スカイライン ターゲット メソッドの編集

このチュートリアルは選択反応監視 (SRM とも呼ぶ複数の反応 - MRM の監視) のための新しい楽器メソッドを作成するスカイライン ターゲット プロテオミクス環境で利用できる機能の多くをカバー マススペクトロします。スカイライン サポート ドキュメントを作成する既存の遷移の一覧から別のチュートリアルで覆われています。

スカイラインの開発にターゲットを絞ったプロテオミクス調査のベンダー中立的なプラットフォームを作成を目指します。すべてのスカイライン ドキュメントからアジレント アプライドバイオシステムズジャパン熱科学、水から SRM の楽器のための遷移リストをエクスポートすることができます。この記事の執筆時にスカイライン ネイティブ メソッドを熱科学的器水のエクスポートすることもできます。私たちも近い将来アジレント、アプライドバイオシステムズジャパンに対するネイティブ メソッドのサポートを追加する予定します。

スカイライン ドキュメントからあなたの方法をエクスポートの大きな利点の 1 つには保証あなたがされ楽器出力はスカイライン、データ解析で使用するためにシームレスにインポートしかしこれはまた他のチュートリアルで覆われています。

スカイラインにターゲットを絞ったプロテオミクス メソッドを作成する方法を理解する重要な出発点、ただし、このチュートリアルを探検する良い理由です。

# はじめに

このチュートリアルを開始するには、次の ZIP ファイルをダウンロード：

<https://skyline.gs.washington.edu/tutorials/MethodEdit.zip>

ようなお使いのコンピューターのフォルダー内のファイルを抽出：

C:\Users\brendanx\Documents

新しいフォルダーが作成されます。

C:\Users\brendanx\Documents\MethodEdit

今のスカイラインを起動し、新しい空のドキュメントが表示されます。

このいくつかの方法で空のドキュメントの編集を開始可能性がありますが最初については作業になります蛋白質スカイラインを与えることができます。スカイラインこの背景情報を与えること、によってより迅速に情報の豊富なメソッドを作成するためにスカイラインを許可します。

# MS/MS スペクトル ライブラリを作成します。

以来、このチュートリアルで作成する方法は、イースト蛋白質を測定するために設計は、まず作成する MS/MS スペクトル ライブラリ酵母データ セットの一部からペプチド アトラス オンライン データ リポジトリからダウンロードします。ペプチド アトラスから任意のデータ セットを同じをすることができるまたはちょうどペプチド アトラスによって提供される完全 SpectraST ライブラリを使用することができます。スカイラインでサポートされているすべてのスペクトル ライブラリの 4 大規模な公共の情報源があります。

         MacCoss ラボ （[http://proteome.gs.washington.edu/software/bibliospec/documentation/libs.html](http://www.microsofttranslator.com/bv.aspx?from=en&to=ja&a=http%3A%2F%2Fproteome.gs.washington.edu%2Fsoftware%2Fbibliospec%2Fdocumentation%2Flibs.html) )

         ペプチド アトラス （[http://www.peptideatlas.org/speclib/](http://www.microsofttranslator.com/bv.aspx?from=en&to=ja&a=http%3A%2F%2Fwww.peptideatlas.org%2Fspeclib%2F) )

         国立研究所の標準と技術局 （NIST） （[http://peptide.nist.gov/](http://www.microsofttranslator.com/bv.aspx?from=en&to=ja&a=http%3A%2F%2Fpeptide.nist.gov%2F) )

         グローバル プロテオーム マシン （GPM） （<ftp://ftp.thegpm.org/projects/xhunter/libs/>)

その他の公に利用できるデータを使用してスカイラインの新しいスペクトル ライブラリを作成することもできます。 または室内実験からのペプチドの検索結果します。スカイラインは、現在次の検索結果フォーマットからライブラリのビルドをサポートします。

         マスコット (DAT ファイル)

         トランス プロテオーム パイプライン (pepXML および mzXML)

         X ！タンデム (BioML XML)

         OMSSA （pepXML と mzXML）

         Myrimatch/IDPicker (ipdXML および mzXML)

         スペクトル ミル (エクスポートされた pepXML および mzXML)

         足場 (エクスポートされた mzIndentML と MGF)

         水 MSe (CSV)

         タンパク質プロスペクター （pepXML と mzXML）

このチュートリアルを開始するには、次の手順を実行して、最初のスカイラインと BiblioSpec スペクトル ライブラリをビルドできます。

         [**設定**] メニューで、**ペプチドの設定**] をクリックします.

