



Agilent Spectrum Mill 蛋白质组学软件

获得出色的蛋白质组学结果

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

得到更多蛋白质组学问题的答案

Spectrum Mill 使您的工作流程更高效、更高产

提取

- 提取并筛选 MS/MS 谱图
- 确认用于定量的母离子面积
- 改善母离子单同位素质荷比测定

MS/MS 搜索

- 连接多个搜索的结果
- 针对 CID、ETD 和 HCD 优化了匹配得分
- 采用基于 ppm 的子离子容差
- 允许意外修饰

自动验证

- 使用假阳性率 (FDR) 验证多肽谱图匹配结果
- 根据 FDR 在蛋白质水平上进行筛选

质量指标

- 解决在色谱分析、样品处理以及化学物质标记中的效率问题
- 测定优化后 MS/MS 数据采集的有效性

报告

- 根据 PSM、特有肽段、蛋白质或修饰位点进行组织
- 在样品间进行比较
- 采用免标记法、SILAC、iTRAQ 和 TMT 进行定量分析
- 自动导出结果

Spectrum Mill 采用了一种多步骤数据库搜索方法，使得每一步都具有灵活性。软件通过创建连接每一步参数设置的工作流程而实现了自动化。



“Spectrum Mill 已经从我在加州大学旧金山分校攻读研究生以及后来在千禧制药公司作为科学家时最初开发的软件成长到了现在的规模。自从安捷伦于 2003 年向市场推出 Spectrum Mill 以来，我们一直保持着良好的合作开发关系。受研究中使用的新仪器和技术的影响，我一直在改进 Spectrum Mill 中的工具和算法。”

麻省理工学院和哈佛博德研究所首席研究员 **KARL CLAUSER**

多功能的 Agilent Spectrum Mill 软件可满足蛋白质组学研究的不同目标。实际上，软件的诸多实用工具可帮助您找到设计与执行蛋白质组学实验时遇到的各种假设性问题的答案。

Spectrum Mill 软件提供的多种工具可用于：

- 发现蛋白质组学，包括用于统计解析和通路分析的蛋白质鉴定和结果导出
- 蛋白质定量，采用免标记、SILAC、iTRAQ 和 TMT 方法
- 靶向蛋白质组学，包括 MRM 选择器、多肽选择器以及 MS/MS 或 Q-TOF 系统的目标物列表输出等工具
- 质量评估和验证，关于多肽和蛋白质鉴定（包括 FDR）
- 蛋白质和多肽总结报告的可视化与创建，以便轻松探索复杂数据

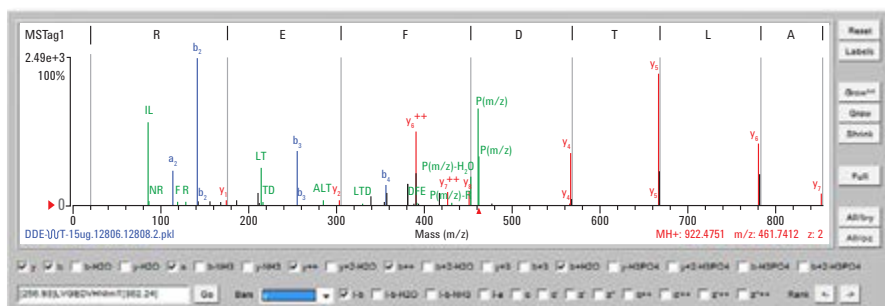
提高分析效率

不要让数据处理成为工作流程中的瓶颈。Spectrum Mill 专为快速获得结果以及充分利用服务器多核微处理器而设计。Spectrum Mill 可让您对不同处理步骤中的参数集进行自定义和保存。这一简单的机制确保了数据处理的高度一致性。可将这些参数集连接起来生成自定义工作流程，以便运行无人值守的分析批次。软件对工作队列进行管理以确保理想的服务器性能。Spectrum Mill 还可支持赛默飞质谱仪的数据。这将大大提升您实验室的分析效率。

坚实的科学基础铸就准确的分析结果

Agilent Spectrum Mill 软件通过与 Karl Clauser 的合作得到了不断改进，它已经被蛋白质组学研究人员广泛用于生成结果，并已产生了 1000 多篇科学论文。全球许多科学家已经将 Spectrum Mill 看作是蛋白质组学工作流程的一个关键组成部分。

