

# Proteome Discovererソフトウェア



## 包括的で拡張性のあるプラットフォーム

プロテオミクス研究には単純な同定以上のことが求められます。タンパク質およびペプチド同定からPTM解析、同重体質量タグおよびSILACとラベルフリー定量に至るまで、さまざまなプロテオミクスワークフローで行う複雑な生物学的サンプル中のタンパク質の同定および定量を単純化します。

Thermo Scientific Proteome Discovererソフトウェアは、さまざまな研究ワークフローに柔軟に対応できる分析ツールと使いやすいウィザード型インターフェースを備えています。複数のデータベース検索アルゴリズム（SEQUEST HT、Mascot、Byonic、MS AmandaおよびProSightPD）および複数の解離法（CID、HCD、ETDおよびETHcd）に対応し、より網羅的かつ完全な分析を実現します。

お問い合わせ

無料トライアルをダウンロード

カタログをダウンロード

## 主な利点

### 対応範囲を最大限広げるためにデータ解析をカスタマイズ

ノードベースのワークフローエディタを使用してデータ解析をカスタマイズできます。SEQUEST、Mascot、MSAmanda、Byonic、Thermo Scientific ProSightPDなどの複数の検索エンジンによるデータベース検索結果を統合できます。

### 相対定量を実施

以下の目的で同位体標識したペプチドの相対発現量を測定して報告します：

- TMT SPS MS1
- グリコペプチドの同定および定量
- リン酸化ペプチドの同定および定量
- トップダウンプロテオミクス
- クロスリンク

Proteome Discovererソフトウェア独自の高性能の統計および視覚化ツールを用いて確信を持ってデータを解釈できます。

### ワークフローツールにアクセス

複数の第三者によるアルゴリズムも当社の視覚化および統計ツールに組み込まれており、これを活用して分析のレベルを上げることができます。

## 詳細を見る

複数の解離法、定量技術およびデータベース検索アルゴリズムに対応し、網羅的なタンパク質同定、特性評価、定量を実現するProteome Discovererはプロテオミクス研究の包括的なツールです。

