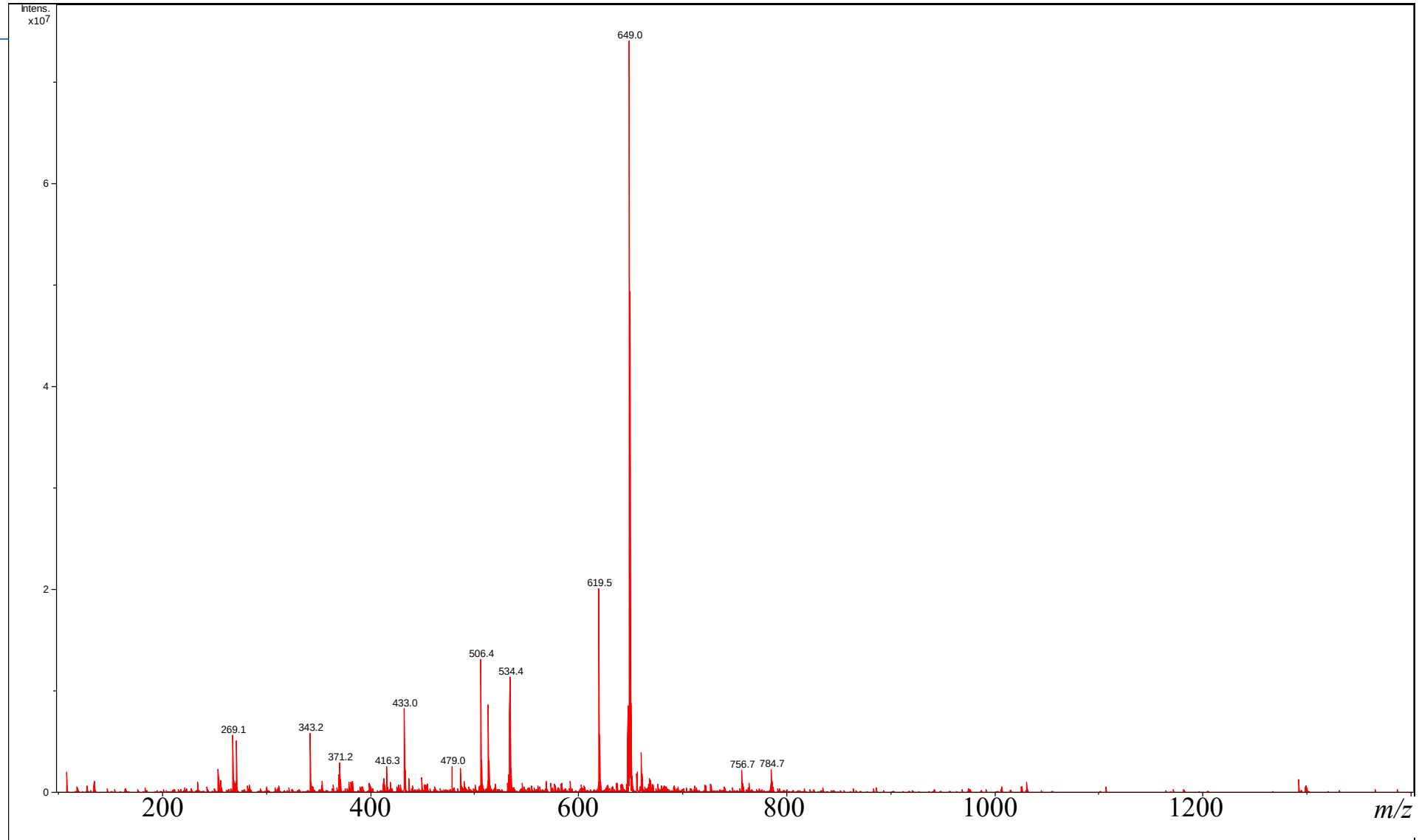
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 220 (V)



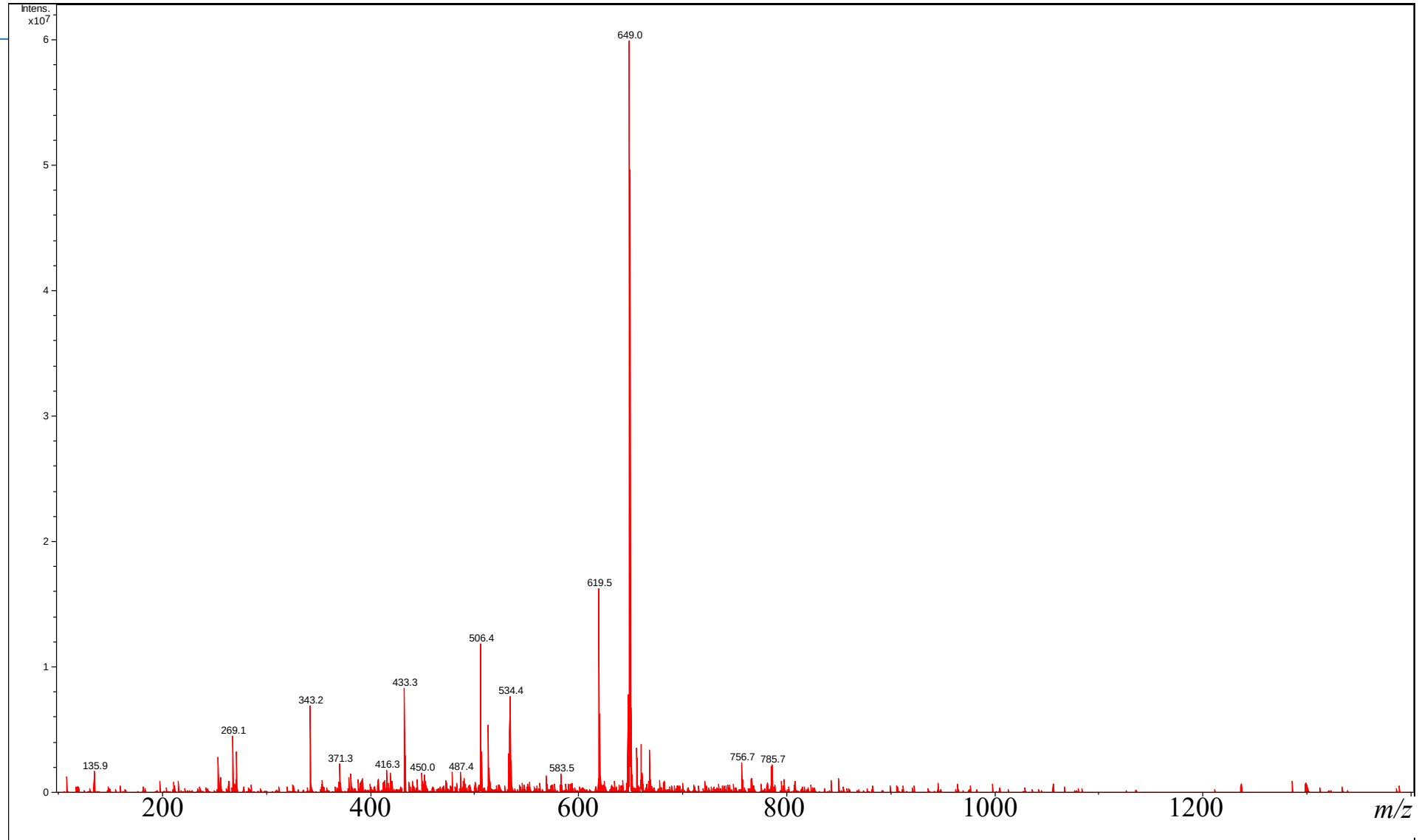
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 230 (V)



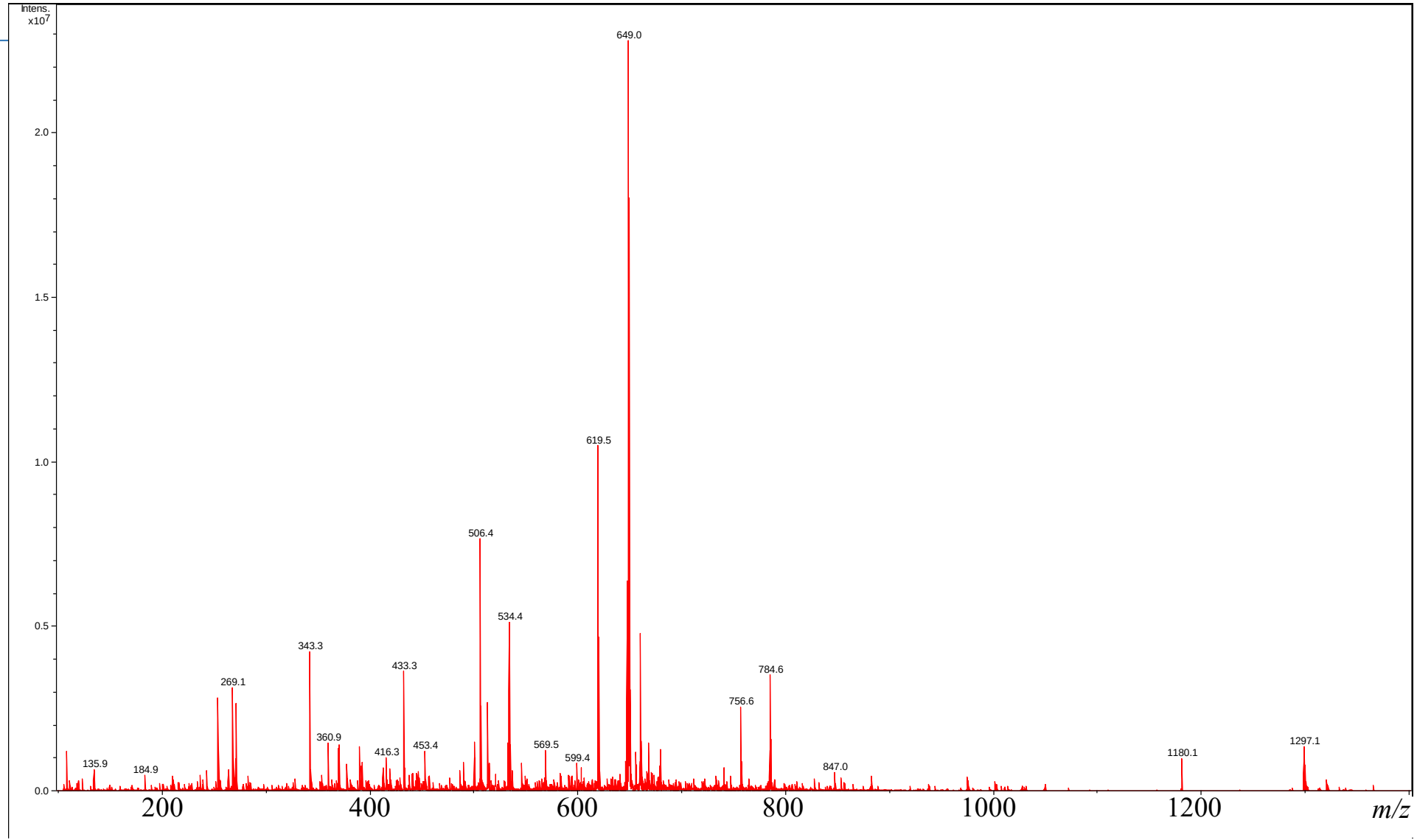
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 240 (V)