Spectrum Mill 能够借助 FDR 自动验证多肽谱图匹配结果。FDR 也被用于蛋白水平的筛选。如此通过将已鉴定多肽和蛋白质的数量限定在设定置信阈值之上，可以大大减少假阳性结果。如今，您在分析数据时即无需担心鉴定错误。



MS/MS 标注谱图

精确定位重要的蛋白质修饰

检测并鉴定修饰后的蛋白质对于试图了解生物学过程的研究人员来说是非常关键的任务。常用的搜索引擎可帮助您寻找未修饰和修饰后的蛋白质。而 Spectrum Mill 可为您提供有关蛋白质修饰的更多信息。

当有两种或更多种可能性时，该软件的可变修饰定位功能可将修饰分配到序列的特定位点上。另外，它可为推荐位点的修饰提供可靠的指标。您无需逐个检查谱图即可确认修饰位点，因此大大提高了效率。Spectrum Mill 的一个强大而独特的功能在于它能够对比与可视化样品间磷酸化位点的差异。

Spectrum Mill 还能执行非指定的单质量间隙搜索。这一功能可利用精确质量数据自动鉴定并突出未知或意外的修饰。

#	得分	磷酸强度	VML 得分	STY 数	my 位点数	定位的 my 位点数	难以确定的 my 位点数	可变位点	序列 VML 序列	登记号	蛋白质名称
4	4.79	2.89e+004	0.000	7	2	0	2	Y542y Y548y	(R)YHLSDYLDSTSYLSTTLR (Q) YHLSDY (V, D) DST (D, S) ST (D, S) LSTTLR	Q9CUL5	IQ and AAA domain-containing protein 1
3	13.48	3.42e+005	99	5	1	1	0	Y849y	(R)LCDFSSASWYADSTSYLYYR (F) LCDFSSASWYADSTSY (L, D) LYR	Q61136	Serine/threonine-protein kinase PRP4 homolog
3	10.31	3.02e+005	99	5	1	1	0	Y849y	(R)LCDFSSASWYADSTSYLYYR (F) LCDFSSASWYADSTSY (L, D) LYR	Q61136	Serine/threonine-protein kinase PRP4 homolog
3	14.55	6.75e+005	99	5	1	1	0	Y849y	(R)LCDFSSASWYADSTSYLYYR (F) LCDFSSASWYADSTSY (L, D) LYR	Q61136	Serine/threonine-protein kinase PRP4 homolog
4	8.47	9.11e+003	0.000	3	1	0	1	Y127y	(R)YSDYSDGTHLRAEHPYR (L) Y (D, S) SDY (D, S) SDGTHLRAEHPYR	Q8B2N6	Indicator of cyclinase protein 10
2	15.40	3.92e+005	99	5	1	1	0	Y359y	(R)YVCTSTYLORR (I) YVCTSTY (L, D) LOYR	Q9ERH7	Homeodomain-interacting protein kinase 3
2	13.66	4.17e+005	99	5	1	1	0	Y359y	(R)YVCTSTYLORR (I) YVCTSTY (L, D) LOYR	Q9ERH7	Homeodomain-interacting protein kinase 3
3	9.46	1.22e+005	99	3	1	1	0	Y279y	(R)QLVSGEFTYDYDHR (Y) QLVSGEFTYDYDHR (L, D) DYHR	Q2N651	Glycogen synthase kinase-3 alpha
3	9.53	1.01e+005	99	1	1	1	0	Y288y	(R)HGLIYDSEYLLSLDFYDF (E) HGLIYDSEYLLSLDFY (L, D) DF	P21688	Ucase
2	8.75	3.43e+005	99	1	1	1	0	Y699y	(R)AAGDYVDFQDF (Q) AAGDY (L, D) VDFQDF	P42232	Signal transducer and activator of transcription 5B
2	13.16	5.42e+005	99	1	1	1	0	Y699y	(R)AAGDYVDFQDF (Q) AAGDY (L, D) VDFQDF	P42232	Signal transducer and activator of transcription 5B
2	8.82	2.70e+005	99	1	1	1	0	Y699y	(R)AAGDYVDFQDF (Q) AAGDY (L, D) VDFQDF	P42232	Signal transducer and activator of transcription 5B
2	7.29	5.37e+005	99	4	1	1	0	Y182y	(R)HSDSDSTDYVACR (R) HSDSDSTDY (L, D) VACR	P47911	Mitogen-activated protein kinase 54

