

解析レポート見本

# 糖鎖解析データのご報告

住友ベークライト株式会社  
S-バイオ事業部

Lot No. XXXXX

# 内容

- サンプル前処理内容
- 測定機器・条件
- 受領した2AB標識糖鎖のLCクロマトグラム
- LCクロマトグラムの各ピークの時間、面積、面積%、面積値より算出される糖鎖量
- 指定されたピークのMSスペクトル
- GlycoModによる糖鎖組成の推定結果
- 各 $m/z$ のMSクロマトグラム

# サンプル前処理

受領サンプル情報

数量：1

検体名：TEST SAMPLE 1

作業内容	特記事項
<ol style="list-style-type: none"><li>1. 受領した2AB糖鎖溶液全量を乾燥</li><li>2. 超純水10 <math>\mu</math>Lに再溶解し、1 <math>\mu</math>Lを用いてLC-MS測定</li></ol>	

# 測定機器・条件

- LC装置** : Nexera (島津製作所)
- LC分析条件
- カラム : ACQUITY UPLC® Glycan BEH Amide, 1.7 $\mu$ m (2.1 mm I.D.  $\times$  150 mm L.)
  - カラム温度 : 40 °C
  - 移動相A : 0.1%ギ酸含有40%アセトニトリル水溶液
  - 移動相B : 0.1%ギ酸含有90%アセトニトリル水溶液
  - 濃度勾配条件 : 表 1 に示す
- 流速 : 0.2 mL/min
- 注入量 : 1  $\mu$ L
- 蛍光検出器 : RF-20A xs (励起波長 330nm, 蛍光波長 420nm)

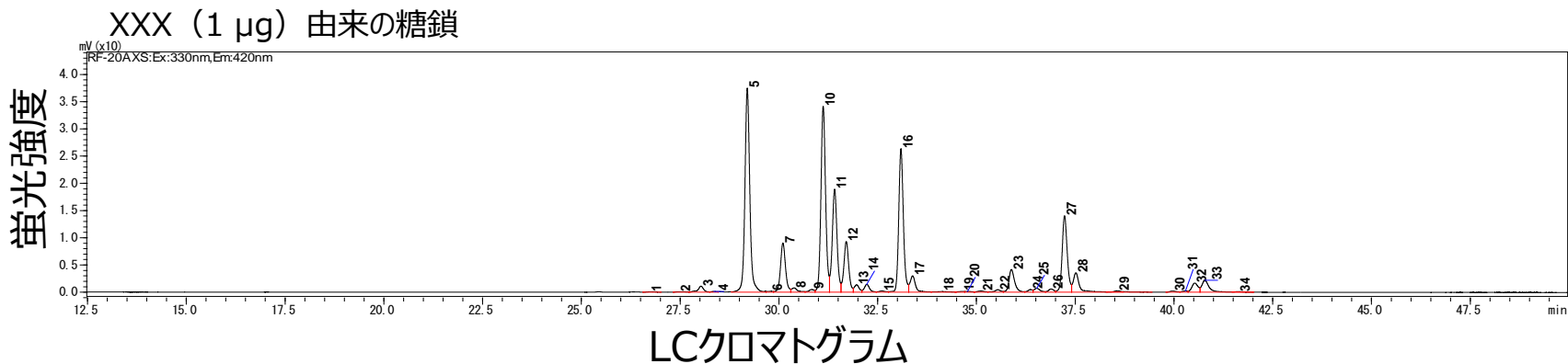
表1. LC濃度勾配条件

時間 (分)	0	50
移動相 A (%)	0	100
移動相 B (%)	100	0

- 質量分析計** : LCMS-IT-TOF (島津製作所)
- 質量分析条件
- イオン化モード : ESIネガティブイオンモード

“TEST SAMPLE 1”