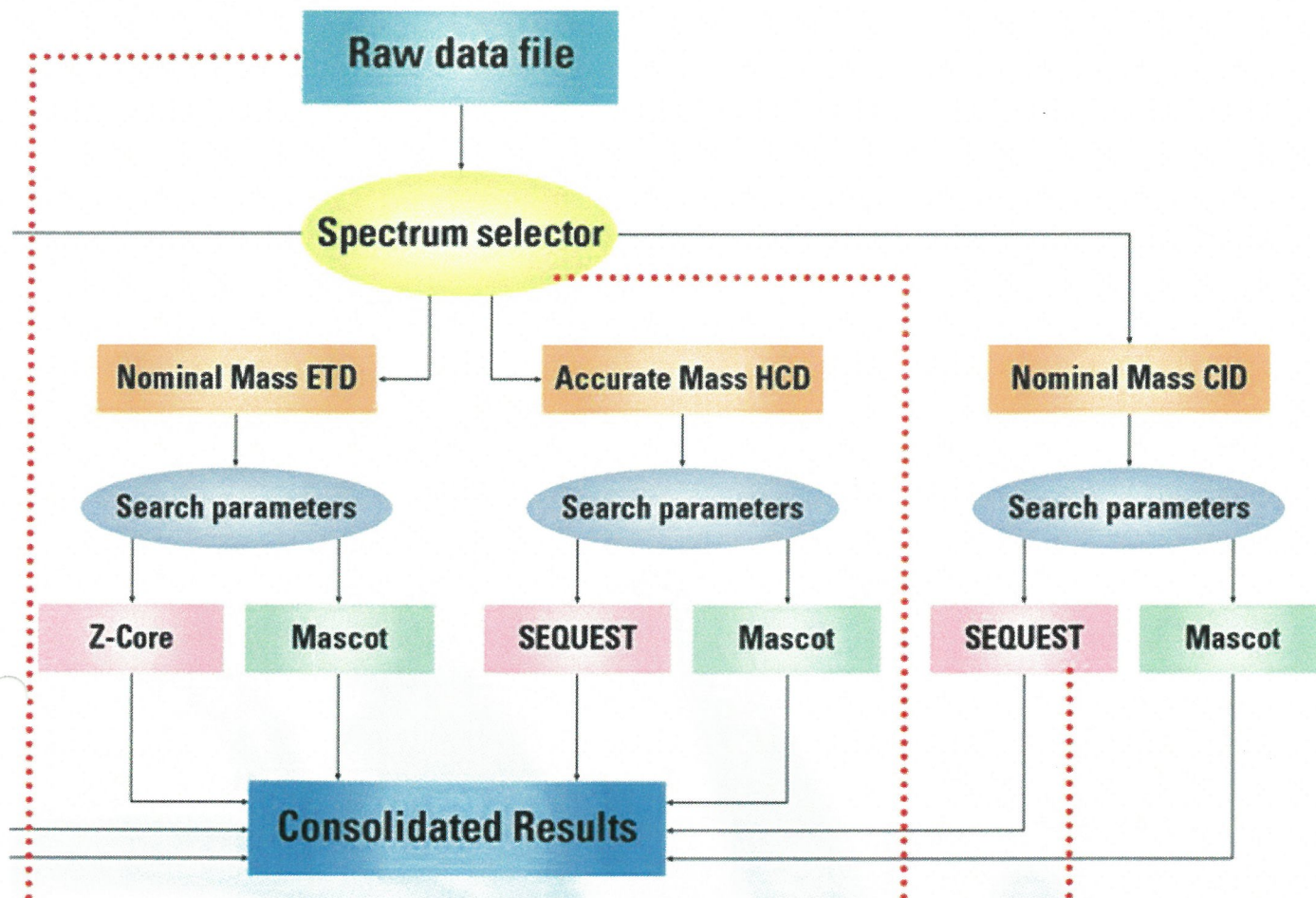
### 研究を支える包括的なツールセット

SEQUESTのさまざまな検索アルゴリズム（Mascot、MS Amanda、ByonicおよびProSightPD）を用いて、複数のアルゴリズムで得られた結果を統合できるため、結果のクロスバリデーションを実施でき、より確信を持って判断できます。

衝突誘起解離（CID）、高エネルギー衝突解離（HCD）、電子移動解離（ETD）といった複数の解離法に対応しているため、十分な配列カバレッジで信頼性の高い翻訳後修飾（PTM）の同定が行えます。

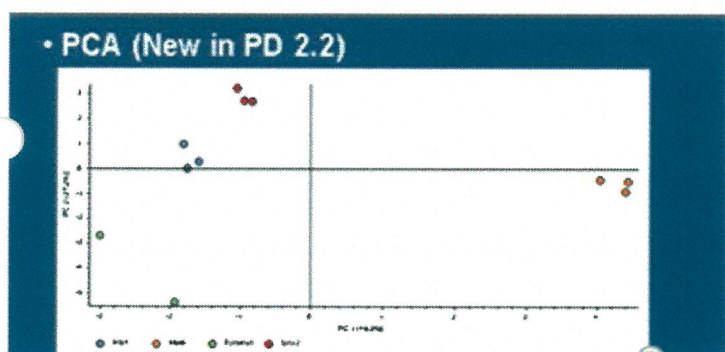
さらに、TMTおよびiTRAQを用いた同重体質量タグ、SILACによる同位体標識、ラベルフリー定量法に完全対応し、お客様のラボラトリーの分析で柔軟にご使用になれます。

### カスタマイズデータ解析

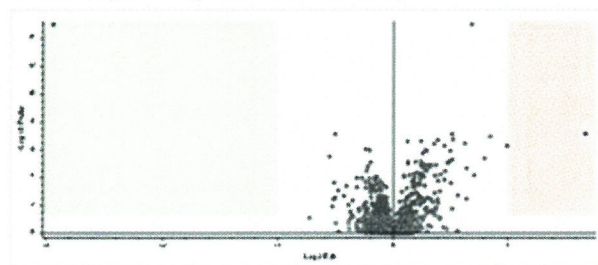


Automate data analysis and simplify MS<sup>n</sup> data analysis through customizable workflows. An example of a customizable workflow with eight separate searches on the same raw file.

