





マトリックスサイエンス社 取扱製品
総合カタログ

マトリックスサイエンス株式会社では、質量分析データからプロテオーム解析を行う際にご利用頂くソフトウェアを取り扱っています。

[取り扱い製品] ・ DDA プロテオミクス

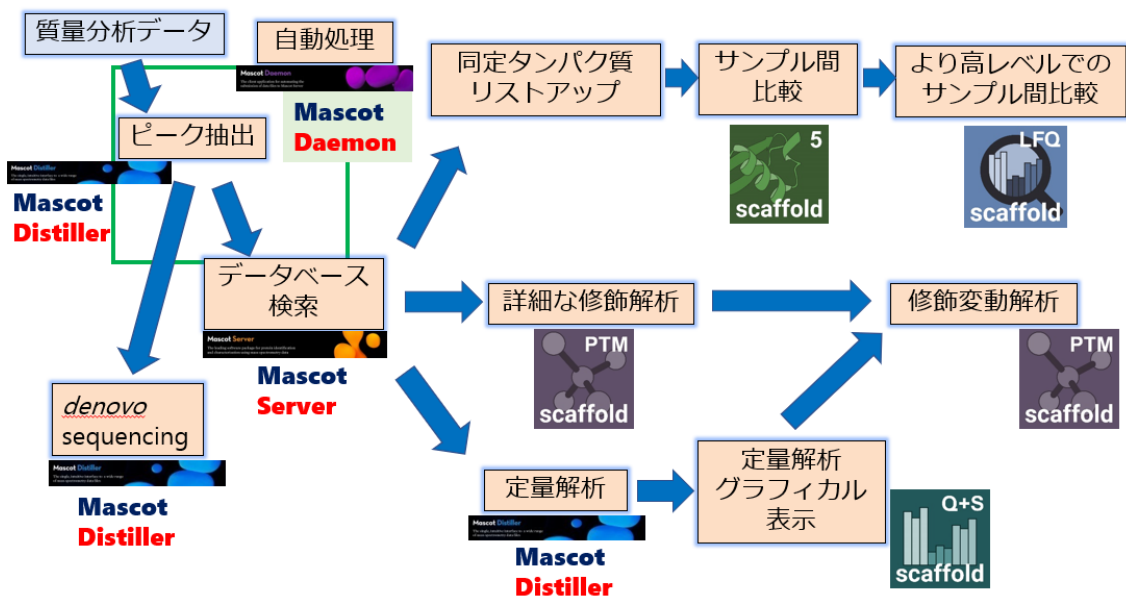
イギリス・マトリックスサイエンス社 製品 

製品名	製品の目的	ご紹介ページ
MASCOT Server	タンパク質/ペプチド配列 同定	3
MASCOT Daemon	Server の自動検索補助	8
MASCOT Distiller	ピーク抽出、 <i>de novo</i> sequencing、 定量解析	9

アメリカ・プロテオームソフトウェア社 製品 

製品名	製品の目的	ご紹介ページ
Scaffold 5	MASCOT Server 結果まとめ	11
Scaffold Q+S	定量解析結果の拡張	13
Scaffold PTM	修飾ペプチド、修飾別の定量解析	15
Scaffold LFQ	より高レベルな結果まとめ	17

解析ワークフローとソフトウェア (DDA)



[取り扱い製品] ・ DIA プロテオミクス

製品名	製品の目的	ご紹介ページ
Scaffold DIA	DIA 定性/定量 解析	19

[取り扱い製品] ・ 低分子化合物の解析

製品名	製品の目的	ご紹介ページ
Scaffold Elements	低分子化合物 定性/定量 解析	21

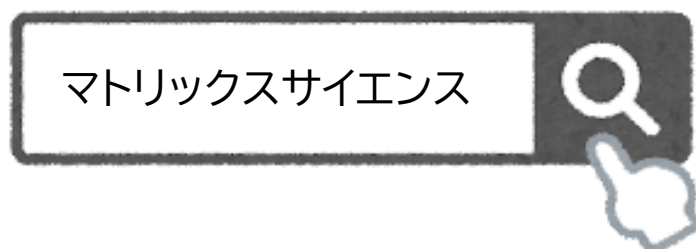
WEB ページのご案内

マトリックスサイエンス株式会社（日本法人）では取扱製品に関する以下の情報を掲載したWEB ページを公開しています。

- 製品の内容
- ソフトウェアの最新情報
- ソフトウェアの最新バージョン
- ソフトウェアの使用方法に関する日本語マニュアル
- ソフトウェアに関するブログ記事 [毎月更新]
- ソフトウェアに関する Newsletter [毎月更新]
- 弊社 連絡方法

是非以下 URL に直接アクセスをして頂くか、各種検索エンジンにて「マトリックスサイエンス」をキーワード検索して WEB ページにアクセスしてください。

<https://www.matrixscience.co.jp>



タンパク質同定ソフトウェア

Mascot Server

質量分析計で測定されたスペクトルデータをもとに、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

[主な特徴・機能]

- Web アプリケーション
- 確率的なスコアリングアルゴリズムにより蛋白質・ペプチドを同定
- 3つの検索モード(PMF、SQ、MIS)をサポート
- 検索時の参照データベース：アミノ酸配列、塩基配列、ピークリストライブラリ
- 各社質量分析装置のデータに対応
- MS/MS データ数(クエリー数) に上限なし、大規模な実験データも検索可能
- 単一 CPU、複数の CPU、複数台のコンピューターシステム(Server Cluster)等、様々なシステムに対応可能。柔軟なスケーラビリティ
- 検索を自動化するためのクライアントソフトウェア Daemon を標準バンドル(無料)
- 様々な定量解析法に対応 (iTRAQ、emPAI、ICAT、SILAC、¹⁸O など)
- 実在データベースに対応する Decoy データベースの自動生成および同時検索、peptide/protein FDR (False Discovery Rate) の表示
- クロスリンク結合または共有結合したペプチドの検索
- ¹³C、¹³C₂ ピークを考慮した検索
- 一度目の検索で同定基準を超える蛋白質について、追加修飾やアミノ酸置換を考慮する等探索空間を広げた検索 [Error Tolerant search]
- 検索結果のファイル出力(XML、CSV)
- 配列データベースの自動更新
- 修飾・切断パターンなど各種設定のカスタマイズ
- ユーザー管理機能

検索パラメーター入力画面

WEB アプリケーションなので、ブラウザー・Mascot Daemon・質量分析装置メーカー付属のソフトウェア など様々なアプリ経由で MASCOT Server を利用可能です。

検索条件として、検索対象のデータベース、生物種、ペプチド切断パターン、修飾、誤差範囲などを指定します。


The screenshot shows the MASCOT MS/MS Ions Search interface. Several fields are highlighted with red boxes and labels:

- 検索対象のデータベース**: Points to the **Database(s)** dropdown menu, which currently shows "SwissProt (AA)".
- 生物種**: Points to the **Taxonomy** dropdown menu, which currently shows "Mammalia (mammals)".
- 修飾**: Points to the **Fixed modifications** dropdown menu, which currently shows "Carbamidomethyl (C)".
- 誤差範囲**: Points to the **Peptide tol. ±** and **MS/MS tol. ±** input fields, which are both set to "0.1".

Other visible fields include:

- You**: (empty)
- Email**: takaesu@matrixscience.com
- Search title**: Search test 01
- Spectral library (SL)**: PRIDE_Contaminants, Amino acid (AA), UP5640_H_sapiens
- Enzyme**: Trypsin
- Allow up to**: 1 missed cleavages
- Quantitation**: None
- Crosslinking**: None
- Variable modifications**: Oxidation (M)
- Peptide charge**: 2+
- Monoisotopic**: Average
- Data file**: ファイルを選択
- Data format**: Mascot generic
- Instrument**: Default
- Precursor**: (empty) m/z
- Error tolerant**:
- Decoy**:
- Target PSM FDR**: 1%
- Buttons**: Start Search ..., Reset Form

検索されたピークデータと候補となるペプチド配列の理論ピークとのマッチングを統計的アルゴリズムで評価しペプチドを同定します。また同定ペプチドのタンパク質への帰属情報をもとに同定タンパク質をリストアップしユーザーに提示します。



MASCOT Search Results

User :
E-mail :
Search title : IPRG2008 SwissProt Mouse
MS data file : D:\IPRG2008\mgf\merged.mgf
Databases : 1: cRAP 20190304 (116 sequences; 38,459 residues)
 2: SwissProt 2019_10 (561,356 sequences; 201,858,328 residues)
Taxonomy : 1: (none)
 2: Mus. (17,083 sequences)
Timestamp : 9 Jan 2020 at 14:12:31 GMT

結果ファイルの出力

Re-search All Non-significant Unassigned [\[help\]](#) Export As XML

Not what you expected? Try [the select summary](#).