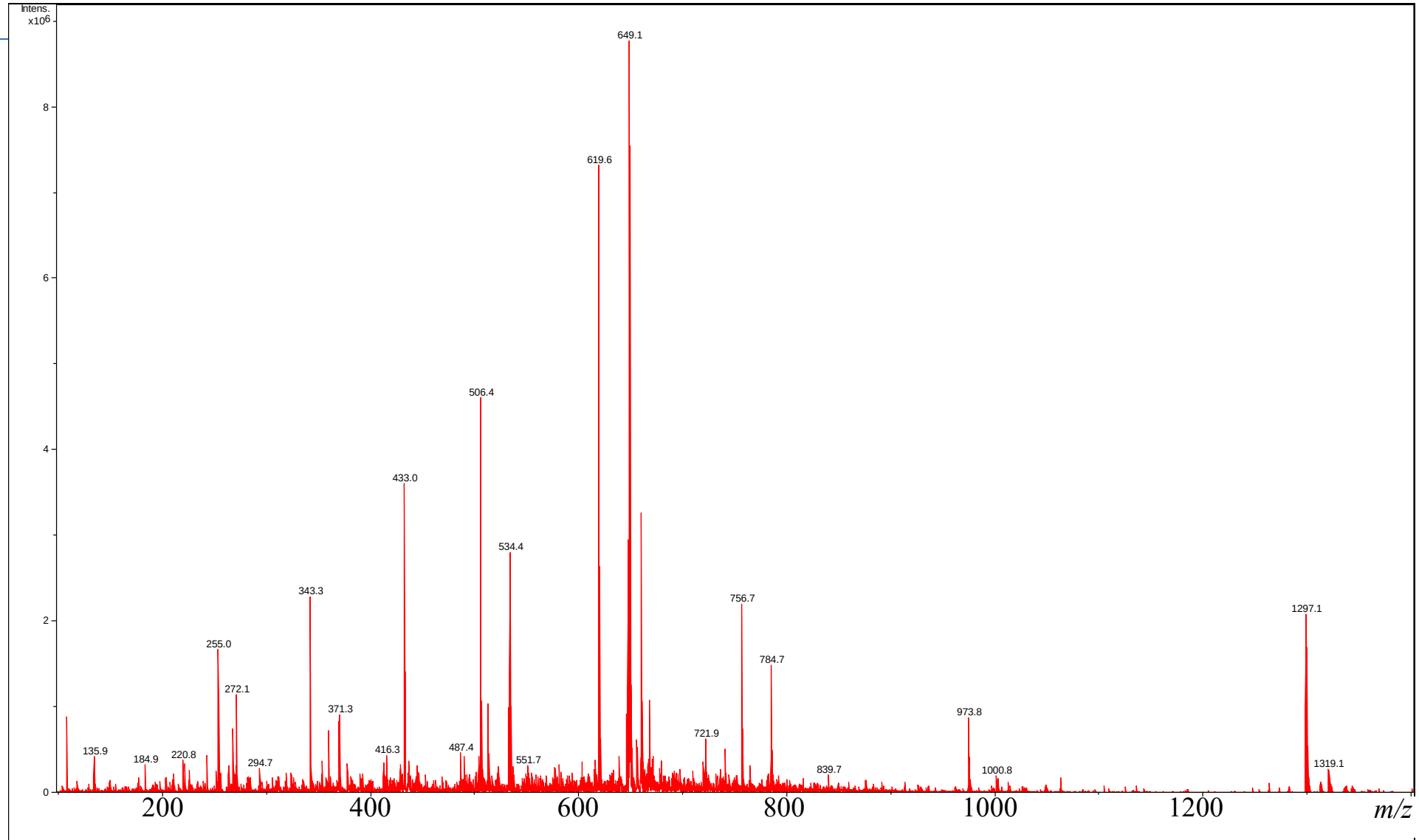
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 250 (V)



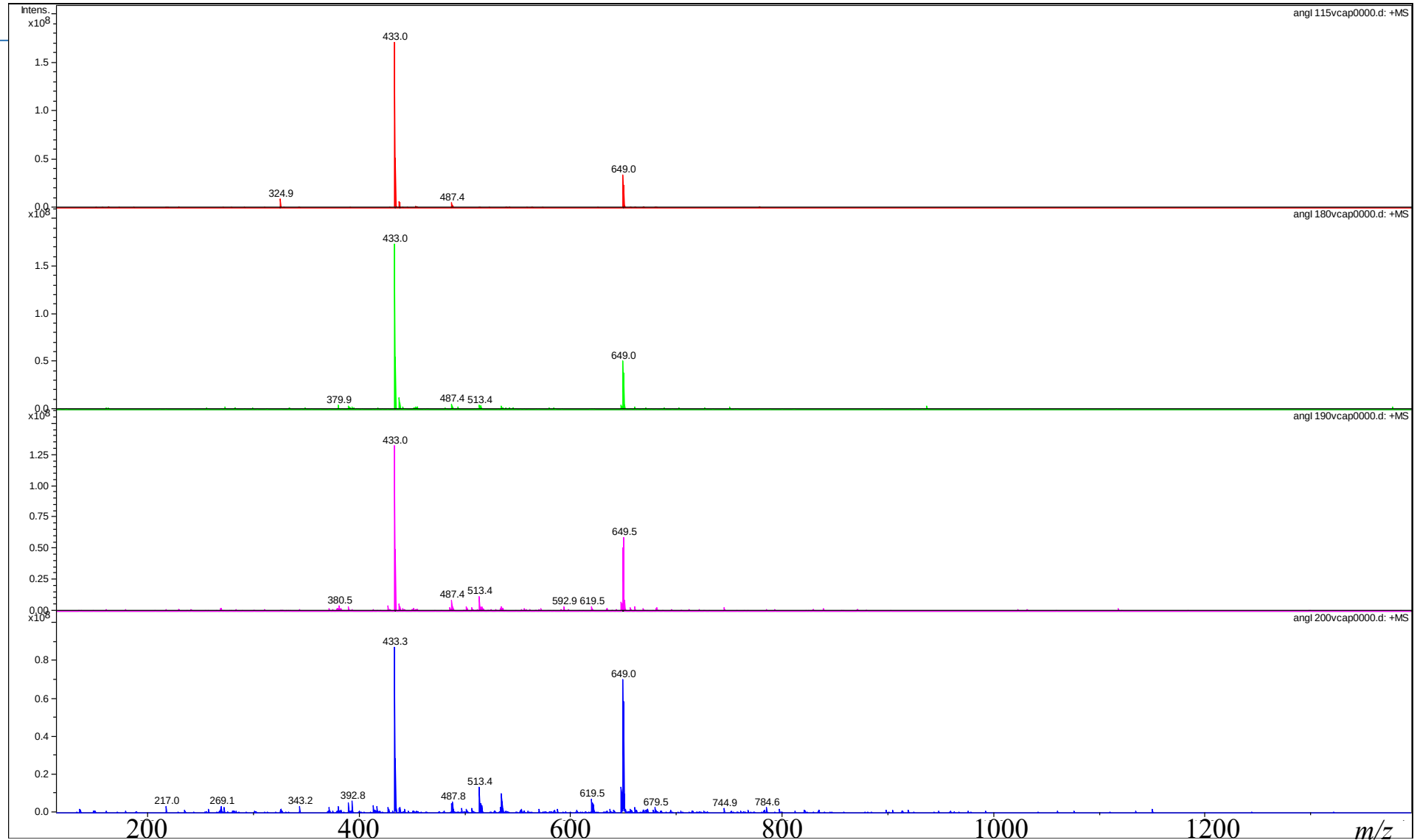
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 300 (V)