         [**ライブラリ**] タブをクリックします。

         **ビルド**ボタン () をクリックします。

         **ライブラリの構築**のフォームの**名前**フィールドで '酵母 (アトラス)」を入力します。

         **[参照**] ボタンをクリックします。

         先ほど作成した MethodEdit フォルダーの下にライブラリ サブフォルダーに移動します。

         [**保存**] ボタンをクリックします。

         **カットオフのスコア**フィールドに最低限の PeptideProphet スコアとして '0.95' を入力します。

         **ラボ インベスコ**フィールドで 'peptideatlas.org' を入力してください。  
[通常、ユニークなドメイン ネーム システム (DNS) 名、ラボによって制御される]。

         **次へ**] ボタンをクリックします。

         **ファイルの追加]**をクリックします。

         MethodEdit フォルダーの下の Yeast\_atlas サブフォルダーに移動します。

         このフォルダー内の対話 prob.pep.xml ファイルをダブルクリックします。

         **[完了**] ボタンをクリックします。

スカイラインがペプチドの設定フォームの [ライブラリ] タブの「ライブラリ」リストに、新しく作成された '酵母 （アトラス）' ライブラリを追加することを参照してくださいする必要があります。ライブラリの構築作業を続行することを解放するバック グラウンド タスクとして実行されます。スカイラインのステータス バーを見て場合、ライブラリの構築の進行状況を見ることができます。しかし、これは、小さなデータ セットとビルドが迅速に行われます。既にこの記事を読む時間で完了しました可能性があります。

ペプチドと遷移の選択でこのライブラリを使用するスカイラインを伝える酵母 (アトラス)」のチェック ボックスをクリックします。[ライブラリ] タブは次のようになります。

# 背景プロテオーム ファイルを作成します。

FASTA シーケンス ファイルはテストが行われる背景行列のスカイラインを通知するためにも使用できます。スカイライン、これはバック グラウンド プロテオーム呼び出されます。それは広いか狭いのように、例えば、全体の生物 FASTA 1 つまたは 18 特定の蛋白質を計画する複数の有機体の間にはそれ以外の場合空白のマトリックス、または任意にスパイクをすることができます。

このチュートリアルは酵母のペプチド設定フォームで [ok] ボタンをクリックする前に、次の手順を実行することによって行うことができます完全な FASTA ファイルを使用します。

         **ペプチド設定**フォームで [**消化**] タブをクリックします。

         **背景プロテオーム**ドロップ リストから**< 追加... >**のように選択します。.

         **背景プロテオームの編集**フォームで [**ビルド**] ボタンをクリックします。

         **[参照**] ボタンをクリックします。

         MethodEdit フォルダーの FASTA サブフォルダーに移動します。

         [**ファイル名**] フィールドで、「酵母」を入力します。

         [**保存**] ボタンをクリックします。

         **ファイル**の追加] をクリックします。

         MethodEdit フォルダーの FASTA サブフォルダーに移動します。

         Sgd 酵母をダブルクリックします。FASTA ファイル。

スカイラインは 5801 蛋白質シーケンスでこのファイルをスキャンし、指定した場所に初期、未消化の背景プロテオーム ファイルを作成します。背景プロテオーム フォームのようになります。

これのようになります、**ペプチドの設定**フォームの [**消化**] タブに戻るに**[ok]**ボタンをクリックします。

スカイラインは変更した 2 つのような多くの編集可能なリストを提供します。[消化] タブの上部に酵素のリストはもうと後で探検することができますペプチド設定のフォームのすべてのタブに他の人があります。今のところ、これらの変更をコミットし、文書に戻ります**[ok]**をクリックします。

