

# Mascot *Distiller*



{*MATRIX*}  
{*SCIENCE*}

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 KN ビル 3 階  
電話 : 03-5807-7895  
ファクシミリ : 03-5807-7896  
URL : <http://www.matrixscience.com>

**Mascot Distiller** は、質量分析計から出力されるデータファイル (raw data file) を読み込み、それらを可視化するとともに、**Mascot** 検索に適したピークリストを生成するためのデータ処理機能を提供します。すべてのメーカーの質量分析計が出力するデータフォーマットに対応していますので、**Mascot Distiller** というひとつのユーザインターフェース環境のもとで、種類あるいはメーカーの異なる質量分析計の出力データを処理 (可視化、ピークリストの生成、**Mascot** 検索の実行) することができます。

**Mascot Distiller** は Windows 2000 および Windows XP Professional で動作します。Windows 98、ME、XP Home Edition では動作しませんのでご注意ください。

## 1 Search Toolbox の機能 3 頁

Distiller の新バージョンの機能である、Search Toolbox の機能についてご説明しています。**Search Toolbox ライセンスをご購入頂かなければご利用になる事ができません。**

## 2 アンインストール 4 頁

Distiller をアップグレードするために、まず旧バージョンの Distiller をアンインストールします。ここではアンインストールの方法について説明しています。

## 3 インストール 4 頁

Mascot Distiller のインストール操作を説明しています。インストール開始後、表示されるダイアログに従って作業を進めてください。

## 4 ライセンスのアップグレード 10 頁

Search Toolbox ライセンスをご購入頂いた方のみ必要な操作です。現在のライセンスを Search Toolbox ライセンスにアップグレードするための操作方法について説明しています。

## 5 使用方法 14 頁

ヘルプ書類へのアクセス方法を説明しています。

## 6 お問い合わせ 14 頁

## 1 Search Toolbox の機能

Mascot Distiller の Search Toolbox は、タンパク質同定と、同定の結果アサインされた各ペプチドを詳細に検討する際に非常に役立つ、以下の6つの機能を有しています。

- Mascot の検索結果を Distiller 内に取り込み、表示
- de novo sequencing 自動計算
- de novo sequencing の計算結果から、Sequence Tag 法のクエリーを自動作成
- マニュアルによる de novo sequencing サポート
- ペプチドのアミノ酸配列から理論的なフラグメントのマス値を算出し、MS/MS データと重ね合わせて表示
- タンパク質のアミノ酸配列から理論的なペプチドのマス値を算出し、MS データと重ね合わせて表示

Mascot Distiller の Search Toolbox モジュールを適用することで、

RAW データ読み込み

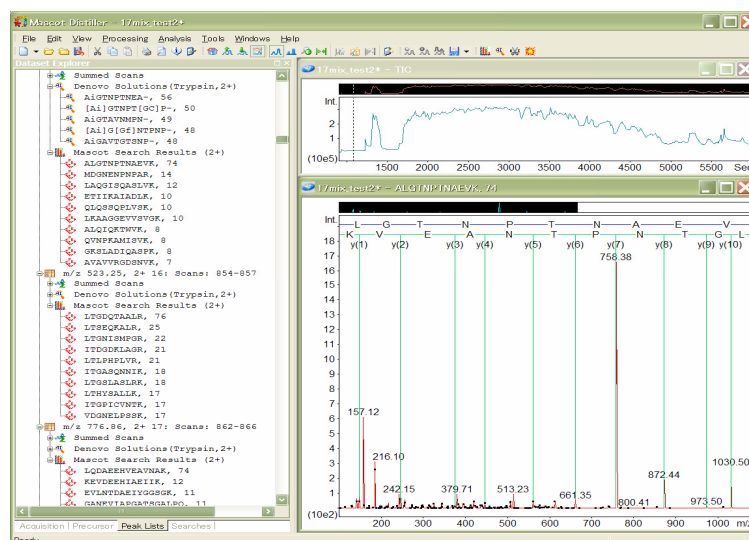
モノアイソピックピーク検出

MS/MS データベース検索・de novo シーケンス検索・シーケンスタグ検索

といった一連の操作を、シームレスに実行することができます。

### MASCOT 検索結果を Distiller 内で表示

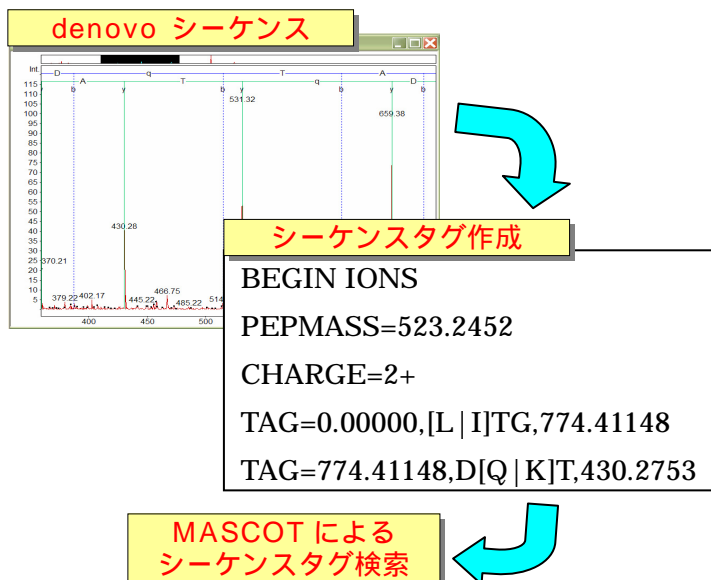
MASCOT の検索結果を、Mascot **Distiller** の画面で表示させることができます。RAW データの読み込みから検索結果の表示までのすべてを Mascot **Distiller** から実行できるため、RAW データと検索結果のつながりが、よりわかりやすくなります。