Search parameters

- Type of search : MS/MS Ion Search
- Enzyme : Trypsin/P
- Fixed modifications : [iTRAQ4plex \(K\)](#), [iTRAQ4plex \(N-term\)](#), [Methylthio \(C\)](#)
- Variable modifications : [Acetyl \(Protein N-term\)](#), [Gln->pyro-Glu \(N-term Q\)](#), [Oxidation \(M\)](#)
- Mass values : Monoisotopic
- Protein mass : Unrestricted
- Peptide mass tolerance : ± 0.9 Da
- Fragment mass tolerance : ± 0.6 Da
- Max missed cleavages : 1
- Instrument type : ESI-TRAP
- Number of queries : 33,191

Query 数

Score distribution
Modification statistics for all protein families
Legend

Protein Family Summary

Format Significance threshold p< 0.05 Max. number of families AUTO [\[help\]](#)
 Target FDR (overrides sig. threshold) (not set) FDR type PSM
 Display non-sig. matches Min. number of sig. unique sequences 1
 Show Percolator scores Dendrograms cut at 0
 Preferred taxonomy All entries

同定タンパク質数

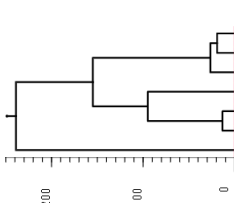
Sensitivity and FDR (reversed prot Proteins (480) [Report Bandwidth](#) [Unassigned \(50372\)](#) [\\$.permalink](#)

Protein families 1-10 (out of 448)

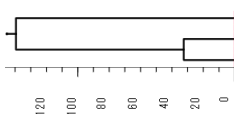
10 per page 1 2 3 4 5 6 ... 45 Next Expand all Collapse all

Accession contains Find Clear

1



2



1::sp|TRY1_BOVIN|

1 2::CP2CT_MOUSE
 6 2::CP239_MOUSE
 7 2::CP238_MOUSE
 2 2::CP254_MOUSE
 3 2::CY250_MOUSE
 5 2::CP237_MOUSE
 4 2::CP2F2_MOUSE

1 2::BIP_MOUSE
 2 2::HSP7C_MOUSE
 3 2::HS71L_MOUSE

同定タンパク質

musculus OX=...

251 Cytochrome P450 2C39 OS=Mus musculus OX=...

150 Cytochrome P450 2C38 OS=Mus musculus OX=...

550 Cytochrome P450 2C54 OS=Mus musculus OX=...

487 Cytochrome P450 2C50 OS=Mus musculus OX=...

338 Cytochrome P450 2C37 OS=Mus musculus OX=...

470 Cytochrome P450 2F2 OS=Mus musculus OX=1...

1302 Endoplasmic reticulum chaperone BIP OS=Mus ...

362 Heat shock cognate 71 kDa protein OS=Mus m...

188 Heat shock 70 kDa protein 1-like OS=Mus musc...

FDR

検索エンジンの評価とは別に検索結果を統計的な検証によって裏付けする事が求められる場合、FDR のオプションを使用する事ができます。

Instrument: Default
Error tolerant:
Decoy:
Star:
Target PSM FDR: 1%
Reset Form

検索時に FDR の数値を指定する事が出来ます

Format: Significance threshold p<: 0.05
Target FDR (overrides sig. threshold): 1%
Display non-sig. matches:
Show Percolator scores:
Preferred taxonomy: All

Max. number of families: AUTO
FDR type: PSM
Min. number of sig. unique sequences: 1

FDR の数値やカウントの対象を切り替える事が出来ます

▼ Sensitivity and FDR (reversed protein sequences)

	Target	Decoy	FDR
Protein family members	302	11	3.64%
PSMs	above	homology	1821 18 0.99%

FDR の数値が表示されます

クロスリンクペプチド検索

ペプチド同士がリンカー化合物や共有結合で繋がったスペクトルデータの解析が可能です。

Quantitation: None

Crosslinking: None

Fixed modifications:

- Disulfide bridge in Lysozyme
- EDC MND1_ARATH+HOP2_ARATH
- HSA Xlink:DSS
- Disulfide bridge in Elongation factor 2 in human
- Disulfide bridge in BSA
- Disulfide bridge in Fetuin
- iPRG 2023 Xlink:DSSO

Variable modifications:

- iPRG 2023 Xlink:DSSO

検索前にリンカーやターゲットとなるタンパク質を設定し、検索時にパラメーターとして指定します

検索後、ペプチド間でどのように結合しているのかが表示されます。また検索結果を xiVIEW で閲覧可能なフォーマットでファイル出力する事ができます。

```
R. CELAAAMKR.H C1<-Xlink:Disulfide->C2 R.GCRL.-
R.GYSLGNWVCAAK.F C9<-Xlink:Disulfide->C1 R.CK.G
R.GYSLGNWVCAAK.F C9<-Xlink:Disulfide->C1 R.CK.G
R.GYSLGNWVCAAK.F C9<-Xlink:Disulfide->C1 R.CK.G
R.GYSLGNWVCAAK.F C9<-Xlink:Disulfide->C2 R.GCR.L
R.CKGTDVQAWIR.G C1<-Xlink:Disulfide->C2 R.GCR.L
K.IVSDGNGMNAWAWR
K.IVSDGNGMNAWAWR
```





複数のコンピューターによる並列処理を行い、検索速度を向上させる事ができます。ファイルサイズが非常に大きなデータの検索や、検索空間が非常に広がるようなパラメーター設定の検索（大きなデータベース、非特異的な切断パターン考慮、crosslink ペプチド検索、Error tolerant Search など）を行う際に有効です。

```

Filesystem = D:\20060206_data Pathname = /home/masita/masita/sequencing/D
Status = OK name Pathname Pathname
State Time = Sun Nov 4 21:13:19 # search = C
New request = YES Request to new mgf = YES Request to new mgf = NO New locked
NUMBER OF threads = 1 CLIENT = 182
  
```

Node	IP Address	OS	Responding	Physical Memory	Swap file	Disk space
node01	192.168.73.1	Linux	OK	42% free	99% free	43% free
node02	192.168.73.2	Linux	OK	43% free	99% free	40% free
node03	192.168.73.3	Linux	OK	53% free	99% free	43% free
node04	192.168.73.4	Linux	OK	47% free	99% free	43% free
node05	192.168.73.5	Linux	OK	41% free	99% free	43% free
node06	192.168.73.6	Linux	OK	40% free	99% free	40% free
node07	192.168.73.7	Linux	OK	41% free	99% free	43% free
node08	192.168.73.8	Linux	OK	50% free	99% free	43% free
node09	192.168.73.9	Linux	OK	47% free	99% free	43% free
node10	192.168.73.10	Linux	OK	53% free	99% free	40% free
node11	192.168.73.11	Linux	OK	53% free	99% free	43% free
node12	192.168.73.12	Linux	OK	40% free	99% free	60% free
node13	192.168.73.13	Linux	OK	52% free	99% free	43% free
node14	192.168.73.14	Linux	OK	40% free	99% free	40% free

- * MASCOT Server はライセンス数に応じて稼働可能な CPU コア数が決まっています。より多くの CPU コアを稼働させるには、その数に対応したライセンス数をご購入いただく必要があります。

カスタマイズ可能な項目

製品版 MASCOT では、以下の内容をカスタマイズして検索可能です。

- ・ データベース [Databases]
- ・ 生物種 [Taxonomy]
- ・ 切断パターン [Enzyme]
- ・ 定量解析設定 [Quantitation]
- ・ クロスリンクペプチド [Crosslinking]
- ・ 修飾 [Modification]
- ・ フラグメンテーションパターン [Instrument]

