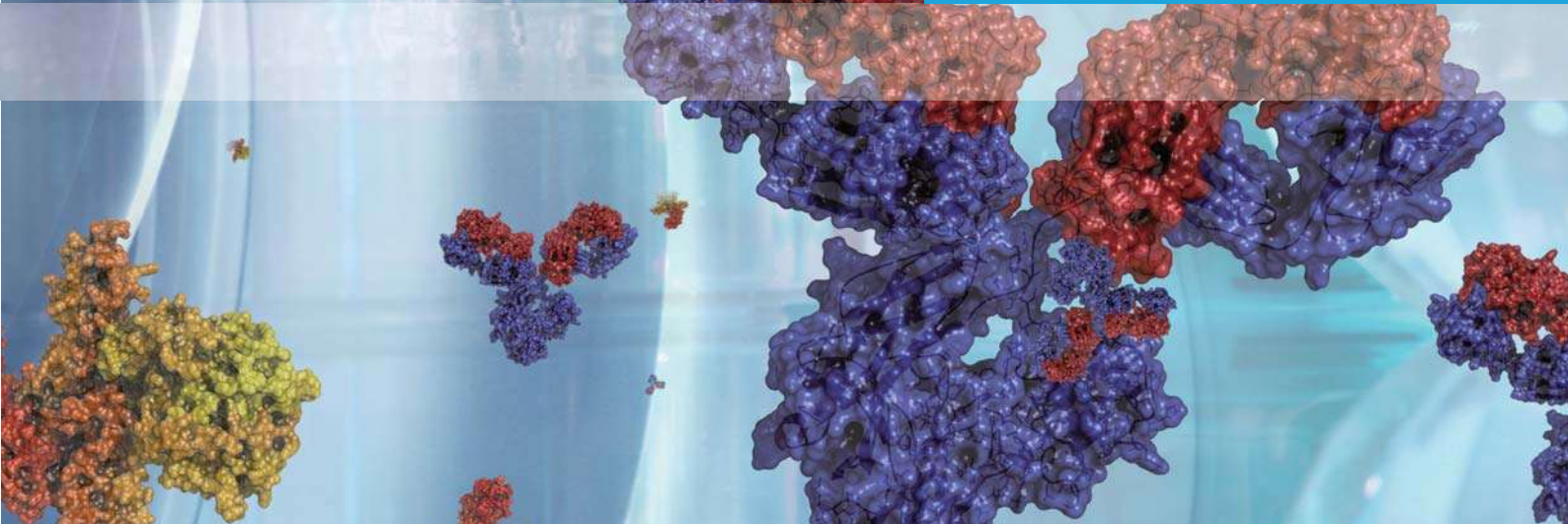




Thermo Scientific
PepFinder Software



新しいパラダイムをもたらす

バイオ医薬品特性解析ソリューション

PepFinder : バイオ医薬品向け特性解析ソフトウェア

Thermo Scientific™ PepFinder™ は、バイオ医薬品を自動で同定し、相対的な定量分析まで実施できる強力なソフトウェアです。LC/MS 測定により得られた質量分析データを用いて、ペプチドマッピングや翻訳後修飾などの詳細な特性解析が行えます。PepFinder ソフトウェアと業界をリードするThermo Scientific高分解能・精密質量Orbitrap™ テクノロジーを組み合わせることで、不均一体のプロファイルや同定などをこれまでよりも簡便に実施でき、正確で信頼性の高い結果をご提供します。

主な機能と特長

- 操作が非常に簡単で、LC-MSデータから迅速に成分を検出
- ETD、HCDおよびCIDなど、フラグメント化するすべてのモードをサポート
- 糖鎖、脱アミド、酸化などの修飾体の相対定量が可能
- カスタマイズした修飾体の同定もサポート
- 質量誤差許容レベルを検索できることから、詳細不明な修飾体やアミノ酸の分子変化体などの同定も可能
- ジスルフィド結合の同定可能
- 部位特異的な修飾の網羅的な表示や、ターゲットタンパク質における配列のカバレッジマップの表示も可能
- サンプル間の比較も可能