## de novo シーケンス機能、シーケンスタグ検索機能

タンパク質DBなしでペプチド配列を予測する **de novo シーケンス計算**を行うことができます。配列情報の登録が少ない生物種、生体内ペプチドの解析に有効です。

de novoシーケンスの結果を元に **シーケンスタグ検索**を行うことができます。通常のMS/MS検索では同定できないペプチドの解析に有効です。



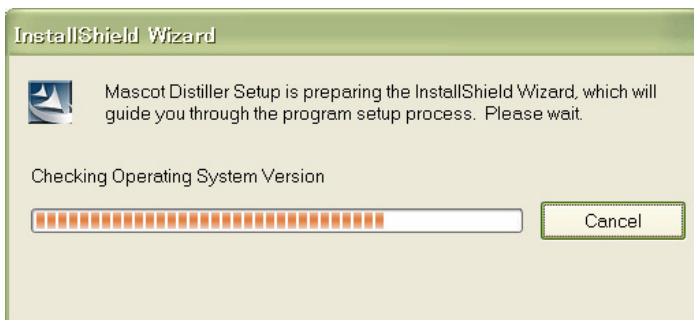
## 2 アンインストール

新しいバージョンへアップグレードする前に、旧バージョンのアンインストールを行う必要があります。アンインストールの操作手順は以下の通りです。

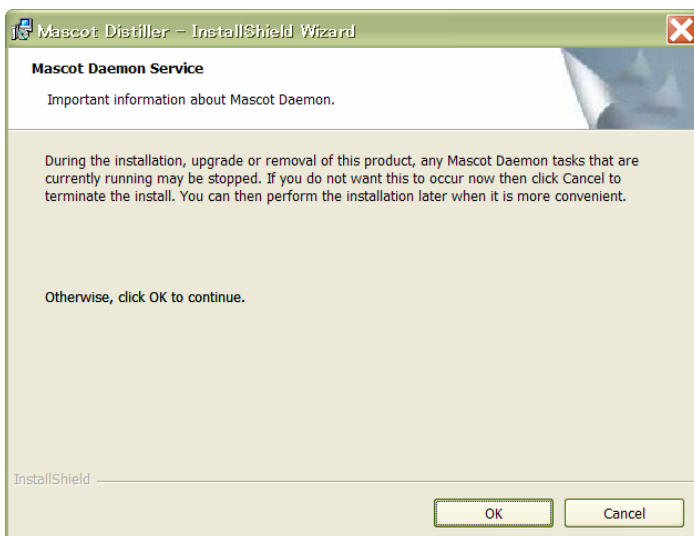
- (1) スタートメニューから[設定]→[コントロールパネル]の順に選択してください。
- (2) [アプリケーションの追加と削除]アイコンをダブルクリックしてください。
- (3) プログラムの変更と削除リストから Mascot Distiller を選択し、[削除]ボタンをクリックしてください。
- (4) InstallShield ウィザードに従い Mascot Distiller を削除してください。

## 3 インストール

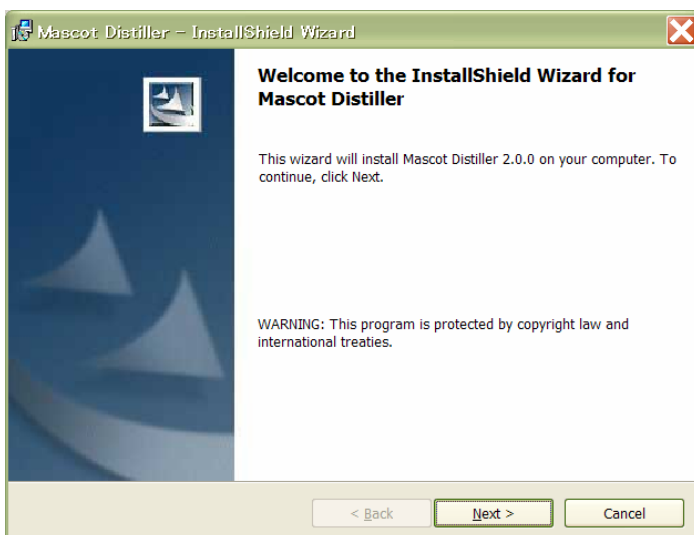
- (1) OS 上で動作しているすべてのプログラムを終了させてください。
- (2) Mascot Distiller の CD を CD-ROM ドライブに挿入してください。お使いの PC の Autorun 機能が有効になっている場合は自動的にインストールが開始されますので、(3) と (4) の操作はスキップしてください。
- (3) スタートメニューから[ファイル名を指定して実行]を選択してください。
- (4) [参照]ボタンをクリックし、CD-ROM ドライブの中の setup.exe を選択し、[OK]ボタンをクリックしてください。インストールが始まります。
- (5) 表示されるウィザードに従いインストールを進めてください。