対応している主な質量分析装置

mgf, mzML といった各社で採用され出力可能なファイルフォーマットのファイルを MASCOT で読み込む事ができます。

[対応メーカー例]

- ・ AB Sciex
- ・ Agilent
- ・ Bruker
- ・ JEOL
- ・ Shimadzu
- ・ Thermofisher Scientific
- ・ Waters

インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Windows 11/10 [Pro 推奨], Windows 2016/2019/ 2022 Server
または Linux * とともに 64bit 版。詳細はお問い合わせください。

メモリ : 64 GB 以上 (使用環境によってはより小さなサイズでも使用可能です)

ディスク : SSD 2TB 以上

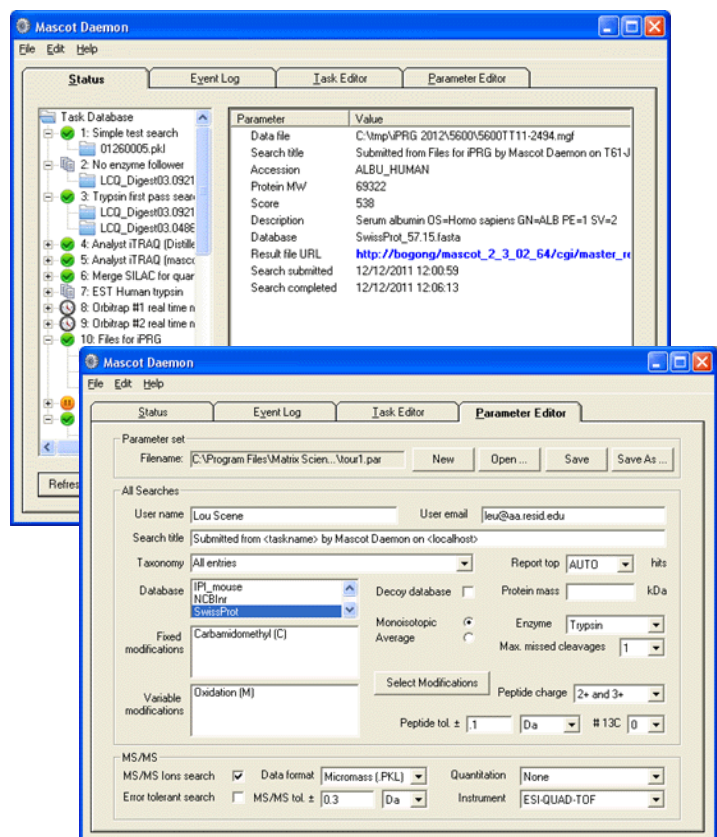
自動検索クライアント

Mascot Daemon

タンパク質同定プロセスを自動化するクライアントソフトウェアで、MASCOT Serverに無償でバンドルされています

[主な特徴・機能]

- バッチ処理モード、リアルタイムモニターモード、フォローアップモードなど様々なニーズに応じる自動検索処理
- MASCOT Distiller や msconvert といった raw データ変換プログラムとの連動による、raw データの自動検索
- 結果ファイル[CSV]の自動出力
- 検索管理ファイルのリレーショナルデータベース化 (VistaDB, PostgreSQL, Oracle)



動作環境

OS : Windows 11/10 または Windows Server 2008 SP2 以降
.NET framework 4.6
メモリ : 8 GB 以上
ディスク : 10 GB 以上

ピーク抽出 & 定量解析

Mascot Distiller

質量分析計システムから作成された raw データを処理して MASCOT 検索に最適なピークリストを作成します。また *denovo* sequencing、定量解析など様々な処理を行います

[主な特徴・機能]

- 各社 質量分析装置 raw データ形式及び mzXML, mzML を読み込み可能
- マルチプロセッサ又はマルチコア対応による高速処理
- 同位体クラスターピークへのフィッティングによる高精度なピーク抽出と電荷決定
- 価数情報を含めた m/z ピークリストファイルの作成
- 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
- MASCOT Daemon との連動により raw データを自動検索
- [Search Toolbox] MASCOT Server 検索結果と raw データの情報の中身との対応関係を可視化
- [Search Toolbox] *denovo* sequencing による参照データなしでの配列決定
- [Quantitation Toolbox] 定量解析 (SILAC, ICAT, Label-Free 定量など)

対応ファイル

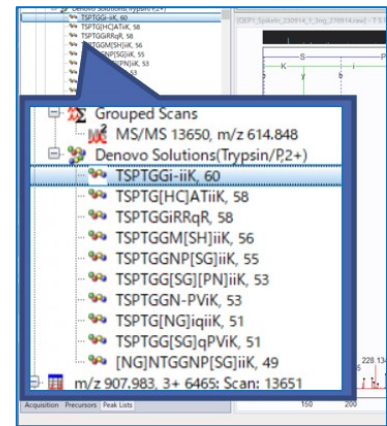
- AB Sciex** : Analyst (QStar, QTrap) 、Data Explorer (Voyager, 4700, 4800)
- Bruker** : Data/Flex Analysis (yep) (Esquire)、XMASS/XTOF (Reflex, Biflex, etc.)
Data/Flex Analysis (baf) (Apex, MicroTOF)、TDF (timsTOF)
- Shimadzu** : Kompact (Axima) 、LCMSSolution (LCMS-IT-TOF)、mzML
- Thermo** : Xcalibur (LCQ, LTQ, Orbitrap)
- Waters** : MassLynx (QTof, M@ldi, TofSpec, Synapt)
- その他** : mzXML 2.0 and 2.1 (XML interchange format)
mzML 1.1 (XML interchange format)
Text (ASCII mass and intensity values)

モジュール構成

MASCOT Distiller はモジュール構成です。3 段階の構成から目的に応じてお選びいただけます

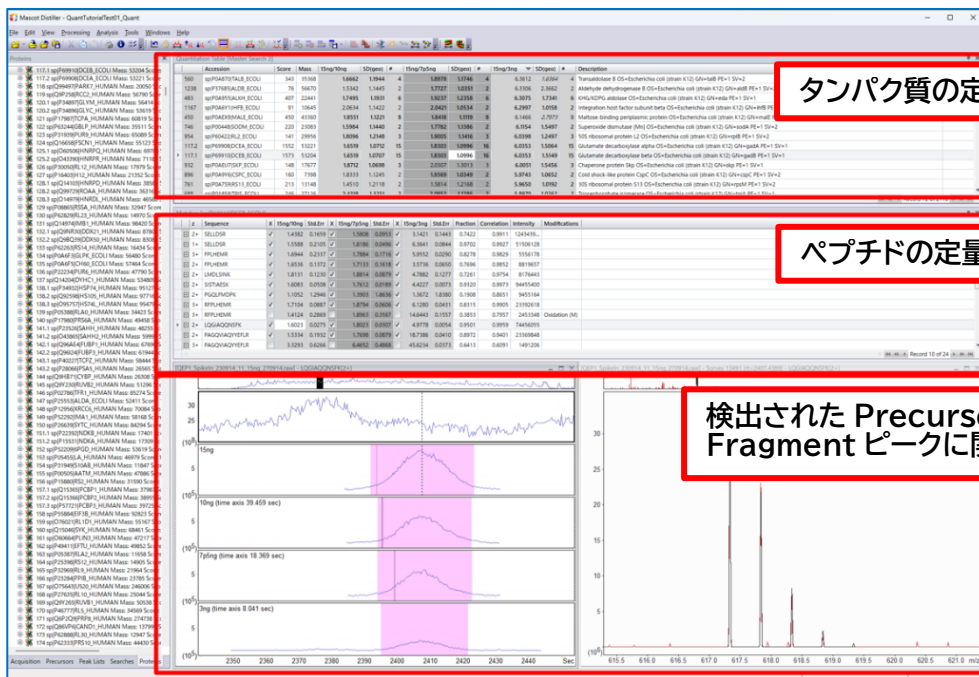
- step1 : 基本 + Daemon
- step2 : 基本 + Daemon + Search Toolbox
- step3 : 基本 + Daemon + Search Toolbox + Quantitation

denovo sequencing



定量解析

SILAC, ICAT, Label-Free 定量など、Precursor ピーク強度を使った各種定量解析が実施可能です [Quantitation モジュールが必要となります]。