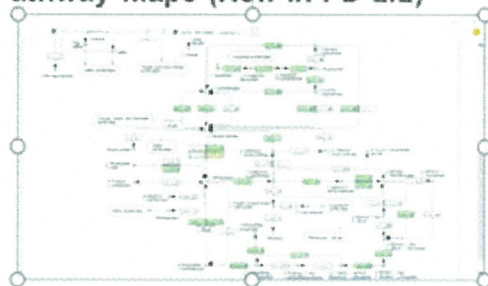
## 相対定量



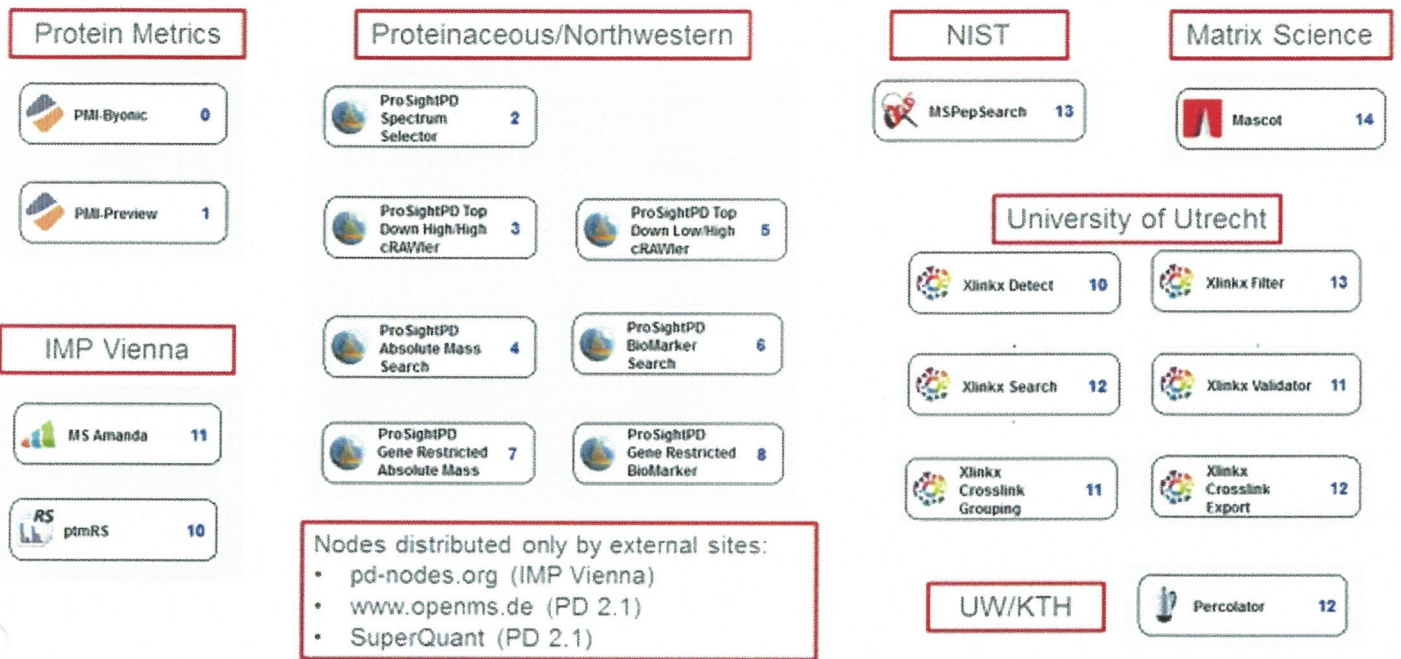
## • Volcano plots (New in PD 2.2)



## • Pathway maps (New in PD 2.2)



Proteome Discoverer Tools for statistical and biological interpretation. Includes study management for mapping of quantitation channels to biological information about the sample, with fast, robust algorithms for peak selection and peptide quantification to extract the maximum possible information from quantitative proteomics studies.



Third party nodes for data processing, facilitates the processing of large datasets. Additionally, biological context by automatically annotating identified proteins with GO classifications, PTMs sites, and literature references from public databases (active maintenance required) can be illustrated.

Effective location of low-level sample components using creative data interrogation strategies such as generating inclusion and exclusion lists and importing those lists directly into instrument methods is provided, and data comparison, exchange, and verification with support for data standards developed by the HUPO Proteomics Standards Initiative (PSI) is additionally supported.