setup.exe を実行するとインストールのための準備が始まります。



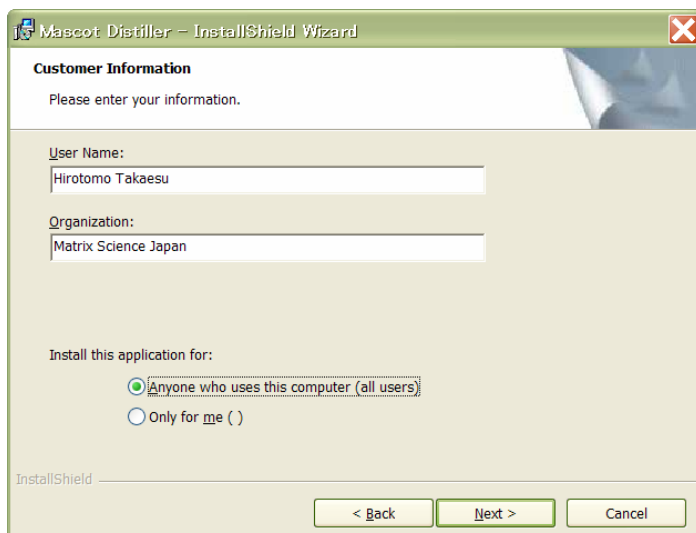
Mascot Daemon が稼動している場合は検索が途中でとまってしまう可能性があります。Daemon のサービスが稼動している場合は左のような画面が現れます。OK を押すとサービスが停止します。



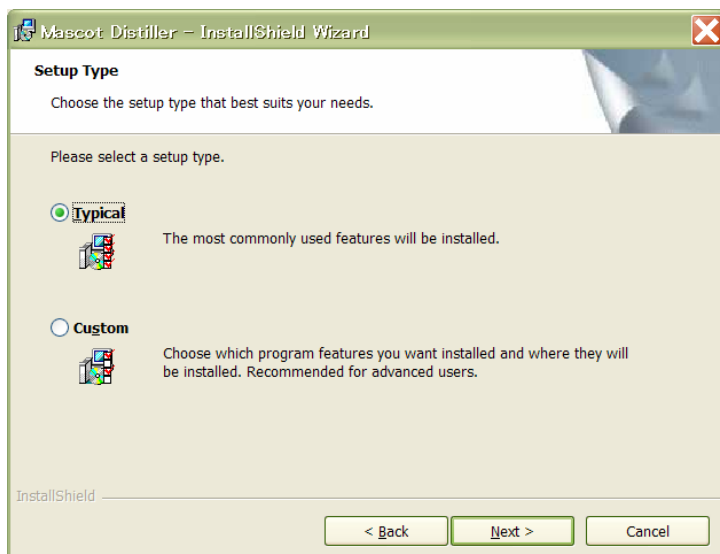
インストールの準備が完了するとこのダイアログが表示されますので[Next >]ボタンをクリックしてください。



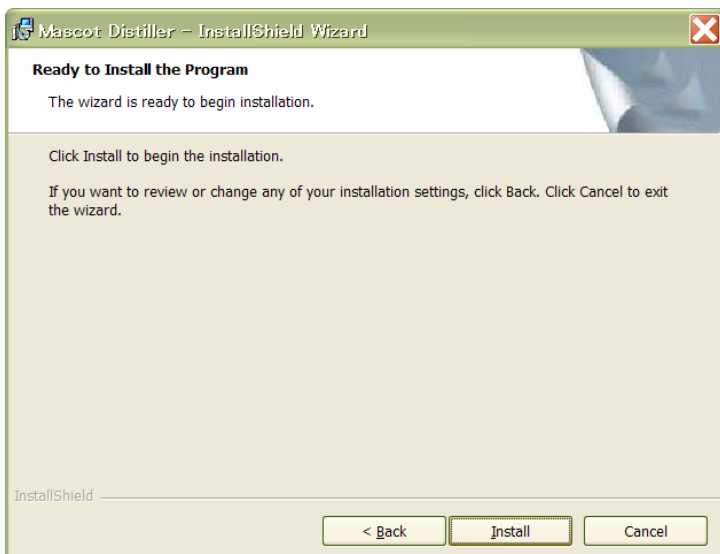
License Agreement をお読みください。内容に問題がないようでしたら「I accept the terms in the license agreement」をチェックし、[Next >] ボタンをクリックしてください。



