

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。

Protein hits (6 proteins)

▼Columns: (custom) (10 out of 27)

Saved arrangement Standard (default) Load Make default
 Custom

Enabled
 Database
 Accession
 Score
 Mass
 Num. of significant matches
 emPAI
 115/114
 116/114
 117/114
 Description

Available
 Family
 Member
 Num. of matches
 Num. of sequences
 Num. of significant sequences
 115/114
 Number of peptides (115/114)
 Significant (115/114)
 Not-normal (115/114)
 SD(geo) (115/114)
 116/114
 Number of peptides (116/114)
 Significant (116/114)
 Not-normal (116/114)
 SD(geo) (116/114)
 117/114
 Number of peptides (117/114)
 Significant (117/114)
 Not-normal (117/114)
 SD(geo) (117/114)

Filters: ("Significant (115/114)" = yes AND Mass > 50000 AND "Num. of significant matches" > 3)
 Significant (115/114) Yes Remove
 AND Mass > 50000 Remove
 AND Num. of significant matches > 3 Remove
 AND Family < Remove
 Update

Export as CSV

DB	Accession	Score	Mass	Pep(sig)	emPAI	115/114	116/114	117/114	Description
SwissProt	VIT3_DROME	212	50436	12	1.13	1.761	2.245	3.698	Vitellogenin-3 pr
SwissProt	PDI_DROME	136	63614	7	0.46	1.891	3.221	1.717	Protein disulfide
SwissProt	ATPB_DROME	87	57821	4	0.27	0.357	0.831	1.733	ATP synthase st
SwissProt	SPTCA_DROME	72	305140	4	0.05	1.411	2.166	0.928	Spectrin alpha c
SwissProt	CALR_DROME	66	53540	7	0.30	1.214	0.889	0.717	Calreticulin prec
SwissProt	HSP7C_DROME	65	81675	5	0.19	1.422	1.906	1.087	Heat shock 70 k

タンパク質リストに反映させたい項目の選択と並べ替えができます。

指定した条件を満たすタンパク質リストを作成することができます。

2. Preferred Taxonomy

NCBI Inr 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生物種に存在し、それらが異なるエントリー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ーが表示されますが、その代表エントリーではなく、目的の生物種のエントリー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。

▼Decoy search summary (random protein sequences)

Peptide matches	in target	in Decoy	FDR	
- above identity threshold	1152	5	0.43%	Adjust to 0.5% * ▾
- above identity or homology threshold	1467	6	0.41%	Adjust to 1% ▾

Decoy results are available in [the decoy report](#).

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。

Accession ▾ contains ▾ Find



**MATRIX
SCIENCE**

プロテオミクスとともに・・・

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

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

Database Manager

Databases (4)

Parse rules (10)

Tasks (0)

Settings

Databases

Name	Status	New files	Tasks
cRAP	* In use	<input type="button" value="Update"/> <input type="button" value="Deactivate"/>	(success) [Wed Jun 20 23:03:11 2012]
EST_human	* In use	<input type="button" value="Update"/> <input type="button" value="Deactivate"/>	(success) [Thu Jun 21 01:11:11 2012]
NCBIInr	* In use	<input type="button" value="Update"/> <input type="button" value="Deactivate"/>	(cancelled) [Mon Jun 25 21:05:21 2012]
SwissProt	* In use	<input type="button" value="Update"/> <input type="button" value="Deactivate"/>	(success) [Thu Jun 21 00:03:24 2012]

*) Entries marked with an asterisk are predefined definitions. Predefined definitions file was last updated Wed Jun 20 20:12:26 2012.

Full database status information is available on [the database status page](#).

[Refresh](#)

New database

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。

Database Manager

Databases (4)

Parse rules (10)

Tasks (0)

Settings

Enable predefined database definition

Predefined database definitions are configuration entries for the most commonly used, publicly available databases. Configuration and FASTA files for predefined definitions will be automatically kept up to date as long as the Mascot Server machine is connected to the Internet.

Name	Enable	Notes
contaminants	<input type="button" value="Enable"/>	
cRAP	<input type="button" value="Enable"/>	Already set up as cRAP.
Environmental_EST	<input type="button" value="Enable"/>	
EST_human	<input type="button" value="Enable"/>	Already set up as EST_human.
EST_mouse	<input type="button" value="Enable"/>	
EST_others	<input type="button" value="Enable"/>	
Fungi_EST	<input type="button" value="Enable"/>	

New database

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	GAYTIEQHPVLEIK	
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	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEALDLIVDAIK	Deamidated N9 99.79%
57.2	3541.7900	0.0191	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEALDLIVDAIK	Deamidated N19 0.19%
47.9	3541.7900	0.0191	KRYGASAGNVGDEGGVAPNIQTAEALDLIVDAIK	Deamidated Q21 0.02%
14.3	3541.7735	0.0355	INKRLNYIKRQPHQSDDEPAQIMGYKNN	
14.3	3541.7735	0.0355	INKRLNYIKRQPHQSDDEPAQIMGYKNN	
13.5	3541.7470	0.0620	ENEVPERKNYEDEMQVTKLPVNQNLKN	
13.0	3541.8013	0.0078	RNVISQINDGQVQVTTQKLPHPVSIQDGGQIQ	
12.9	3541.7472	0.0618	ALLVMSDKVYENYTNINIFYMSKNLIKK	
12.8	3541.8641	-0.0551	IRSTFKYSPINNPNIILDVKNKSGNEQRPTI	
12.6	3541.7472	0.0618	ALLVMSDKVYENYTNINIFYMSKNLIKK	