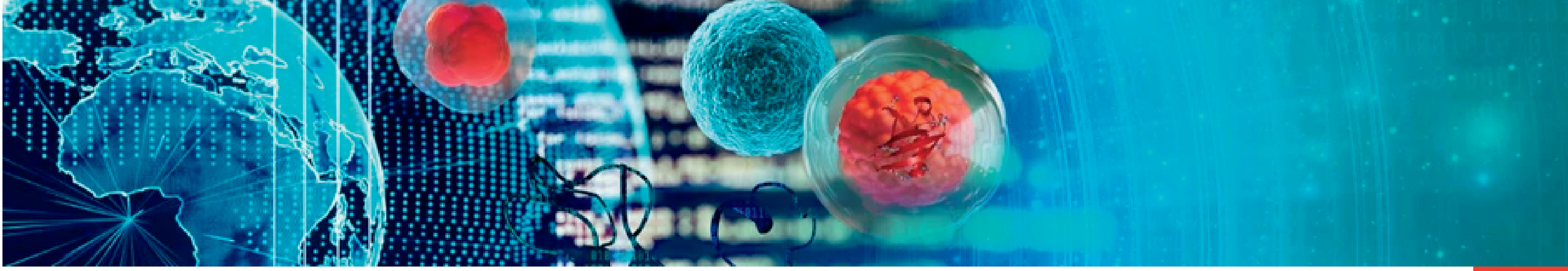


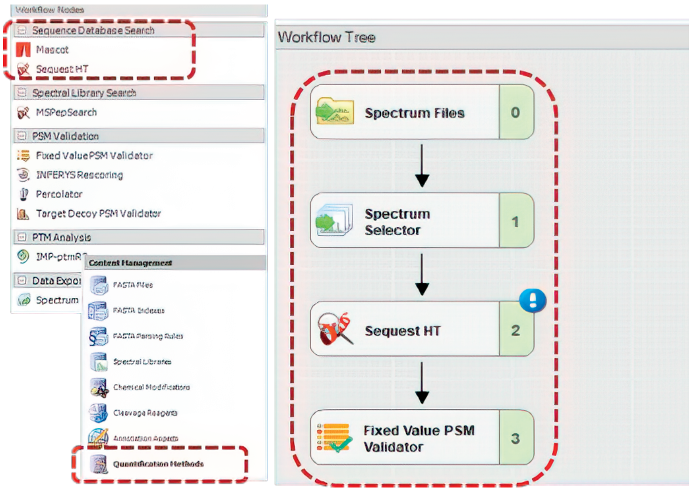
Proteome Discoverer

Mass Informatics Platform for Protein Scientists

Thermo Scientific Proteome Discoverer Software

- โปรแกรมสำหรับระบุชนิดของโปรตีนและเปปไทด์จากการวิเคราะห์แบบ Bottom-Up Proteomics
- สามารถวิเคราะห์ Post-Translational Modification (PTM) ในตัวอย่างชีวภาพ
- รองรับการวิเคราะห์ผลจากเทคนิคการแยกมวลได้หลายรูปแบบ เช่น HCD, CID, ETD, และ UVPD

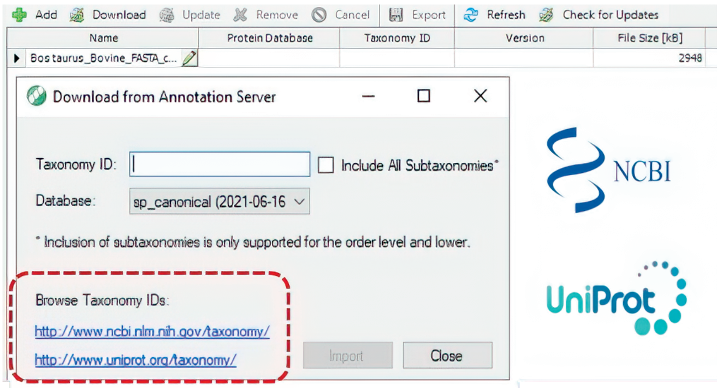
สามารถออกแบบ workflow template ได้ตามวัตถุประสงค์ของงาน



- Search Tools ในการวิเคราะห์ ใช้ได้หลากหลายเช่น SEQUEST™ HT และ MASCOT
- ฟังก์ชันรองรับการวิเคราะห์จากการติดฉลาก เช่น TMT iTRAQ และ SILAC เป็นต้น

