

Thermo Xcalibur RAW ファイルに対する Mascot Server、Mascot Daemon 側の設定等について

1. はじめに

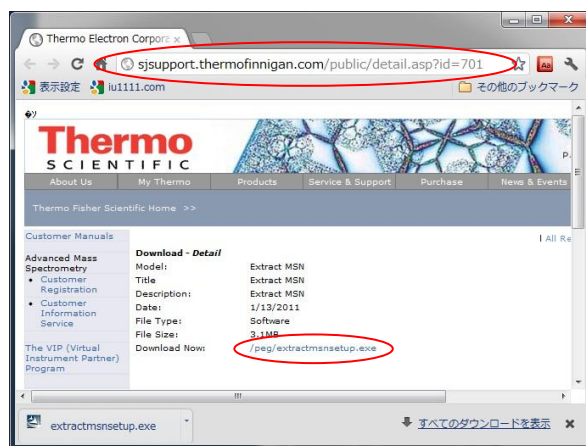
Mascot 検索における入力データはテキスト (ASCII) で書かれた質量ピークリストです。従いまして、Thermo Xcalibur RAW ファイルをピークリストファイルに変換した上で、Mascot 検索を実行することが必要になります。Thermo Fisher Scientific は、RAW ファイルを DTA ファイルに変換するプログラムとして extractMSn プログラム及び MSFileReader プログラムを提供しています。これらのプログラムを利用して次の動作環境を整えることにより、RAW ファイルのピークリストファイル (MGF ファイル) への変換プロセスと Mascot 検索をシームレスに結合することができます。

2. extractMSn プログラムを Web ブラウザから利用する場合

extractMSn プログラム及び MSFileReader プログラムは Thermo Fisher Scientific が提供する、RAW ファイルを DTA ファイルに変換するプログラムです。Mascot Server PC にインストールしてください。

2-1 インストール

- (1) 「C:\%temp」フォルダを作成してください。
- (2) 「C:\%lcq\system%programs」フォルダを作成してください。
- (3) extractMSn プログラムをインストールしてください。
 - ① 次のサイトにアクセスしてください。
<http://sjsupport.thermofinnigan.com/public/detail.asp?id=701>
 - ② /peg/extractmsnsetup.exe リンクをクリックし「extractmsnsetup.exe」プログラムを保存してください。



- ③ 保存した「extractmsnsetup.exe」プログラムを実行し、表示されるダイアログに従ってインストールを進めてください。「C:\%Program Files%Thermo%ExtractMSn」フォルダにインストールされます。
- ④ 「C:\%Program Files%Thermo%ExtractMSn」フォルダに存在する全てのファイルを、(2)で作成した「C:\%lcq\system%programs」フォルダにコピーしてください。
- (4) 「C:\%lcq\system%programs」フォルダの「extractMSn.exe」ファイルをコピーして、次の2つのファイルを

作成してください。

extractMSn.exe → extract_msn.exe

extractMSn.exe → lcq_dta.exe

(5) MSFileReader プログラムをインストールしてください。

① 次のサイトにアクセスしてください。

<http://sjsupport.thermofinnigan.com/public/detail.asp?id=703>

② [/peg/file/MSFileReader.zip](#) リンクをクリックし、「MSFileReader.zip」ファイルを保存してください。

③ 保存した「MSFileReader.zip」ファイル解凍してください。

④ 「MSFileReader_install.doc」を開き、インストール方法や注意点を確認した後、「MSFileReader.exe」を実行し、表示されるダイアログに従ってインストール進めてください。

2-2 動作確認

Mascot Server PC またはクライアント PC 上で次の操作を行ってください。

- (1) Web ブラウザを起動し、http://ホスト名/mascot/lcq_dta_shell.html にアクセスしてください。[参照]または[ファイルを選択]ボタンから RAW ファイルを読み込み、質量分析計の測定条件に応じた RAW → DTA 変換パラメータを指定してください。[Min. Scans/Group]のデフォルト値は 2 ですが、測定条件によっては 1 を指定しないと extractMSn プログラムがエラーを返すことがあります。なお、コマンドプロンプトから extractMSn プログラムを実行することにより変換パラメータの設定に関するヘルプページが表示されます。また、弊社ホームページの HELP にある[Instrument Specific Tips]ページも併せてご覧ください。
- (2) [Generate .DTA Files]ボタンを押してください。指定した RAW ファイルが extractMSn プログラムに渡され、RAW → DTA 変換プロセスが進行し、変換が終了すると Mascot Server の検索条件設定ページが表示されます。検索条件を設定し、Mascot 検索を実行してください。

