

Mascot Server 2.5 New

1. 混合スペクトル(Chimeric spectra) 対応

1つのプロダクトイオンマススペクトルデータに複数のペプチド由来のデータが混合しているデータの検索が可能となりました。mgf ファイルの中にペプチドの質量に関する情報を複数与えて検索し、ペプチドの質量を指定した分の query が生成されます。

BEGIN IONS

TITLE=15397: Scan 18999 (rt=3168.16)

PEPMASS=756.94206 1583103.2 2+

PEPMASS=757.40156 2243692 2+

CHARGE=2+

SCANS=18999

RAWSCANS=sn18999

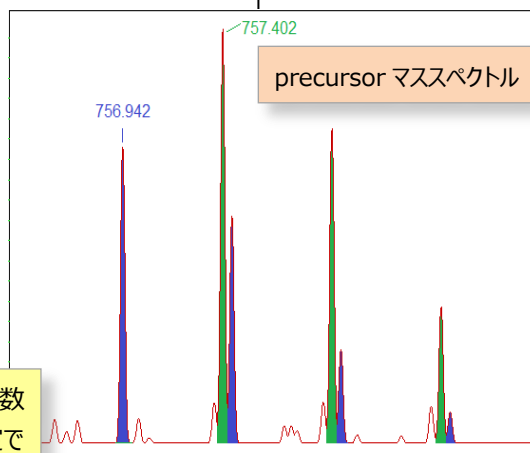
RTINSECONDS=3168.1628

105.05717 5843.5938

...

END IONS

mgfファイルの中で複数のペプチド質量を指定できます。



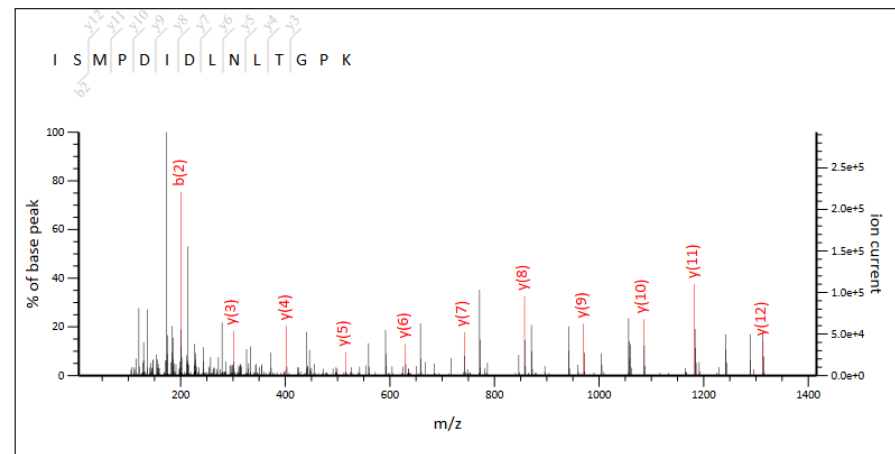
1つのスペクトルデータから複数の query が生成されます。

```
20796 756.94206 1511.86957 1511.86716 1.59 0 57 4.1e-006 ▼1 U K.TVAGQDAIVLLGTR.N  
No other peptide matches in query
```

```
20797 757.40156 1512.78857 1512.78577 1.85 0 34 0.00066 ▼1 U K.ISMPDIDLNLTPGPK.I  
No other peptide matches in query
```

2. 新しくなったスペクトルビューワー

スペクトルビューワーが刷新されました。色分け表示がカーソルの動きに合わせてインタラクティブに変化するほか、SVG形式による出力にも対応します



3. 入力ファイルのダウンロード対応

Webブラウザからのデータアップロードだけでなく、ダウンロード場所を指定する事でも入力データを MASCOT へ投入可能となりました。入力データのサイズが非常に大きく途中でアップロードがエラーになってしまう場合にご利用ください。

Peptide charge: 2+ Monoisotopic Average

Data file No file selected.