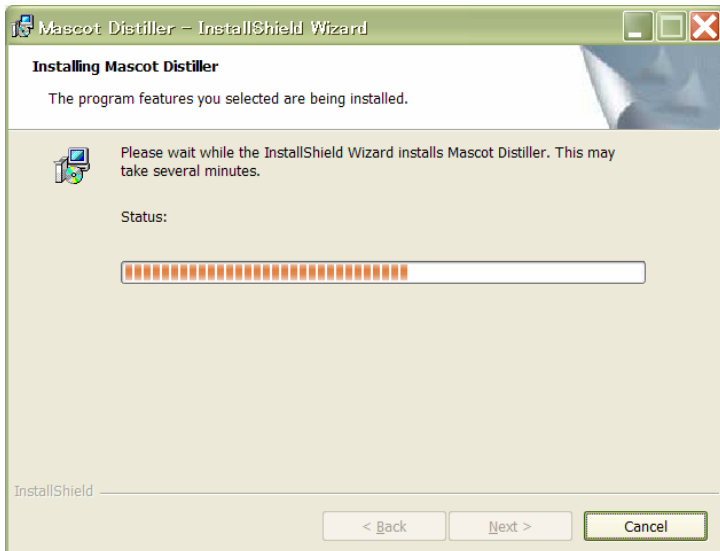
デフォルトでは「User Name」欄にはログオンアカウント名が入ります。必要に応じて変更してください。「Organization」欄には組織名などの情報を入力してください。また、Mascot Distiller を利用するユーザを指定することができますので、「Anyone who uses this computer (all users)」または「Only for me」を選択し、[Next >] ボタンをクリックしてください。



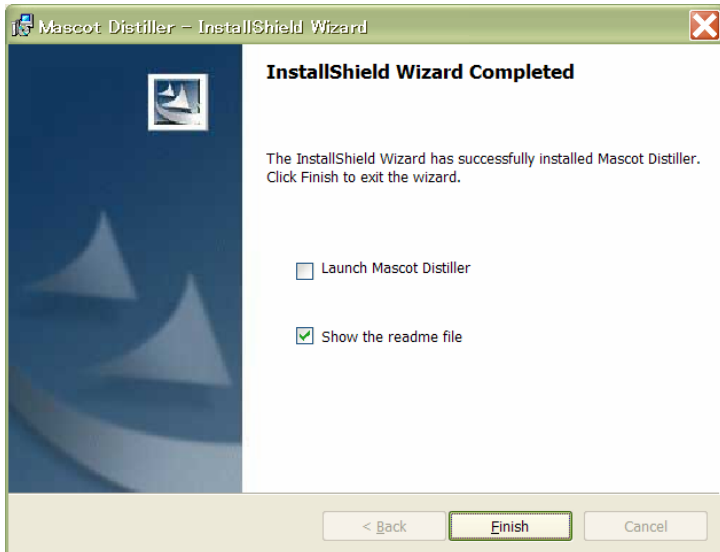
セットアップのタイプを選択することができます。通常はデフォルト (Typical) を選択し、[Next >] ボタンをクリックしてください。



インストールの準備が整った旨のダイアログです。[< Back]をクリックすることにより前のダイアログに戻ることができます。問題ないようでしたら[Install]ボタンをクリックしてください。



インストールが始まります。終了するまでしばらくお待ちください。



インストールが正常に終了するとこのダイアログが表示されます。「Launch Mascot Distiller」をチェックすると、インストールが終了後、Mascot Distiller が自動的に起動します。[Finish]ボタンをクリックしてください。

Mascot Distiller は、Windows 2000、Windows XP Professional で動作します。Windows 9x、Windows Me では動作しませんのでご注意ください。

Mascot Distiller から直接 Mascot 検索を実行する場合は Internet Explorer 4.01 SP1 以上が必要です。

Mascot Distiller は次の質量分析計データ処理ソフトウェアから出力されるデータファイルフォーマットをサポートしています。いくつかのデータファイルフォーマットについては、対応する質量分析計データ処理ソフトウェアに付属するライブラリファイル群 (DLL あるいは OCX と呼ばれる Windows のプログラムライブラリで、Mascot Distiller がデータファイルを読み込む際に利用します) が必要です。質量分析計データ処理ソフトウェアがインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールする場合は特別な環境設定等は必要ありませんが、質量分析計データ処理ソフトウェアがインストールされていない PC に Mascot Distiller をインストールする場合は、必要なライブラリファイルをインストールしてください (ライブラリファイルをインストールする際、regsvr32.exe ユーティリティを利用してレジストリに登録することが必要になる場合があります。)

#### (1) Applied Biosystems Data Explorer (Voyager、4700)

**Data Explorer** がインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールしてください。Mascot Distiller は **Data Explorer version 3.5、4.0** および **4.5** で動作確認をしています。なお、**Data Explorer** の仕様上、**Data Explorer** と Mascot Distiller を同時に起動するとエラーが発生しますので、同時に起動しないでください。