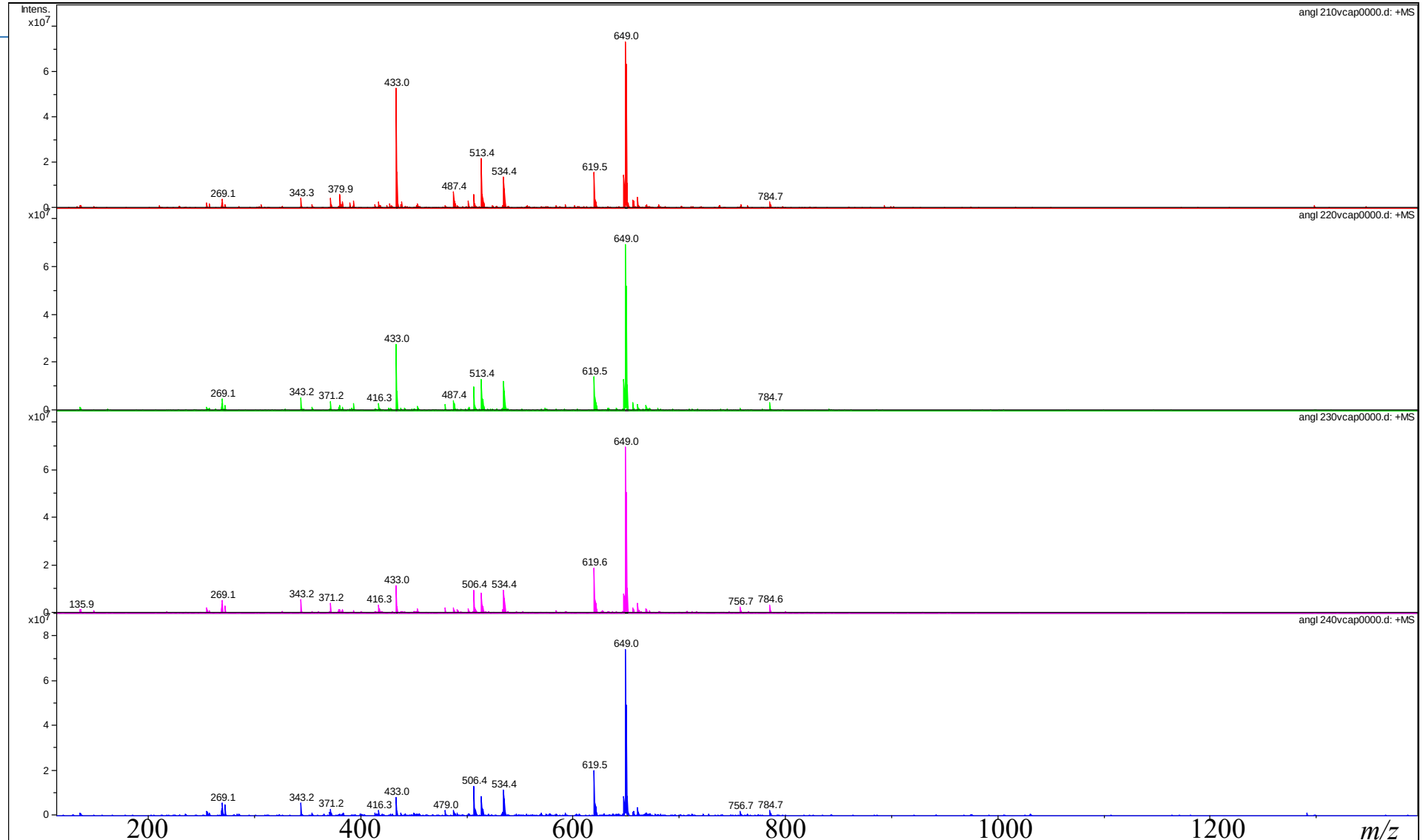
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 360 (V)



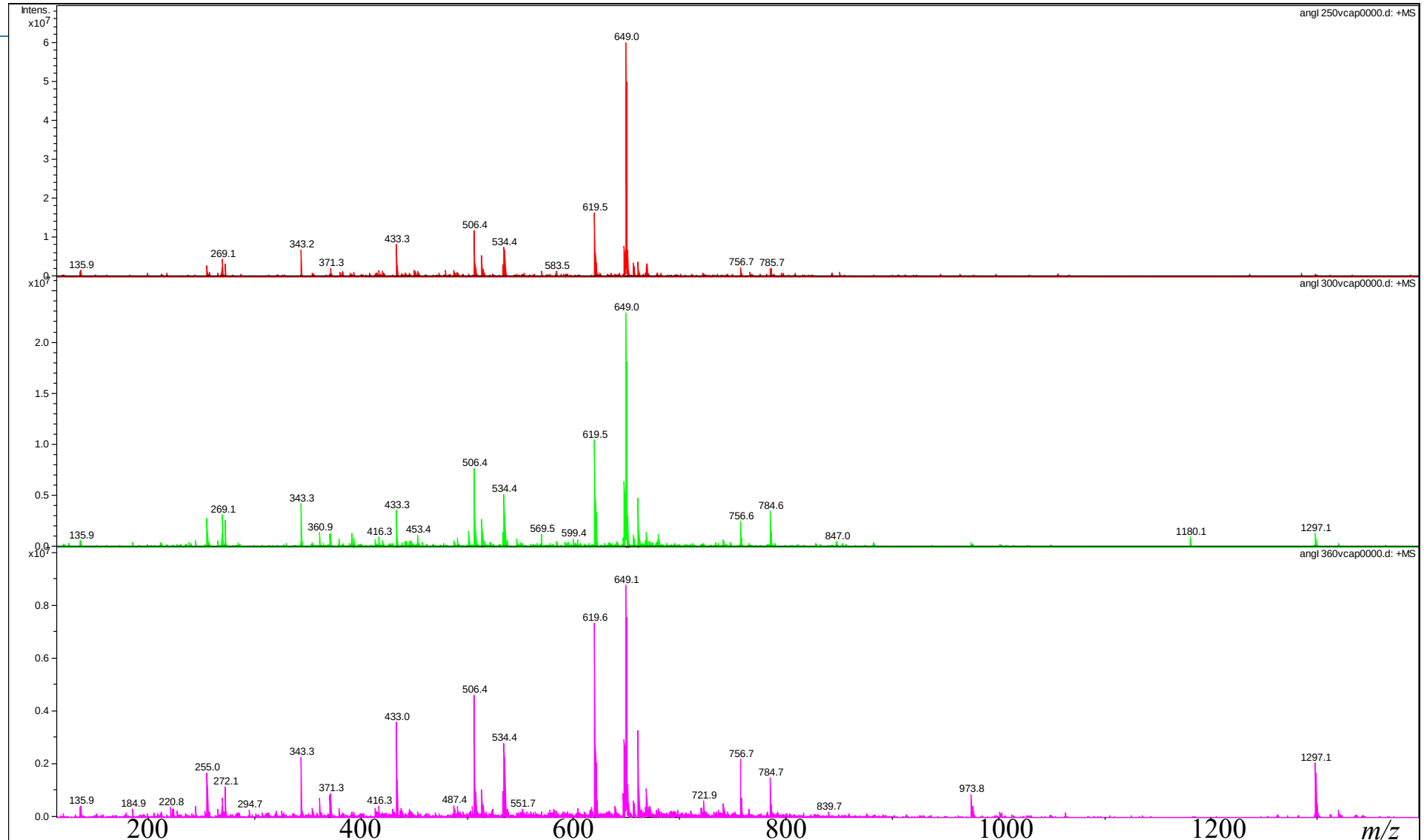
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 115 – 200 (V)



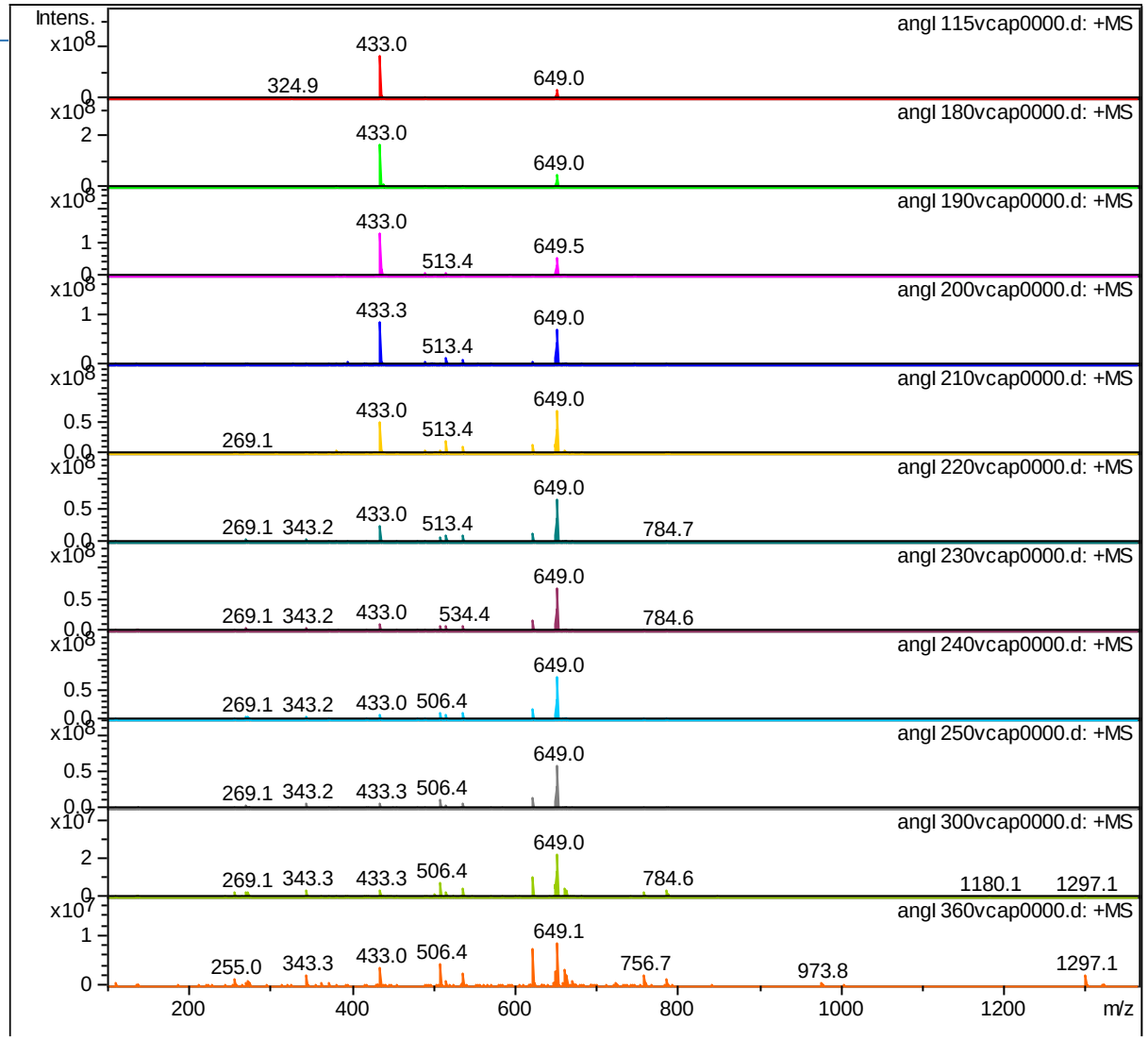
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 210 – 240 (V)