スカイライン背景プロテオームこのケース トリプシンのアクティブなプロテアーゼ酵素との消化を開始します。ステータス バーに進行状況が報告し、作業を続けることができます。この消化力が発生している間蛋白質ドキュメントを追加するより新しいスペクトル ライブラリ、ペプチドの影響を理解し、スカイラインになります選択肢の移行を開始できます。

# FASTA シーケンスを貼り付ける

興味の蛋白質を指定するためのスカイラインに追加された最初の方法は FASTA シーケンス本文ドキュメントに直接貼り付ける能力でした。このメソッドを使用するには、次の手順を実行します。

         Windows**メモ帳**アプリケーションを使用して、MethodEdit フォルダーの FASTA サブフォルダー 'Fasta.txt' ファイルを開きます。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**すべて選択**(ctrl-A) をクリックします。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**コピー** (CTRL + C) をクリックします。

         スカイラインに切り替えます。

         [**編集**] メニューで、 **[貼り付け]** (CTRL + V) をクリックします。

         最初貼り付けたペプチドが選択されるまで ↓ キーを押します。

これは次の状態でスカイラインを残すべきであります。

[**表示**] メニューで、**イオンの種類**を選択し、 **B**スカイライン、スペクトル グラフで紫色でこのペプチドの b イオンを強調表示する] をクリックします。このペプチドを監視するスカイラインは選んだ m/z と製品の m/z 転移前駆体を表示する + ペプチッド シーケンスの左に表示をクリックします。割り当てられている移行 '（ランク 1）' に選択を移動する下矢印キーを押します。スカイライン次のビューを表示する対応する遷移を選択すると、グラフ中のイオンのハイライト：

既定では、スカイラインいる唯一選ばれた、3 最も強烈な電荷 1 製品 y-イオン電荷 2 前駆体の測定は遷移としてこのすべてが、調整するただし。既定値から設定を変更するには、次の手順を実行します。

         **設定**] メニューの [**切り替えの設定**] をクリックします.

         [**フィルター** ] タブをクリックします。

         **前駆体料金**フィールドで 2、3' に '2' を変更します。

         **イオン料**] フィールドの値が '1' を確認します。

         **イオンの種類**フィールドを 'y' に変更 'y, b'。

**移行設定**フォームようになります。

         [**ライブラリ**] タブをクリックします。

         **選択**フィールドで '3' '5'**製品イオン**に変更します。.

**移行設定**フォームようになります。

         **[Ok]**をクリックします。

スカイライン ドキュメント ツリーは、次のように更新する必要があります。

スカイラインはランク 4 とその b5 イオンを含む VDIIANDQGNR ペプチドのランク 5 イオンを追加します。新規ペプチド YAL005C 蛋白質における最初のペプチドとして追加されています。それを拡大し、それが新しいスペクトル ライブラリ含まれる電荷 3 スペクトル ペプチド一致のみライブラリは明らかに VDIIANDQGNR ペプチドに対する電荷 3 スペクトルを含まないしながらペプチドが見ることができます。ライブラリのペプチド設定はまだ一致するスペクトル スペクトル ライブラリが含まれる前駆体のみを選択する直接スカイライン。2 充電し、充電 3 スペクトルのスペクトル ライブラリで発見された両方のペプチドの例を参照する LIDVDGKPQIQVEFK ペプチドを展開できます。

# 公共スペクトル ライブラリを使用します。

新しいスペクトル ライブラリ YAL005C 蛋白質の一致の多くが含まれているがそのような小さなデータ セットから建てられたので多くの蛋白質表示ないペプチド全然。スカイラインは、しかし、ちょうど単一のスペクトル ライブラリを使用するにはたとえば、GPM から酵母の公に利用できるライブラリを追加できます。NIST から酵母ライブラリはより広範なは、このチュートリアルを含めるには大きすぎます。チュートリアル ZIP ファイルに含まれている GPM のライブラリを追加するには、次の手順を実行します。

         [**設定**] メニューで、**ペプチドの設定**] をクリックします.