インストールするコンピュータの推奨スペック

OS : Windows 11/10

* 各社 raw データ読み込みに必要な関連プログラムを別途インストールします

メモリ : 32 GB 以上 (ラベルフリー定量計算を行う場合 64GB 以上)

ディスク : SSD, 100 GB 以上



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
- X! Tandem/MSFragger 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

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: Identified Proteins (32)	Accession	Molecular Weight	Protein	Taxonomer	biological	cellular	developmental	metabolic	multicellular	response	cytoskeletal	cytoskeleton	endosome	extracellular	membrane	mitochondrion	nucleus	organelle	plasma	binding	catalytic	enzyme	molecular	structure	I_M	I_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"/>	(P02410) Beta crystallin B1	CRBB1_BOVIN	28 kDa	Bos taurus																					32	33	
3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P02410) Beta crystallin B3	CRBB3_BOVIN	24 kDa	Bos taurus																					17	17	
4	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P02410) Beta crystallin A3	CRBA1_BOVIN (...)	25 kDa	Bos taurus																					25	24	
5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P11842) Beta crystallin A4	CRBA4_BOVIN (...)	24 kDa	Bos taurus																					16	16	
6	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P02510) Alpha crystallin B ch...	CRYAB_BOVIN	20 kDa	Bos taurus																					11	11	
7	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P02522) Beta crystallin B2	CRBB2_BOVIN	23 kDa	Bos taurus																					14	14	
8	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P26444) Beta crystallin A2	CRBA2_BOVIN	22 kDa	Bos taurus																					11	11	
9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P02526) Gamma crystallin B (...)	CRGB_BOVIN	21 kDa	Bos taurus																							
10	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(P48644) Retinal dehydrogenas...	AL1A1_BOVIN	55 kDa	Bos taurus																							

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

Protein Threshold: Min # Peptides: Peptide Threshold:

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

1 Fatty acid-binding protein, liver... P12710 abp1

2 Hemoglobin subunit beta-1 OS=... P02088 Hbb-b1

3 Hemoglobin subunit alpha OS=... P01942 Hba

Protein Information: Lookup Identifier In: WikiPathways (e.g. Gene Name)

Find pathways

Search for: Fabp1 ALL SPECIES

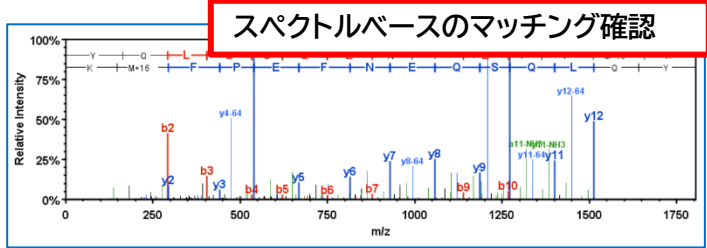
16 pathways found

Steatosis AOP (Homo sapiens)

(streamlined) Mus musculus

Pathway 情報サイトへのリンク

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

B	B Ion	Y	Y Ion	Score	Protein	Accession	Score	Protein	Accession
1	164.1								
2	292.1								
3	405.2								
4	533.3								
5	620.3								
6	748.4								
7	877.4								
8	991.4								
9	1139.5								
10	1267.6								
11	1364.6								
12	1511.7								
13	1658.7								
14	1804.8								

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

Venn Diagrams

Counting unit: Individual Proteins Evaluate based on: Presence/Absence

1: Control 2: Treatment 3: No Category Specified

Proteins Total Unique Peptides Total Unique Spectra

Control Treatment

214 155 45

Accession	Protein Name
P12710	Fatty acid-binding p...
P02088	Hemoglobin subunit ...
P01942	Hemoglobin subunit ...
P04264	Keratin, type II cytos...
P52760	Ribonuclease UK11...
P62982	Ubiquitin-40S ribos...
P35527	Keratin, type I cytos...
P31786	Acyl-CoA-binding p...
P32020	Non-specific lipid-t...

サポートする入力データ

- MASCOT
- Proteome Discoverer
- MaxQuant
- PLGS-Identity
- mzIdentML で出力した検索結果 (PEAKS, Protein Pilot など)

インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Mac (OS 10.9 以降), Windows 11/10, Linux (Ubuntu 12 以降, CentOS 5.6 以降)

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



定量解析補助モジュール

Scaffold Q+S



iTRAQ, TMT, SILAC, Dimethyl, ラベルフリーなど各種定量解析結果のファイルを受け取り、定量値の再計算や統計解析、グラフ表示を行う事ができる Scaffold 5 の拡張モジュールです

[主な特徴・機能]

- 既存の定量解析ソフトウェアでは不足しがちな、実験データの定義や統計解析、グラフ表示機能を補います
- 各実験の関係性の定義と適した解析手法の案内: “Experimental Design Wizard”
- パラメトリック、ノンパラメトリックの各種統計解析が利用可能
- 修飾、p-value、fold change でのタンパク質 並び替え/フィルターリング が可能
- タンパク質発現量のばらつきやデータの質を検証できる各種グラフ
- 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

定量データの表示

Relative Abundance Legend:

- Log₂ Fold Change: 2
- Log₂ Fold Change: 1
- Log₂ Fold Change: 0
- Log₂ Fold Change: -1
- Log₂ Fold Change: -2

Quant View:
620 Proteins in 598 Clusters

Accession	Molecule	Protein	p-ANCOV (p < 0.01)	Quantile	Medium	Heavy
Cluster of Uncharacterized protein (IPI00751742)	IPI00751742 [7]	44 kDa	★ 0.0099	2.0	2.2	
Uncharacterized protein	IPI00751742	44 kDa	★ 1.00	2.4	2.7	
Uncharacterized protein	IPI00480295 (+1)	42 kDa	★ 0.029	1.7	2.0	
Clusterin-associated protein 1	IPI00277999 (+3)	42 kDa	★ --	No data	No data	
Cluster of Isoform 1 of Signal transduction protein CBL-C (IPI00330742)	IPI00330742 [3]	50 kDa	★ 0.17	1.2	1.5	
Isoform 1 of Signal transduction protein CBL-C	IPI00330742	50 kDa	★ 0.17	1.2	1.5	
Uncharacterized protein	IPI00857432	50 kDa	★ --	No data	No data	
Uncharacterized protein	IPI00559518	50 kDa	★ --	No data	No data	

タンパク質のサンプル別の定量値を表示

Experimental Design Wizard

Experimental Design Wizard

1. Analysis Type
2. Experiment Type
3. Edit Sample Names and Categories
4. Organize Quant Samples
5. Approve Settings

Drag and drop samples or select samples to be moved and right-click on the destination cell.

Create additional Reference Alignment

Organize Quant Samples

Unorganized Samples				Organized Samples	
Name	ID	MS Sample	BioSample	Reference	Treatment 1
Quant 2	IPI00-115	(IPI00-115)	(IPI00-115)	Quant 1	Quant 3
Quant 4	IPI00-117	(IPI00-117)	(IPI00-117)		

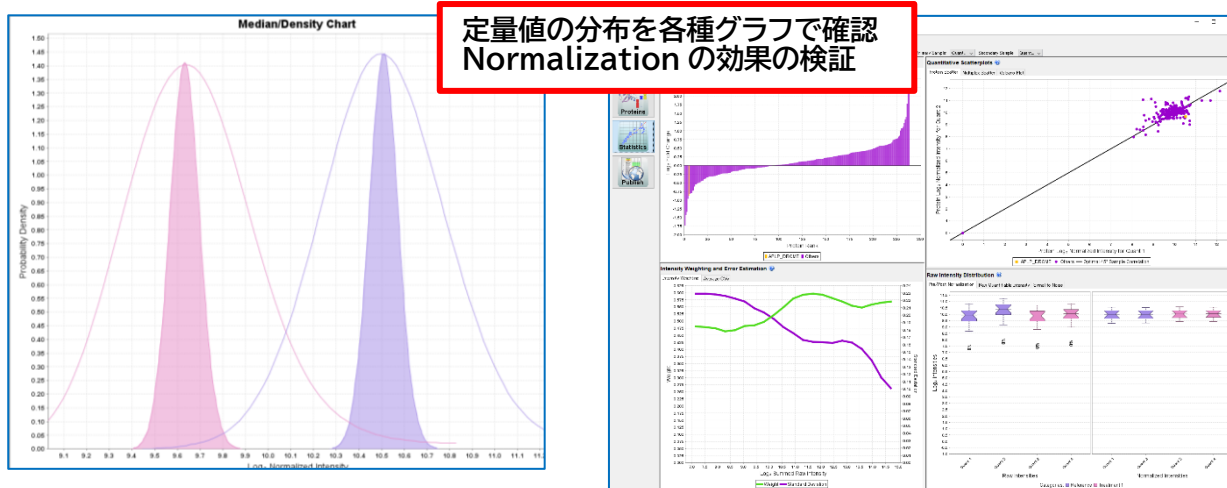
繰り返し実験などサンプルと定量値の種類を細かく定義可能
ソフトウェア側が定義内容に適した統計手法を案内

