

DDAプロテオミクス 解析ソフトウェア



SpectroMine™

powered by Pulsar

UNSURPASSED PERFORMANCE
FOR DDA PROTEOMICS

Deeper Coverage, Faster Analysis and Better Experience
for Quantitative Proteomics

THE NEXT FRONTIER OF INNOVATION IN DDA PROTEOMICS

私たちのパワフルかつユーザーフレンドリーなDDAプロテオミクスソリューションは、最先端のパフォーマンスとスピード、さらに最新のデータ取得法のサポートを提供します。SpectroMineは、最先端のPulsarと新しいKuiper検索エンジンが統合されており、イオンモビリティテクノロジーをフルサポートし、ディープラーニングによる強化によって、より多くの識別が可能になっています。

質量分析（MS）に基づくプロテオミクスは急速に進化しており、イオンモビリティ分離や高次アイソバリックマルチプレックス法が今や日常的なものとなっています。これらの進歩により、免疫ペプチドミクスや限定的なタンパク質分解から大規模コホート解析まで、かつては不可能とされていた研究が可能になりました。これらの能力を活用するには、研究者は時代の変化に対応できるソフトウェア、すなわち、高度なアルゴリズム、柔軟なワークフロー、直感的なインターフェースを統合し、実用的なプロテオミクス知見を提供する、汎用性と高性能を兼ね備えたプラットフォームが必要です。

Biognosysは、データ独立取得（DIA）処理技術および業界トップのDIAソフトウェアであるSpectronautの共同発明者および開発者として最もよく知られています。最新のDDAプロテオミクスの要求に対応するために、DIAデータの解析用に開発された強力なアルゴリズムに基づいて、私たちはSpectroMineを開発しました。SpectroMineは、さまざまなタイプのデータ¹を検索でき、高品質のアイソバリックラベリング定量（ILQ）²を実行できます。医薬品のターゲット同定パイプラインであるLiPMSや、最近ではラベルフリーの宿主細胞プロテオーム（HCP）解析にも使用されています。

SpectroMineは、DDAを最大限に活用します：

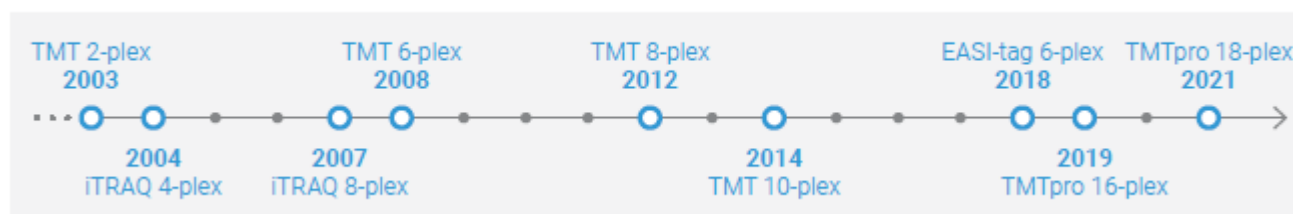
- **Deep-learning augmentation**
免疫ペプチドミクスなどの非特異的検索を含む、比類のない識別とスピードのための高度な検索アルゴリズム
- **Isobaric labeling quantification**
最新のアイソバリックタグとブロックノーマライゼーションのサポート
- **Library-based DDA search**
少ないサンプル量でも、高深度のプロテオームカバレッジを取得
- **Ion mobility technology support**
PASEFとFAIMS Proをサポート
- **Complete analysis environment**
ユーザーフレンドリーなインターフェースでのDDAデータ解析と詳細な結果のレビュー
- **First class technical support**
サイエンティストによるサポート

1 Bader et al., Mol Syst Biol, 2020 16:e9356

2 Hörnberg et al., Nature, 2020 584, 252–256

3 Piazza et al., Nat Commun, 2020 11, 4200

Figure 1. Milestones in Isobaric Labeling development



対応している質量分析装置ベンダー

- Bruker
- SCIEX
- Thermo Scientific
- Waters

推奨システム要件

- Windows 10 (64bit)
- Intel or AMD CPU 4コア以上
- HDDの空き容量 2 TB以上 (2x data set size)
- メモリ 64 GB 以上