Spectrum Mill 的可变修饰定位可提供具体修饰位点的明确信息。在这个示例中，磷酸化位点基于 MS/MS 谱图中的信息的得分 (VML 得分) 用于指示可信 (VML 得分 > 1.1) 和难以确定的位点。序列图中显示了所观察离子的裂解位置，为得分提供了更多信息。

“在过去 5 年中我的实验室一直在使用 Spectrum Mill，作为我们细胞信号传导和生物标记物发现研究的一部分。我们认为 Spectrum Mill 简单易用，而且有着极其直观的可视化选项和自定义总结文件。目前我们将 Spectrum Mill 安装在内部服务器上以便多用户访问，而且发现这样的配置非常适合我们的需求。我们期待安捷伦继续对 Spectrum Mill 进行改进以提供有助于研究进行的新功能。”

澳大利亚布里斯班昆士兰大学迪亚曼蒂纳研究所癌症蛋白质组学团队负责人 **MICHELLE HILL 博士**

生成更有意义的结果

Spectrum Mill 可轻松集成其他分析工具，帮助您进一步挖掘蛋白质组学研发数据的价值。您可以将 Spectrum Mill 的搜索结果上传到蛋白质组学软件常用的 Scaffold 套件上，并与其他搜索引擎得到的结果进行对比。

从搜索结果中得出的蛋白质丰度可以导入到 Agilent Mass Profiler Professional (MPP) 中进行统计解析和可视化。由于 Spectrum Mill 能够为已鉴定多肽自动提取和分配母离子面积，这一创新工作流程才得以实现。在报告生成过程中，系统通过计算归属于该蛋白质的面积总和从而得出蛋白质丰度。蛋白质分组与相关的蛋白质水平定

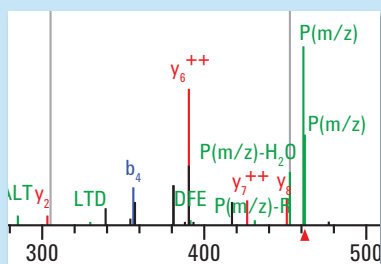
量分析可以纳入或排除多种蛋白质间共享的多肽。在 MPP 中可以快速可视化样品组差异，Pathway Architect 则可将这些差异匹配到通路中。通过发现与您实验相关的通路，Spectrum Mill 可帮助您更快获得有生物学意义的结果。

Spectrum Mill 能够从 MS/MS 多肽鉴定中生成包含精确质量和保留时间的列表，用

于仅限 MS 的蛋白质谱图分析工作流程。Agilent MassHunter Profinder 软件可利用此多肽目标物列表从多个样品文件中找到多肽。Profinder 拥有自动处理、数据浏览和手动修正等多种工具。

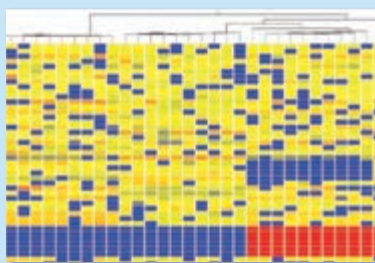
Spectrum Mill 能以不同方式导出结果，方便您使用其他软件程序进行审查并按自己的方式解析实验。

发现



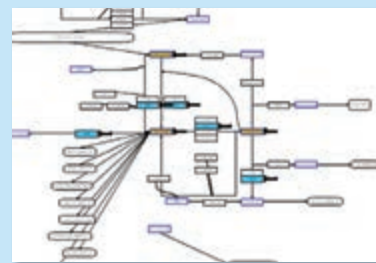
- 采集数据依赖型数据
- 执行 Spectrum Mill 数据库搜索
- 对比不同样品组的蛋白质丰度