# LCクロマトグラムの各ピークの時間、面積、面積%、面積値より算出される糖鎖量



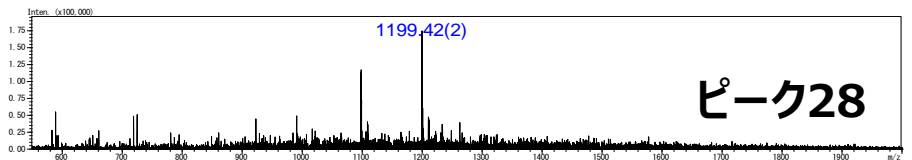
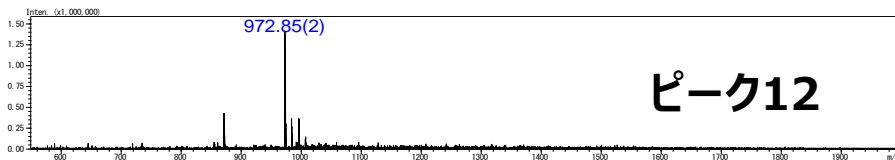
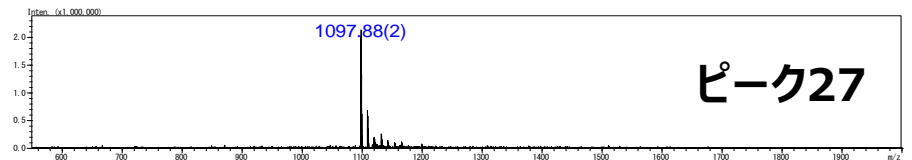
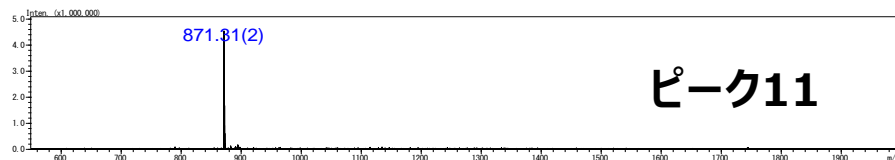
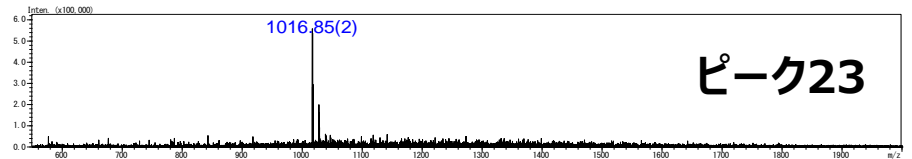
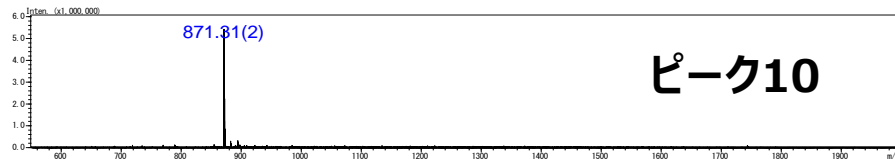
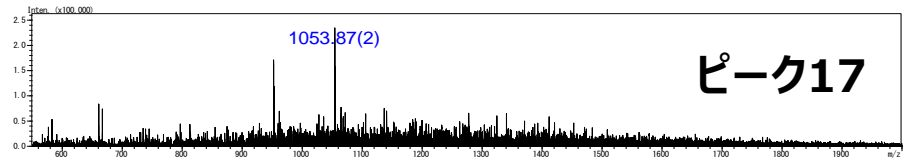
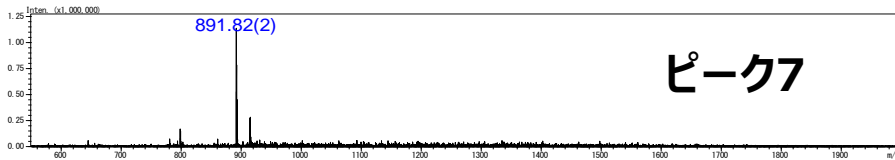
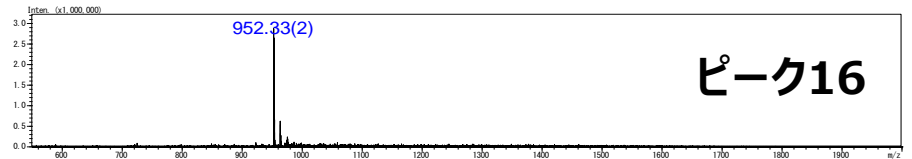
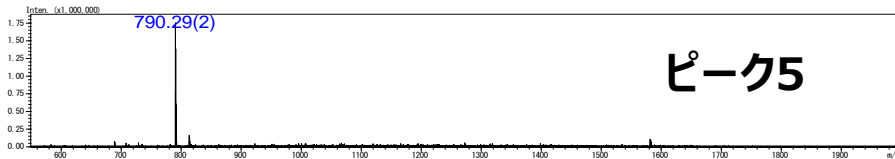
ピーク#	保持時間	面積	ピーク開始	ピーク終了	面積%	糖鎖量(fmol)/1回注入量
1	26.7	1144	26.6	27.0	0.1	8.9
2	27.5	1411	27.3	27.7	0.1	10.1
3	28.0	11509	27.7	28.3	0.8	54.1
4	28.4	1408	28.3	28.5	0.1	10.1
5	29.2	324352	28.8	29.7	21.4	1419.7
6	29.8	1617	29.7	29.9	0.1	11.0
7	30.1	80156	29.9	30.3	5.3	353.8
8	30.4	8469	30.3	30.7	0.6	40.9
9	30.8	4666	30.7	30.9	0.3	24.3
10	31.1	280085	30.9	31.3	18.4	1226.5
11	31.4	159410	31.3	31.6	10.5	699.7
12	31.7	79967	31.6	31.9	5.3	353.0
13	32.0	11607	31.9	32.1	0.8	54.6
14	32.2	13437	32.1	32.5	0.9	62.6
15	32.6	2632	32.5	32.8	0.2	15.4
16	33.1	216010	32.8	33.3	14.2	946.8
17	33.4	28944	33.3	33.9	1.9	130.2