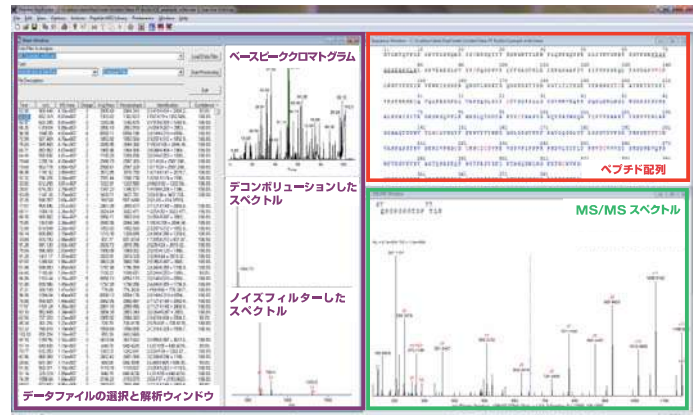


図1. PepFinder の表示画面

MS/MSスペクトルを予測してペプチドを同定

PepFinderは新しいアルゴリズムを搭載しており、MS/MSスペクトルを予測してペプチドの配列を同定することができます。フラグメントイオンの m/z 値をマッチングするだけでなく、さらにフラグメントイオンの相対的な存在比も考慮して同定することから、フラグメントの情報が少ない場合でも正確に同定できます。