« 私はSpectroMineの機能に非常に感銘を受けました。特に、宿主細胞タンパク質モニタリングのためのMSベースの定量プロテオミクスにおいてその効果は顕著です。 »

Somar Khalil, Principal Scientist
Glaxo Smith Kline

利点

特長

パフォーマンス

ディープラーニングによる強化に基づいた高深度のプロテオームカバレッジ

拡張性

ブロックノーマライゼーションと高速かつ、オープンおよび非特異的検索のカバレッジを備えた、大規模ILQ実験データの高速検索と定量化

多用途性

DDA, DIAさらにPRMデータの検索と、FAIMS ProとPASEFのサポート、TMT, iTRAQ, EASI-tagとTMTProのアイソバリックラベリング定量

簡潔性

直感的なユーザーインターフェースでの完全な解析環境

再現性

信頼性のあるロバストな解析結果かつ、容易にシェアが可能

使用性

パラメータの最適化の自動調整により、容易なデータ解析が可能

EFFORTLESS ISOBARIC LABELING QUANTIFICATION

SpectroMineは、アイソバリックラベリング実験における完全なプラットフォームを提供します。

TMTproやEASI-tagを含むすべての主要なラベリング試薬用の解析テンプレートにより、最新のイノベーションを起こし続けることを容易にします。

Figure 2. Overview of Isobaric Labeling Quantification

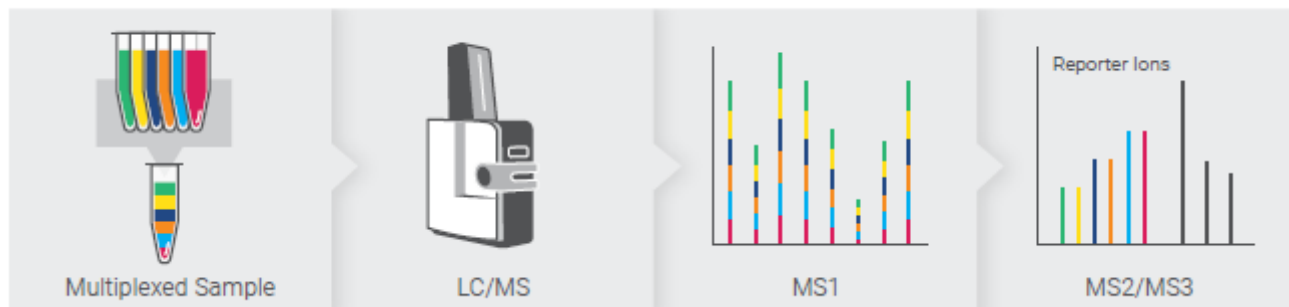
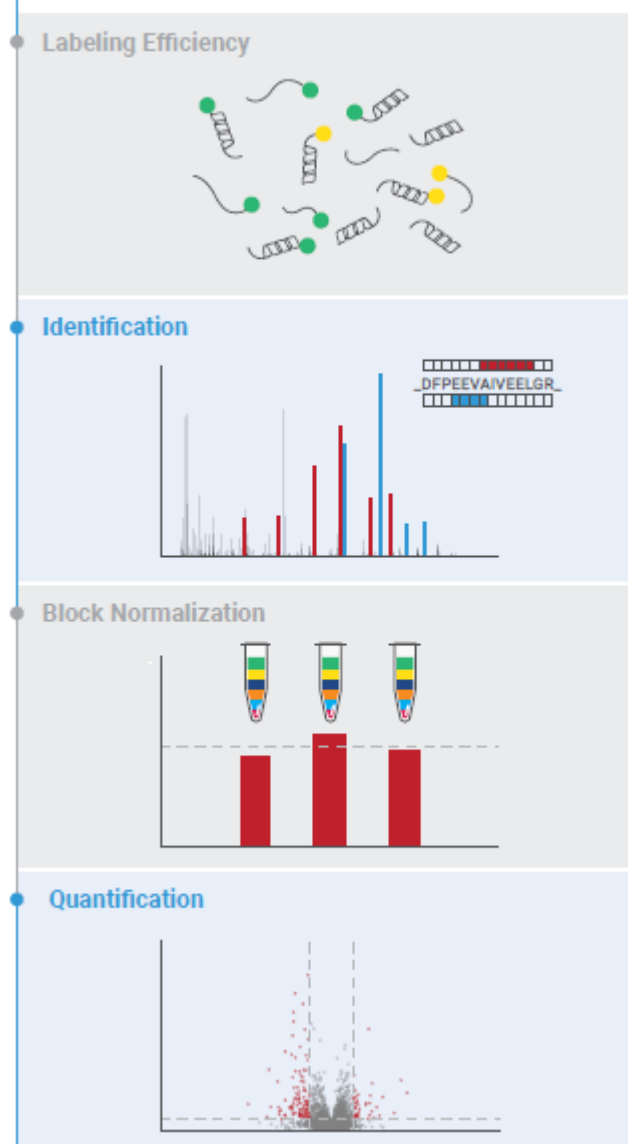