         [**ライブラリ**] タブをクリックします。

         **リストの編集**] ボタンをクリックします。

         ライブラリの編集フォームの「**追加**」ボタンをクリックします。

         **ライブラリを編集**フォームの**Name**フィールド、' 酵母 （GPM）」を入力します。

         **[参照**] ボタンをクリックします。

         ライブラリ フォルダーのサブフォルダー、MethodEdit に移動します。

         Yeast\_cmp\_20.hlf ファイルをダブルクリックします。

         **ライブラリの編集**フォームで**[ok]**をクリックします。

         **ライブラリの編集**フォームで**[ok]**をクリックします。

         **ライブラリ**一覧で、新しく作成された ' 酵母 （GPM）」項目をチェックします。

ペプチドの設定フォームは次の次のようになります。

スカイラインは、その製品イオン決定を通知するために単一のスペクトルのみを選択できますこれらのマッチをランク付けする値フィールドによるランク ペプチド何も表示されないので、ライブラリは、リストの順序で検索されます。スカイラインは、最初にスペクトル一致を使用します。アクションでこれを確認する**[ok]**をクリックします。

ライブラリが読み込まれたら、スカイライン新規ペプチドの多くを含むドキュメントが更新されます。ペプチドと既に GPM ライブラリが追加される前に存在していたペプチド前駆体を選択した場合、スペクトル グラフ タイトルまだ属性スペクトルを '酵母 （アトラス）' ライブラリを見ることができます。ただし、新規ペプチドとペプチド前駆体のスペクトル グラフはタイトルに ' 酵母 （GPM）」が表示されます。

注: 他のすべての形式とは異なり GPM ライブラリのみ 20 最も強烈な MS/MS のピークを保存します。どれだけあなたと思うストアド スペクトルは実際に彼らは主張する、スペクトルと一致する必要がありますそうので、いくつかのピークが表示されている理由の完全な知識を持つ他のライブラリにフィルタ リングされていないスペクトルと比較しての判断することができます。

# タンパク質/ペプチドを制限します。

ペプチドの今ある多くのペプチド前駆体を測定します。本当に、文書の別のチュートリアルで覆われているプロセスを精製を開始する前に、それらすべてを測定する場合があります。このチュートリアルでは、どういうわけかペプチッド蛋白質ごとの測定の数を制限すると仮定します。

将来的に予測アルゴリズムにより、このタイプの実験データなしランキング ペプチド スカイラインに追加することを望みます。現時点では、手動で自分のペプチッドを選ぶに頼ることがなくタンパク質/ペプチドを制限する唯一の方法は、スペクトル ライブラリによって提供されるランク値を使用します。残念ながら、GPM からこのチュートリアル、公共図書館に建てられた BiblioSpec ライブラリは匹敵するスコアを共有しません。つまり、1 つのランキングのスコアを使用してライブラリをオフに必要があります。

現在のドキュメント内のタンパク質あたりペプチドを制限するには、次の手順に従います。

         [**設定**] メニューで、**ペプチドの設定**] をクリックします.

         '酵母 （アトラス）' ライブラリをオフにします。([**ライブラリ**] タブ必要がありますまだするアクティブ)。

         **ランクによるペプチド**ドロップダウン リストから**期待する**を選択します。.

         **蛋白質ごとの制限ペプチド**をチェックします。

         **ペプチド**フィールド数を入力します '3'。

         **[Ok]**をクリックします。

今多くの少ないペプチドが必要です。あなた今も取り除くことができます空の蛋白質**を絞り込む**を選択する**[編集**] メニューから**空のタンパク質を削除**をクリックして投稿.

