

## マススペクトルによる非経験的ペプチド配列同定法

金澤光洋<sup>1,2</sup>, 安養寺久栄<sup>2</sup>, 荻原淳<sup>2,3</sup>, 長嶋雲兵<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>筑波大学大学院 数理物質科学研究科 (〒305-8577 つくば市天王台 1-1-1)

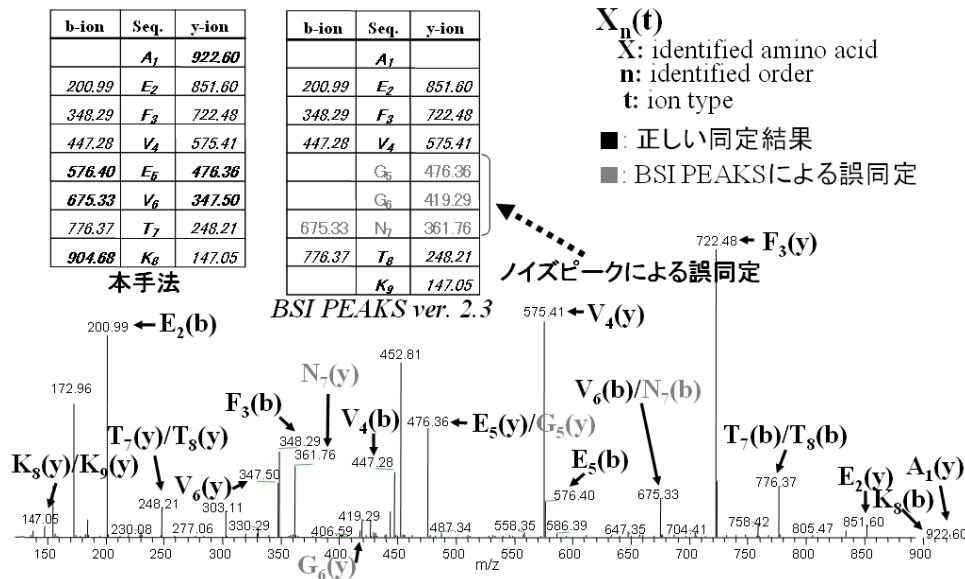
<sup>2</sup>株式会社 メディカル・プロテオスコープ (〒162-0217 新宿区西新宿 2-6-1-17)

<sup>3</sup>東京医科大学 臨床プロテオームセンター (〒162-0217 新宿区西新宿 2-6-1-17)

<sup>4</sup>産業技術総合研究所 グリッド研究センター (〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1)

質量分析計によるアミノ酸配列同定では、1) 既存のアミノ酸配列データベースにマススペクトルを照らし合わせる手法と、2) 測定されたマススペクトルのピーク間隔から得られる質量を元にアミノ酸を直接的に検出する手法が存在する。しかしながら、1) の手法では、データベースに存在しないアミノ酸配列を同定できないだけでなく、誤同定されてしまうケースが多く見受けられる。また、2) の手法においては、ピーク間隔のみを考慮しているためピークがノイズかシグナルかの判定が難しいだけでなく、配列に含まれる全てのペプチドフラグメントが検出されない限り、ペプチド全体のアミノ酸配列同定は困難である。

そこで本研究ではアミノ酸間の結合強度を考慮することで、結合の切断が不均一に起こっているマススペクトルから、データベースに依存しない非経験的にアミノ酸配列同定を行う手法を提案する。この同定手法では、質量分析により検出されるペプチドフラグメントのイオン強度と、アミノ酸-アミノ酸間の結合強度により算出されるピークの出現確率を考慮する評価関数を開発し、高精度なアミノ酸配列同定を実現した。2) の手法として代表的な既存手法 PEAKS と比較することで、我々の手法によるアミノ酸配列 'AEFVEVTK' の同定結果を図に示す。この例では、PEAKS はノイズピークによる誤同定をしており、正しい結果を得ていないが、我々の手法ではピーク強度を考慮することにより正しい解が得られている。本手法の適用により、アミノ酸由来のピークを正確に判別し、精度の高い解析結果を得ることが可能である。



図：PEAKS と本手法によるアミノ酸配列 'AEFVEVTK' の同定結果比較。PEAKS は誤同定。