ピーク#	保持時間	面積	ピーク開始	ピーク終了	面積%	糖鎖量(fmol)/1回注入量
18	34.1	2735	33.9	34.5	0.2	15.8
19	34.6	1411	34.5	34.7	0.1	10.1
20	34.8	1655	34.7	34.9	0.1	11.1
21	35.1	2781	34.9	35.3	0.2	16.0
22	35.5	4911	35.3	35.7	0.3	25.3
23	35.9	41770	35.7	36.2	2.7	186.2
24	36.4	3925	36.2	36.4	0.3	21.0
25	36.5	7506	36.4	36.8	0.5	36.7
26	36.9	5513	36.8	37.0	0.4	28.0
27	37.2	125791	37.0	37.4	8.3	553.0
28	37.5	39972	37.4	39.4	2.6	178.4
29	38.6	2202	38.3	38.7	0.1	13.5
30	40.0	2246	39.8	40.2	0.1	13.7
31	40.3	2082	40.2	40.4	0.1	13.0
32	40.5	18342	40.4	40.7	1.2	84.0
33	40.8	28454	40.7	42.0	1.9	128.1
34	41.6	1017	41.5	42.0	0.1	8.3

# 各ピークのMSスペクトル

ご指定いただきました、10個のピークのMSスペクトル（横軸： $m/z$ 、縦軸：シグナル強度）  
 各MSスペクトルにおいて最大強度のシグナルの $m/z$ のみを示しております。括弧内の数値はイオンの価数を示しております。