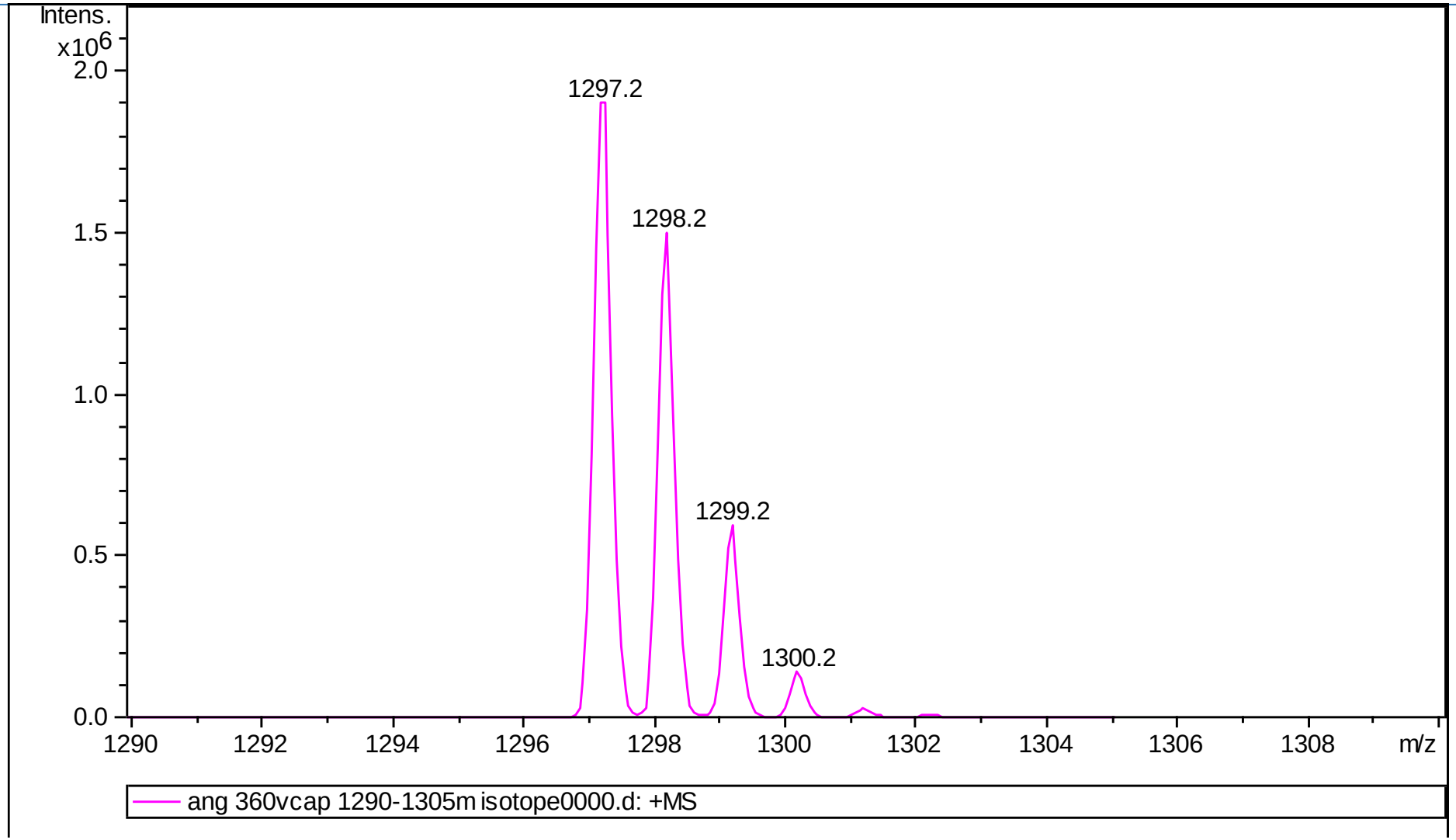
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 250 – 360 (V)



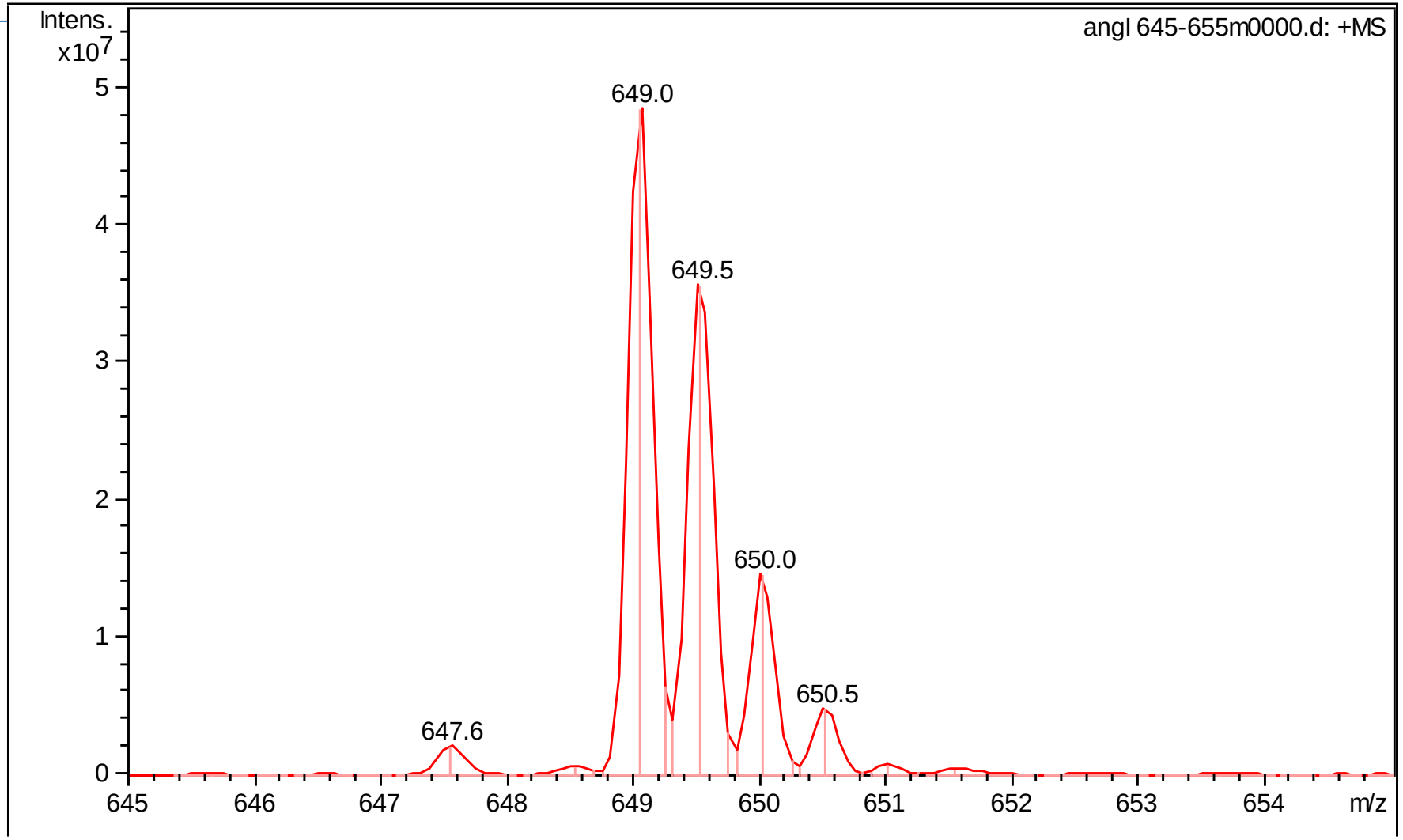
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 100 – 1400 (Da), Vcap 115 – 360 (V)



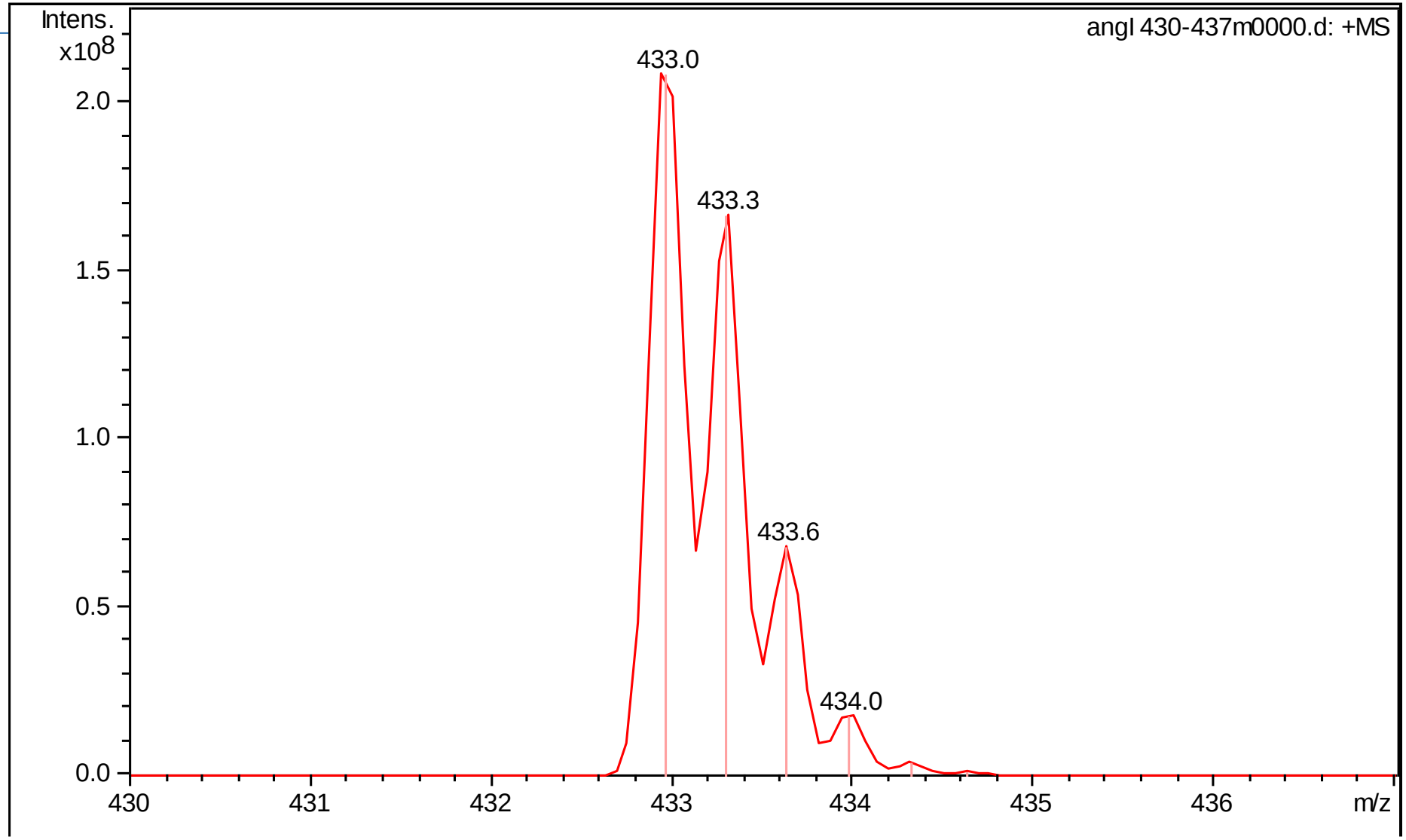
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 1290 – 1305 (Da), Vcap 360 (V)