#### サードパーティーのノードをダウンロード

## KEGGライセンスキーへのアクセス

以前ご利用いただいたことのあるお客様には、2019年用の新しいKEGGライセンスキーをご用意しております。

KEGGライセンスを有効化するには、Administration > Manage Licensesページで「Add Activation Code」をクリックし、このライセンスキーを入力してください：

WUC2-1MNB-D2GX-1MZ4

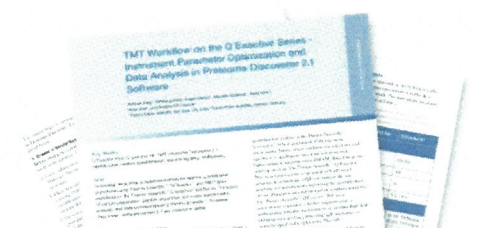
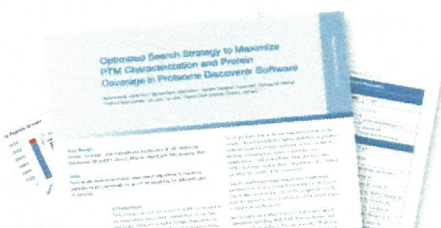
サポートが必要な場合はこちらからご連絡ください。

## 関連するコンテンツ

アプリケーションノート

アプリケーションノート

アプリケーションノート



Proteome Discovererソフトウェアにおいて、PTMの特性

ハイスループットプロテオミクスを可能にする非常に高感

Q ExactiveシリーズにおけるTMTワークフロー -

評価とタンパク質カバレッジを最大化するよう最適化された検索ストラテジー（英語）  
度の堅牢な150  $\mu$ mカラム（英語）

Proteome Discoverer 2.1ソフトウェアにおける装置パラメーターの最適化およびデータ解析（英語）

## 注文ガイド



### お問い合わせ

Proteome Discovererソフトウェアの無料トライアルを最大限活用できるようにお手伝いいたします。使用法についてのご質問がある場合や担当者からの連絡をご希望の場合は、当社にお問い合わせください。

連絡のご依頼

## リソース

カタログ：Thermo Scientific Proteome Discoverer：タンパク質科学者のための質量インフォマティクスプラットフォーム（英語）

タンパク質分析向け質量分析の概要

Planet Orbitrap

## サポート

Unity Lab Services

Thermo Fisher Connect

Orbitrap質量分析

MSラーニングセンター

LC-MS装置サポートセンター

液体クロマトグラフィー質量分析ソフトウェアのサポート

HPLCのTipsのe-learning



The leading software package for protein identification and characterisation using mass spectrometry data

Mascot Serverは、質量分析計で測定されたタンパク質あるいはペプチドの質量スペクトルに一致するアミノ酸配列をタンパク質・ゲノムの配列データベースやスペクトルライブラリから検索し、試料に含まれるタンパク質を同定するためのソフトウェアです。以下の質量分析計ベンダーの質量ピークリストを使って検索する事ができます。

- AB Sciex
- Bruker
- Shimadzu
- Waters
- Agilent
- Jeol
- Thermo Scientific

Mascot検索によって検出されたタンパク質またはペプチドは確率的なスコアリングアルゴリズムによって処理され、統計的に有意なタンパク質・ペプチドは期待値（または期待値に対応するスコア）と偽陽性率（FDR）によって明確に区別され、同定されたかどうかを直感的にわかりやすい形式で可視化します。

無料でご利用いただける Mascot 検索サーバをインターネット上に公開しています。お客様の Web ブラウザからアクセスできますのでお試しください。なお、より多くの方に快適にお使いいただくため、投入できる質量データサイズ等に若干の制限があります。詳しくは FAQ ページをご覧ください。

ペプチドイオン質量スペクトルに一致するタンパク質を探します

プロダクトイオン質量スペクトルに一致するペプチドを探します

配列タグに一致するペプチドを探します

Mascot検索サーバは、

1. Mascot Serverソフトウェア
2. Webサーバーアプリケーション（IISあるいはApache）
3. ソフトウェアを走らせるPC（WindowsまたはLinux）

**Your name** Matrix Science      **Email** info@matrixscience.com

**Search title**

**Search title**

|                         |   |                           |
|-------------------------|---|---------------------------|
| Human_EST (NA)          | > | Mammalia_EST              |
| PRIDE_Contaminants (SL) | < | Mag_EST                   |
| SesapPilot (AN)         |   | Plants_EST                |
|                         |   | Prokaryotes_EST           |
|                         |   | Rodents_EST               |
|                         |   | Vertebrates_EST           |
|                         |   | Spectral library (SL)     |
|                         |   | NIST_Mouse IonTrap        |
|                         |   | NIST_S_cervinaeae IonTrap |
|                         |   | PRIDE_Human               |