主要な10個のピークのMSスペクトル（横軸： $m/z$ 、縦軸：シグナル強度）



# GlycoMod toolを用いて検索した結果

※”GlycoMod tool“で推測される糖鎖組成のうち、”GlyConnect database”に登録されているもののみ抽出しております。

peak	obsd m/z	calcd m/z	ion species	Estimated glycan composition ('GlyConnect' database)	URL Link
5	790.29	790.30	[M-2H] <sup>2-</sup>	(HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
7	891.82	891.84	[M-2H] <sup>2-</sup>	(HexNAc) <sub>3</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
10	871.31	871.33	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
11	871.31	871.33	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
12	972.85	972.86	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>3</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
16	952.33	952.35	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>2</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
17	1053.37	1053.38	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>3</sub> (NeuGc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
		1053.39	[M-2H] <sup>2-</sup>	(HexNAc) <sub>1</sub> (Deoxyhexose) <sub>4</sub> (NeuAc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
23	1016.85	1016.87	[M-2H] <sup>2-</sup>	(HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>2</sub> (NeuGc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
		1016.87	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> (NeuAc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
27	1097.88	1097.90	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>1</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>2</sub> (NeuGc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>
		1097.90	[M-2H] <sup>2-</sup>	(Hex) <sub>2</sub> (HexNAc) <sub>2</sub> (Deoxyhexose) <sub>1</sub> (NeuAc) <sub>1</sub> + (Man) <sub>3</sub> (GlcNAc) <sub>2</sub>	<a href="#">GlyConnect</a>

**Tips: レポート上のリンクからGlyConnectデータベースを参照し、糖鎖推定構造、参考文献等を確認できます**

## Abbreviations

Hex: hexose (e.g. mannose, galactose)  
 HexNAc: N-acetylhexosamine (e.g. GlcNAc, GalNAc)  
 Deoxyhexose: e.g. fucose  
 Man: mannose  
 GlcNAc: N-acetylglucosamine

HexA: hexuronic acid (e.g. glucuronic acid)  
 Pent: pentose (e.g. xylose)  
 NeuAc: N-acetylneuraminic acid  
 NeuGc: N-glycolylneuraminic acid  
 Sulph: sulphate  
 Phos: phosphate

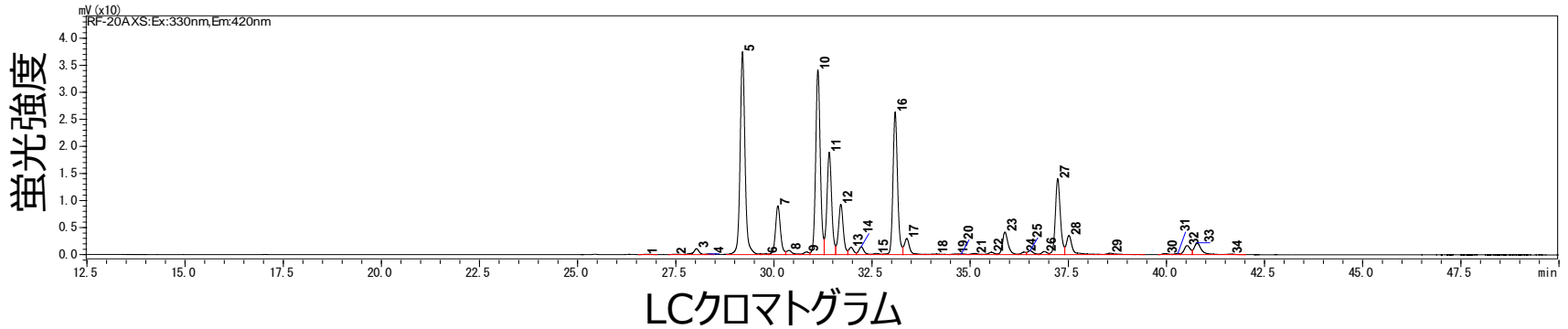
## GlycoMod tool

<https://web.expasy.org/glycomod/>  
 Cooper C.A., Gasteiger E., Packer N.  
 GlycoMod - A software Tool for Determining Glycosylation Compositions from Mass Spectrometric Data  
 Proteomics 1:340-349 (2001).



# 各 $m/z$ のMSクロマトグラム

## ■ 参考データ (LCクロマトグラム)



## ■ ピーク5,7,10,11,12,16,17,23,27,28で得られた $m/z$ のMSクロマトグラム

