

蛋白質検索プログラム

株式会社ネットワーク応用通信研究所

2008 年 9 月 11 日

目 次

1	はじめに	2
2	プログラムのインストール	2
3	プログラムの起動	2
4	アミノ酸の組合せの検索方法	2
5	検索にかかる時間の目安	3
6	元素の追加・質量の変更	4
7	アミノ酸の主鎖の構造の追加・変更	4

1 はじめに

「蛋白質検索プログラム」は m/z 値から可能なアミノ酸の組み合わせを検索するプログラムです。

2 プログラムのインストール

プログラムのインストールは protein_search.zip ファイルを展開することによって行います。protein_search.zip ファイルの中にはプログラムの動作に必要なファイルが全て含まれています。

ファイルを展開すると、protein_search フォルダが作成されます。protein_search フォルダの内容は以下になります。

protein_search.bat

プログラムを起動するファイルです。

config

このフォルダには、プログラムで使用する元素の質量や、アミノ酸の残基の数に対応する主鎖のフラグメントの構造を定義するファイルが含まれています。

programs

プログラムの本体が含まれているフォルダです。

本プログラムは Windows のシステムフォルダやレジストリに情報を書き込みません。プログラムをアンインストールする場合は、protein_search フォルダを削除してください。

3 プログラムの起動

プログラムの起動は、protein_search フォルダ内の protein_search.bat ファイルをダブルクリックすることによって行います。

4 アミノ酸の組合せの検索方法

アミノ酸の組み合わせを検索する方法を以下に示します。

1. 「 m/z 」に m/z 値を入力します。

入力できるのは数値のみです。数値以外の文字を入力した場合は再度入力を求められます。

2. 入力欄の右にある「Search」ボタンを押します。

アミノ酸の検索が始まります。

検索中は他のボタンを押すことができなくなります。入力した m/z 値が大きい場合には検索に時間がかかります。このような場合には、途中で検索処理を中断したいこともあると思います。処理を途中で中止する場合は「Abort」ボタンを押します。

「Abort」ボタンを押すと検索処理が中止され、他の操作を行うことができるようになります。

3. 検索が終了すると「Results」と「Details」のタブに検索結果が表示されます。

結果は各組成式毎にまとめて表示されます。「Results」には対応するアミノ酸の組み合わせが表示されます。「Details」には主鎖の組成に対応するアミノ酸の組み合わせが表示されます。

4. 「Results」や「Details」の内容を保存する場合は、各タブの下部にある「Save as」ボタンを選択します。

ファイルの選択画面が表示されるので、適切なフォルダを選択します。そして、ファイル名を入力し「保存」を選択します。

5. 検索結果を破棄して再び検索を実行したい場合は「Clear」ボタンを押します。

「Clear」ボタンを押すと「Results」と「Details」の内容が消去され、 m/z 値入力欄にカーソルが移動します。

6. プログラムを終了する場合は「Exit」ボタンを押します。

5 検索にかかる時間の目安

検索時間は入力の m/z 値に応じて指数的に増加します。

以下に主な m/z 値に対して検索を実行した場合にかかる時間を示します。検索を実行する際の参考にしてください。

m/z 値	検索時間
100	2 秒
200	10 秒
300	1 分
400	4 分
500	15 分

6 元素の追加・質量の変更

検索で使用する元素の定義は config フォルダ内の atom_weight.yml に記述されています。

ファイルには各行に一つの元素の定義が記述されています。記述形式は以下のようになっています。

<元素記号><コロン><スペース><質量>

一つの元素の定義は一行に記述してください。複数の元素の定義を一行に記述することはできません。また行頭にスペースを入れてはいけません。

以下に水素の例を示します。

H: 1.0078

atom_weight.yml はプログラムの起動時に読み込まれます。ファイルの記述形式を間違えるとプログラムが正常に動作しなくなります。このファイルに変更を加える場合は、事前にファイルのバックアップを行ってから編集するようにしてください。

7 アミノ酸の主鎖の構造の追加・変更

アミノ酸の残基の数に対応する可能な主鎖のフラグメントの構造は、config フォルダ内の以下のファイルに記述されています。

- principle_chains.yml
- principle_chains_with_proline.yml

principle_chains.yml は全てのアミノ酸用のファイルです。principle_chains_with_proline.yml にはアミノ酸にプロリンが含まれる場合の主鎖の構造が記述されています。

各ファイルには、残基の数が 1 から 5 までの場合に対応する可能な主鎖フラグメントの分子式が記述されています。主鎖フラグメントは残基の数毎にまとまっており、残基の数が少ない順に上から記述されています。残基の数に応じた主鎖フラグメントのまとまりは、「-」一文字が記述された行によって区切られています。主鎖の組成式は、区切り行の次の行からスペースでインデントされて、以下の形式で記述されています。

-<スペース><組成式>

以下に principle_chains.yml の先頭部分から抜粋した例を示します。この例には、残基の数が 1 個の場合と 2 個の場合に可能な主鎖フラグメントの組成式が記述されています。

```
-
- C3N2O2
- C3N02
- C2N2O
- C2N0
- C2O
- CN
- C
```

```
-
- C5N3O3
- C5N2O3
- C4N3O2
- C4N2O2
- C4N02
- C3N2O
- C3N0
```

...

主鎖フラグメントの分子式を変更する場合は、残基の数に対応する主鎖の分子式のまとまりの中の対応する分子式を編集してください。

残基の数が6個の場合の主鎖フラグメントの分子式を追加する場合は、ファイルの末尾に以下のように主鎖フラグメントの分子式を追加します。

```
-
- <フラグメントの分子式>
- <フラグメントの分子式>
- <フラグメントの分子式>
- <フラグメントの分子式>
```

...

principle_chains.yml, principle_chains_with_proline.yml はプログラムの起動時に読み込まれます。記述形式を間違えるとプログラムが正常に動作しくなくなります。これらのファイルに変更を加える場合は、事前にファイルのバックアップを行ってから編集するようにしてください。