#### (2) Applied Biosystems | MDS Sciex Analyst (QStar、QTrap)

**Analyst** がインストールされている PC に Mascot Distiller をインストールしてください。Mascot Distiller は **Analyst QS 1.0** および **Analyst 1.3、1.4** で動作確認をしています。**Analyst 1.3** をお使いの場合は、Enhancement pack1 以上をインストールしてください。**Analyst QS** をお使いの場合は service pack5 以上をインストールしてください。

**Analyst QS 1.0** をお使いの場合は、次の操作にしたがってレジストリ設定を変更してください。

- ① regedit ユーティリティを起動し、  
HKEY\_CLASSES\_ROOT¥CLSID¥{C09D0EF8-926D-11D1-A9F2-0060977F5C78}¥InprocServer32  
に移動してください。
- ② ThreadingModel を削除するか名称を変更してください。

#### (3) Bruker XMASS / XTOF (Reflex、Biflex 等)

ライブラリは必要ありません。

#### (4) Bruker yep format (Bruker Esquire、Agilent LC/MSD Trap)

ライブラリは必要ありません。

#### (5) mzXML

mzXML スキーマのバージョン 2.0 か 2.1 のファイルをご利用ください。これ以前のバージョンはサポートしていません。バージョンの確認方法として、ファイルをテキストエディタで開き、最初の数行を見てください。以下のような文章が記載されている場合は、**mzXML\_2.0 or mzXML\_2.1** のスキームです。

```
<?xml version="1.0" encoding="ISO-8859-1"?>
<mzXML
xmlns="http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1"
xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
xsi:schemaLocation="http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1
http://sashimi.sourceforge.net/schema_revision/mzXML_2.1/mzXML_idx_2.1.xsd">
```

#### (6) Waters (Micromass) Masslynx (QTof, M@ldi, TofSpec)

ライブラリは必要ありません。

#### (7) Thermo Finnigan Xcalibur (LCQ, Deca)

Mascot Distiller は **Xcalibur 1.2 から 2.0** までのバージョンで動作確認をしています。バージョン 1.4 の場合、次のライブラリファイル群が必要になります。

- ① Xrawfile.ocx
- ② FControl2.dll
- ③ Fglobal.dll
- ④ Fileio.dll
- ⑤ finDB.dll
- ⑥ finSSClientLib.dll
- ⑦ Fregistry.dll

バージョン 2.0 ではさらに以下の 2 つのファイルが必要です。

- ⑧ CFRDBResources.dll
- ⑨ CFRUtil.dll

これらのライブラリファイルはひとつのフォルダにまとめ、regsvr32.exe ユーティリティーを利用して Xrawfile.ocx ファイルをレジストリに登録してください。

<レジストリへの登録方法>

- ① スタートメニューから [ファイル名を指定して実行] を選択し、「名前」欄に「cmd」を入力し、[OK] ボタンをクリックしてください。DOS 窓が開きますので、C:\%winnt%\system32 ディレクトリに移動してください。
- ② dir コマンドを実行し、regsvr32.exe が存在することを確認し、次のコマンドを実行してください。  
C:\%WINNT%\system32>regsvr32.exe "your\_directory パス¥XRawfile.ocx"
- ③ XRawfile.ocx の登録が成功すると次のダイアログが表示されます。  
DllRegisterServer in your\_directory パス¥XRawfile.ocx succeeded.

注：「your\_directory パス」は XRawfile.ocx ファイルが存在するディレクトリパスです。

#### (8) Shimadzu (Kratos) Launchpad (Axima)

Mascot Distiller は **Axima CFR**、**Axima CFR plus**、**Axima QIT** のデータファイルをサポートしています (初期の Kompact データファイルでの動作確認は行っていません)。データファイルを開くためには

gzip.exe プログラム (Launchpad に含まれています) が必要です。Launchpad がインストールされている場合、gzip.exe プログラムは C:\Program Files\Kompact\programs ディレクトリにありますので、このディレクトリにシステムパスを通してください。

サポートしているキャリブレーション手法は、Least square (old and new)、Quadratic、Cubic、Two point です。Polynomial はサポートしていません。

PSD データについては、Cubic spline を使った Additional fragment correction をサポートしていますが、Quadratic fit はサポートしていません。また、自動測定から得られた複数サンプルを含むデータファイルをサポートしていますが、それぞれのサンプルはひとつの MS あるいは MS/MS スペクトルのみで構成されている必要があります。ひとつのサンプルを含むデータファイルの場合も同様にひとつのスペクトルのみで構成されている必要があります。

#### (9) Shimadzu LCMSolution (LCMS-IT-TOF)

Shimadzu LCMS-IT-TOF Data Export ライブラリ (TTFLDataExport) 1.02 が必要です。

## 4 ライセンスのアップグレード

Mascot Distiller を起動し、ライセンスの発行手続きを行ってください。表示された登録フォーム (Web ブラウザ上の登録フォームまたはファクシミリ書類を選択することができます) に必要事項を記入し、弊社宛にお送りください。ライセンス情報を含む電子メールをお送りいたします。