今チュートリアルを作成すると、背景プロテオーム ファイルと方法も使えますペプチッドおよび蛋白質を使用するドキュメントを編集するときに情報を追加するを返します。

# 蛋白質リストを挿入します。

蛋白質のリストを使用するいると仮定します。FASTA ファイルで蛋白質を識別するために使用する Id を持っている可能性がありますが、各シーケンスを 1 つずつ貼り付ける FASTA ファイルを移動したくないです。背景プロテオームを設定している、のですべてのスカイラインが必要です背景プロテオームの作成に使用した FASTA ファイルから蛋白質 Id を線で区切って

追加するには、新しい蛋白質を現在のドキュメントの一覧、次の手順に従います。

         Windows**メモ帳**アプリケーションを使用して、MethodEdit フォルダーの FASTA サブフォルダー ' タンパク質 List.txt' ファイルを開きます。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**すべて選択**(ctrl-A) をクリックします。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**コピー** (CTRL + C) をクリックします。

         スカイラインに切り替えます。

         ドキュメントの最後に空白の要素を選択します。

         [**編集**] メニューで、**挿入**を選択し、**蛋白質**.

         Ctrl-V キーを押して、クリップボードから貼り付けます。

スカイラインは、蛋白質リスト グリッドに蛋白質のリストを追加し、フォームのように見えるように背景プロテオーム Id の記載説明とシーケンス フィールドの値を割り当てます。

これらの蛋白質は文書の末尾に追加する [**挿入**] ボタンをクリックします。それらの多くある GPM ライブラリにスペクトルに一致するペプチド再び、[**編集**] メニューで、選択**を絞り込む**とないペプチド ライブラリ スペクトル マッチング、タンパク質を削除する**空のタンパク質を削除**をクリックします。

# ペプチド一覧を挿入します。

ペプチドのリスト スカイライン ドキュメントに挿入する 2 つの方法があるし、次の結果があります。

1. ペプチド、蛋白質の情報とは別のリスト

2. 、特定のタンパク質に関連付けられている各ペプチド

最初の結果を達成するためには、次の手順を実行します。

         Windows**メモ帳**アプリケーションを使用して、MethodEdit フォルダーの FASTA サブフォルダー ' ペプチド List.txt' ファイルを開きます。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**すべて選択**(ctrl-A) をクリックします。

         メモ帳で [**編集**] メニューの**コピー** (CTRL + C) をクリックします。

         スカイラインに切り替えます。

         ドキュメント内の最初の蛋白質を選択します。

         [**編集**] メニューで、 **[貼り付け]** (CTRL + V) をクリックします。

スカイラインはペプチッドの完全なリストは単一新しいペプチド リスト内の要素 'peptides1' という名前の文書に追加します。単に名を入力して、必要に応じて、たとえば 'プライマリ ペプチド' リストを今すぐ変更することができます。

GPM ライブラリは貼り付けたペプチドを選択する上下の矢印キーを押すことによって確認することができますこれらのペプチッドのすべてのスペクトルを持っています。スカイライン ドキュメントする必要があります今すぐようになります。

各ペプチドが背景プロテオームでそれぞれそのタンパク質に関連付けられるので、同じリストを挿入するには、挿入ペプチド リスト フォームを使用する必要があります。今これを行うには、次の手順に従います。

         まず、**元に戻す**ツールバーのボタン、2 回 (ctrl + Z、ctrl + Z) をクリックします。

         [**編集**] メニューで、**挿入**を選択し、**ペプチド**.

         Ctrl-V キーを押して、クリップボードから貼り付けます。

スカイラインのように見えるフォームを提示する各ペプチドのタンパク質フィールドを設定します。

文書に挿入、ペプチド、[**挿入**] ボタンをクリックします。

# 簡単なリファイン

この時点で追加した 70 ペプチド ドキュメントにさらに任意の確認を行わずより GPM 酵母ライブラリにはスペクトルには各が含まれます。見てするペプチド ライブラリ スペクトルこのドキュメントは測定しようの特に悪いマッチのように思える場所、次の操作を行います。

         [**編集**] メニューで、**検索**をクリックします.(ctrl F)。

         **[検索する文字列**] フィールドに 'IPEE' を入力します。

         **次を検索**] ボタンをクリックします。

このスペクトルと y イオンと 1 b イオンを一致すると一致する 1 だけを示していますのように見えます。

これら 2 つのイオンの測定はこのペプチドに関する有用な情報を生成する可能性があります。

ライブラリ スペクトルが必要な 5 プロダクト イオンを提供するために失敗したすべてのペプチドを削除するには、次の手順を実行します。

         [**編集**] メニュー**を絞り込む**を選択し、**詳細設定**をクリックします.

