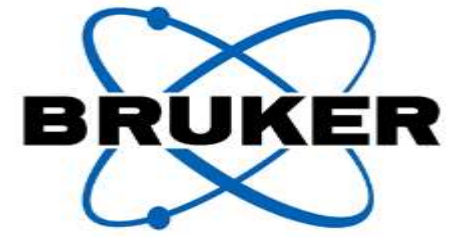




ФГБУ «НИЦ эпидемиологии и микробиологии им. Н.Ф. Гамалеи» Минздрава России (Москва)

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА АЛМАСС БИО 200

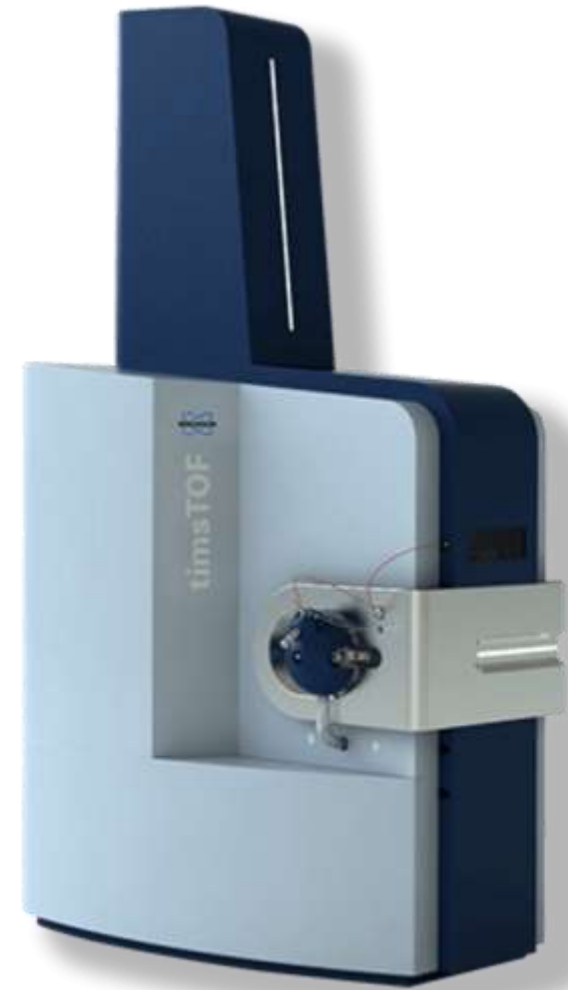
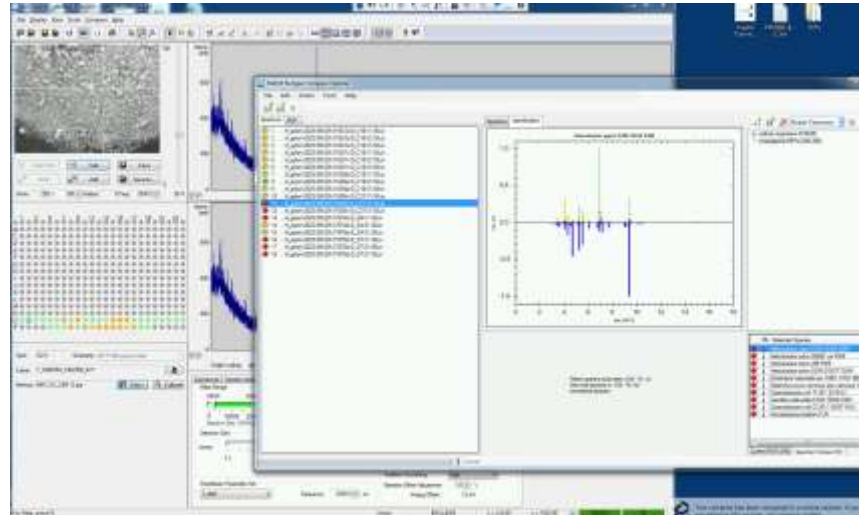
- Никита Борисович Поляков
- Лаборатория индикации и ультраструктурного анализа микроорганизмов
- Email: polyakovnb@gmail.com



MALDI biotyper



+



До начала 2022 года на российском рынке масс-спектрометров для микробиологии присутствовали три компании



MICROFLEX



SAI T2 Plus



SA VITEK MS

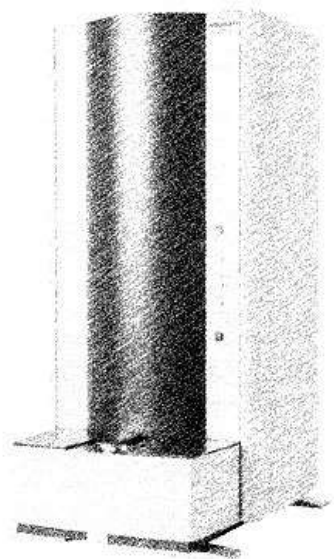


VITEK[®] MS PRIME

В 2022-2023 годах на российском рынке появились новые приборы, с рынка ушла фирма Брукер