เชื่อมโยงกับฐานข้อมูลออนไลน์ที่เป็นแหล่งรวบรวมข้อมูลโปรตีนที่สำคัญ

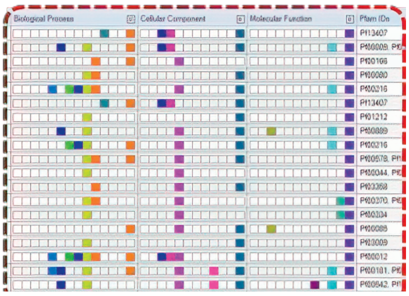
- เชื่อมต่อกับฐานข้อมูลออนไลน์อย่าง NCBI และ UniprotKB /Swiss-Prot ทำให้ได้ข้อมูลที่มีการอัพเดตตลอดเวลา



VISIT US www.scispec.co.th scispec 02-454-8533

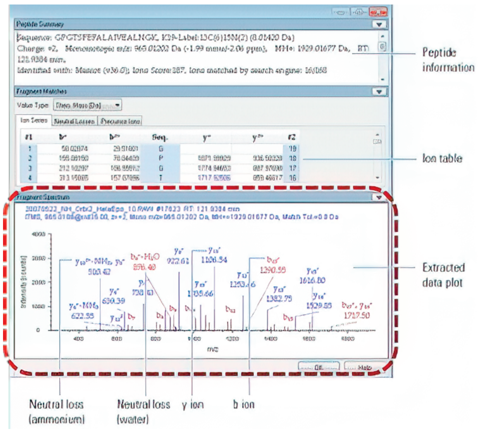
ระบุ Protein Functions ผ่านฐานข้อมูลออนไลน์ที่เป็นที่ยอมรับ

Master	Accession	Description	Coverage	# Peptides	# PSMs	# Unique Peptides	# AAs	MW [kDa]	calc. pI	Score Seq
✓	P02925	Ribose import binding protein RbsB [OS=	66%	15	194	15	296	30.9	7.47	687.59
✓	P0CE48	Elongation factor Tu 2 [OS=Escherichia c	64%	20	232	20	394	43.3	5.45	859.13
✓	P0A6F9	10 kDa chaperonin [OS=Escherichia coli (	62%	5	58	5	97	10.4	5.24	189.14
✓	P0AGD1	Superoxide dismutase [Cu-Zn] [OS=Esch	61%	7	47	7	173	17.7	6.42	160.81
✓	P0ACF0	DNA-binding protein HU-alpha [OS=Esch	58%	4	35	4	90	9.5	9.58	136.53
✓	P0AEE5	D-galactose-binding periplasmic protein [(	55%	16	95	16	332	35.7	6.02	274.15
✓	P0A853	Tryptophanase [OS=Escherichia coli (stra	52%	23	206	23	471	52.7	6.23	630.08
✓	P0A6P1	Elongation factor Ts [OS=Escherichia coli	52%	14	88	14	283	30.4	5.29	247.92
✓	P0A6Y1	Integration host factor subunit beta [OS=E	52%	4	15	4	94	10.6	9.35	44.28



- เชื่อมโยงฐานข้อมูลสำหรับขั้นตอน Annotation อย่าง GO, Pfam, KEGG, Wiki Pathways และ UniProt database เพื่อระบุหน้าที่การทำงานของโปรตีน พร้อมจัดกลุ่มตามหน้าที่การทำงานในกระบวนการต่างๆ เช่น Biological Process, Cellular Component, Molecular Function เป็นต้น

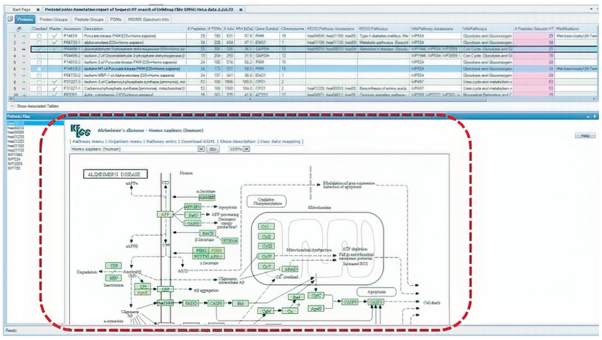
ค้นหาข้อมูล Mass Spectra อัตโนมัติ พร้อมระบุข้อมูล m/z อย่างละเอียด



