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。

 $extractMSn. exe \rightarrow extract_msn. exe$

 $extractMSn. exe \rightarrow lcq_dta. exe$

- (5) MSFileReader プログラムをインストールしてください。
 - 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。

C Marco 1/cc_dta_shell.html C C C C M Valoz11/mascot/cg/search_form_pl C C C C M Valoz11/mascot/cg/search_form_pl C C C C C M C C C C M C C C C M C	Matrix Science - Mascot x						
# State ************************************	← → C ♠ Ovaioz11/mascot/lcg dta shell.html 👷 🖪 🔧	← → C ☆	Svaioz11/mascot/cgi/search_	form.pl	ជ	-	
MATTRAX MARKEN HOME IMASCOT INED Search Mascot > LCQ_DTA Mascot > LCQ_DTA Shell execution of lcq_dta.exe or extract_msn.exe Lave scan range limits empty to process entire data file. Fields in the lower section and for Xcalburs only (Xcalbur and BioWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) Image: CQ_Raw File	▲ 表示設定 ↓ iu1111.com	🛂 表示設定 👌 iu:	1111.com		🧀 その他のブ	ックマーク	
HOME IMARCOT THED Search Mascot > LCQ_DTA Mascot > LCQ_DTA Leave scan range limits empty to process entrie data file. Fields in the lower section of for_dita.eve or extract_msn.eve Leave scan range limits empty to process entrie data file. Fields in the lower section on set for XaBibor / BibWorks" only (Xcalbur and BioWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) Image: Complexity of the lower section on set for XaBibor / BibWorks" only (Xcalbur and BioWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) Image: Complexity of the lower section on set for XaBibor / BibWorks" only (Xcalbur and BioWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) Image: Complexity of the lower section on set for XaBibor / BibWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) Image: Complexity of the lower section on set for XaBibor / Bibor		{MATRIX} {SCIENCEJ		ном	ME:MASCOT:HELP Search	Go	
Mascot > LCQ_DTA Shell execution of Icq_dta.exe or extract_msn.exe Leaves can range limits empty to process entire data file. Fields in the lower section are for Xcalbur® / BioWorks [™] only (Xcalbur and BioWorks [™] only (Xcalbur and BioWorks [™] only First Scan Last Scan Min. Mass 300 Da Max. Mass 4000 Da Grouping Tolerance 1.4 Da Intermediate Scans 1 Immediate Scans 1 Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO * Variable "one selected ****" one selected ****" one selected **** Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template Option String Threshold Extract MS* Extract MS* Recet form Cenerate_DTA Files Recet form	SCIENCE HOME:MASCOT:HELP Search Go	Mascot > MS/	MS Ions Search				
Shell execution of log_dta.exe or extract_msn.exe Leave scan range limits empty to process entire data file. Fields in the lower section are for Xcaliburs // BieWorks ** only (Xcalibur and BieWorks are trademarks of Thermo Electron Corp.) ILQ Raw File >=////#38/R klc_101207p_SA_10x.RAW First Scan Last Scan Min. Mass 300 Da Max. Mass 4000 Da Grouping Tolerance 1.4 Percursor Charge Min. Peaks in .DTA 15 Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template >=///##38/R %ch_10.12 %ch_ Ad Sequence Option String Threshold Extract MS* Extract MS* Reset Form Instrument Elsi-TRAP Extract MS* Reset Form Reset Form	Mascot > LCQ_DTA	маясот	MS/MS Ions Search				
Fields in the longe made longe of plocaliburg 0 (Pacifiburg 0) Fields in the longe made longe of plocaliburg 0 (Pacifiburg 0) Image: Comparison of the longe of plocaliburg 0) Image: Compare 0) Image: Comparison 0)	Shell execution of lcq_dta.exe or extract_msn.exe	Your name		Email			
(LCalibur and bloworks are trademarks of intermo Electron Corp.) Image: Corput String Image:	Fields in the lower section are for Xcalibur® / BioWorks™ only	Search title	klc_101207p_CPTAC_BSA_10x.RAW,	all scans			
LQ Raw File アルル送銀田、ktc_101207p_SA_10x.RAW First Scan Last Scan Min. Mass 3000 Da Max. Mass 40000 Da Grouping Tolerance 1.4 Da Intermediate Scans 1 Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO w Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template アルル送銀田、湖水社 大 AA Sequence Option String Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data w Peptide tol.± 10 ppm w #3C 0 w MS/MS tol.± 0.6 Da w Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Desta file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Data file kt, 101207p_CFAL BSA_10x.RAW Reset Form Stat Search_w Reset Form	(Acalibur and Bloworks are trademarks of Thermo Electron Corp.)	Database(s)	EST_human A	Enzyme	Trypsin		
First Scan Last Scan Min. Mass 300 Da Max. Mass 4000 Da Grouping Tolerance 1.4 Da Intermediate Scans Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO w Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template 2m/L±SHR SKRAtTU ±t/A AA Sequence Option String Threshold Extract MS ⁿ Generate .DTA Files Fixed charge	LCO Raw File ファイル参選択 ktc 101207p SA 10x RAW		NCBInr IPI, human	Allow up to	1 💌 missed cleavages		
First Scan Last Scan Min. Mass 300 Da Max. Mass 4000 Da Grouping Tolerance 1.4 Da Intermediate Scans 1 Min. Scans / Group 1 Precursor Charge Autor Min. Peaks in .DTA 15 Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Image: Carbanidomethyl (C) Image: Carbanidomethyl (C) Image: Carbanidomethyl (C) Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Image: Carbanidomethyl (C)			cRAP -	Quantitation	None		
Min. Mass 3000 Da Max. Mass 4000 Da Grouping Tolerance 1.4 Da Intermediate Scans 1 Intermediate Scans 1 Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO • Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template 2m/JL/2磁R/ 磁形代しません AA Sequence Option String Data file kc, 101207p, CPTAC BSA, 10x:RWW Data file kc, 101207p, CPTAC, BSA, 10x:RWW Data file	First Scan Last Scan	Taxonomy	All entries		v		
Grouping Tolerance 1:4 Calculate Classing Intermetate Scales 1 Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO * Variable Biolon (K) Biolon (K) Biolon (K) Biolon (K) Biolon (K) Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template Part/Južajin jantation AA Sequence Option String Late file kL, 10207_CPTAL BSA, 10x.RW De * Peptide charge 1:* Monoisotopic & Average Late file kL, 101207_CPTAL BSA, 10x.RW Decord Data file kL, 101207_CPTAL BSA, 10x.RW Precursor m/z Instrument Estract MS ⁿ Generate_DTA Files Reset Form	Min. Mass 300 Da Max. Mass 4000 Da	Fixed modifications	Carbamidomethyl (C)	>	Acetyl (K) Acetyl (N-term) Acetyl (Protein N-term)	Ť.	
Calculate Charge Min. Peaks in .DTA 15 Charge Template ファイルを選択<激売れていません AA Sequence Option String Threshold Extract MS ⁿ Generate_DTA Files Generate_DTA Files	Min. Scans / Group 1 Precursor Charge AUTO	Variable	Display all modifications		Amidated (C-term) Amidated (Protein C-term) Ammonia-loss (N-term C) Biotin (K)		
Charge Template ファイルを選択 選択されていません。 AA Sequence Option String Decision Threshold Extract MS ⁿ Ext	Calculate Charge 🔲 Min. Peaks in .DTA 15	modifications	none selected A	>	Biotin (N-term) Carbamyl (K) Carbamyl (N-term) Carboxymethyl (C)		
AA Sequence Option String Data file dc. 101207p. CPTAC. BSA. 10x. RAW Data format Mascit generate .DTA Files Peptide charge 1± Mennoisotopic @ Average Data file dc. 101207p. CPTAC. BSA. 10x. RAW Data format Mascit generate .DTA Files Peptide charge 1± Mennoisotopic @ Average Data file dc. 101207p. CPTAC. BSA. 10x. RAW Data format Mascit generate .DTA Files Peptide charge 1± Mennoisotopic @ Average Data file dc. 101207p. CPTAC. BSA. 10x. RAW Data format Mascit generate .DTA Files Peptide charge 1± Mennoisotopic @ Average Petide charge 1± Mennoisotopic @ Average 1± Mennoisotopi	Charge Template ファイルを選択 違択されていません	Peptide tol. ±	10 ppm • # ¹³ C 0 •	MS/MS tol. ±	0.6 Da 💌		
Threshold Extract MS ⁿ Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Data file dx: 10120 ⁿ CPN2 BSA 10x:RW Precursor m/z Generate .DTA Files Decoy Report top IAUTO whits Start Search Reset Form	AA Sequence Option String	Peptide charge	1+ •	Monoisotopic	Average		
Generate_DTA_Files Instrument Esi-TRAP Error tolerant Generate_DTA_Files Decoy Report top AITO	Threshold Extract MS ^{II}	Data file Data format	klc_101207p_CPTAC_BSA_10x.RAW Mascot generic	Precursor	m/z		
Generate .DTA Files Decoy Report top AUTO this Start Search Reset Form		Instrument	ESI-TRAP	Error tolerant			
Start Search Reset Form	Gonerate DTA Files	Decoy		Report top	AUTO V hits		
	Ocherate JOIA Files		Start Search		Reset Form		
Copyright © 2010 Matrix Science Ltd. All Rights Reserved. Last Updated 03/30/2010 08:14:40 Copyright © 2008 Matrix Science Ltd. All Rights Reserved.							