         **分転移前駆体ごと**のフィールド数を入力します '5'。

         **[Ok]**をクリックします。

スカイライン ウィンドウの右下隅にあるステータス バーのインジケーターを示していますペプチドの数が 64 を 70 から削減されています。

# ペプチドの一意性をチェックします。

チェックするもう一つですどのようにユニークな選ばれたペプチドを測定しようとしている蛋白質。残念ながら、我々 は FASTA シーケンスファイルが頻繁に冗長である十分な背景プロテオームの単一のシーケンスに一意ではないすべてのペプチッドを単に削除するが賢明だろうことを発見しました。多くのペプチッドは単一遺伝子モデルの複数の蛋白質の同族体に属しています。

スカイラインは、ただし、文書で蛋白質ごとのペプチドの一意性を検査するためのフォームを提供しています。編集中の文書で最後の 2 つの蛋白質を確認するには、次の手順に従います。

         ドキュメントの最後のタンパク質を選択します。

         [**編集**] メニューで、**ユニークなペプチド**をクリックします。.

スカイラインの**ユニークなペプチド**フォームが表示されます、次の情報。

これらの 6 蛋白質の精査を示していますいくつか、互いに似ていますが、この 1 つのペプチドは興味の蛋白質を測定の少し自信を与えること確かに十分な変化があります。各蛋白質の蛋白質順序はグリッド ビューでその列を選択して表示できます。

ユニークなペプチド フォームを閉じるし、このタンパク質を文書から削除する Del キーを押します。

今新しい最後の蛋白質のための同じ手順を繰り返します。スカイラインこの蛋白質のために選ばれた 1 つのペプチドはまた複数の蛋白質、この場合 4 を割り当てますが、彼らははるかに似ていますが表示されます。この 1 つを残しておきたい場合があります。**[キャンセル**] ボタンをクリックします。

# 直接文書の編集

既に既存の名前を入力してペプチド リストの名前を変更するだけでなく、del キーを使用して文書内の項目を削除することも可能だがきました。このセクションでは、編集機能タンパク質・ ペプチド、前駆物質を測定したいトランジションをすばやく変更することができますをいくつかのより直接文書に導入予定します。

## タンパク質名の自動補完

定義されている背景プロテオーム、蛋白質およびペプチッド、文書の最後に空白の要素を入力するだけで追加のヘルプを得ることができます。名前によってタンパク質を追加するには、次の操作を行います。

         ドキュメントの最後に空白の要素を選択します。

         型 'ybl087'

スカイラインは以下のようにタンパク質を追加することによってこれを完了する提供します。

タンパク質を文書に追加する Enter キーを押します。

## タンパク質説明オート コンプリート

スカイラインは FASTA ファイルから蛋白質配列の説明のテキストも検索されます。検索をその記述に基づくタンパク質を追加するには、次の操作を行います。

         型 'eft2'

         2 回のように記載されている、2 番目のタンパク質を選択する下矢印キーを押します。

タンパク質を文書に追加する Enter キーを押します。

## ペプチッド順序の自動補完

3 番目の自動補完オプション ペプチッド シーケンスを入力を開始するあり、スカイライン、ペプチドやタンパク質をそれを含む蛋白質を識別するのに役立ちます。検索し、そのシーケンスによってペプチドを追加、次の操作を行います。

         Caps Lock キーを押します。

         型 'IQGP'。

         スカイライン ペプチド IQGPNYVPGK を示しています、それを選択する上下の矢印キーを押します。

         Enter キーを押します。

ペプチドは、ドキュメントに追加されますが、既存の蛋白質 YDR385W、空白の最後の要素のすぐ上に追加されます。追加タンパク質は次のようになります。

## 選択リストのポップアップ

タンパク質を文書に追加すると、一度もペプチド、前駆物質と製品イオンは対象を変更するのにスカイライン ポップアップ選択リストを使用できます。YBL087C 蛋白質に別のペプチドを追加するには、次の手順します。

