

## 消化酵素の定義方法 (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、次の書式にしたがって新規のペプチド結合切断特性を追加登録することができます。

### enzymes ファイルの存在場所：

C:\inetpub\mascot¥config フォルダにあります。

### 編集方法：

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。または、[スタート]メニュー → [プログラム] → [Mascot] → [config] → [Mascot Enzymes file]を選択するとメモ帳で開かれまので、編集してください。

### 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 (\*) で区切ります。

<pre>Title:Trypsin Cleavage:KR Restrict:P Cterm *</pre>	}	“Trypsin” のペプチド切断特性定義
<pre>Title:Asp-N Cleavage:DB Nterm *</pre>	}	“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)：

タイトル定義行です。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。

---

## 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。

---

## 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）。

何かお困りのことがありましたら弊社技術サポートにご連絡ください。



マトリックスサイエンス株式会社

電子メール: support-jp@matrixscience.com

電話: 03-5807-7895

ファクシミリ: 03-5807-7896

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