

消化酵素の新規登録・変更方法（enzymes）

Mascot 検索における残基特異的蛋白質分解酵素やペプチド結合切断試薬の切断特性は enzymes ファイルの中で定義されており、このファイルの内容が Mascot 検索設定画面の「Enzyme」欄に表示されるリストに対応しています。

enzymes ファイルはテキストで構成されており、登録項目並びにその内容は次のような書式で定義されています。

1. enzymes ファイルの存在場所

[インストールフォルダ(通常は C:\inetpub)]\mascot¥config フォルダにあります。

2. 基本書式

ひとつのペプチド結合切断特性は複数のキーワード行で構成・定義され、他のペプチド結合切断特性定義とはアスタリスク（*）行で区切ります。

```

Title:Trypsin
Cleavage:KR
Restrict:P
Cterm
*
Title:Asp-N
Cleavage:DB
Nterm
*

```

“Trypsin” のペプチド切断特性定義

“Asp-N” のペプチド切断特性定義

各キーワード行は次の内容を持っています。

1 行目（Title 行）：

登録名定義行です。この行は必ず 1 行目に定義してください。“Title:” キーワードの後にタイトルとなる文字列が続きます。この文字列は Mascot 検索設定画面の「Enzyme」欄に表示されます。短くかつ意味が把握できる文字列を定義してください。構成する文字列は英数文字（alphanumeric character）およびスペースに限られます。また、文字と文字の間のスペースは意味を持ちます（保持されます）。

2 行目（Cleavage 行）：

切断サイト定義行です。“Cleavage:” キーワードの後に切断サイトを指定するためのアミノ酸残基名文字列が続きます。

3 行目：

オプション行です。“Restrict:” キーワードの後に切断制限アミノ酸残基名文字列が続きます。ここで

指定したアミノ酸残基が“Cleavage:”キーワードで指定したアミノ酸残基の隣に存在する場合は、その切断サイトで切断されないように指定することができます。

4行目：

切断方向定義行です。“Cterm”または“Nterm”キーワードにより、C末端側あるいはN末端側の切断を指定します。

3. 拡張書式：Independent 行

“Cleavage:”、“Restrict:”、Cterm、Nterm キーワードの後にインデックス番号を追加し、“Independent:”キーワードと組み合わせることにより、複数の切断特性をまとめて定義することができます。

```
Title:CNBr+Trypsin
Cleavage[0]:M
Cterm[0]
Cleavage[1]:KR
Restrict[1]:P
Cterm[1]
Independent:0
*
```

“Independent:”キーワードは定義された複数の切断特性を独立に反映させるかどうかのスイッチとして働き、この例では、インデックス番号“[0]”と“[1]”で定義された切断特性と“Independent:0”（切断特性同時反映）が組み合わせられ、切断特性[0]と[1]が同時に反映されます。なお、“Independent:0”は省略することができます。

“Independent:1”を指定した場合は、定義された切断特性が独立に反映されます。たとえば、ひとつの試料を2つに分け、一方には切断特性[0]を、もう一方には切断特性[1]を独立に適用した後、これらの試料を合算した場合に対応します。

4. 拡張書式：SemiSpecific 行

Mascot 検索設定画面の「Enzyme」欄において「None」を選択した場合、（特別な切断特性を考慮せず）すべてのペプチド結合を切断して得られるペプチド群に対して Mascot 検索を実行することができますが、“SemiSpecific:”キーワードを追加することにより、定義した切断特性と「None」を組み合わせた切断特性を定義することができます。

```
Title:semiTrypsin
Cleavage[0]:KR
Restrict[0]:P
Cterm[0]
SemiSpecific:1
*
```

“SemiSpecific:1”を指定した場合は、定義した切断特性に従い生成したペプチド群に対し、それらの切断面（上の例ではC末端側）とは逆の切断面（N末端側）方向に存在するペプチド結合も任意に切断します。