         名前の横にドロップの矢印が表示されるまで YBL087C 蛋白質上マウス カーソルを移動します。

         マウス カーソルをドロップの矢印上に移動するとカーソル イメージが手に変わります。

         マウスの左ボタンをクリックします。

スカイラインは、最初にフィルター処理されますと、文書に既に追加しているペプチドのセットのみが表示されますポップアップの選択リストが表示されます。このタンパク質由来ペプチドを削除する Del キーを使用すると同じ効果を持っているこれらのいずれかオフにすることができます。代わりに、次の手順で新規ペプチドを追加できます。

         フィルターのリストを得る目標到達プロセス イメージ ボタンをクリックします。

         '（ランク 6）' サフィックスを持つペプチドを確認してください。

ピックリストのように見える状態になります。

Enter キーを押してまたは、変更をコミットを文書に緑色のチェック マーク イメージ ボタンをクリックします。

選択リストの同じようなサブ リストをサポートして、ドキュメント内のすべてのアイテムが表示されます。ペプチド前駆体製品イオン遷移を変更するには、次の操作を行います。

         ペプチッド シーケンスの左にある + 記号をクリックして YBL087C 蛋白質 (ISLGLP...) 最初ペプチドを展開します。

         672.6716 の上にマウス カーソルを移動 + + + 前駆体名の横にドロップの矢印が表示されるまで。

         マウス カーソルをドロップの矢印上に移動するとカーソル イメージが手に変わります。

         マウスの左ボタンをクリックします。

可能な限り製品イオンのフィルタ リングされていないリスト全体はポップアップの選択リストに表示されます。B イオンだけで測定したこの特定の前駆体がより良いだろうと考えているいくつかの理由があったと仮定し、現在の 2 y イオン 2 30a-t-8 b イオンを交換したい実際には。これを行うには、次の手順を実行します。

         ビュー (ア9. および y6) で現在 2 つの y イオンをオフにします。

         検索フィールドを表示する双眼鏡イメージ ボタンをクリックします。

         型 'b + +' （b - スペース-+ +)、b が含まれている項目だけにリストをフィルターして + +。

         30A-t-8 b5 と b7 イオンを確認してください。  
注： これは単なる例と MS/MS スペクトルのこれらのイオンが見つかりませんでした。

選択リストは次のようになります。

Enter キーを押してまたは、変更をコミットを文書に緑色のチェック マーク イメージ ボタンをクリックします。

## 大きな画像

時々 それはより広い文脈で文書内の情報を見ることができることができます。気づくことこれ、既にとして、ドキュメント上にマウスを移動するが場合は、ホバー今スカイライン、ドキュメント ツリー内の要素のいくつかの上にマウス カーソルはありません、以下に示すようなデータ ヒント。これらのヒントは、赤、青、ドキュメント要素で、選択した要素が強調表示され、太字は、フィルターに一致するが、ドキュメントに含まれていない要素に使用します。

## ドラッグ アンド ドロップ

最後に、することができますもドラッグ アンド ドロップ、ドキュメント内の特定の要素の順序を変更します。このチュートリアル用に作成したドキュメントで蛋白質自身のみが再命令されるかもしれません。他の要素は順序を継承と移動することはできません。ただし、リストを作成する、ペプチッド蛋白質情報なしで文書に直接リストの貼り付けで上記したよう場合、しする可能性がありますもドラッグ アンド ドロップ ペプチドそのリスト内の順序を変更します。ドラッグし、ドロップ、蛋白質の順序を変更する今作品を見ること。

# メジャーの準備

もちろん、このドキュメントの編集によっての最終目標は質量分析計に文書中のペプチドを測定しようとします。しかし、最初の質量を決定する必要があります。スカイライン 4 つのメーカーからの楽器の遷移リストをエクスポート: 水熱科学的、アプライドバイオシステムズジャパン アジレント。それも今、これらのいくつかと、将来的にすべてのネイティブ メソッド ファイルをエクスポートすることができます。スカイラインは、スカイラインはこれを行うにインストールされている計測器制御ソフトウェアをコンピューターで実行する必要がありますも熱焼入れ楽器のための SRM メソッド ファイルにエクスポートできます。