サポートする入力データ

MASCOT Server, MASCOT Distiller, Proteome Discoverer, MaxQuant, Spectrum Mill, Protein Pilot, など

* 解析手法により取り込み可能なソフトウェアと取り込みが必要なファイルが異なります

タンパク質発現量のばらつきやデータの質を検証できる各種グラフ



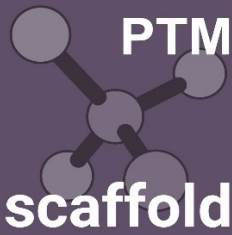
様々な統計解析手法をサポート

		Calculation type	
Experiment Type		median	mean
	Between-subjects	Mann Whitney test Kruskal-Wallis test	T-Test ANOVA
	Repeated Measures	Wilcoxon Signed-rank Friedman	Paired T-Test rANOVA

* 上記に加えて Permutation Test は常に実施可能

[多重検定補正]

- **Benjamini-Hochberg correction**
(BH 法、最初の選択として推奨)
- **Bonferroni Correction**
- **Holm Step-down**
- **Hochberg Step-up**



修飾解析ソフトウェア

Scaffold PTM



質量分析データの解析で難しい、修飾位置の特定を補助する各種アルゴリズムを搭載したソフトウェアです

[主な特徴・機能]

- Ascore 拡張アルゴリズムを使った修飾部位の評価、確率の計算
- Motif 検索機能
- 計算結果の確認が容易な各種グラフ表示
- Q+S と連動して、修飾部位の定量解析

Ascore 拡張アルゴリズムを使った修飾特定部位の評価、確率の計算

The screenshot displays the Scaffold PTM software interface. At the top, there are 'Display Options' and 'Filters'. Below is a table of proteins with columns for #, Star, Protein Name, Accession, Scaffold:Protein Probability, Sequence Coverage, Acetyl (n), Oxidation (M), Phospho (S), and Phospho (T). A 'Probability Legend' is shown on the left, with color-coded boxes for probability ranges: over 95% (green), 80% to 94% (yellow), 50% to 79% (orange), 20% to 49% (red), and 0% to 19% (grey).

A red box highlights a specific protein entry: Serine/arginine repetitive matrix protein 2 OS=Homo sap... SRRM2_HUMAN, with a Scaffold:Protein Probability of 100% and Sequence Coverage of 38%. A callout box points to this entry with the text: "同等タンパク質毎に修飾に関する情報がまとめられる".

Below the protein list, the 'PTM Sites' section shows 'T111 (Phospho)'. A table lists peptide sequences, variable residues, and their probabilities. A red box highlights the 'Ascore [拡張アルゴリズム]の適用状況をチェック' (Check the application status of Ascore [extended algorithm]).

At the bottom, a 'Spectrum & Ascore' graph shows 'Abundance Score' vs 'Number of Peaks per 100 m/z'. The graph includes three data series: T3 (322.49) in purple, T11 (244.33) in orange, and T13 (225.03) in green. A dashed line indicates 'T3 Peak Depth (3)'.

Motif 検索

Scaffold PTM - Tutorial_4-Protein_Normalized.sptm

File Edit View Experiment Export Help

修飾部位としてレポートされた箇所について Motif との比較

Motif: All Modification Types

Modification	Motif	Score	# Match...	Enzyme	En
Phospho	K...tP...	73.84	29		
Phospho	...SsP.P...	64.16	16		
Phospho	K...sP.E...	60.59	15		
Phospho	...sP.P.P...	53.36	15		
Phospho	G...P.sP...	56.99	12		
Phospho	P.sP	54.11	95	RSK2, Fik-1, Fik-2 and kin...	

Sequences:

Modification	Surrounding...	Accession	Name	Site	Best As...	Localizat...
Phospho	RQDKKFsPPFV	SRRM2_HUM...	Serine/argini...	S1188	125.84	100%
Phospho	IDTDSTsGGES	RBP2_HUMAN...	E3 SUMO-pr...	S2831	23.98	99%
Phospho	EDLFDGsNKIV	TP53B_HUM...	Tumor suppr...	S310	126.32	100%
Phospho	ETKEQNsALPT	SRRM2_HUM...	Serine/argini...	S1227	53.49	100%
Oxidation	QDRGDGnYKVE	FLNA_HUMAN...	Filamin-A O...	M1316	1,000.00	100%
Phospho	PATSIPsPASF	RBP2_HUMAN...	E3 SUMO-pr...	T1517	60.50	100%
Oxidation	TSNLQDnGSOE	CENPF_HUM...	Centromere ...	M1253	1,000.00	100%

Q+S と連動し修飾部位の定量解析

Quantitation: (SRRM2_HUMAN) Serine/arginine repetitive matrix p... Display Options: Log: Rat...

Peptide Quantitation (Protein-Normalized) Quantitative Charts (Protein-Normalized)
 PTM Spectrum Counts PTM Quantitation (Protein-Normalized) Peptide Spectrum Counts

Q+S のデータを受け取り、修飾部位別やペプチド別の定量値の比較を行う事が可能

Volcano Plot Protein/Motif Scatterplot

Modification	Best Score	Localization Probability	Referen... control		Treatment 1	
			control_hela_phospho_fr_2012...	treated_hela_phospho_fr_2012...	p-value for treated_hela_phospho_fr_2012...	
Phospho	1,000.00	100%	[0.88]	[1.70]	--	
Phospho	17.99	99%	[-3.12]	[-4.15]	--	
Phospho	158.98	100%	[5.64]	[2.51]	0.439	
Phospho	127.17	100%	[5.64]	[0.22]	0.248	
Phospho	53.57	100%	--	[4.62]	--	
Phospho	114.24	100%	[1.79]	[-0.14]	--	
S323	Phospho	93.29	100%	[6.07]	[4.62]	--
T326	Phospho	39.54	100%	--	--	--
S333	Phospho	47.96	100%	[3.57]	[1.05]	--
S351	Phospho	79.90	100%	[4.62]	[1.13]	0.439
S353	Phospho	130.85	100%	[2.73]	[1.13]	0.564

インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Mac (OS 10.9 以降), Windows 11/10, Linux (Ubuntu 12 以降, CentOS 5.6 以降)
 メモリ : 32GB 以上 ディスク : SSD (HDD と合わせて 1TB 以上)