お送りした電子メールの本文にライセンス情報が含まれていますので、本文全体をコピー (クリップボードにその内容がコピーされます) してください。Mascot Distiller にはクリップボードの内容を自動的に読み込む機能がありますので、クリップボードにライセンス情報が含まれている場合はそれを自動的に読み取り、ライセンスのインストールが完了します。

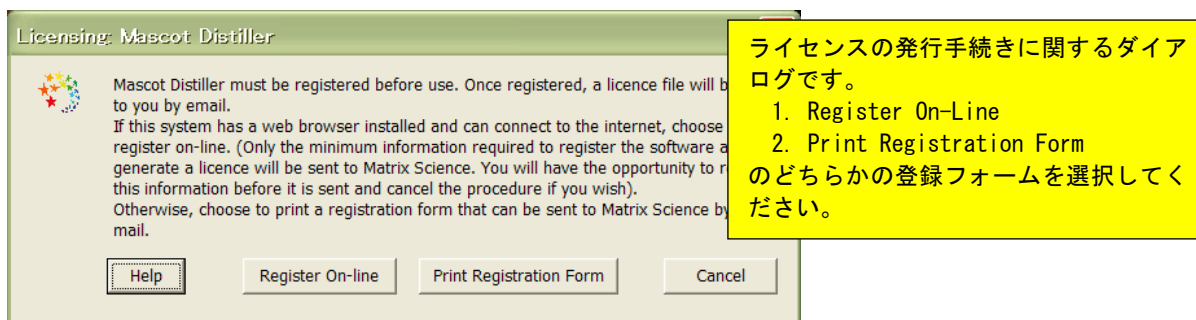
#### (1) Mascot Distiller の起動

Mascot Distiller を起動してください。



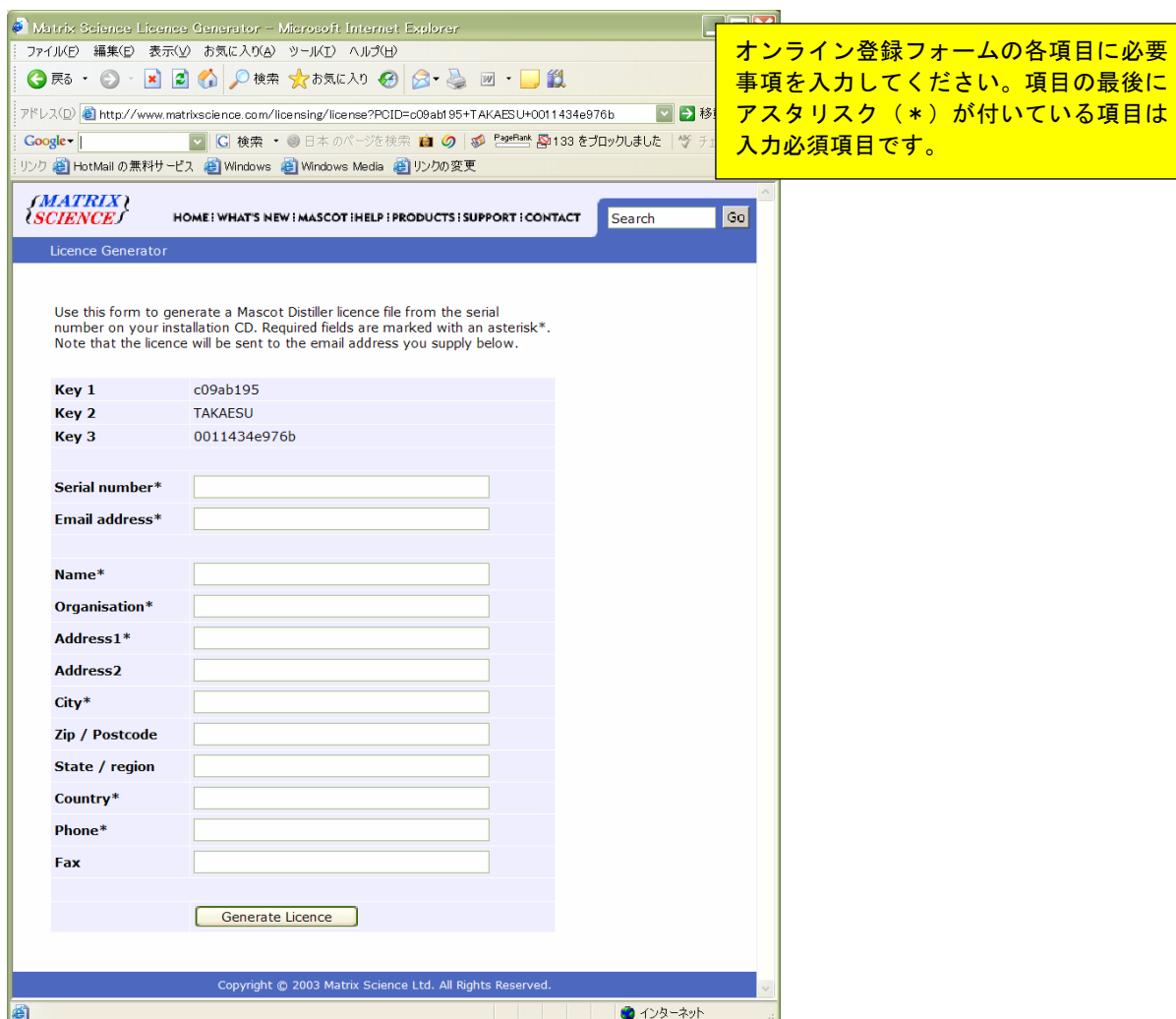
#### (2) 登録フォームの表示

ライセンスが存在しない場合や無効になっている場合は、ライセンスの発行手続きに関するダイアログが表示されます。



### (3) オンラインによるライセンス発行手続き

PC に Web ブラウザがインストールされていて、インターネットへの接続環境が整っている場合は [Register On-line] ボタンをクリックしてください。弊社のホームページに接続され、次の画面が表示されます。