このチュートリアルでは AB 4000 Q トラップの遷移のリストを 1 つだけをエクスポートします。前に、いくつかの設定を変更する必要があります。Q トラップ遷移リストをエクスポートするためのドキュメントを用意するには、次の操作を行います。

         **設定**] メニューの [**切り替えの設定**] をクリックします.

         [**予測**] タブをクリックします。

         **衝突エネルギー**のドロップダウン リストから ' ABI 4000 Q トラップを選択します。

         プロム**Declustering 潜在的な**ドロップ リスト 'ABI' を選択します。

         [**計器**] タブをクリックします。

         **マックス m/z**フィールド '1800' を変更します。

         **[Ok]**をクリックします。

あなたの最初の遷移のリストをエクスポートする前にまず文書を保存します MethodEdit フォルダー以下を実行しています。

         [**ファイル**] メニューの [**保存**（ctrl-S） をクリックします。

         MethodEdit フォルダーに移動します。

         [**ファイル名**] フィールドで、「MethodEdit チュートリアル ' を入力します。

         [**保存**] ボタンをクリックします。

次に、355 遷移がこのチュートリアルで作成した文書に含まれていることに注意してください。既に場合正確なときこれらのペプチッド溶出列にあなたの測定を使用して、各時間の小さなウィンドウのみの測定は、すべて単一の方法でスケジュールを設定することができるかもしれない。これらの測定値をまだ持っていないのでただし、まずグラデーション全体にわたって測定する測定の注射あたり約 75 遷移のグループに分割します。

この情報により、AB 4000 Q トラップの移行一覧をエクスポートする準備が整いました。これを行うには、次の手順を実行します。

         [**ファイル**] メニューの [**エクスポート**を選択し、**移行一覧**をクリックします.

         **複数の方法**のラジオボタンをクリックします。

         **無視する蛋白質**をチェックします。

         **サンプル注入あたり最大遷移**フィールド '75' を入力します。

これのように見える遷移リストのエクスポート フォームを残す必要があります：

         **[Ok]**をクリックします。

         [**ファイル名**] フィールドで、'Yeast\_list' を入力します。

         [**保存**] ボタンをクリックします。

Windows エクスプ ローラー ウィンドウに切り替えて、作成した遷移の一覧ファイルを MethodEdit フォルダーに移動します。MethodEdit フォルダーの内容は次のようになります。

最初の 5 つの新しいファイルを開くし、次のような遷移のリストを見つける必要があります。

列の順序では： 前駆体/z は m、製品/z は m、住むポテンシャルと衝突エネルギー デクラスタ リング、時間、拡張ペプチド。これは、AB メソッド作成ユーザー インターフェイスに貼り付けるし、使用することがこれらのペプチッドを測定しようとする酵母のサンプルに、楽器を実行するメソッドを作成するのに十分なはずです。

# 結論

ターゲットを絞ったプロテオミクス実験用スカイライン アプリケーションを使用してについて学ぶために確かに多くがあります。必要があります、しかし、自信実際のスカイライン文書の作成を開始します。うまくいけばこれらのドキュメントの前に持っているよりも早く新しい仮説をテスト メジャー ペプチドまでセットを取得するに役立ちます。そのピークの統合および結果分析のスカイラインに楽器出力ファイルをインポートしたいと思う。我々 は大きくスカイライン文書で作成するコンテキスト簡単計測器出力の概要を見つけるだろうと思います。ただし、次の手順を実行する方法だけスカイライン web サイト上で見つけることができます他の教材では説明します。

[http://www.microsofttranslator.com/static/189029/img/tooltip_logo.gif](http://www.bing.com/translator)http://www.microsofttranslator.com/static/189029/img/tooltip_close.gif

**Original**

Navigate to the Yeast\_atlas subfolder under the MethodEdit folder.