データ横断的なプロテオーム解析ソフトウェア

Scaffold Lfq

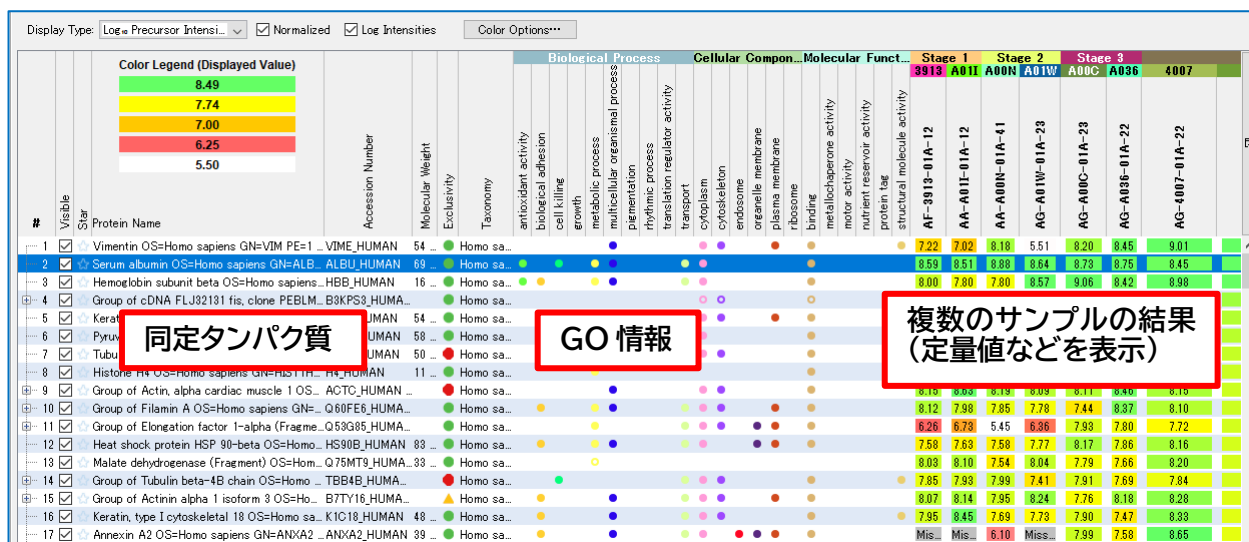


Scaffold や各種検索エンジンの解析結果を取り込み、データ横断的な同定タンパク質の比較と定量解析を行うソフトウェアです

[主な特徴・機能]

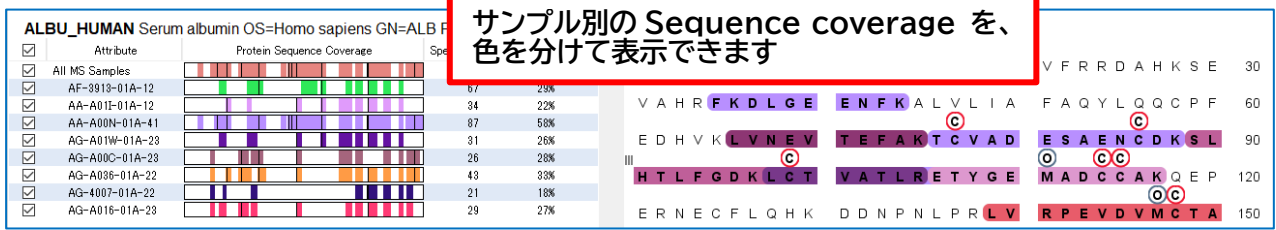
- Scaffold や各種検索エンジンの結果ファイルを取り込み、大量データを一度に表示
- Sequence coverage のサンプル別比較
- Gene Ontology 情報付与・表示
- 各実験の関係性定義と適した解析手法を案内：“Experimental Design Wizard”
- 各種定量値（spectral counting , precursor intensity）を使った統計解析とグラフ表示
- XLS フォーマットで結果内容を出力
- 無償 Viewer ソフトウェアを使って結果のシェアが容易に

Scaffold や各種検索エンジンの結果ファイルを取り込み、大量データを一度に表示

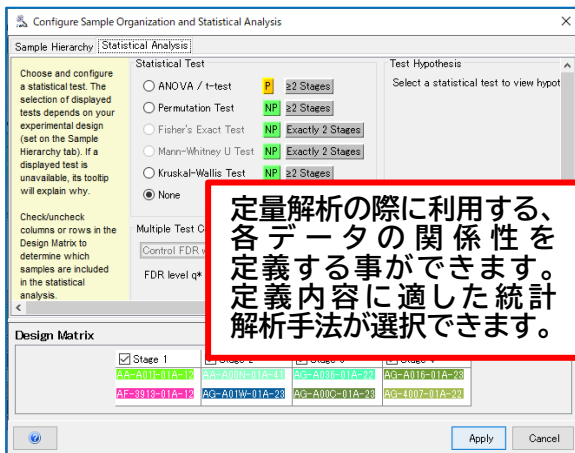


Scaffold 単独では処理が大変な大量データの一括表示を行います。別々に解析した結果を並べて見る事が可能です。入力データとして Scaffold データのほか、MASCOT などの検索エンジンから出力された mzIdentML ファイルを利用することができます。

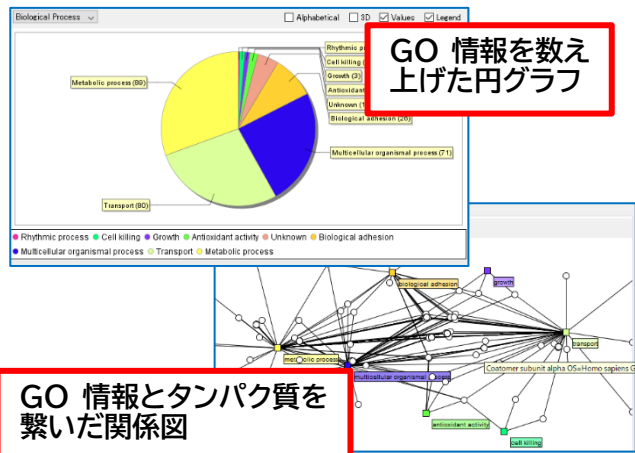
Sequence Coverage サンプル別比較



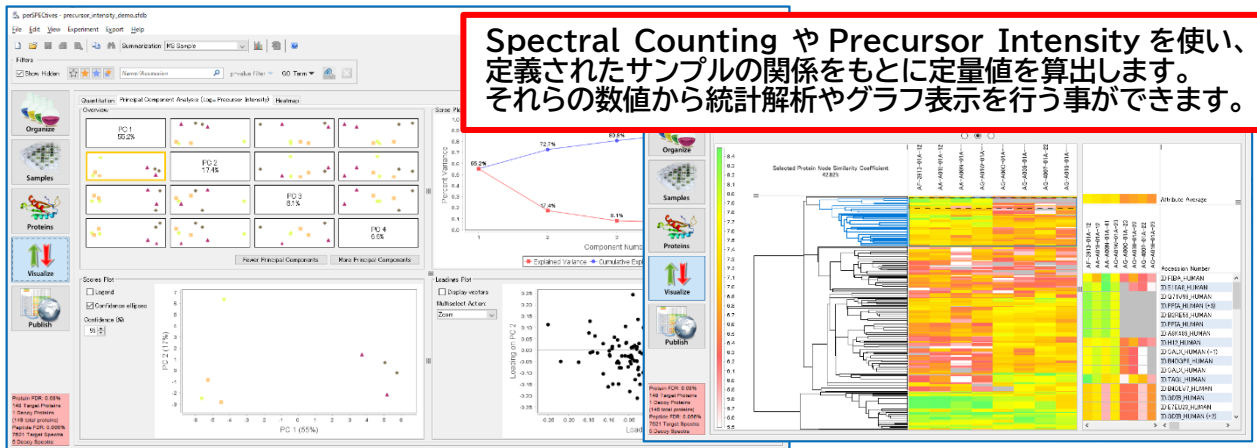
Experimental Design Wizard



Gene Ontology に関する情報の表示

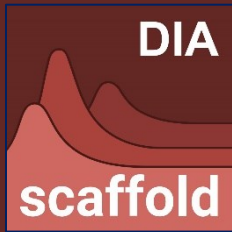


統計解析とグラフ表示



インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Mac (OS 10.9 以降), Windows 11/10, Linux (Ubuntu 12 以降, CentOS 5.6 以降)
 メモリ : 32GB 以上 ディスク : SSD (HDD と合わせて 1TB 以上)



DIA プロテオミクス 定性 / 定量 解析ソフトウェア

Scaffold DIA



DIA プロテオーム解析において、RAW データ読み込みから定性・定量解析、統計解析とその結果表示までの一連作業を、すべて1つのソフトウェア上で行う事ができるソフトウェアです

[主な特徴・機能]

- 4種類の検索対象に対応
 - FASTA (配列データベース)
 - DDA データ検索結果から作成されたピークリストライブラリ
 - FASTA から計算された理論 ピーク/クロマトライブラリ
 - DIA 検索結果から作成されたピーク/クロマトライブラリ
- Prosit プログラムとの強い連携。ライブラリ作成に使用する input データ作成機能、prosit で作成されたライブラリを使った検索が可能。
- 定量値は共溶出の影響を避けるため、限定された数のフラグメントピークから計算
- 定量解析の基本であるデータの構造定義を行う Experimental Design
- PCA を含む各種統計解析が可能
- Gene Ontology 情報の表示
- 無償 Viewer ソフトウェアを使って結果のシェアが容易に