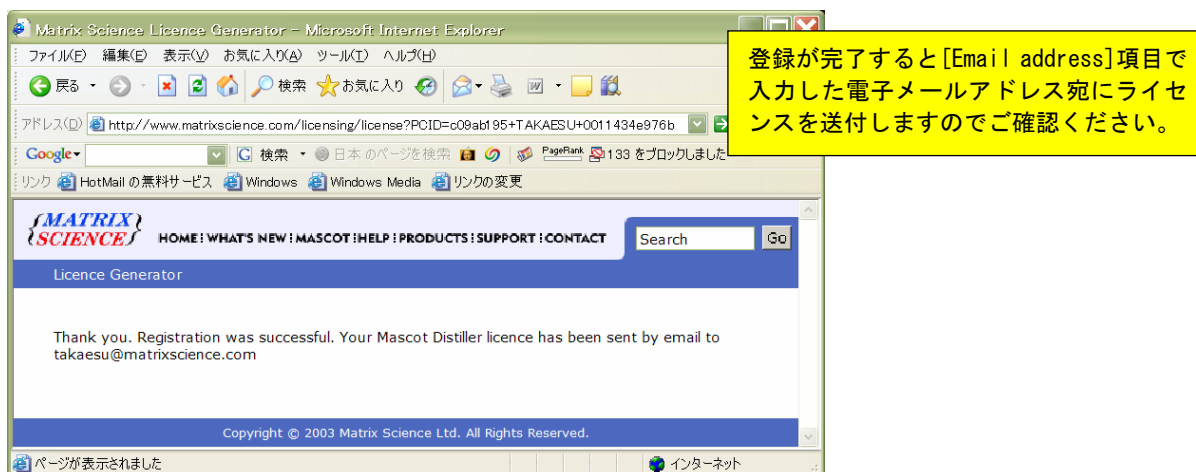


アスタリスク (\*) が付いている項目は入力必須項目です。「Serial number」入力欄にはシリアル番号を入力します。シリアル番号は **68E9-3233-73A7** のような形式を持ち、通常は Mascot Distiller の CD ケースに貼付してあります。シリアル番号が不明な場合は弊社技術サポートまでご連絡ください。

**ここで入力された情報は Mascot Distiller のライセンス発行およびお客様への技術サポートの提供以外の目的（広告主や第三者への提供など）で使用することはありません。**

入力項目への入力が終わりましたら [Generate Licence] ボタンをクリックしてください。「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。

なお、異なる PC への再インストールや既存ライセンスが無効になるような PC システム構成の変更（ネットワークカードを変更したような場合）を行った場合は、再度上記の登録作業を行ってください。30 日間有効な評価ライセンスを発行いたしますので、評価ライセンスの有効期間が切れる前に弊社技術サポートまでご連絡ください。