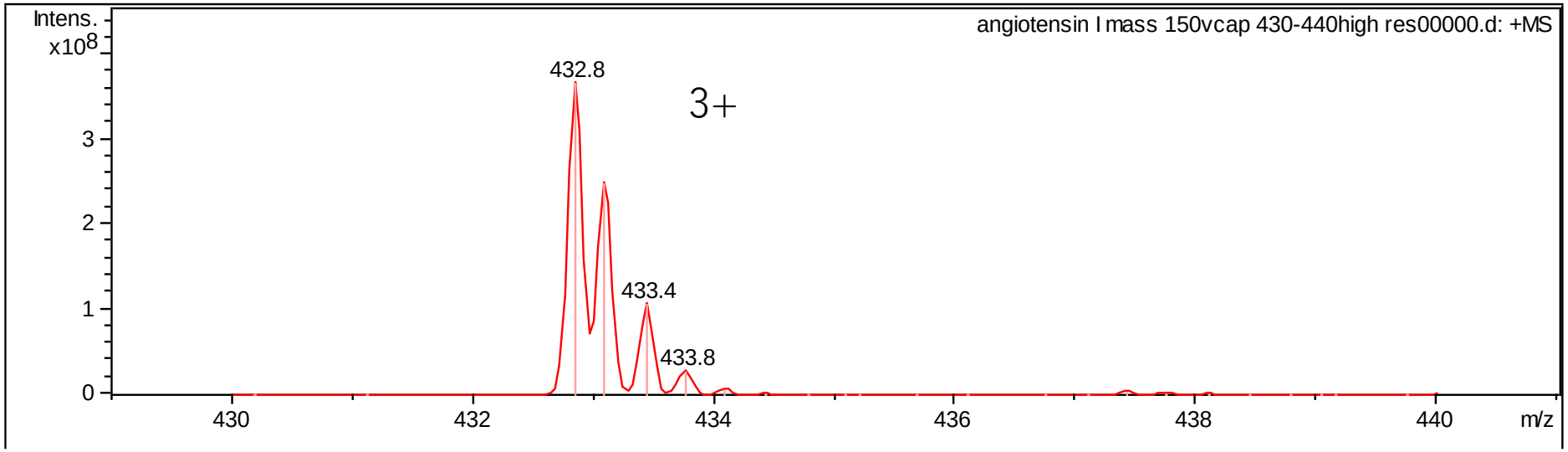
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 645 – 655 (Da), Vcap 115 (V)

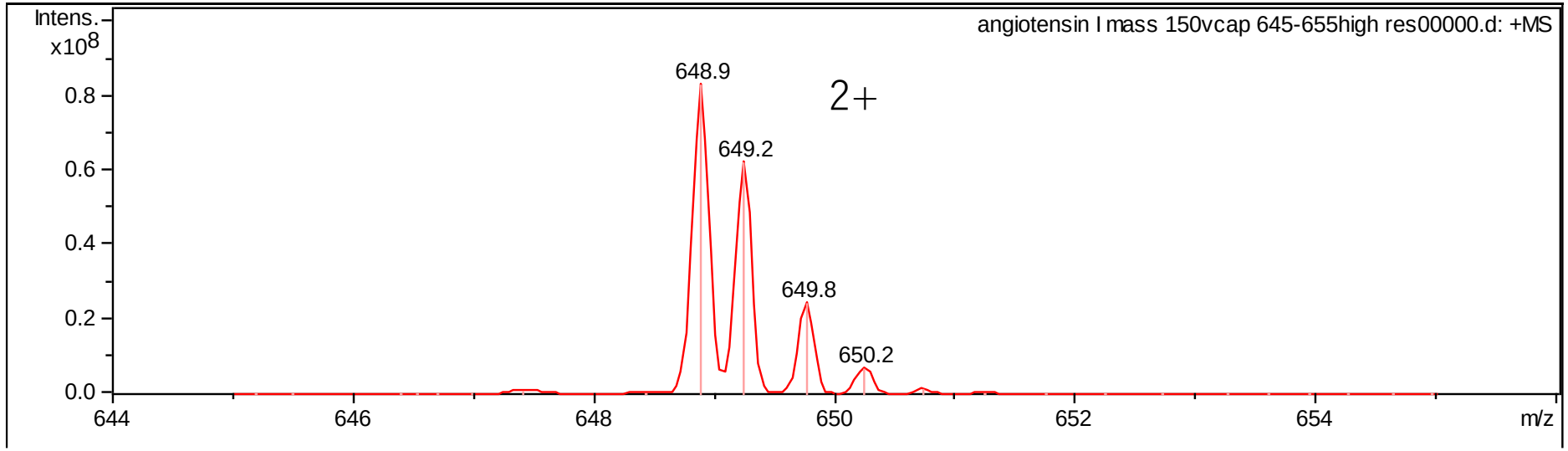


ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 430 – 437 (Da), Vcap 115 (V)