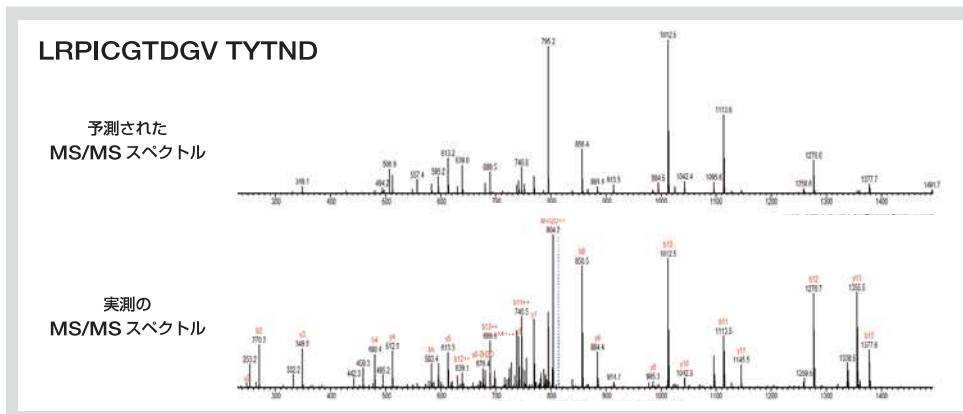


図 2-1. ペプチドの配列情報

予測されたフラグメントパターンとその存在比が実測データとほぼマッチしていることが分かります。

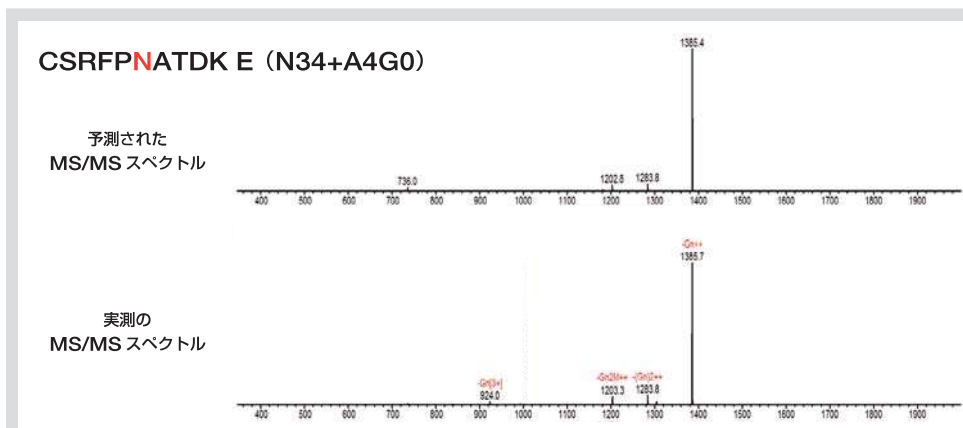


図 2-2. 糖ペプチドのスペクトル

ペプチドの情報が少ないですが、正確にスペクトルを予測して正しいペプチド配列を導き出しています。

■ ジスルフィド結合の同定

ジスルフィドについても、事前に結合部位の情報がない場合でも簡単にマッピングが行えます。

PepFinderは非還元データと還元データを同時に比較解析できるため、新たな結合部位や潜在的なジスルフィド結合の組換えもMS/MSスペクトルから確認・同定でき、信頼ある優れた解析結果をもたらします。

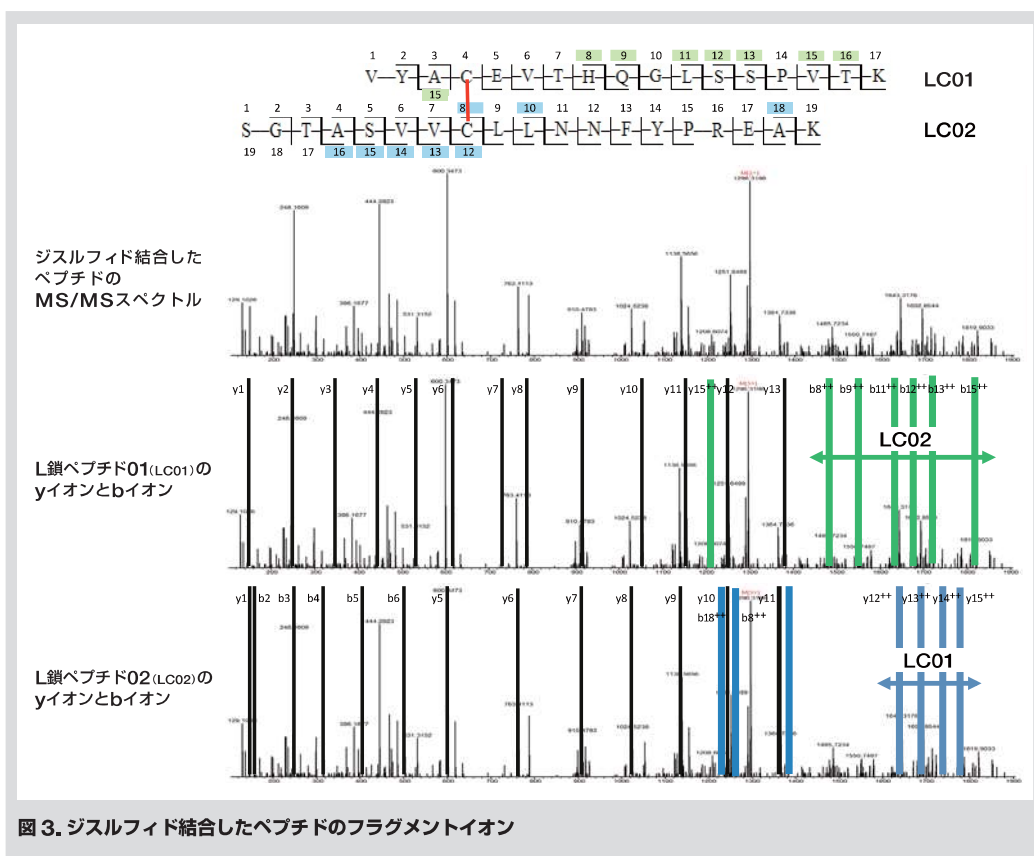


図3. ジスルフィド結合したペプチドのフラグメントイオン

■ アミノ酸の分子変化体の同定

PepFinderでは質量誤差許容レベルの検索を自動的に行い、アミノ酸の分子変化体も正確に同定します。図4は、バリンからフェニルアラニンに置換されたペプチドのCIDスペクトルを示します。フラグメントのカバレッジマップ(図5)も簡単に作成でき、追加情報も確認できます。