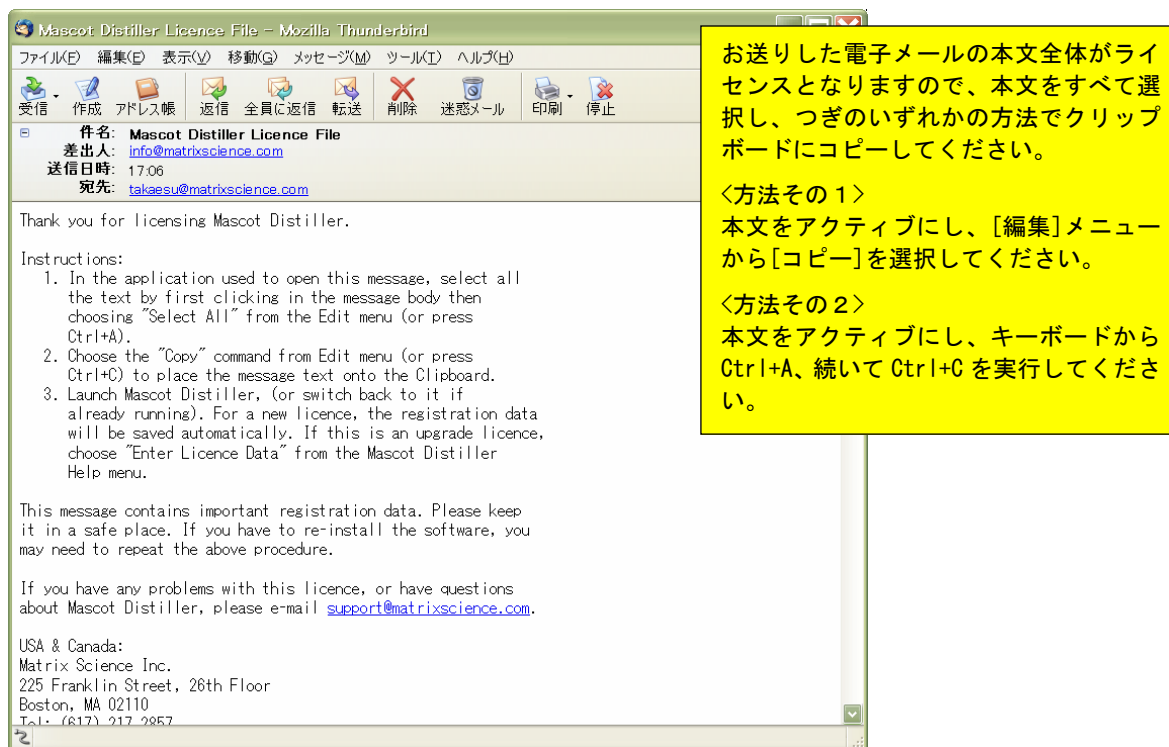
#### (4) ファクシミリによるライセンス発行手続き

インターネットへ接続できない場合やオンラインでの登録手続きを希望されない場合は [Print Registration Form] ボタンをクリックしてください。ファクシミリ送付シート (Licence\_request.rtf ファイル) が開きますので、必要事項を記入し弊社宛ファクシミリをお送りください。「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。

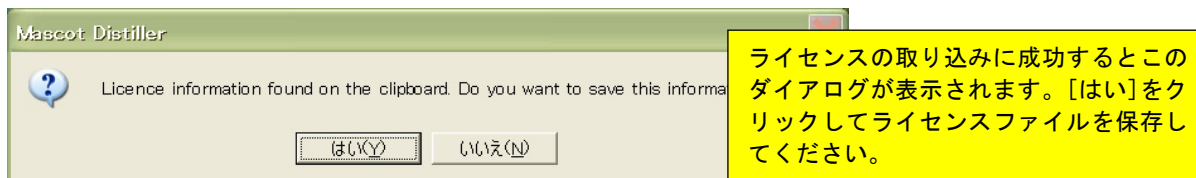
#### (5) ライセンスのインストール

お送り頂きました登録情報に基づきライセンスを作成し、「Email address」項目で入力した電子メールアドレス宛にライセンスをお送りいたします。

Mascot Distiller は Windows のクリップボードに保存されたライセンス情報を自動的に取得することができます。お送りした電子メール（電子メールのメッセージ本文全体がライセンスになっているとお考えください）に関して、次の操作を行ってください。



- ① お送りした電子メールメッセージを開き、メッセージ本文が表示されているウィンドウをクリックし（アクティブにし）、[編集]メニューから[すべて選択]を選択してください（あるいはキーボードのCtrl キーを押しながら A キーを押してください）。メッセージ本文が反転し、選択されます。
- ② [編集]メニューから[コピー]を選択してください（あるいはキーボードの Ctrl キーを押しながら C キーを押してください）。メッセージ本文が Windows のクリップボードにコピーされます。
- ③ Mascot Distiller を起動してください。Mascot Distiller がすでに起動している場合は Mascot Distiller をアクティブにしてください。Windows のクリップボードにコピーされているライセンスが新規ライセンスの場合、Mascot Distiller は自動的にそのライセンスを取り込み、有効にします。Windows のクリップボードにコピーされているライセンスが新規ライセンスではなくアップグレードライセンス等の場合は、[Help]メニューの[Enter License Data]を選択してください。Mascot Distiller はライセンスを取り込み、有効にします。



- ④ 上記の操作がうまくいかない場合は、電子メールのメッセージ本文を ASCII (American Standard Code for Information Interchange) テキストファイル（ファイル名は Distiller.lic）として作成し、C:\Program Files\Common Files\Matrix Science\licdb フォルダに保存してください。なお、このフォルダパスはデフォルトインストールを行った場合に作成されます。インストールの際に他のフォルダを指定した場合はそのフォルダに保存してください。

## 5 使用方法

MASCOT Distiller を起動し、[Help]メニュー → [Mascot Distiller Help]を選択してください。ヘルプ書類が起動します。左側ウインドウの[目次]タブを有効にすると目次が表示されますので、[Overview]をクリックし、[Quick tour : Processing a single MS scan]または[Quick tour : Processing an LC-MS dataset]の部分を参照してください。また、必要に応じてその他の項目をご参照ください。

## 6 お問い合わせ

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 : 03-5807-7897

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

© 2003-2005 マトリックスサイエンス株式会社

© 2003-2005 Matrix Science Limited