“SemiSpecific:0”を指定した場合は、定義した切断特性のみを考慮します（“SemiSpecific”行を指定しない場合と同じ意味になります）。

5. 編集方法その1：テキストエディタを利用して enzymes ファイルを編集する

テキストエディタを使って enzymes ファイルを開き、編集してください。

なお、enzymes ファイルを編集する前に必ずバックアップを取ってください。

6. 編集方法その2：ブラウザベースの Enzymes Configuration Editor を利用する

トップページの [Configuration Editor] リンクをクリックしてください。[Mascot Configuration] ページが開きますので、[Enzymes] リンクをクリックしてください。次のように、[Mascot Configuration: Enzymes] ページが表示されます。

Mascot Configuration: Enzymes ページ

The screenshot shows the 'Mascot Configuration: Enzymes' page. The table below is a representation of the data shown in the image:

Title	Sense	Cleave at	Restrict	Independent	Semispecific	
Trypsin	C-Term	KR	P	no	no	Edit Delete
Arg-C	C-Term	R	P	no	no	Edit Delete
Trypsin+V8-E/P	C-Term	KR	P	no	no	Edit Delete
semiTrypsin	C-Term	E7	P	no	yes	Edit Delete
None						

Callouts in the image provide the following information:

- Edit リンク: 登録内容を変更することができます。** (Edit link: You can change the registration content.)
- 新規に登録することができます。** (You can register new ones.)
- Mascot Configuration ページに戻ります。** (Returns to the Mascot Configuration page.)
- 登録を削除します。** (Deletes the registration.)

登録項目毎に [Edit] および [Delete] リンクがあります。[Edit] リンクをクリックすると登録内容を示すページ([Edit Enzyme: 登録名] ページ)が表示されますので、登録内容を変更し、[Save Changes] ボタンを押してください。また、[Delete] リンクをクリックすると登録項目を削除することができます。

[Add new enzyme] ボタンを押すと [Add new enzyme] ページが表示されますので、登録したい内容を入力または選択し、[Save new Enzyme] ボタンを押してください。次の例では Trypsin の切断特性と Asp の N 末端側での切断特性を同時に満たす内容になっています。必要に応じて [Protein] 欄に入力したアミノ酸配列に対する生成ペプチドを [Test Enzyme] ボタンで確認してください。

Add new enzymes ページ

Add new enzyme

General

Title: Trypsin+AspN

Independent

Semispecific

Components

#	Sense	Cleave At	Restrict	Delete
1	C-Term	KR	P	<input type="checkbox"/>
2	N-Term	D		<input type="checkbox"/>

Add Delete

Test

Protein : MSEELSQKPSSAQSLSLREGNRFPFLSLSQREGR

#	Start	End	Peptide
1	1	1	M
2	1	18	MSEELSQKPS SAQSLSLR
3	2	18	SEELSQKPSS AQSLSLR
4	19	21	EGR
5	22	23	NR
6	24	32	FPFLSLSQR
7	33	35	EGR

Test Enzyme

Save new Enzyme Cancel

When unchecked, if there are multiple components, these are combined, as if multiple enzymes had been applied simultaneously or serially to a single sample aliquot. When checked, multiple components are treated as if independent digests had been performed on separate sample aliquots and the resulting peptide mixtures combined.

各項目にマウスを合わせるによりその説明が表示されます(この例では[Independent]を示しています)。

なお、[Save Changes] ボタンまたは [Save new Enzyme] ボタンを押すことにより enzymes ファイルの内容は更新されますが、更新前の enzymes ファイルは enzymes.#(#は数字、たとえば enzymes.11)ファイルとして自動的にバックアップされます。

以上

何かお困りのことがありましたら **Mascot サポート** にご連絡ください。



〒100-0015 東京都台東区東上野 1-6-10 ART ビル 1F

support-jp@matrixscience.com

03 5807 7895