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

- 「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 of 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。

Mascot Daemon: Preferences		×
Intrane Data import filters DADD connection Ti	mer settings Authe	ntication
Directory for storing peak list files created by da	ata import filters	
C:\Program Files (x86)\Matrix Science\Masco	t Daemon\mgf	
	Brows	e
Full path to extract_msn_com.exe or extract_m	<u>isn.exe or lcq_dta.ex</u>	e
C:\LCQ\system\programs\extract_msn.exe		
	Brows	e
	Save	Cancel

(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

 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_dat.exe]タブで RAW → DTA 変換パラメータを指定してください。

🛞 Mascot Daemon		
File Edit Help	Task Editor Parameter Editor	
Owner Task RAW search test	ing 1 New	Run
Parameter set flatrix Science\Mascot Daemon\raw.par	Data import filte ThermoFinnigan LCQ / DECA RAW/ file	Options
Data file list Drag and drop data files into the area below or click on Add	Schedule Image: Start now Image: Start at 12:21:53 Image: Transmission of the schedule Image: Start at 12:21:53 Image: Transmission of the schedule	Mascot Daemon: Data Import filter options
aw\klc_101207p_CPTAC_BSA_10x.RAW	C Feature monitor C Follow-up Search prior Actions Extensity results Extensity	All versions First scan Last scan
	Follow-up No follow-up required	Minimum mass 300 Maximum mass 4000 Grouping tolerance 1.4 Intermediate scans 1 Min scans / group 1 Precursor chaine Autro
Delete Add Folder Add Files	Discard results Repeat at intervals of Pass data to None	Version 2 only (Koalibur)
		Charge template As sequence Options Threshold
		Cancel

(2) [Run] ボタンを押し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 \rightarrow 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 КNビル3階

電話:03-5807-7897

電子メール: support-jp@matrixscience.com