统计分析和可视化



- 导入 Spectrum Mill 结果
- 确定差异调节蛋白质
- 执行相关性分析

通路分析



- 将蛋白质映射到通路中
- 使用通路信息阐释生物学效应
- 导出通路蛋白质以进行后续靶向分析

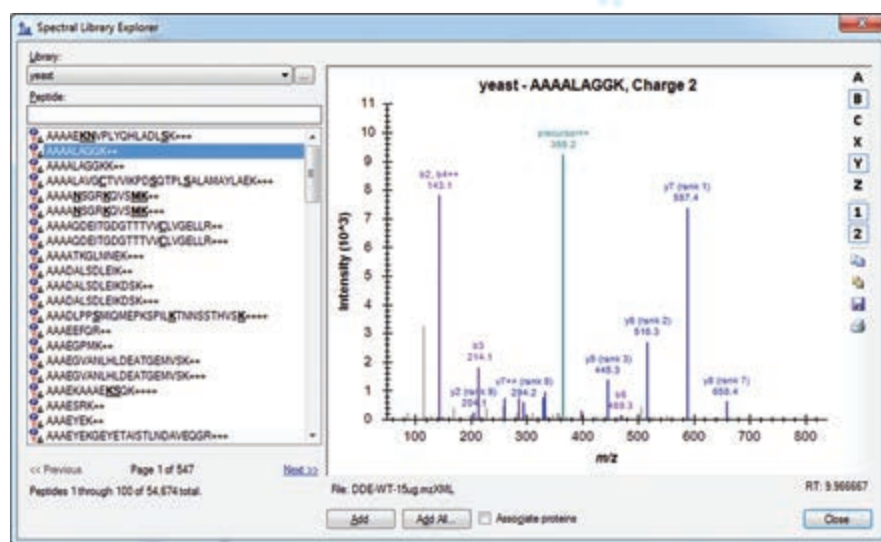
您可以将 Spectrum Mill 搜索结果导出到 Mass Profiler Professional 和 Pathway Architect 中，以便更快地了解生物学过程。如果不同处理组间的数据依赖型结果在一个受影响的通路中不包含所有蛋白质，那么可能需要检测差异调节通路并在后续分析中对其进行靶向定位。

专注于靶向蛋白质组学分析

当您鉴定出一组目标蛋白质后，下一步可能需对具体多肽进行靶向分析。您可以从 Spectrum Mill 中导出已鉴定的多肽谱图并使用西雅图华盛顿大学 MacCoss 团队的 Skyline 软件对其进行分析。