- แสดงข้อมูล Fragment Spectrum และ Fragment Matches
- แสดงข้อมูลทางสถิติ ที่คำนวณได้จากการวิเคราะห์ False Discovery Rates (FDRs), Z-Score, P-Values

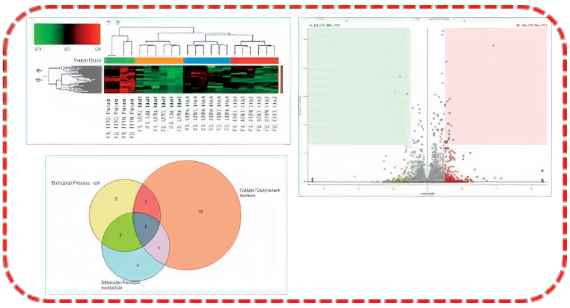
สามารถวิเคราะห์ผล จัดกลุ่ม และหาความสัมพันธ์ของข้อมูลได้บน Software

- เลือกรูปแบบการวิเคราะห์ผลได้ตามความต้องการทั้ง Protein Grouping, Pathway analysis, Functional enrichment เป็นต้น



สามารถวิเคราะห์ผลทางสถิติและเลือกรูปแบบการแสดงผลได้

- เลือกแสดงผลการวิเคราะห์ ในรูปแบบที่ต้องการ เช่น Venn diagrams, Volcano plots, PCA plots, Heat map เป็นต้น
- ในตารางผลการวิเคราะห์ของข้อมูลทั้งหมด มีแสดงลำดับ Sequence และชนิดของโปรตีนที่วิเคราะห์ได้



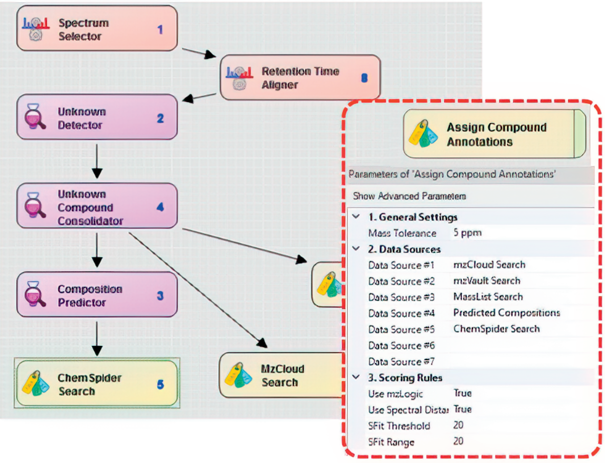
Thermo Scientific Compound Discoverer Software

Compound Discoverer

Complete Small Molecule Structure Identification in next Generation Platform

- โปรแกรมสำหรับระบุชนิดของ Small Molecules จากการวิเคราะห์ Untargeted Analysis
- ออกแบบมาตอบโจทย์งาน Metabolomics สามารถออกผล ในการระบุชนิดและค่าทางสถิติได้ในโปรแกรมเดียว

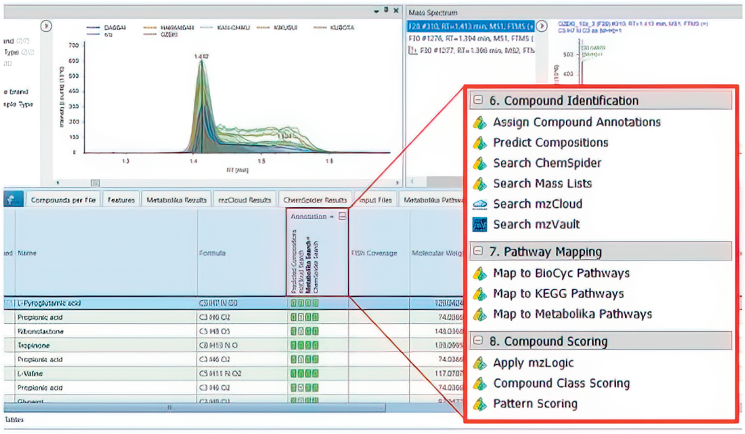
Workflow Template ตามวัตถุประสงค์ของงาน



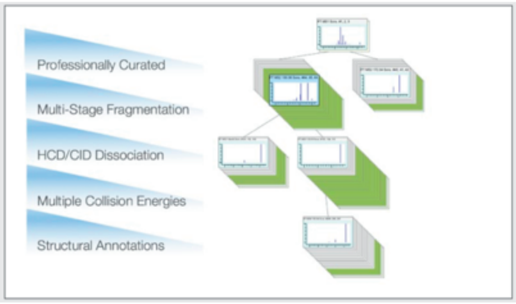
- ✅ สามารถเลือกตั้งค่าการคัดกรองข้อมูลได้เพื่อให้ได้ผลการวิเคราะห์ที่มีคุณภาพดีกว่าโปรแกรมทั่วไป
- ✅ สามารถเลือกฐานข้อมูล มาใช้ได้ถึง 7 ชนิดเพื่อระบุชนิดของสารที่วิเคราะห์