**Taxonomy** [ ] Primates

**Enzyme** TrypsinP      **Allow up to** 2 missed cleavages

**Quantitation** None

**Crosslinking** Disulfide bridge in Elongation factor 2 in human

**Fixed modifications** Carbamidomethyl (C)

Display all modifications

**Variable modifications** Oxidation (M)

**Peptide tol.** 1 ppm @ 1<sup>st</sup> C

**MS/MS tol.** 1 ppm

**Peptide charge** 2+      **Monoisotopic** ☒ **Average** ☐

**Data file** ファイルを選択 neo\_sample.mgf

**Data format** Mascot generic      **Precursor** ☐ m/z

**Instrument** CID+ETD      **Error tolerant** ☐

**Decoy** ☐ **Report top** AUTO hits

**Start Search** **Reset Form**

[illegible]

[illegible]

- 
- The screenshot shows a Windows desktop with a taskbar at the bottom containing icons for Internet Explorer, Google Chrome, and several folders. The active window is a web browser displaying a search engine results page for the query "IP Address". The search results include a link to "IP Address - Wikipedia" and a table of IP addresses.
- The table has the following columns: **IP Address**, **OS**, **Resolving**, **Physical Memory**, **Swap Size**, and **Disk Space**. The table contains 10 rows of data, each representing a different IP address and its associated system information.
- | IP Address   | OS    | Resolving | Physical Memory | Swap Size | Disk Space |
|--------------|-------|-----------|-----------------|-----------|------------|
| 192.168.1.1  | Linux | 0.0       | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.2  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.3  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.4  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.5  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.6  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.7  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.8  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.9  | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |
| 192.168.1.10 | Linux | 0         | 4.75 GB         | 0.00 GB   | 4.80 GB    |

バージョン情報

- 2021年7月リリース
- 最新バージョン **2.8.2** (パッチリリース日:2022年8月)
- 新規サポート機能 : Error Tolerant検索に対する新しいアルゴリズムの適用, 検索速度向上, ...[さらに見る](#)
- ◆ Windows版
  - リリースノート
  - 新規インストール手順
  - 新規インストール手順におけるクラスターシステム補足
  - アップグレード手順
- ◆ Linux版
  - リリースノート
  - 新規インストール手順
  - 新規インストール手順におけるクラスターシステム補足
  - アップグレード手順

Version 2.6 +

Version 2.4 +

Version 2.3 +

Version 2.2 +

Version 2.1 +

Version 2.0 +

Version 1.9 +

## サポート

---

### ▷ オリジナルデータベースの作成・更新方法

テキストエディタを使ってオリジナルのデータベースファイルをご自身で作成する方法について説明しています。

### ▷ 検索対象の生物種を予め絞り込んだUniprotKBデータベースの作成手順

NCBIprotの代わりにお勧めのUniprotKBをMascot Serverで使用可能にする方法について説明しています。

### ▷ SwissProtの手動更新方法

SwissProtデータベースを手動で更新する方法について説明しています。

### ▷ Taxonomyリストの変更方法について

検索条件設定画面の「Taxonomy」リストを変更する方法について説明しています。

### ▷ データベース管理マニュアル

データベースの登録、更新などを行う設定画面「Database manager」について説明しています。

### ▷ Mascot Server取扱説明書

Mascot Serverの使い方を説明しています。

### ▷ ユーザ管理とセキュリティ機能の使い方

ユーザ管理とセキュリティ機能の使い方を説明しています。

### ▷ 消化酵素の新規登録・変更方法

消化酵素の新規登録、登録内容の変更方法を説明しています。

### ▷ 修飾エディタの使い方

Mascot Server 2.2からサポートしたブラウザベースの修飾エディタの使い方を説明しています。

### ▷ 検索結果ログの構造

検索結果ログの構造について説明しています。

### ▷ robocopyプログラムを利用したMascot Server検索結果のバックアップ

マイクロソフトが提供する高機能バックアッププログラム「robocopy」を利用したMascot Server検索結果ファイルのバックアップ方法について説明しています。

### ▷ Windows7からWindows10へのアップグレード手順

Mascot Server PCにインストールされているWindows7をWindows10にアップグレードする手順について説明しています。

### ▷ 消化酵素のデータフォーマット

消化酵素のデータフォーマットについて説明しています。

### ▷ 修飾のデータフォーマット

修飾のデータフォーマットについて説明しています。



5

タンパク質同定結果検証・整理 ソフトウェア

# Scaffold 5



MASCOT など各種検索エンジンの検索結果を取り込み、結果をサンプル毎にまとめて表示したり、結果の検証に役立つアルゴリズムを適用したり、様々な生物学的情報の表示を行うソフトウェアです