Figure 3. ILQ Processing in SpectroMine (Optional Steps Shown in Grey)



DDAとアイソバリックラベリング定量（ILQ）の組み合わせは、ディスカバリープロテオミクスにおいて選択されるワークフローであり、一度の実験で複数の生物学的サンプルの同時定量を可能にします。ILQは、高深度のプロテオームカバレッジと、定量における高い信頼性と再現性を実現します。⁴

SpectroMineでは、ILQ解析のセットアップを迅速かつ効率的に行うことができます。自動キャリブレーションと高性能なデフォルト設定により、最小限のユーザー設定で、最適な結果を得ることができます。サンプル数がレポーターのマルチプレックス数を超える実験の場合、サンプルをブロックにまとめることができます。

SpectroMineは、これらブロックを横断し、実験全体でのノーマライゼーションを提供します。さらにラベリング効率を評価するためのワークフローにより、解析チャンネル間のサンプル調整に関連した違いを、迅速に修正できます。

定量結果は、SpectroMine上で直接表示でき、カスタマイズ可能なレポート形式、またはMSstatsなどの外部ツールを使用したダウンストリーム処理を行うために、すでにパッケージ化されたスキーマでエクスポートできます。

THE MOST POWERFUL SEARCH ENGINE

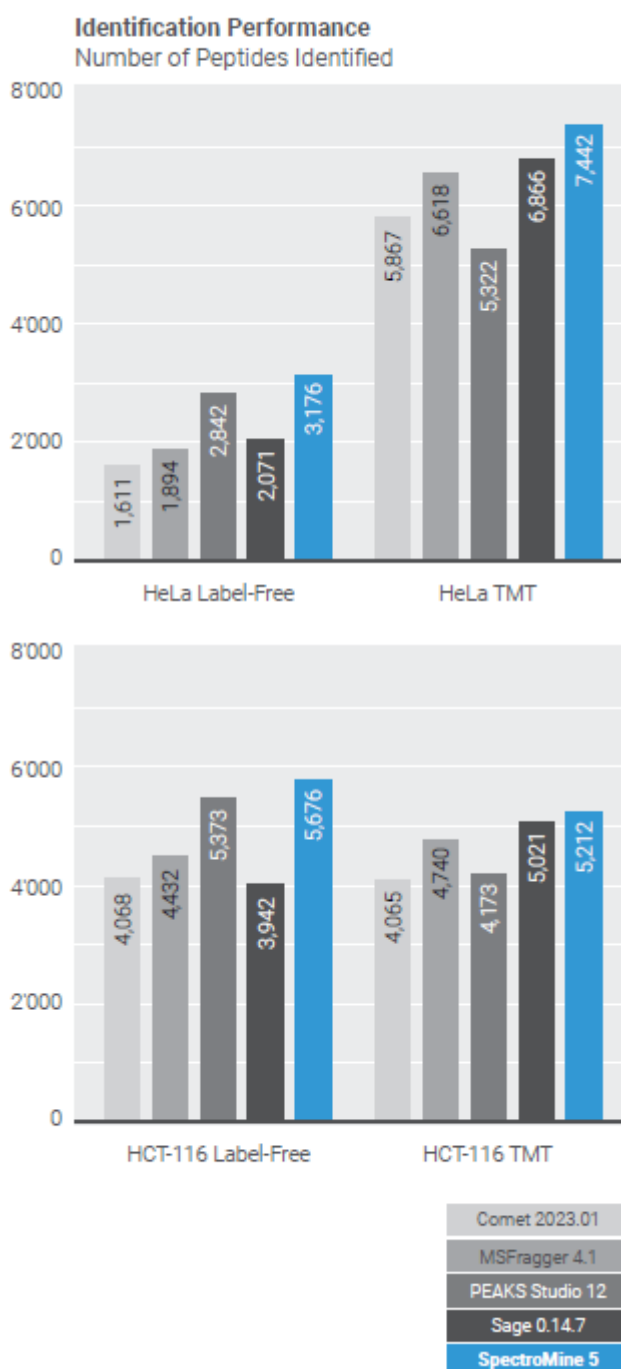