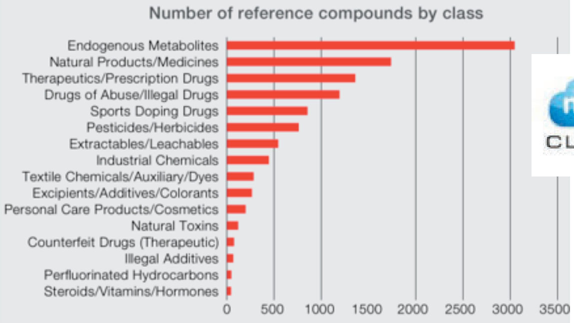
มี Reference Library ทั้ง Online และ Offline ให้เลือกใช้

- ✅ ในขั้นตอน Compound Identification สามารถใช้ In-house Database และ Online Database ได้ เช่น ChemSpider และ mzCloud เป็นต้น
- ✅ เชื่อมโยงกับฐานข้อมูล Metabolic Pathways ซึ่งได้แก่ BioCyc, KEGG และ Metabolika



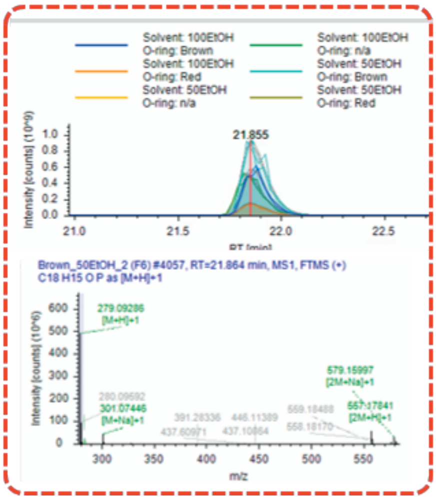
เชื่อมโยงกับ Mass Spectral Fragmentation Library ที่สำคัญ “mzCloud”



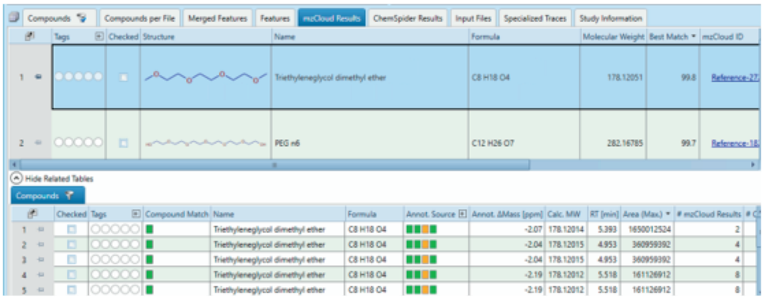


- ✅ รวมรวบข้อมูล Small Molecules ทั้ง MS2 และ MSn Spectra มีการอัพเดตฐานข้อมูลอยู่ตลอด จึงทำให้มี Library จำนวนมาก ครอบคลุม Extra และ Intra-Cellular Metabolite ที่แบ่งออกเป็น Class ดังกราฟแสดงผล

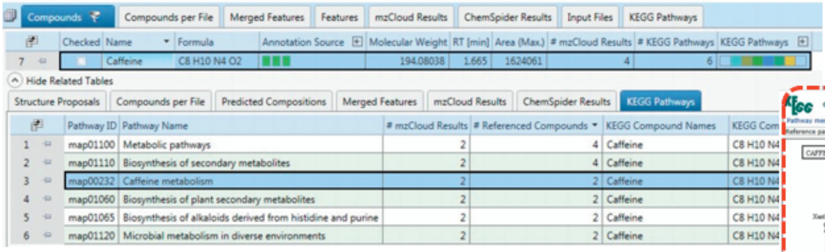
ข้อมูล Compound ที่วิเคราะห์ได้ แสดงผลทั้ง Chromatogram และ Mass spectra