## [ 主な特徴・機能 ]

- MASCOT など各種検索エンジンの結果を取り込み、サンプル間比較の表を作成
- 内部搭載している X!Tandem でデータ取り込み時に追加の検索が実施可能
- データ取り込みのバッチ処理 **new !**
- データ取り込み時に独自の同定結果検証アルゴリズムを適用
- 表示するタンパク質・ペプチドの基準をインタラクティブに変更可能
- 同定タンパク質-同定ペプチドの関係性の確認やスペクトルデータの検証が容易
- ベン図を使ってサンプル間共通/サンプル独自 のタンパク質・ペプチドをリストアップ
- Gene Ontology 情報付与・表示
- Pathway データベースへのリンク
- 複数の Spectral Counting に対応。Precursor Intensity を利用した定量手法にも一部対応
- 論文の method 記述サポートと repository サイト投稿補助
- XLS フォーマットで結果内容を出力
- 無償 Viewer ソフトウェアを使って結果のシェアが容易に
- Scaffold Q+S[オプション]により、定量解析結果の取り込みと表示が可能となります

## 検索エンジンの結果取り込みとサンプル間の比較表作成 / Gene Ontology 情報付与・表示

| #  | Visible?                            | Starred?                            | Bio View:<br>Identified Proteins (32) | Accession N | Molecular We | Protein Group | Taxonomy | biological reg | cellular proce | development? | metabolic pro | multicellular | response to s | cytoplasm | cytoskeleton | endosome | extracellular | membrane | mitochondriol | nucleus | organelle par | plasma mem | binding | catalytic acti | enzyme regul | molecular fun | structural mc | 1_M | 1_G |
|----|-------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------|--------------|---------------|----------|----------------|----------------|--------------|---------------|---------------|---------------|-----------|--------------|----------|---------------|----------|---------------|---------|---------------|------------|---------|----------------|--------------|---------------|---------------|-----|-----|
| 1  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P02470) Alpha crystallin A ch...     | CRYAA_BOVIN | 20 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 27            | 29  |     |
| 2  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P07318) Beta crystallin B1           | CRBB1_BOVIN | 28 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 32            | 33  |     |
| 3  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P02470) Alpha crystallin A ch...     | CRYAA_BOVIN | 20 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 27            | 29  |     |
| 4  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P07318) Beta crystallin B1           | CRBB1_BOVIN | 28 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 32            | 33  |     |
| 5  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P02470) Alpha crystallin A ch...     | CRYAA_BOVIN | 20 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 27            | 29  |     |
| 6  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P07318) Beta crystallin B1           | CRBB1_BOVIN | 28 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 32            | 33  |     |
| 7  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P02470) Alpha crystallin A ch...     | CRYAA_BOVIN | 20 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 27            | 29  |     |
| 8  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P07318) Beta crystallin B1           | CRBB1_BOVIN | 28 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 32            | 33  |     |
| 9  | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P02470) Alpha crystallin A ch...     | CRYAA_BOVIN | 20 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 27            | 29  |     |
| 10 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | (P07318) Beta crystallin B1           | CRBB1_BOVIN | 28 kDa       | Bos taurus    |          |                |                |              |               |               |               |           |              |          |               |          |               |         |               |            |         |                |              |               | 32            | 33  |     |

表示するタンパク質・ペプチドの基準をインタラクティブに変更可能

ペプチド/タンパク質の FDR、  
アサインペプチド数でのフィルター

Pathway データベースへのリンク

The screenshot shows the KEGG Pathway database interface. The search bar contains 'Fabp1' and the results show '15 pathways found'. A red arrow points from the text 'Pathway 情報サイトへのリンク' to the search bar.

## スペクトルデータの検証



## 理論値ベースのマッチング確認

ベン図を使ってサンプル間共通/サンプル独自の  
タンパク質・ペプチドをリストアップ



- MASCOT
- Proteome Discoverer
- MaxQuant
- PLGS-Identity
- その他 mzIdentML で出力した検索エンジンの結果(PEAKS,Protein Pilot など)

## インストールするコンピュータの推奨スペック

**メモリ** : 32GB 以上      **ディスク** : SSD (HDD と合わせて 1TB 以上)

マトリックスサイエンス株式会社