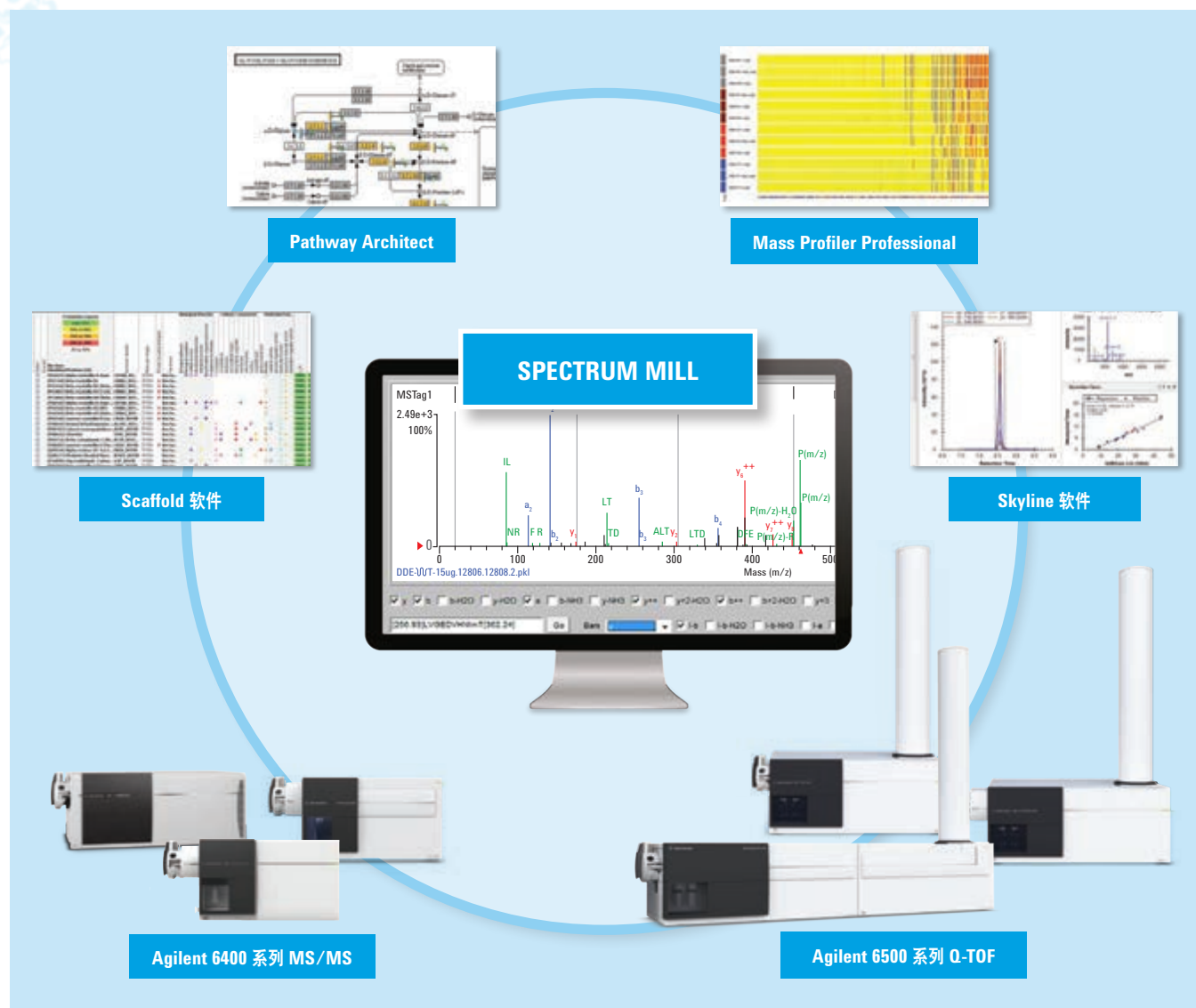
三重四极杆质谱仪是靶向定量分析的优选仪器，它可分析多达数百种蛋白质。您可以在 Skyline 中将 Spectrum Mill 结果作为多肽谱库，创建用于安捷伦三重四极杆液质联用系统的 MassHunter 多反应监测方法。另一方面，如果您希望监测更多数量的蛋白质，则可以选择 Q-TOF 质谱仪作为靶向 MS/MS 蛋白质组学的分析仪器。靶向 MS/MS 蛋白质组学以数据依赖型模式收集多肽 MS/MS 谱图。Spectrum Mill 多肽 MS/MS 谱库通过将所采集的谱图与谱库进行匹配，从而从目标蛋白质中鉴定多肽。

Spectrum Mill 还包括用于靶向分析的工具。例如，多肽选择器可执行蛋白质的理论消化，随后自动选择可能的靶标多肽。相比之下，MRM 选择器则会根据数据依赖型采集实验中发现模式下生成的实验数据构建并输出 MRM 离子对列表。您可以输出用于安捷伦或 AB SCIEX 的三重四极杆仪器的离子对列表。



用户可以将 Spectrum Mill 数据库搜索结果得出的多肽谱图匹配结果轻松导出为自定义谱库，并借助 Skyline 谱库浏览器用于基于 Skyline 的工作流程中。

SPECTRUM MILL — 蛋白质组学研究的核心



Spectrum Mill 建立在坚实的科学基础上，历经多年开发，并经过了数百篇科学论文的论证。Spectrum Mill 提供的不仅仅是蛋白质数据库搜索功能，它还具有质量评估、PTM 定位、蛋白质定量、可视化和报

告等功能。Spectrum Mill 的结果可用于安捷伦软件（Mass Profiler Professional、Pathway Architect 和 MassHunter Profinder）以及第三方软件（Skyline 和 Scaffold）。Spectrum Mill 的连通性可将您之前的结果

应用于新实验中。Spectrum Mill 在将蛋白质组学数据转化为生物学见解的工作流程中扮演着至关重要的角色。

了解详细信息

www.agilent.com/chem/spectrum_mill

查找当地的安捷伦客户服务中心：

agilent.com/chem/contactus-cn

安捷伦客户服务中心：

免费专线：800-820-3278

400-820-3278（手机用户）

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

仅供研究使用。本文中的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。安捷伦科技对本资料可能存在的错误，或由于提供、展示或使用本资料所造成的间接损失不承担任何责任。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2015

2015 年 2 月 4 日，中国印制

5991-5250CHCN



Agilent Technologies