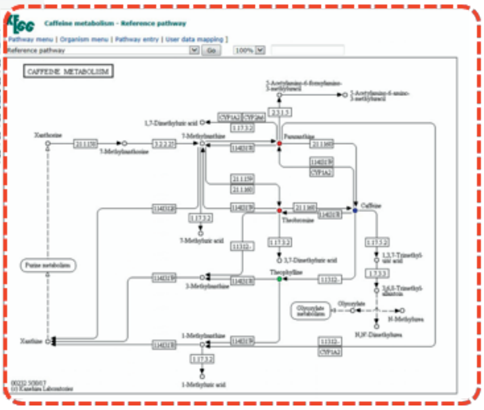


- แสดงผลข้อมูล Precursor และ Product Ion ของ Raw Data ที่ Matching กับ Library ได้ เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของข้อมูล



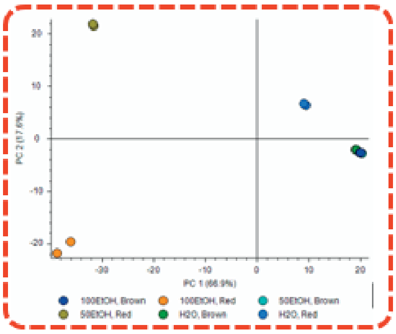
วิเคราะห์ผล จัดกลุ่ม และหาความสัมพันธ์ของข้อมูล Metabolic Pathways

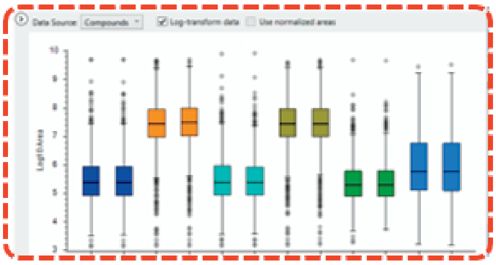




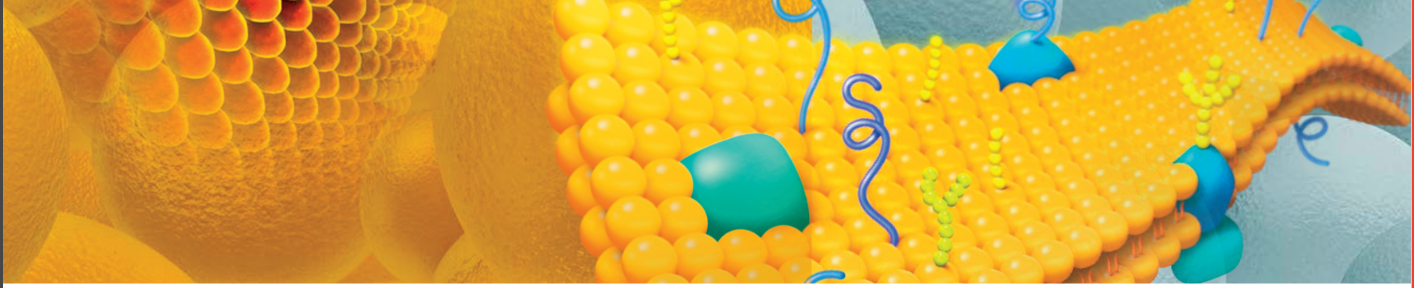
- จากผล Compound ที่วิเคราะห์ได้ สามารถตรวจสอบได้ว่า Compound นั้นๆ มีความสัมพันธ์ใน Metabolic Pathways ใดบ้าง เพื่อต่อยอดสำหรับขั้นตอน Functional Analysis

วิเคราะห์ผลทางสถิติและเลือกรูปแบบการแสดงผลได้





- ฟังก์ชันรองรับสำหรับการเลือกแสดงผลการวิเคราะห์ (Data Review Icons) ในรูปแบบที่ต้องการ เช่น PCA Plots, Differential Analysis, Descriptive Statistics เป็นต้น

