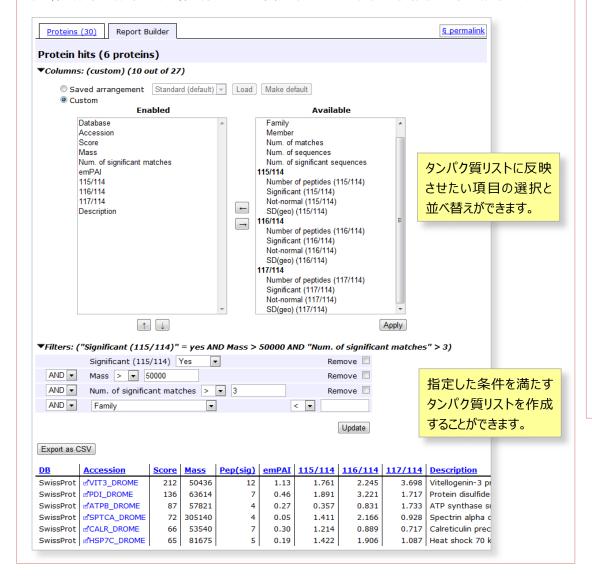
Mascot Server 2.4 New



1. Report Builder

ヒットしたタンパク質をプロテインスコアやアクセッション番号などの項目を自由に組み合わせて、また、 項目に対するフィルタ条件(たとえばプロテインスコア 50 以上など)を指定して、簡潔なタンパク質リス トを作成することができます。作成したタンパク質リストは CSV ファイルとして出力することができます。

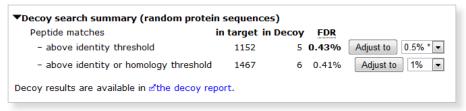


2. Preferred Taxonomy

NCBInr 配列データベースのように、ひとつのタンパク質が複数の牛物種に存在し、 それらが異なるエントリとして登録されている場合、タンパク質ヒットリストにはそのタンパ ク質を代表するエントリが表示されますが、その代表エントリではなく、目的の牛物種の エントリを表示させたい場合に便利な機能です。

3. FDR 指定による閾値スコアの算出

指定した FDR の値(%)になるように閾値スコアを再計算します。また、それに対応 する有意なペプチドに基づくタンパク質リストを表示します。



4. Decoy データベースの作成方法選択

設定ファイル「mascot.dat」の中で作成方法(リバース配列あるいはランダム配列) を指定することができます。

5. Text and Number 文字列検索

「Protein Family Summary Report」ページの中で使用出来る文字列検索 機能を強化しました。





マトリックスサイエンス株式会社

電子メール: support-jp@matrixscience.com

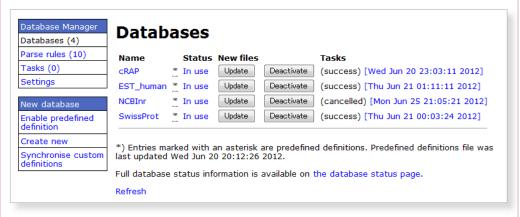
話: 03-5807-7895 ファクシミリ: 03-5807-7896

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

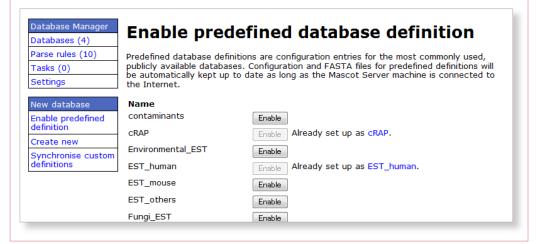
6. Database Manager

Web ブラウザを利用して、配列データベースの稼働状況、新規登録、更新などを一元的に 管理することができます

- 1. 稼働状況の確認
- 2. ウィザード形式による新規登録
- 3. 豊富な Predefined Database
- 4. 自動更新スケジュールの設定と実行
- 5. 弊社公開 Mascot Server における設定との同期



主要な配列データベースの設定は「predefined database」として予め登録されていますので、利用したい配列データベースの[Enable]ボタンを押すだけで必要なファイル群のダウンロードからセットアップまで自動的に処理されます。



7. Site Analysis (Mascot Delta Score)

ペプチドが修飾されており、修飾サイトが複数存在する場合は、どの修飾サイトが正しいのかを、Mascot Delta score (当該ペプチドのイオンスコアの差、MD-score と呼んでいます)から計算される確率を「Site Analysis」項に表示します。デフォルト設定では、MD-score が 10 の場合は 91%の確率に対応します。

次のリン酸化ペプチドの例では、MD-Score は「83.4 – 75.8 = 7.6」および「83.4 – 62.7 = 20.7」となりますので、これから計算される確率は S4 サイトが 85%、S6 サイトが 15%、T7 サイトが 1%となり、S4 サイトがリン酸化されたペプチドが最も可能性が高く、確から しいことがわかります。

Score	Mr(calc)	Delta	Sequence	Site Analysis
83.4	1846.7179	0.1889	DIGSESTEDQAMEDIK	Phospho S4 84.56%
75.8	1846.7179	0.1889	DIGSESTEDQAMEDIK	Phospho S6 14.73%
62.7	1846.7179	0.1889	DIGSESTEDQAMEDIK	Phospho T7 0.72%
26.9	1846.7808	0.1261	KLNSNPENYCESELK	
22.8	1846.7729	0.1339	KMEDSVGCLETAEEVK	
15.5	1846.9230	-0.0161	GAYTIEQHPVLGLEIK	
14.2	1846.7729	0.1339	KMEDSVGCLETAEEVK	
13.9	1846.8754	0.0315	YVKGIYENLPSIDEK	
13.8	1846.8866	0.0202	QLIEAPDPVPSFEVAR	

次の脱アミド化の例では、MD-Score は「27.3」および「36.6」となりますので、N9 サイトの脱アミド化ペプチドがほぼ 100%の確率で正しいことを示しています。

Score	Mr(calc)	Delta	Sequence	Site Analysis
84.5	3541.7900	0.0191	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEEALDLIVDAIK	Deamidated N9 99.79%
57.2	3541.7900	0.0191	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEEALDLIVDAIK	Deamidated N19 0.19%
47.9	3541.7900	0.0191	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEEALDLIVDAIK	Deamidated Q21 0.02%
14.3	3541.7735	0.0355	INKRLNYIKRQPHQSDDEPAQIMGYKNK	
14.3	3541.7735	0.0355	INKRLNYIKRQPHQSDDEPAQIMGYKNK	
13.5	3541.7470	0.0620	ENEVPERKNYEDEMQVTKLPVNQNILKN	
13.0	3541.8013	0.0078	RNVISQINDGQVQVTTQKLPHPVSQIGDGQIQ	
12.9	3541.7472	0.0618	ALLVMSDKVYENYTNNINFYMSKNLIKK	
12.8	3541.8641	-0.0551	IRSTFKYSPINNPNLILDVKNGSGNEQRPTI	
12.6	3541.7472	0.0618	ALLVMSDKVYENYTNNINFYMSKNLIKK	