3. extractMSn プログラムを Mascot Daemon から利用する場合

extractMSn プログラム及び MSFileReader プログラムは Thermo Fisher Scientific が提供する、RAW ファイルを DTA ファイルに変換するプログラムです。Mascot Daemon をインストールした PC にインストールしてください。

3-1 インストール

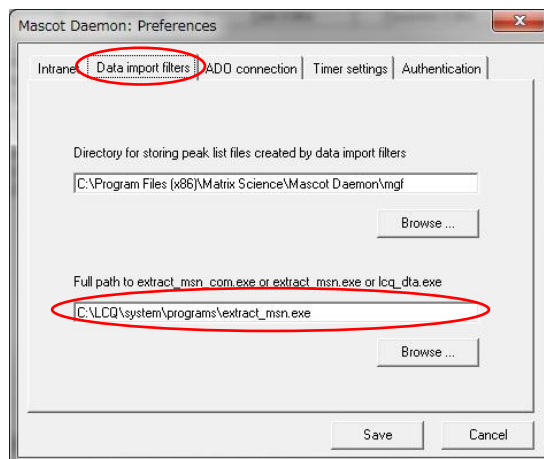
(1) 「2-1 インストール」 の手順にしたがって extractMSn プログラム及び MSFileReader プログラムのインストールを進めてください。

(2) Mascot Daemon を起動し、[Edit]→[Preferences] →[Data import filters] タブの下方にある「Full path to extract_msn_com.exe or extract_msn.exe or lcq_dta.exe」 入力欄下の [Browse ...] ボタンを押し、