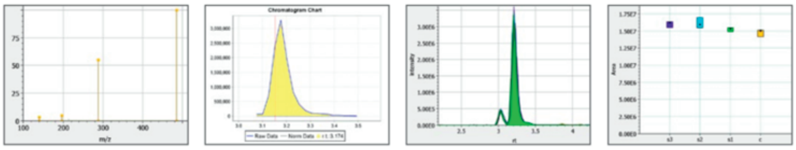


LipidSearch

Software for Lipidomics Workflow

- ใช้ระบุชนิดของ Lipid โดยเทียบผลของ Mass spectrum กับฐานข้อมูลของ Lipid ที่มีมากกว่า 1.5 ล้านดาต้า
- เชื่อมโยงกับฐานข้อมูลออนไลน์ LipidMaps ที่มีการอัพเดต Unique Lipid Structures อยู่ตลอด

ใช้งานง่าย ลำดับการทำงานเป็นแบบ Automated Workflow



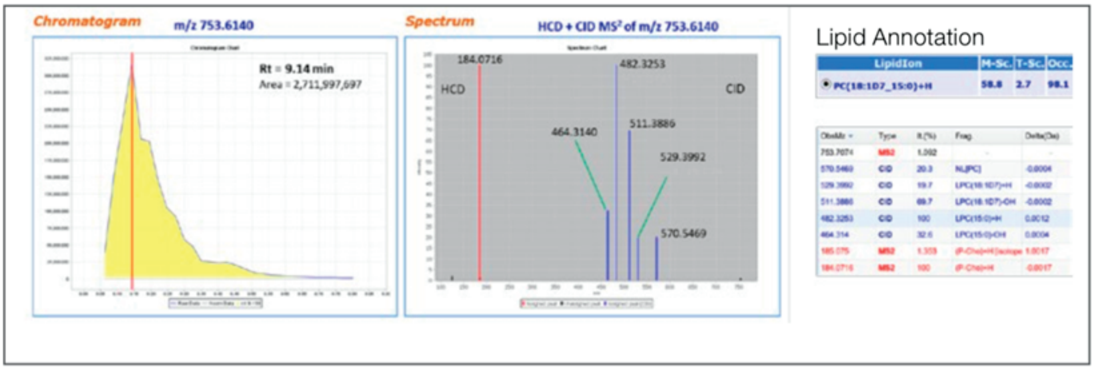
LPE	Rt min	$[M+H]^+$ m/z	Conc C	Conc S1	Conc S2	Conc S3
LPE(1-16:1)	2.21	451.2699	131	267	354	452
LPE(1-16:0)	3.07	453.2855	242	642	158	710
LPE(1-17:0)	3.61	467.3012	17	19	3	10
LPE(1-18:3)	1.98	475.2699	1074	576	311	368
LPE(2-18:2)	2.42	477.2855	8843	7172	2056	3028
LPE(1-18:2)	2.55	477.2855	3181	3204	603	1030
LPE(2-18:1)	3.06	479.3012	4226	4643	6486	4156
LPE(1-18:1)	3.24	479.3012	1184	1739	1593	1245
LPE(2-18:0)	3.93	481.3168	8	12	4	11
LPE(1-18:0)	4.08	481.3168	233	292	103	349
LPE(1-20:2)	3.26	505.3168	59	33	12	13
LPE(2-20:1)	3.99	507.3325	23	19	41	45
LPE(1-20:1)	4.12	507.3325	25	46	22	56

Identify → Detect → Align → Quan → Concentration ng/mL

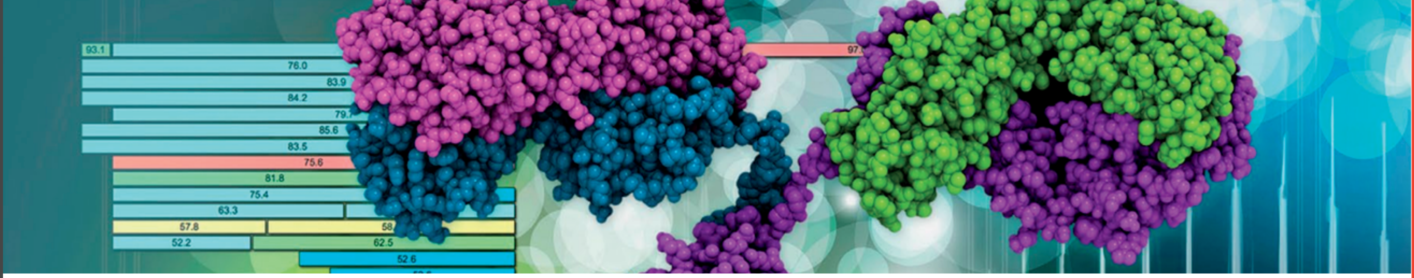
✅ ขั้นตอนการใช้งานชัดเจน ไล่ลำดับการทำงานไปทีละขั้นตอน