SpectroMine 5では、業界をリードするベンダー非依存のPulsar検索エンジンと、まったく新しいKuiperエンジンを組み合わせることで、より深いプロテオームカバレッジと超高速のDDA分析を実現します。

SpectroMine 5では、Kuiperを活用した免疫ペプチドミクスを導入し、免疫ペプチドミクスワークフローに比類のない深度と信頼性をもたらします。免疫ペプチドミクスと非特異的検索向けに特別に調整された、インデックス保持時間（iRT）と断片化予測のための高度なディープラーニングモデルを活用することで、これまで以上に広範かつ正確なペプチドカバレッジを実現します。

調和的な検索空間、タンパク質推論、およびFDR設定で主要なソフトウェアと比較したベンチマークでは、DDA免疫ペプチドミクス実験において、Kuiperを搭載した SpectroMine 5が一貫して優れたパフォーマンスを発揮しました (Figure 4)。

Kuiperは、最も困難なワークフローにも革命をもたらします。免疫ペプチドミクス解析を強化しながら、包括的なオープン検索を可能にします。SpectroMine 5は、アップグレードされたPulsarのプロパティ予測とKuiperの高度な検索インデックスを組み合わせることで、最先端のパフォーマンスと大幅に短縮された処理時間を実現します。

Figure 4. Analysis of Published⁵ Immunopeptidomics Datasets Using SpectroMine and Leading Competitors