`C:\%lcq%system\programs\extract_msn.exe`

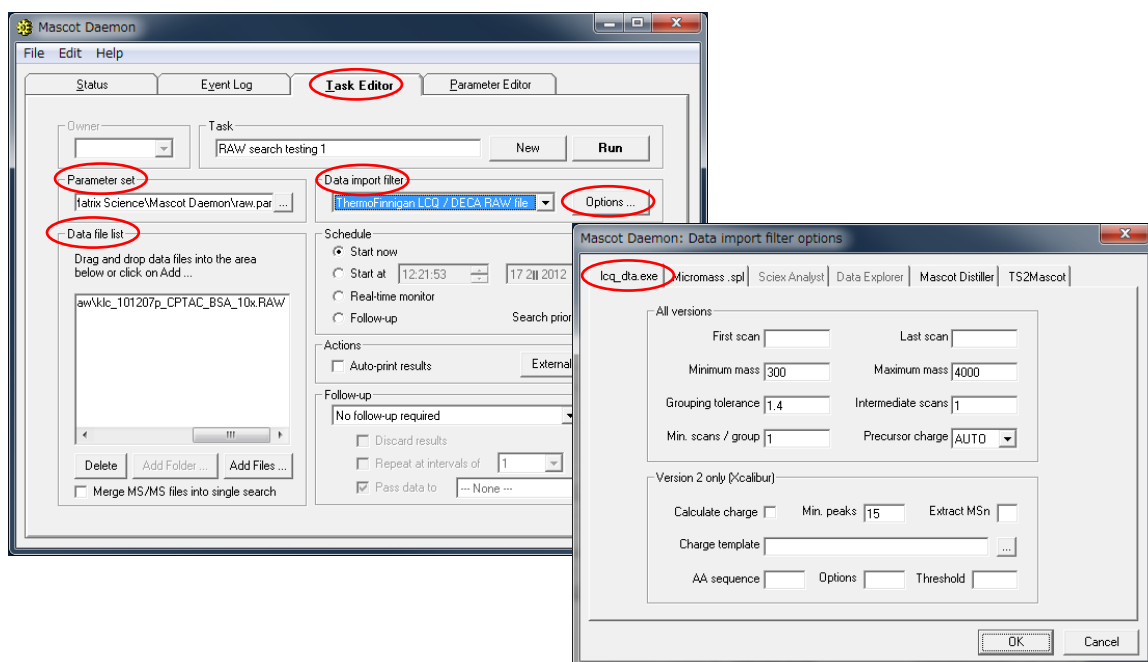
ファイルを指定してください。

(3) [Save] ボタンを押すと Mascot Daemon の再起動を促すダイアログが表示されますので、ダイアログの内容に従い再起動してください。



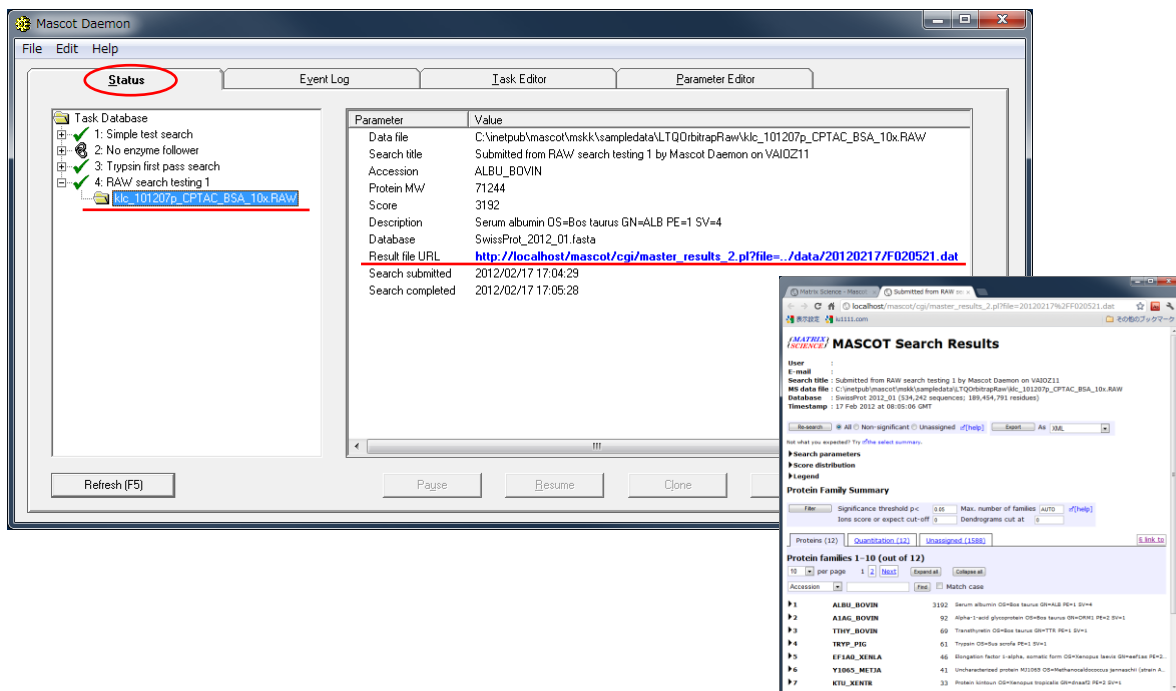
3-2 動作確認

(1) Mascot Daemon を起動し、[Task Editor] タブ上で Task 名、Mascot 検索パラメータファイル、RAW ファイルを指定し、[Data import filter] から「ThermoFinnigan LCQ/DECA RAW file」を選択した後に [Options] ボタンを押し、開いた [lcq_dta.exe] タブで RAW → DTA 変換パラメータを指定してください。



(2) [Run] ボタンを押してタスクを実行してください。RAW ファイルが extract_msn.exe プログラムに渡され、

RAW → DTA 変換プロセスに続いて Mascot 検索が実行され、全ての検索が終了すると [Status] 画面に切り替わります。[Result file URL]のリンクをクリックし、Mascot 検索結果が表示されることを確認してください。



4. お問い合わせ

ご不明点などありましたら技術サポート担当者にご連絡ください。

マトリックスサイエンス株式会社

〒101-0021 東京都千代田区外神田 6-10-12 KNビル3階

電話 : 03-5807-7897

電子メール : support-jp@matrixscience.com