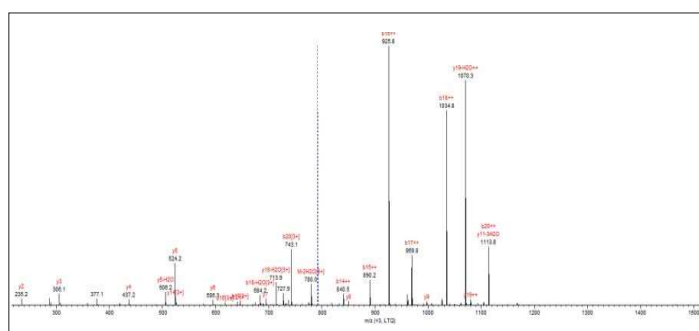


図4-1. ペプチド「SKPVQMMYQI GLERVASMAS E」のCIDスペクトル

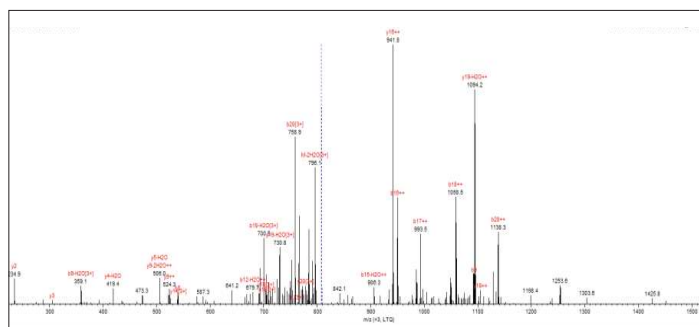


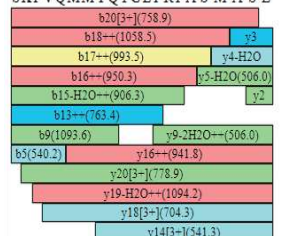
図4-2. ペプチド「SKPVQMMYQI GLFRFASMAS E」のCIDスペクトル

Fragment Coverage Map

Average Structural Resolution = 1.4 residues

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21
S-K-P-V-Q-M-Y-Q-I-G-L-F-R-F-A-S-M-A-S-E

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21
SKPVQMMYQIGLFRFASMA SE



Color Code for Ion Intensity

>8.2e+001 >3.3e+001 >1.3e+001 >5.3e+000 >2.1e+000

図5. 確認されたフラグメントのカバレッジマップ

■ 糖鎖および詳細不明な修飾体の同定

PepFinderはN型糖鎖ペプチドを自動的に同定でき、修飾部位と相対的な存在度まで導き出します。

IgGモノクローナル抗体に見られる全147通りの糖鎖型（N-グルカンのアンテナ数、シアル酸、ガラクトース、あるいはN-アセチルグルコサミンなど各アンテナ末端の糖質の種類、およびフコースの有無、加えて高マンノース型糖鎖と複合型糖鎖のタイプなど）を予測し、また、質量誤差許容レベルの検索によって詳細不明な修飾体も同定が可能です。