Data input Data URL (http OR ftp)
ftp://PASS00138:IG4328f@ftp.peptideatlas.org/IEC6-NuclIPD_0min-0mM-R2-1.mgf

Data format: Mascot generic Precursor: m/z



マトリックスサイエンス株式会社

電子メール : support-jp@matrixscience.com

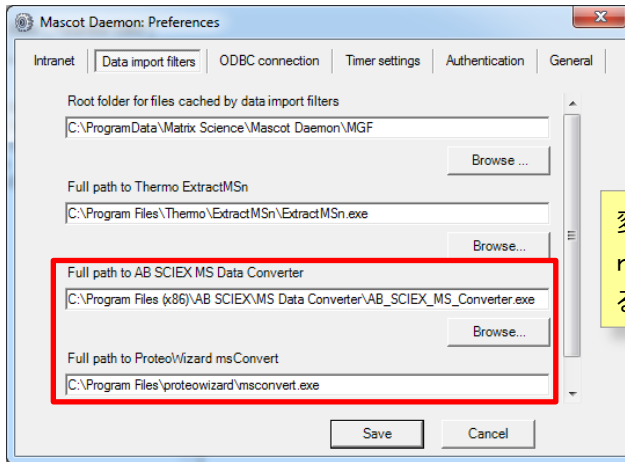
電話 : 03-5807-7895 ファクシミリ : 03-5807-7896

住所 : 〒101-0021 東京都千代田区外神田 6-10-12 KNビル 3階

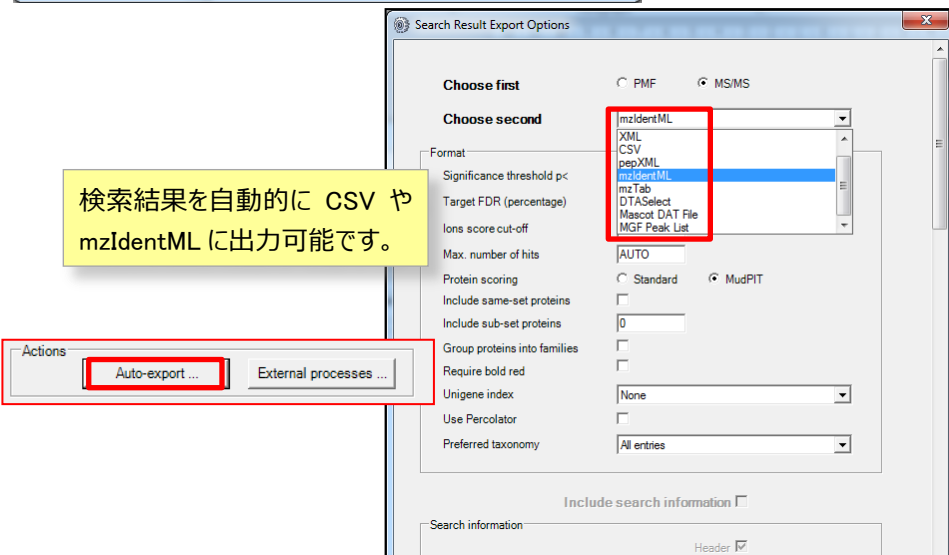
4. Daemon 64bit 対応

Daemon が 64bit 版対応となりました。併せて以下の 4 つの機能も追加されました。

1. raw データ変換プログラム : 「AB Sciex MS Converter」
「msconvert (ProteoWizard 社)」に新たに対応しました。
2. 検索後の自動ファイル出力機能
3. 入力データサイズ上限の緩和
4. parameter ファイルのデータベース化 (既存の方式のままでも使用可能です)



変換プログラムの使用により、raw データを直接検索にかけることができます。



検索結果を自動的に CSV や mzIdentML に出力可能です。

5. 修飾解析結果のサマリー表示

検索時に指定した修飾を持つペプチドの数が結果画面内で一覧表示されるようになりました。

▶ Score distribution				
▼ Modification statistics				
Modification	Site	Above thr.	ET	Total matches
Oxidation	M	13	0	13
Acetyl	N-term	8	0	8
Carbamidomethyl	C	7	0	7
Non-specific cleavage	-	0	5	5
Carbamidomethyl	N-term	0	3	3
Carbamidomethyl	K	0	2	2

6. サーバー管理機能の強化

- 修飾の設定について、Private / public の分離がされました。独自の修飾設定を保ちながら unimod ファイルの更新をすることが可能です。
- Private の FASTA ファイルを web ブラウザからアップロード・設置可能になったほか Database Manager の GUI が改善されました。

7. WEB ページレイアウト変更

MASCOT の WEB ページレイアウトが一新されました