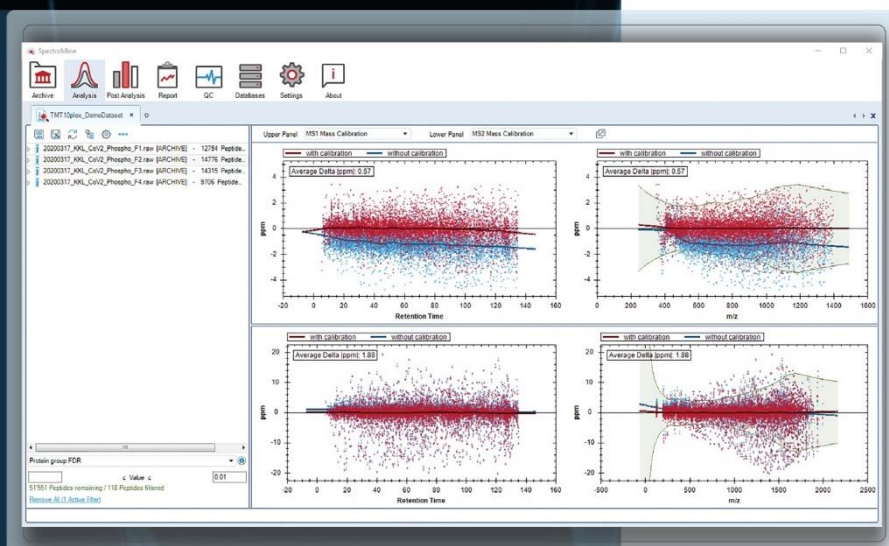


THE ALL-IN-ONE WORKFLOW

SpectroMineは、データ解析、レビュー、解釈、およびエクスポートのためのさまざまな組み込み機能を備えたオールインワンソリューションです。直感的なユーザーインターフェイスには、解析のセットアップをガイドするために、すでに設定済みのウィザードが付属しており、簡単かつユーザーフレンドリーなプロセス実行が可能です。

Automated Mass Calibration

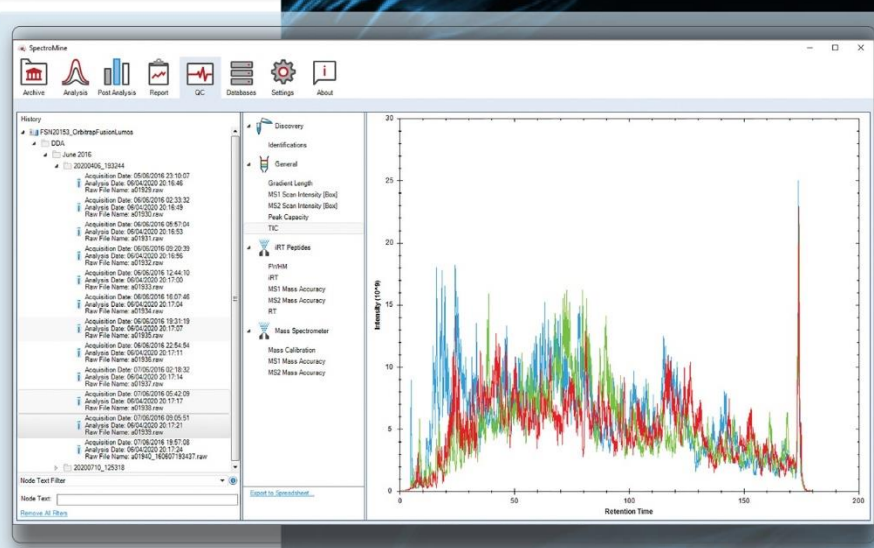
解析後に、ランサマリー、RTキャリブレーション、マスキャリブレーションなどのさまざまな視覚化を用いて、実験の確認を行います。目下の実験に応じて、各MSレベルで自動マスキャリブレーションが提供されます。



Peptide-Spectrum Match (PSM) Plots

ランレベルからスキャンレベルまでの結果の探索を行います。PSMは、すべてのレベルの対応するマスペクトルとともに視覚化されます。SpectroMineでは、結果の最適な表示を行うための設定調整が可能です。





SpectroMine

SpectroMineについて、もっと詳しい情報や無料トライアルライセンスをご希望の場合は、support@filgen.jpまでお問い合わせください。

Biognosys

Biognosysは、最先端のプロテオミクスツールを研究者が利用できるようにすることでライフサイエンスを変革することを専門とする、次世代プロテオミクスのリーダーです。また、プロテオームを理解し、あらゆる分野の研究者に、タンパク質発現と生物学的システムにおける定量化についての深い見方を提供するための一連の製品とサービスを提供しています。

製造元

Biognosys AG

Wagistrasse 21 / 8952 Schlieren

Switzerland

TEL : +(41) 44 738 2040

URL : www.biognosys.com

輸入販売元



フィルジェン 株式会社
バイオインフォマティクス部

【お問い合わせ】

〒459-8011 愛知県名古屋市緑区定納山1丁目1409番地

TEL:052-624-4388 FAX:052-624-4389

E-mail: support@filgen.jp URL: <https://filgen.jp/>

代理店

(Jun.,2025)