タンパク質ベースの結果まとめ・サンプル間の比較表作成

#	Visible	Star	Protein Name	Accession Number	Molecular Weight	Identified Peptide Count	Protein Group Score	Color Legend (Displayed Value)	
								Water	Yeast
1	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_HMLangeB	AQU...	38 kDa	30	261.355	3.44	3.55
2	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_MycoplasmaSch...	AQU...	36 kDa	28	217.993	2.73	3.13
3	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_HMLangeE	AQU...	31 kDa	23	205.007	2.02	3.30
4	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_PombeSchmidt	AQU...	31 kDa	22	203.837	1.31	3.32
5	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_MouseSabido	AQU...	29 kDa	23	201.845	0.61	3.69
6	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_MouseSabido	AQU...	28 kDa	24	198.694	3.62	3.62
7	<input checked="" type="checkbox"/>	☆	AQUA4SWATH_MouseSabido	AQU...	28 kDa	24	194.299	3.80	3.80

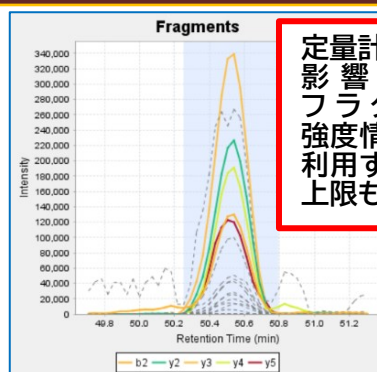
同定タンパク質

サンプル別の
定量値を表示

サポートする入力データ

- Thermo RAW
- SCIEX WIFF
- その他 ProteoWizard の MSConvert プログラムで読み込み可能な各社のデータ

定量値はフラグメントピークの intensity から計算

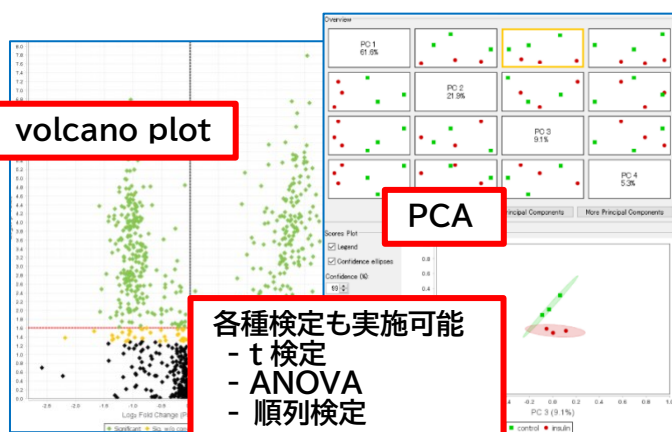


定量計算ではピーク干渉の影響を避けるため、フラグメントピークの強度情報を利用し、さらに使用するフラグメント数の上限も定めています。

4種の検索方法に対応、Prosit プログラムとの強い連携

- FASTA(タンパク質配列データベース) [fasta]
 - DDA スペクトルライブラリ [blib]
 - FASTA から生成された理論的なライブラリ [dlib]
 - DIA 解析結果から作成されたライブラリ [elib]
- * FASTA 配列からライブラリを作成するプログラム “Prosit”にて作成された理論ライブラリも使用可能。また Prosit でライブラリを作成する際に利用する input データの作成機能を搭載

様々な統計解析・グラフ表示が可能



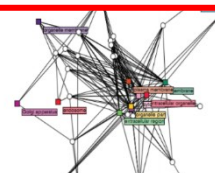
volcano plot

PCA

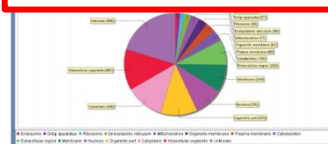
各種検定も実施可能
- t 検定
- ANOVA
- 順列検定

Gene Ontology (GO) 情報

GO 項目とタンパク質を繋いだ関係図



GO 項目を数え上げた円グラフ



インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Windows 11/10 メモリ : 32GB 以上 ディスク : SSD (HDD と合わせて 1TB 以上)

* 同じコンピューターに ProteoWizard msconvert.exe をインストールする必要があります

* prosit 由来のライブラリを使い大規模なデータ解析を行う場合、メモリを 128GB 以上 にする事を推奨



メタボローム解析ソフトウェア

Scaffold Elements



質量分析データから低分子化合物を同定するとともに、定量解析を行う事ができるソフトウェアです

[主な特徴・機能]

- MS1,MS2 スペクトルデータから低分子化合物を同定・定量
- 各実験の関係性を定義する Experimental Design Wizard [定量値計算に利用]
- 代謝フラックス解析に対応 (^{13}C , ^{15}N , ^{18}O , ^2H)
- NIST, METLIN, HMDB, Lipid Maps などに対する検索 [一部オプション]
- ProteoWizard msconvert の利用により、主要メーカーの raw データ読み込みに対応
- 様々な統計解析とグラフ表示が可能
- XLS フォーマットで結果内容を出力