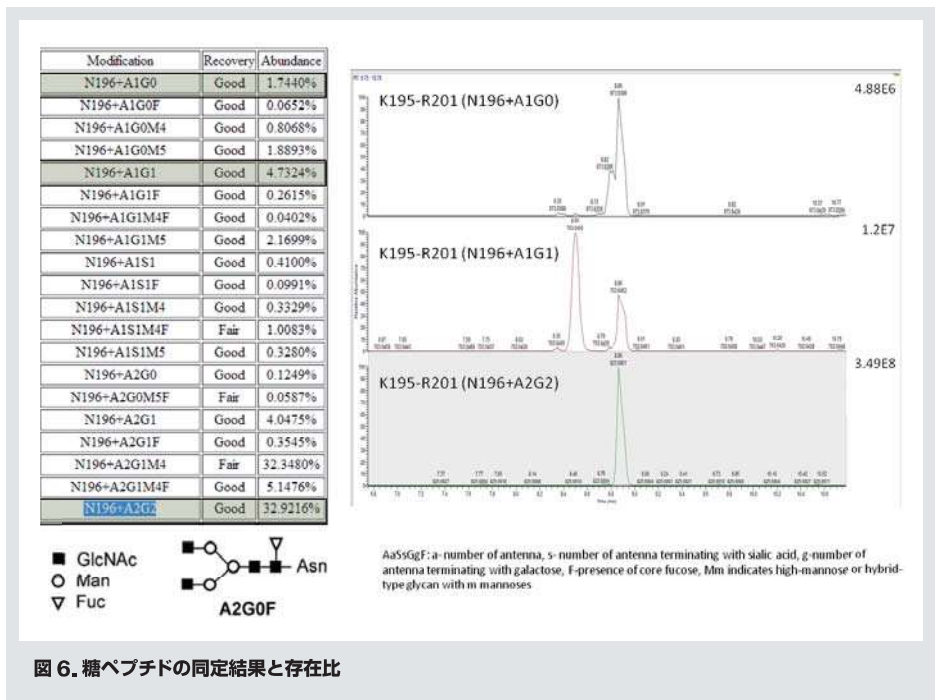


図 6. 糖ペプチドの同定結果と存在比

■ サンプル間の比較

PepFinderでは複数のデータファイルをソフトウェアにアップロードした場合に、それらデータセットの自動比較が可能です。このワークフローでは、クロマトグラフィーにおける保持時間の誤差も補正されます。どのサンプルにおいても部位特異的な修飾体における相対的な存在比が導き出され、さらにピークエリア値を他の統計解析ソフトウェアへ簡単に出力することもできます。

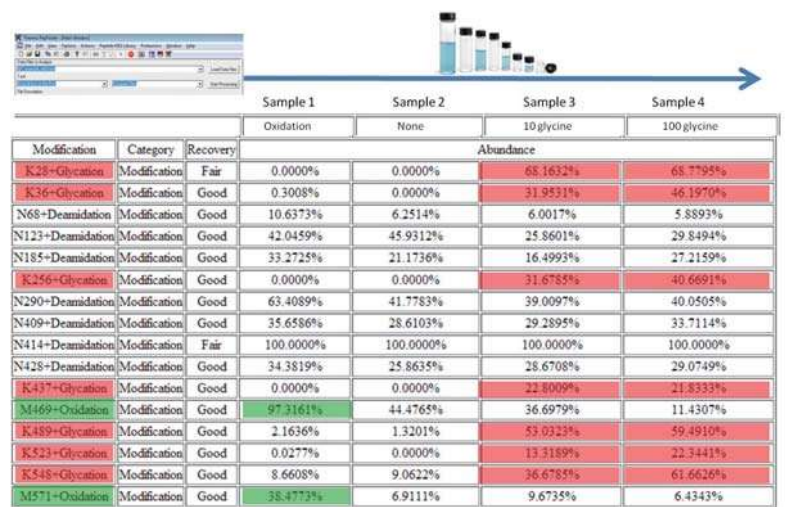


図 7. サンプル間の比較データ

©2015 Thermo Fisher Scientific K.K. 無断複写・転載を禁じます。

ここに記載されている会社名、製品名は各社の商標、登録商標です。
ここに記載されている内容は、予告なく変更することがあります。

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
分析機器に関するお問い合わせはこちら

TEL 0120-753-670 FAX 0120-753-671
〒221-0022 横浜市神奈川区守屋町3-9

E-mail: Analyze.jp@thermofisher.com
www.thermoscientific.jp

LCMS006-B1504CE

Thermo
SCIENTIFIC
A Thermo Fisher Scientific Brand