ตั้งแต่กำหนด Raw Data File -> Lipid Identification -> Alignment and Quantitation

ผลการวิเคราะห์ Identification และ Annotation มีความน่าเชื่อถือ



✅ Unique Peak Detection Algorithms ที่สามารถคำนวณ False Positives ได้ จากข้อมูล MS/MS Data



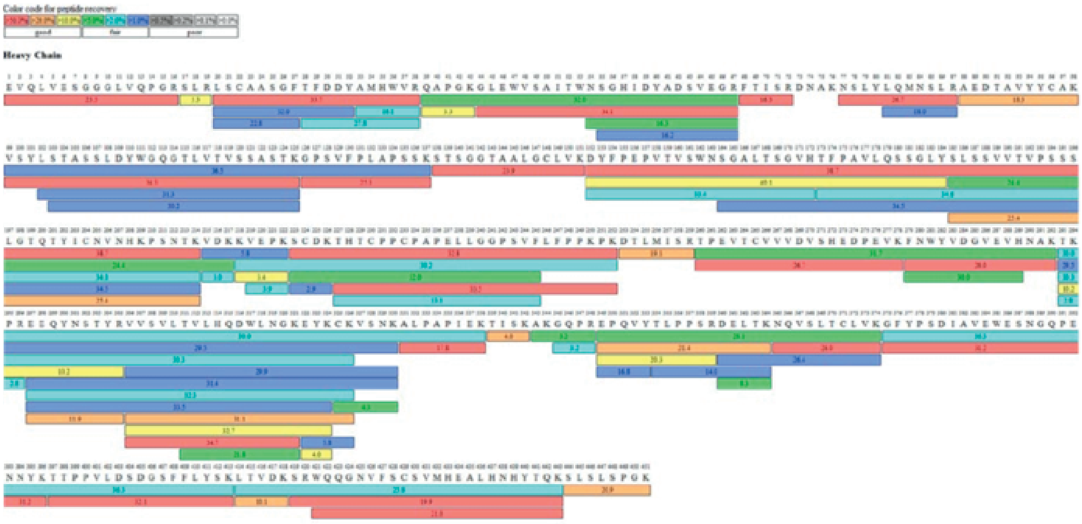
Thermo Scientific BioPharma Finder Software

BioPharma Finder

Complete biotherapeutic characterization

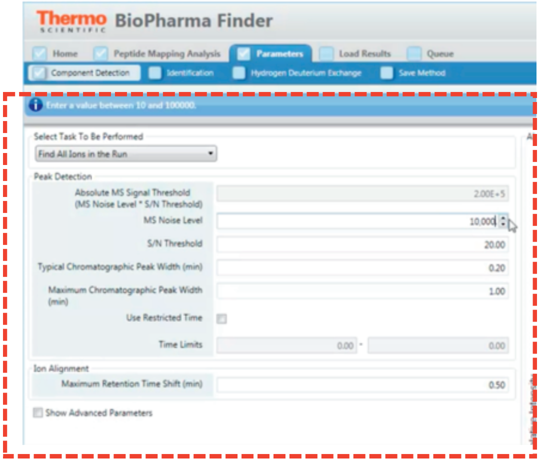
- โปรแกรมสำหรับวิเคราะห์ Intact Protein Analysis, Peptide Mapping Analysis และ Top-down Analysis
- ประมวลผลข้อมูลที่เกิดจากการ Fragmentations ได้หลายรูปแบบทั้ง CID, HCD, ETD, EThcD และ UVPD

