

## 4) 超高分解能 MALDI Spiral-TOFMS によるミコール酸のキャラクタリゼーション

<sup>1</sup>日本電子, <sup>2</sup>NITE NBRC, <sup>3</sup>大阪市環境研, <sup>4</sup>大阪市大

○寺本華奈江<sup>1</sup>, 佐藤崇文<sup>1</sup>, 田村朋彦<sup>2</sup>, 浜田盛之<sup>2</sup>, 鈴木健一郎<sup>2</sup>, 山本敦史<sup>3</sup>, 和田崇之<sup>3</sup>, 藤原永年<sup>4</sup>

ミコール酸は、2-アルキル 3-ヒドロキシ脂肪酸で、その総炭素数は天然有機化合物の中で最も大きい物質のひとつである。特に *Mycobacterium* 属菌が含有するミコール酸の総炭素数は 60-90 程度と大きく、細胞壁の疎水性、抗酸性、物質透過性、病原性、および薬剤耐性等との関連が指摘されている。このため、ミコール酸の生合成や代謝経路は、抗結核薬開発分野で注目されている。また、ミコール酸の官能基や分子種は、*Corynebacterineae* 亜目に属する菌群の化学分類の指標にもなっている。

ミコール酸分析は、薄層クロマトグラフィー (TLC)、高速液体クロマトグラフィー (HPLC)、ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS) などにより行われている。最近では、生体関連試料を分解せずに質量分析できるマトリックス支援レーザー脱離イオン化質量分析 (MALDI-MS) が、TLC により官能基ごとに精製したミコール酸の総炭素数分布を調べるために用いられることもある。TLC は、ミコール酸の存在、およそその総炭素数、および官能基の種類を推定できるが、大量の有機溶媒を使用する上、時間がかかり操作が煩雑である。HPLC のクロマトグラムパターンは *Mycobacterium* 属菌の種を簡易同定するためのプロトコルは整っているが、識別できない種もある。GC/MS は誘導体化が煩雑で、マススペクトルの解析には専門知識や熟練を要する。このように、現在においてもミコール酸の分析は容易ではない。

そこで我々は、TLC による精製を行っていない総ミコール酸画分を質量分解能が高い MALDI Spiral-TOFMS により直接分析して、元素組成に基づいて菌体が含有するミコール酸を分析した。その結果、質量差が僅か 0.036 Da のピークを質量分離できた。これにより、総炭素数、酸素数、および不飽和結合数が異なるミコール酸を質量により識別することができ、菌体が含有するミコール酸を迅速簡便にキャラクタリゼーションした。本手法は、抗結核薬の開発分野や化学分類などに必要な情報を提供できるものとして期待される。