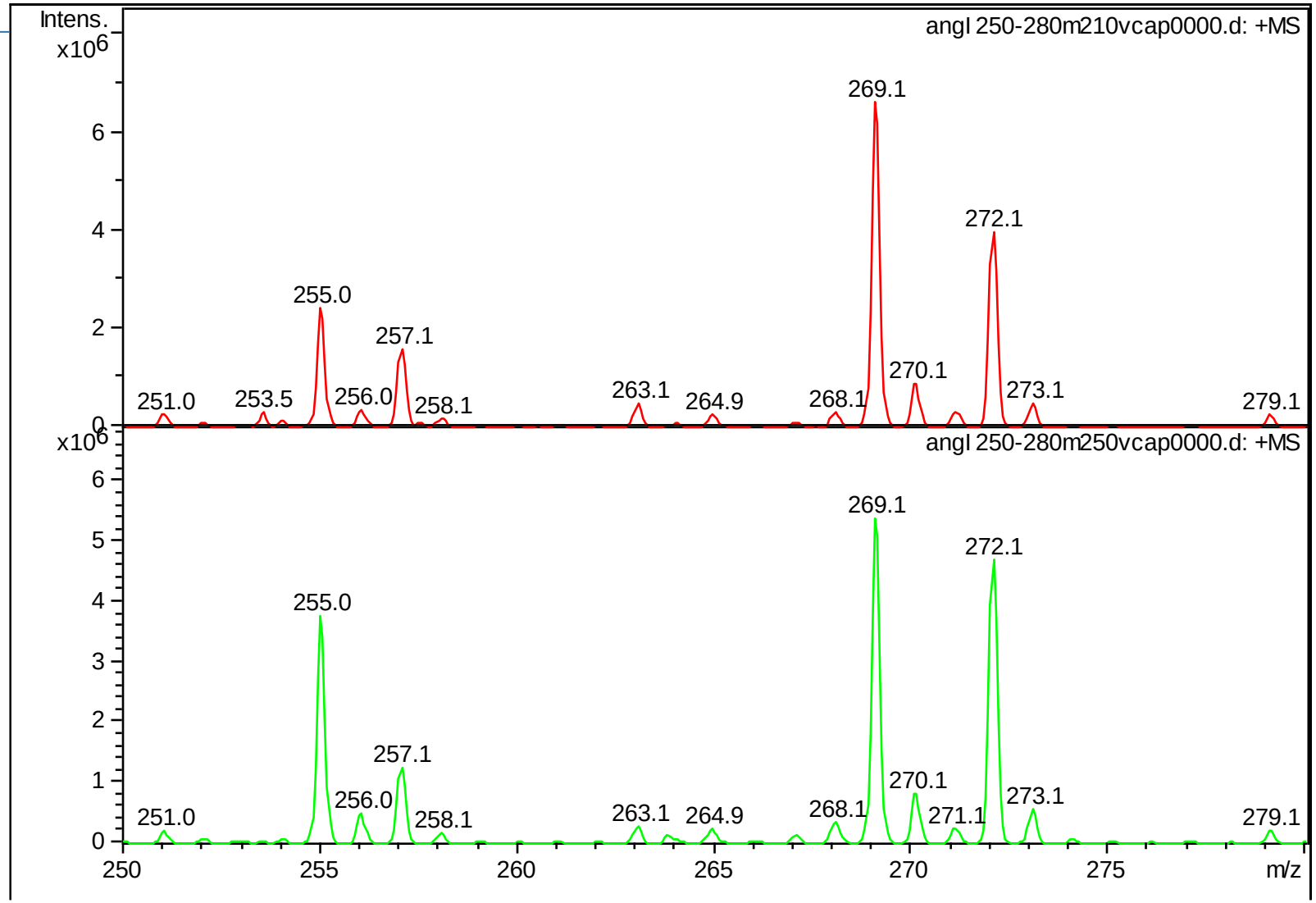


Angiotensin I （z=2,3）^{13}C 同位体分布

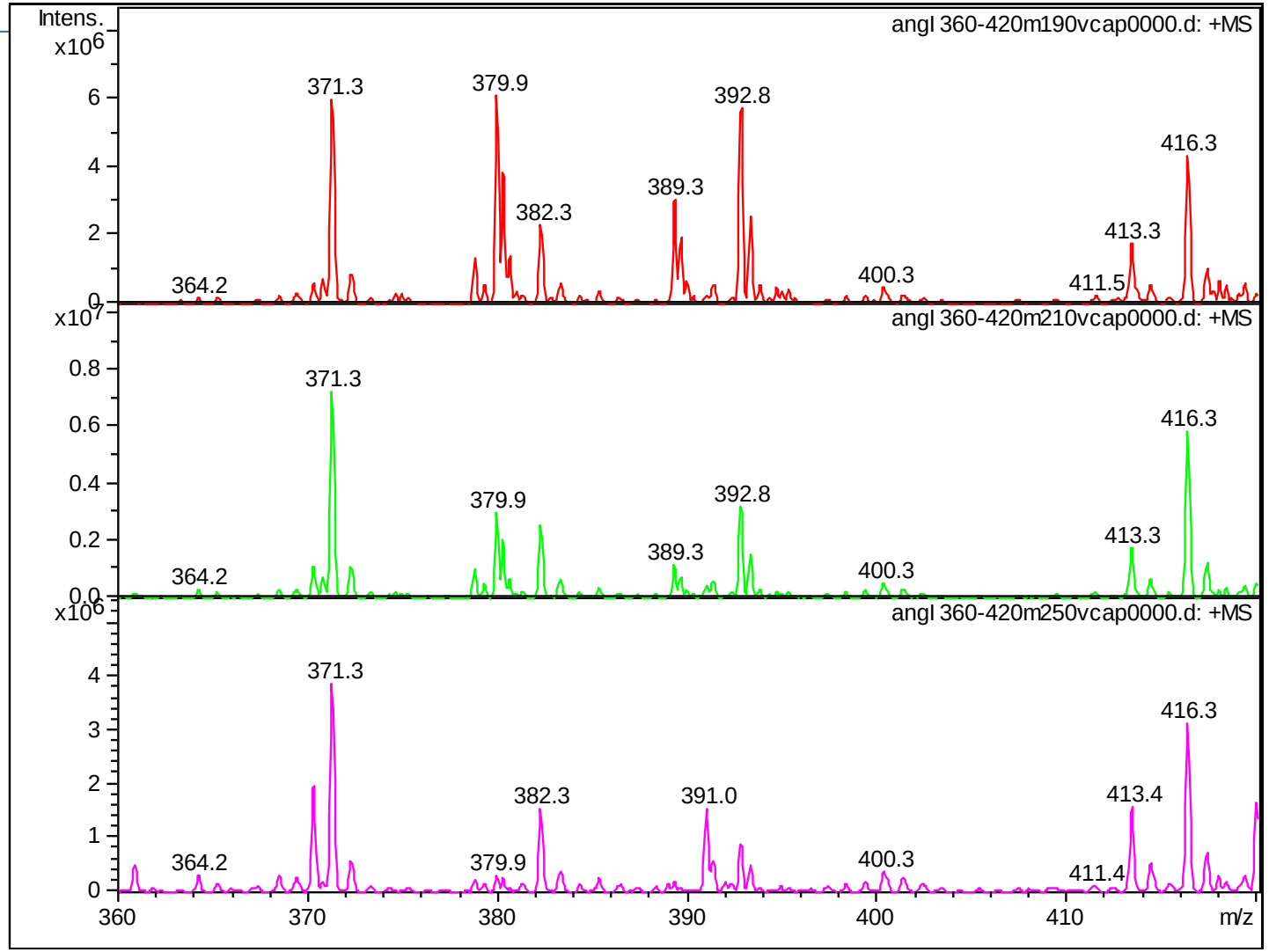




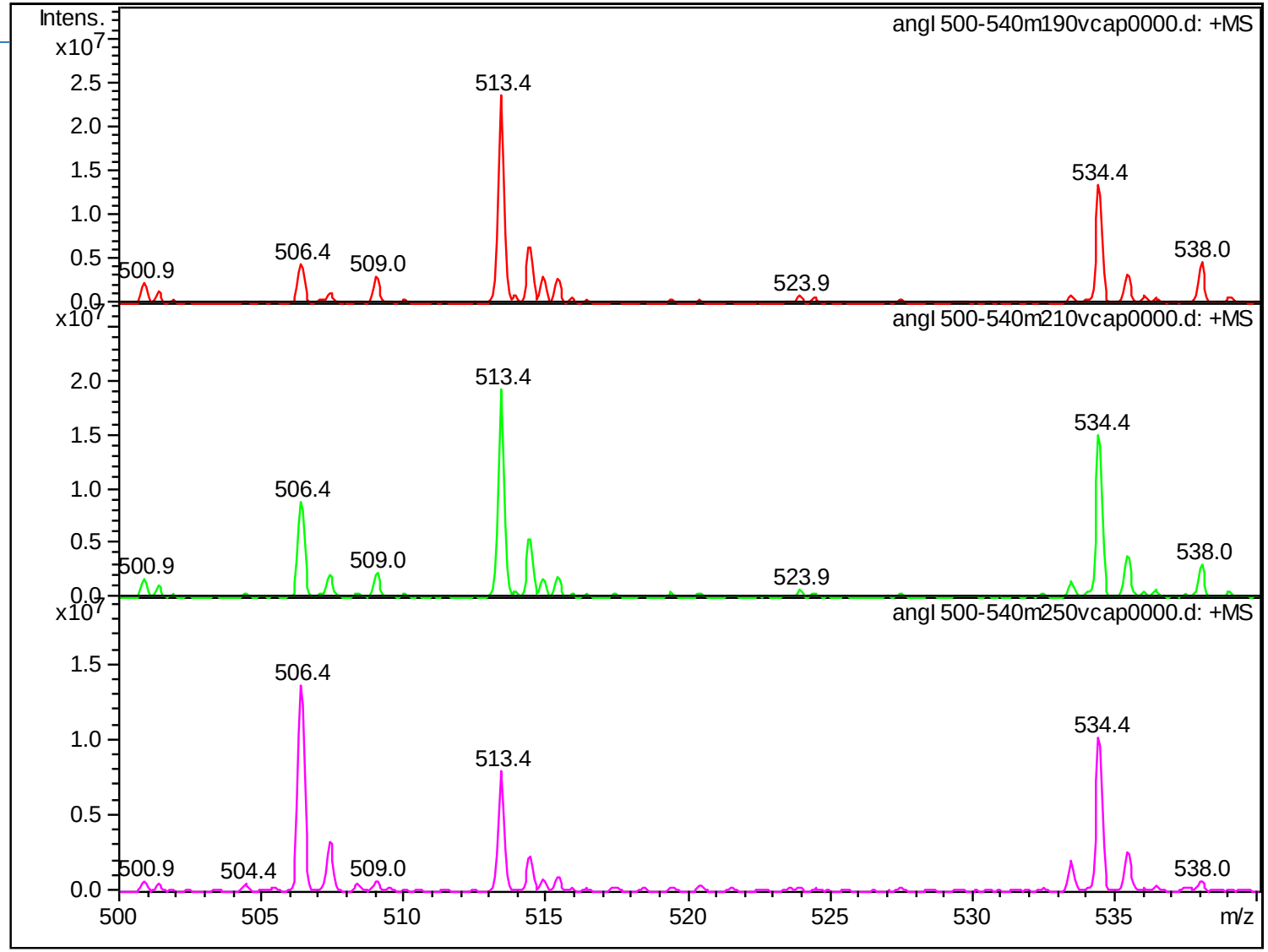
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 250 – 280 (Da), Vcap 210, 250 (V)



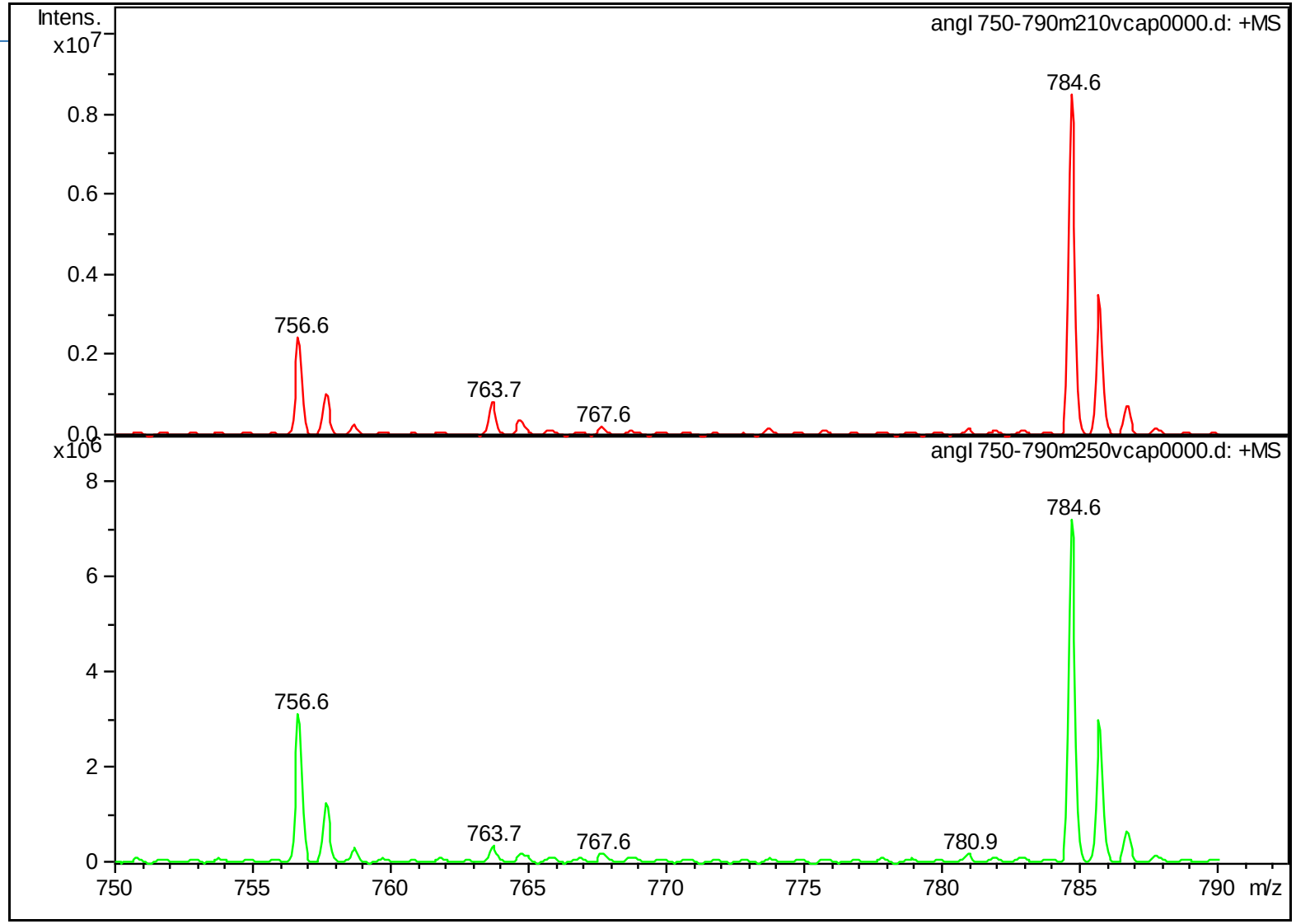
ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 360 – 420 (Da), Vcap 190, 210, 250 (V)



ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 500 – 540 (Da), Vcap 190, 210, 250 (V)

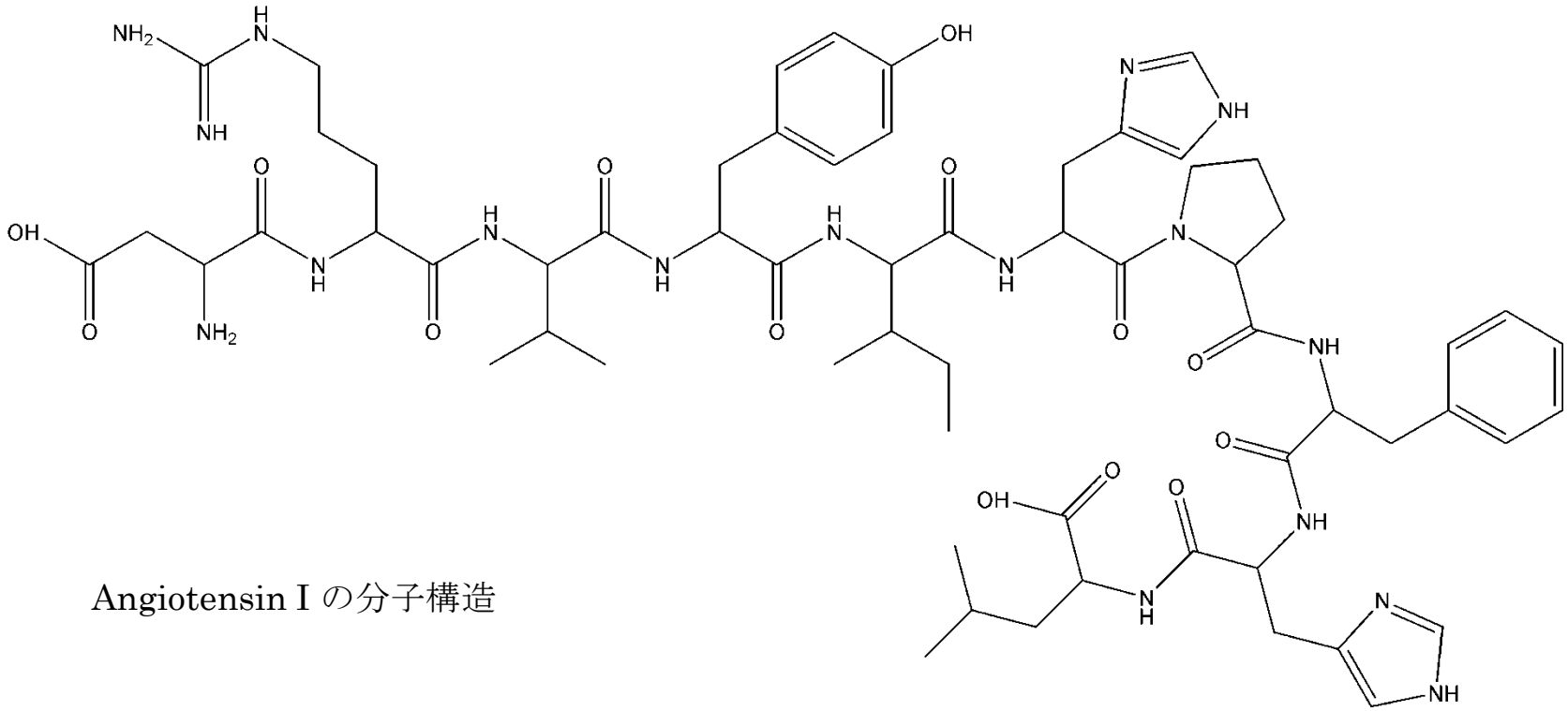


ESI mass spectra of Angiotensin I
Mass Range 750 – 790 (Da), Vcap 210, 250 (V)



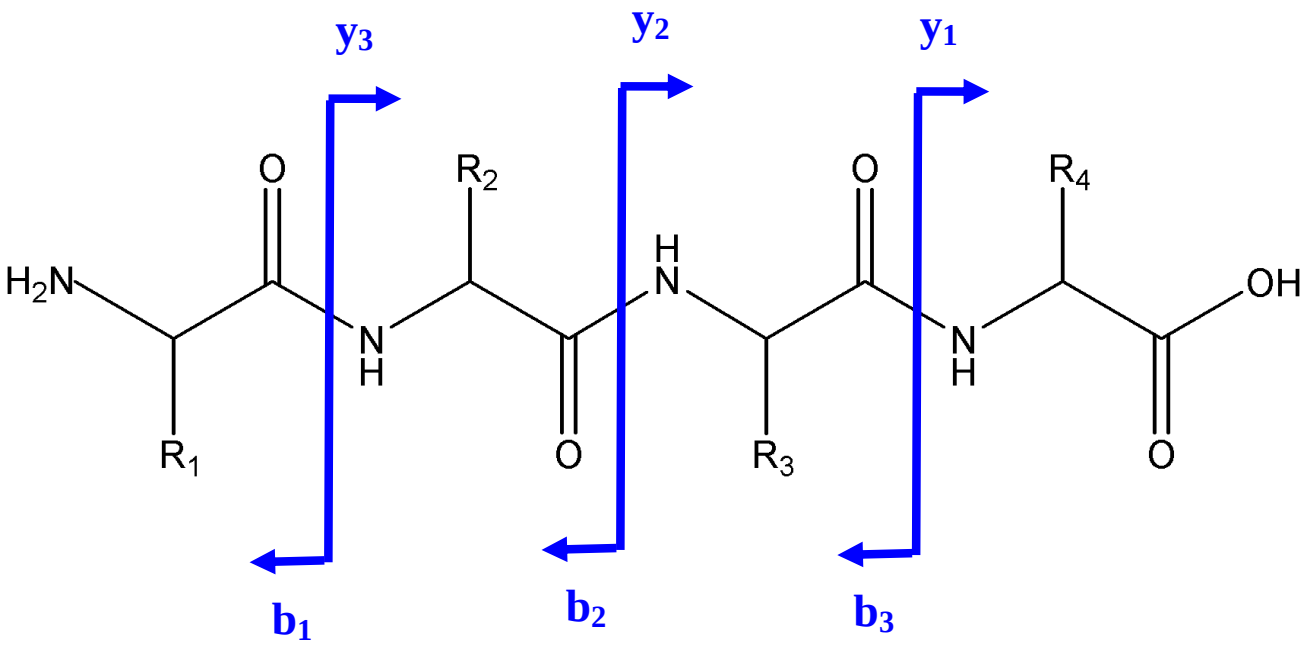
課題；Source CID によるAngiotensin I のfragment ions, b,y

Angiotensin Iのアミノ酸配列
3文字表記；　Asp-Arg-Val-Tyr-Ile-His-Pro-Phe-His-Leu-OH
1文字表記；　DRVYIHPFHL



Angiotensin I の分子構造

CID(collision induced dissociation, 衝突誘起解離)　によるペプチド鎖の切断



CIDにおいては、b,yイオンが優先的に生成される。

課題1．Angiotensin I のSource CID による質量スペクトル中に観測される
269, 272, 371, 416, 513, 534, 784 Da　の生成物イオンを帰属しなさい。