แสดงผล Peptide Sequence Coverage Map



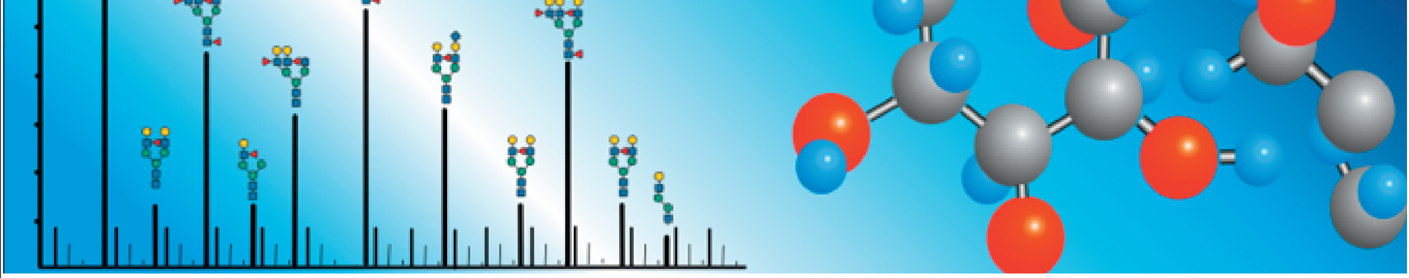
✅ แสดงผลการ Match คำนวณเป็น Percent sequence coverage ได้ และแสดงรายละเอียดของเปปไทด์สามารถใช้ยืนยันผลวิเคราะห์ได้

ลดระยะเวลาในการวิเคราะห์ผล Peptide Mapping



✅ คำนวณค่าที่เหมาะสมของการตั้งค่า Parameter ต่างๆ ใน workflows ทำให้ผู้ใช้งานมือใหม่ สามารถใช้งานได้ในทันที ซึ่งรองรับการทำงานในขั้นตอน Peptide-based Biotherapeutic Characterization Assays, Host-cell Protein (HCP) Analysis, Peptide And Disulfide Bond Mapping และ Hydrogen Deuterium Exchange (HDX).

Thermo Scientific SimGlycan Software

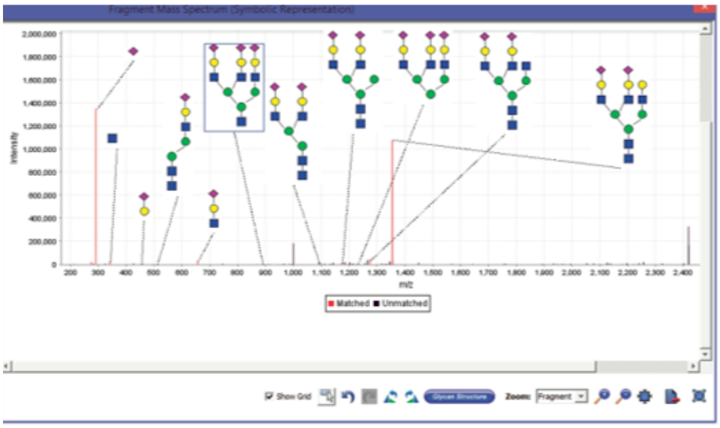


SimGlycan

High Throughput Glycan & Glycopeptide Identification

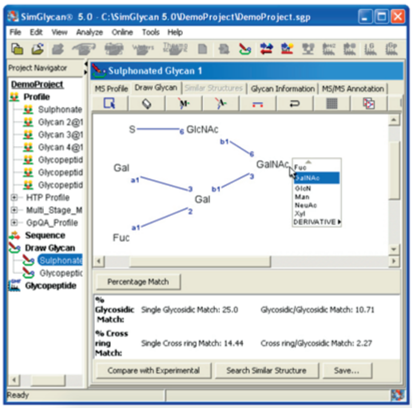
- โปรแกรมสำหรับระบุชนิดและโครงสร้างของ Glycan โดยมีฐานข้อมูลของ Glycan มากกว่า 22,500 Glycan
- ใช้วิเคราะห์โครงสร้าง Glycosaminoglycan, Cross-ring และตำแหน่ง Glycosidic Cleavages

ตอบโจทย์การใช้งานเพื่อวิเคราะห์ Glycan และ Glycopeptide



- รวบรวมข้อมูล Database ไว้จำนวนมาก (9,964 Glycans และ 22,814 Glycoproteins)
- ระบุ Adducts รวมไปถึง Adduct combinations ของ Glycan ได้ เช่น Na, Li, Mg, K, Na+H และ Li+H
- รองรับการวิเคราะห์ผลในเชิงปริมาณจากการใช้ aminoxyTandem Mass Tags (TMT)

สามารถระบุชนิดและโครงสร้าง Glycan และ Glycopeptide ได้อย่างสมบูรณ์



- ระบุชนิดและโครงสร้างจากการคำนวณค่า m/z กับค่าทางทฤษฎี
- หมดปัญหาเรื่อง Loss Monosaccharide Units เพราะสามารถวาดโครงสร้างเพิ่มเติม เพื่อใช้ระบุ Basic Unit เหล่านั้นได้