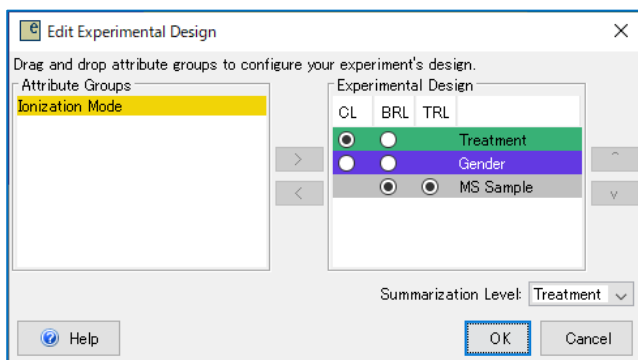
同定・定量結果を表示

#	Visible	Star	ID Score	Mass Accuracy Score	Isotopic Distribution Score	MS2 Score	X/D Score	Analyte Name	Accession Number	Molecular Formula	Molecular Weight	Retention Time (min)	Control	High
1			0.899	0.99	1.00	1.00	0.92	Taurine	CASNO:107-35-7	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_3\text{S}$	125.0	4.41	5.99	5.85
2			0.899	0.98	1.00	1.00	0.96	Cluster of Decylbenzenesulfonic acid	CASNO:140-80-3				5.71	5.70
2			0.856	0.97	0.95	0.91	0.23	Decylbenzenesulfonic acid	CASNO:140-80-3	$\text{C}_{16}\text{H}_{26}\text{O}_2\text{S}$	299.2	24.25	(4.15)	(3.46)
2								Cluster of Ala-Gly	CASNO:439904-34-4	$\text{C}_{26}\text{H}_{46}\text{NO}_{11}\text{P}$	719.4	24.25		
3			0.897	0.99	1.00	1.00	0.82	Ala-Gly (+3)	CASNO:687-69-4	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$	146.1	4.46	5.89	5.89
3			0.893	0.98	1.00	1.00	0.61	5-Methyl-5,8-Dihydroxycil (+1)	CASNO:696-04-8	$\text{C}_8\text{H}_{15}\text{NO}_2$	128.1	4.46	5.08	5.15
4			0.897	0.99	1.00	0.99	0.92	8-A	DBHMDB03831	$\text{C}_8\text{H}_{15}\text{NO}_2$	181.1	6.12	5.72	5.72
5			0.894	0.96	1.00	1.00	0.95	Uric	SNO:69-99-2	$\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_3$	168.0	5.65	6.82	6.48
6			0.894	0.98	0.98	1.00	0.98	Dog	SNO:151-41-7	$\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{NO}_2\text{S}$	266.2	23.76	5.57	5.57
7			0.893	0.97	1.00	0.99	0.92	2-Methyl-2-oxopropionamide	SNO:149-30-4	$\text{C}_4\text{H}_7\text{NO}_2$	167.0	22.80	5.82	5.82
8			0.891	0.96	0.99	0.99	0.96	Xanthosine	CASNO:146-80-5	$\text{C}_9\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_6$	284.1	7.91	4.49	(2.25)
9			0.889	0.98	0.98	0.99	0.89	1,11-Undecanedicarboxylic acid	CASNO:505-52-2	$\text{C}_{17}\text{H}_{32}\text{O}_4$	244.2	23.55	5.85	5.49
10			0.889	0.99	0.99	0.98	0.86	p-Tolyl Sulfate	CASNO:91878-69-7	$\text{C}_7\text{H}_7\text{O}_2\text{S}$	188.0	15.29	5.22	5.20
11			0.887	0.97	0.98	0.98	0.96	L-Tryptophan (+1)	CASNO:73-22-3	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_2$	204.1	12.00	6.21	6.33
12			0.885	1.00	1.00	0.98	0.94	Cholic acid (+1)	CASNO:81-25-4	$\text{C}_{26}\text{H}_{46}\text{O}_5$	408.3	24.80	6.01	6.18
13			0.885	0.99	1.00	0.98	0.99	cholesterol sulfate_RT1	HMDB:HMDB00653	$\text{C}_{27}\text{H}_{46}\text{O}_5\text{S}$	466.3	29.74	6.63	6.88
14			0.885	0.91	0.99	0.99	0.82	DL-Phenylalanine (+1)	CASNO:150-30-1	$\text{C}_9\text{H}_9\text{NO}_2$	165.1	9.59	5.78	5.85
15			0.883	0.99	1.00	0.95	0.88	Gluconic acid (+1)	CASNO:526-95-4	$\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_7$	196.1	4.55	5.48	5.07
16			0.882	1.00	1.00	0.95	0.95	1-Stearoyl-2-hydroxy-sn-glycero-3-phospho...	CASNO:89747-55-3	$\text{C}_{37}\text{H}_{73}\text{NO}_8\text{P}$	481.3	25.30	6.32	6.40
17			0.882	0.91	0.99	0.92	0.52	1H-Benzimidazole-7-carboxamide, 2-[(2R)-2-...	CASNO:912444-00-9	$\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_3$	244.1	22.27	4.87	(4.57)
18			0.881	0.99	1.00	0.95	0.89	PE(18)(92)/0.0	CASNO:89576-29-4	$\text{C}_{23}\text{H}_{46}\text{NO}_7\text{P}$	479.3	25.11	5.79	5.84
19			0.880	0.97	0.92	1.00	0.91	Hypoxanthine (+1)	CASNO:68-94-0	$\text{C}_5\text{H}_8\text{N}_4\text{O}$	136.0	8.36	(4.57)	Missing Value
20			0.880	0.96	1.00	0.95	0.99	cholesterol sulfate_RT2	HMDB:HMDB00653	$\text{C}_{27}\text{H}_{46}\text{O}_5\text{S}$	466.3	34.30	Missing Value	(4.16)
21			0.880	0.99	0.99	0.95	0.74	16-Hydroxyhexadecanoic acid	CASNO:506-13-8	$\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_3$	272.2	24.63	5.32	5.30
22			0.880	0.99	0.91	1.00	0.93	PE(16:0)/0.0	INCHIKEY:VYVMBNSKX...	$\text{C}_{21}\text{H}_{44}\text{NO}_7\text{P}$	453.3	24.83	6.19	6.36
23			0.880	1.00	1.00	0.94	0.87	L-Glutamate	CASNO:56-86-0	$\text{C}_5\text{H}_9\text{NO}_4$	147.1	4.48	5.72	5.75
24			0.879	0.96	1.00	0.95	0.84	2,2'-Methylene-bis(6-tert-butyl-4 methylphenol)	CASNO:119-47-1	$\text{C}_{23}\text{H}_{32}\text{O}_2$	340.2	26.69	4.95	5.08
25			0.878	0.97	0.93	0.99	0.93	Deoxyinosine	CASNO:890-38-0	$\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_4$	252.1	10.10	(4.58)	Missing Value
26			0.877	0.98	0.94	0.94	0.58	5-Hydroxyindoleacetic acid (+1)	CASNO:54-16-0	$\text{C}_{10}\text{H}_9\text{NO}_3$	191.1	20.57	(4.86)	(2.85)
27			0.876	0.98	0.99	0.94	0.74	1-Stearoyl-2-arachidonoyl-sn-glycero-3-phosp...	CASNO:132014-80-3	$\text{C}_{44}\text{H}_{78}\text{NO}_8\text{P}$	811.5	27.76	4.57	(3.95)
28			0.875	0.95	0.99	0.95	0.94	Lumichrome	CASNO:1086-80-2	$\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{O}_2$	242.1	22.26	(4.92)	Missing Value

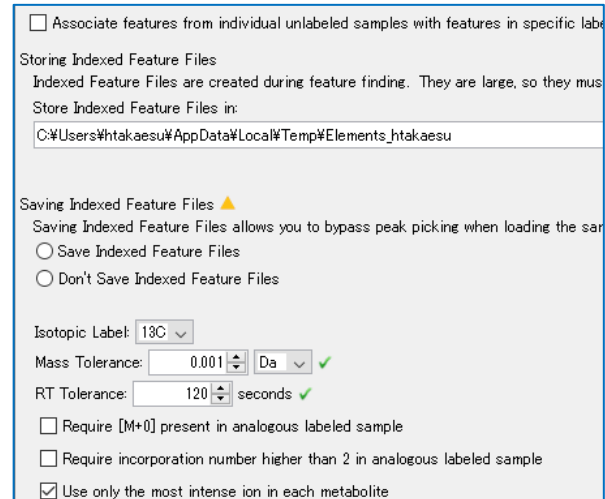
対応フォーマット

ProteoWizard msconvert で読み込み可能な各社装置データを読み込み可能
Sciex [t2d, .dat, .wiff], Agilent [.d ディレクトリ], Bruker [.d ディレクトリ],
Thermo (.raw), Waters (.raw ディレクトリ), その他 mzML フォーマットのファイル

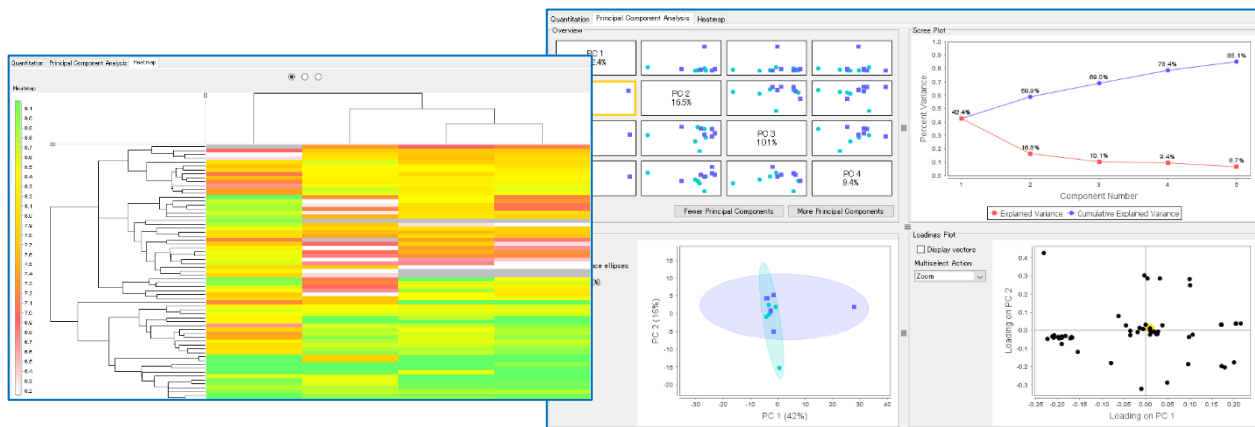
Experimental Design Wizard



代謝フラックス 解析に対応



統計解析とグラフ表示



インストールするコンピューターの推奨スペック

OS : Windows 11/10 メモリ : 32 GB 以上

ディスク : SSD (HDD とトータルで 1TB 以上)

* 同じコンピュータに ProteoWizard msconvert.exe をインストールする必要があります

マトリックスサイエンス株式会社



**MATRIX
SCIENCE**

住所：〒110-0015 東京都台東区東上野 1-6-10 ARTビル 1F

TEL：03-5807-7895

FAX：03-5807-7896

URL：<http://www.matrixscience.co.jp>

Email：info-jp@matrixscience.com