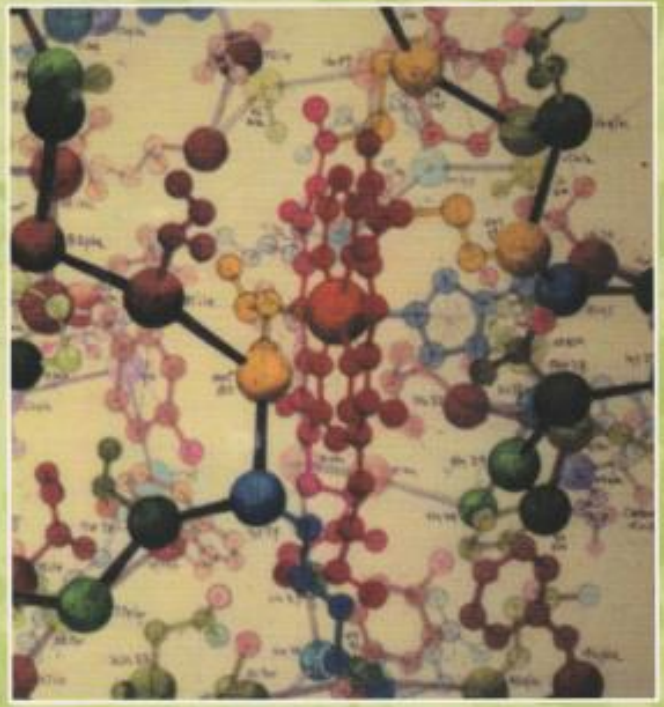
課題2．その他の主な生成物イオンにはどのようなものがあるか？

DONALD VOET・JUDITH G. VOET

ヴォート生化学（上）

第3版

田宮信雄・村松正実・八木達彦
吉田　浩・遠藤斗志也 訳



東京化学同人

表 4・1　タンパクに含まれる標準アミノ酸の構造，表記法とタンパク中の含量およびカルボキシ基，アミノ基，側鎖解離基の pK' 値

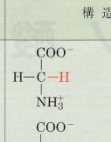
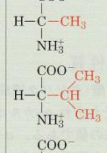
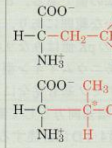
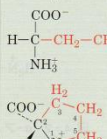
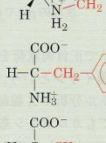
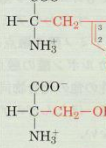
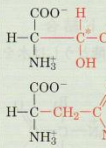
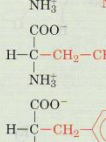
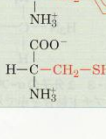
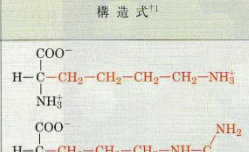
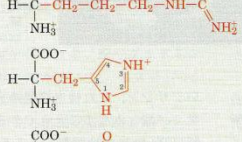
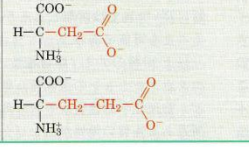
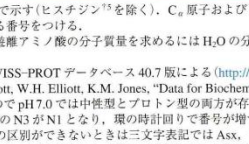
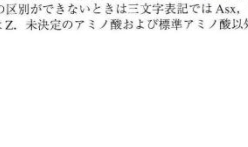
名称，三文字表記，一文字表記		構造式†1	残基質量〔D〕†2	タンパク中の平均含量(%)†3	pK_1'†4 (α−COOH)	pK_2'†4 (α−NH_3^+)	pK_R'†4 (側鎖)
非極性側鎖アミノ酸	グリシン Gly G		57.0	6.8	2.35	9.78	
	アラニン Ala A		71.1	7.6	2.35	9.87	
	バリン Val V		99.1	6.6	2.29	9.74	
	ロイシン Leu L		113.2	9.5	2.33	9.74	
	イソロイシン Ile I		113.2	5.8	2.32	9.76	
	メチオニン Met M		131.2	2.4	2.13	9.28	
	プロリン Pro P		97.1	5.0	1.95	10.64	
	フェニルアラニン Phe F		147.2	4.1	2.20	9.31	
	トリプトファン Trp W		186.2	1.2	2.46	9.41	
極性無電荷側鎖アミノ酸	セリン Ser S		87.1	7.1	2.19	9.21	
	トレオニン Thr T		101.1	5.6	2.09	9.10	
	アスパラギン†6 Asn N		114.1	4.3	2.14	8.72	
	グルタミン†6 Gln Q		128.1	3.9	2.17	9.13	
	チロシン Tyr Y		163.2	3.2	2.20	9.21	10.46 (フェノール基)
	システイン Cys C		103.1	1.6	1.92	10.70	8.37 (−SH 基)

表 4・1　(つづき)

名称，三文字表記，一文字表記		構造式†1	残基質量〔D〕†2	タンパク中の平均含量(%)†3	pK_1'†4 (α−COOH)	pK_2'†4 (α−NH_3^+)	pK_R'†4 (側鎖)
極性電荷側鎖アミノ酸	リシン Lys K		128.2	6.0	2.16	9.06	10.54 (ε−NH_3^+)
	アルギニン Arg R		156.2	5.2	1.82	8.99	12.48 (グアニジニウム基)
	ヒスチジン†5 His H		137.1	2.2	1.80	9.33	6.04 (イミダゾリウム基)
	アスパラギン酸†6 Asp D		115.1	5.2	1.99	9.90	3.90 (β−COOH)
	グルタミン酸†6 Glu E		129.1	6.5	2.10	9.47	4.07 (γ−COOH)

†1　構造は pH 7.0 でおもなイオン型で示す(ヒスチジン†5を除く)．C_α 原子および＊印をつけた原子はキラル中心で，構造をフィッシャー投影式で示す．複素環基には有機化合物命名法による番号をつける．

†2　残基質量は中性型の値とする．遊離アミノ酸の分子質量を求めるには H_2O の分子質量 18.0 D を加える．側鎖だけの質量を求めるにはペプチド部分の値，56.0 D を引く．

†3　タンパク中の平均含量は完全 SWISS-PROT データベース 40.7 版による(http://www.expasy.ch/sprot)．

†4　出典：R.M.C. Dawson, D.C. Elliott, W.H. Elliott, K.M. Jones, "Data for Biochemical Research", 3rd Ed., p.1～31, Oxford Science Publications (1986)．

†5　ヒスチジンの pK_R' は 7.0 に近いので pH 7.0 では中性型とプロトン型の両方が存在する．ヒスチジンのイミダゾリウム基の番号づけは生化学の慣用に従った．IUPAC の方法では生化学慣用の N3 が N1 となり，環の時計回りで番号が増す．

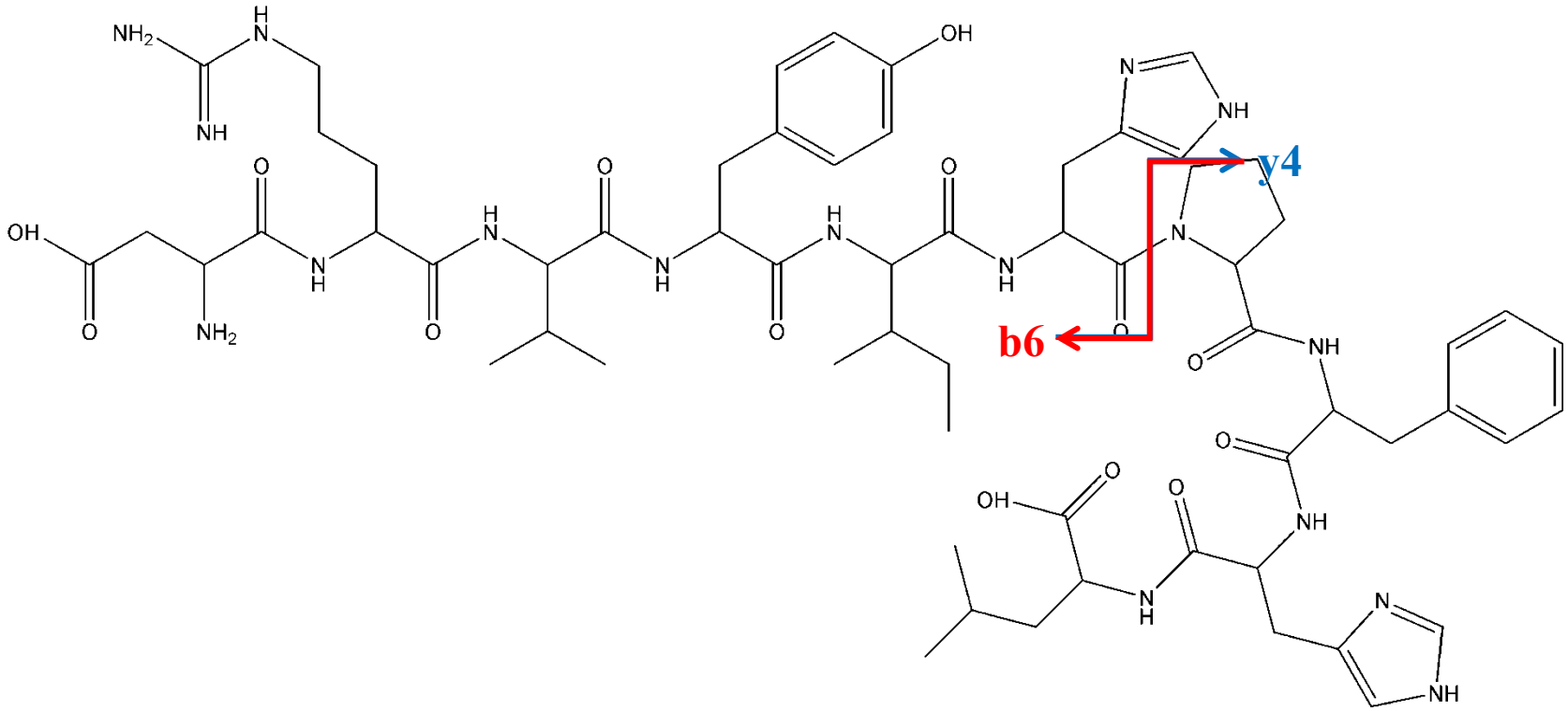
†6　アスパラギンかアスパラギン酸の区別ができないときは三文字表記では Asx，一文字表記では B，グルタミンかグルタミン酸の区別ができないときは三文字表記では Glx，一文字表記では Z．未決定のアミノ酸および標準アミノ酸以外のアミノ酸は一文字表記では X で示す．

例えば・・

Fragment 513 Da = 97 + 147 + 137 + 113 + 19 → Pro-Phe-His-Leu + H_2O-H^+ , **y4**

Fragment 784 Da = 115 + 156 + 99 + 163 + 113 + 137 + 1

→ Asp-Arg-Val-Tyr-Ile-His + H^+ , **b6**



自然科学実験Iaレポート

実習の課題をレポートで提出して下さい。
MS-Wordで作成。A4で5～10枚程度。
（※レポート本文中にマススペクトルを含めない。）
理学系研究棟5階529号室
（部屋のドア脇にあるポスト。）

レポート作成等について、皆様からの質問を**TA**が受け付けます。
質問のある方は、理学系研究棟5階531号室までお越しください。
TAが対応できる時間帯：（月-水）12-16時頃

レポート提出締切:実習日から一週間後

終わり

御静聴を
どうも有り難うございました。

実習レポートの提出を
楽しみしております。