Clin-TOF-II, Лабконцепт



АЛМАСС Био
60/200, АЛЬГИМЕД



Smart MS 5020, ЛИТЕХ



Autof MS
600/1000/1600/2000/2600
Интерлабсервис



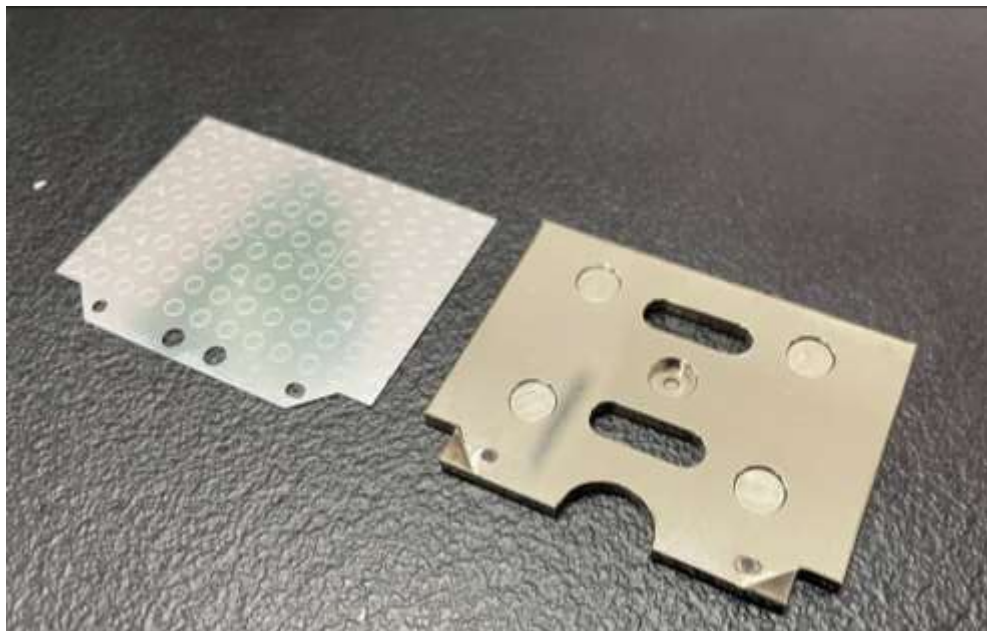
Hexin Instrument CMI -
1600/2000 ДИА-М

Общий обзор масс-спектрометров АЛМАСС БИО 200 и Bruker Ultraflexreme

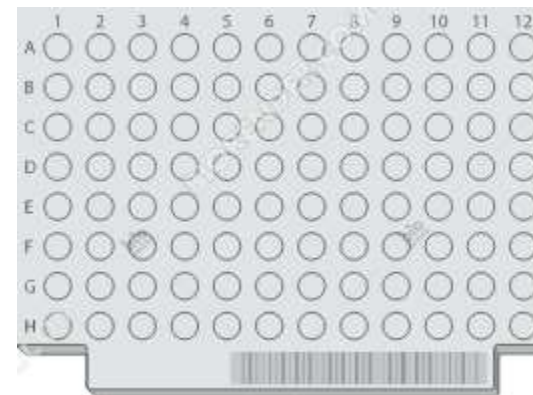


	АЛМАСС БИО 200	Bruker Microflex	Bruker Ultraflex extreme
Объект идентификации	Бактерии, микобактерии, дрожжи, грибы	Бактерии, микобактерии, дрожжи, грибы	Бактерии, микобактерии, дрожжи, грибы
База данных	Более 2700 видов и 7000 штаммов , возможность создания собственных записей	Более 5700 видов и 10800 штаммов , возможность создания собственных записей	Более 5700 видов и 10800 штаммов , возможность создания собственных записей
Разрешающая способность	Более 4000 на m/z 1619 (Бомбезин)	Более 2000 на m/z 1619 (Бомбезин)	Более 3000 на m/z 1568 (Glu_Fib)
Предел обнаружения	S/N > 10:1 на m/z 445 (Тетрациклин, 1 мг/мл)	S/N > 50:1 для 500 фмоль BSA	
Точность масс	Не более 200 ppm	Не более 200 ppm	Не более 60 ppm
Диапазон масс	1 – 300 000 Да, тест по BSA 66, 133 кДа	Тест по димеру BSA, 133 кДа	
Стабильность масс	Менее 200 ppm/8 ч	Таких тестов в сервисной инструкции нет	Таких тестов в сервисной инструкции нет
Твердотельный лазер	До 200 Гц с плавной регулировкой ресурс более 10 ¹⁰ выстрелов	До 200 Гц	До 2000 Гц
Мишень	Многоразовая, нержавеющая сталь 96 точек	Многоразовая, нержавеющая сталь 96 точек	Многоразовая, нержавеющая сталь, 384 точки
Режим ионизации	Положительный и отрицательный, программное переключение	Положительный и отрицательный (у некоторых моделей), программное переключение	Положительный и отрицательный , программное переключение

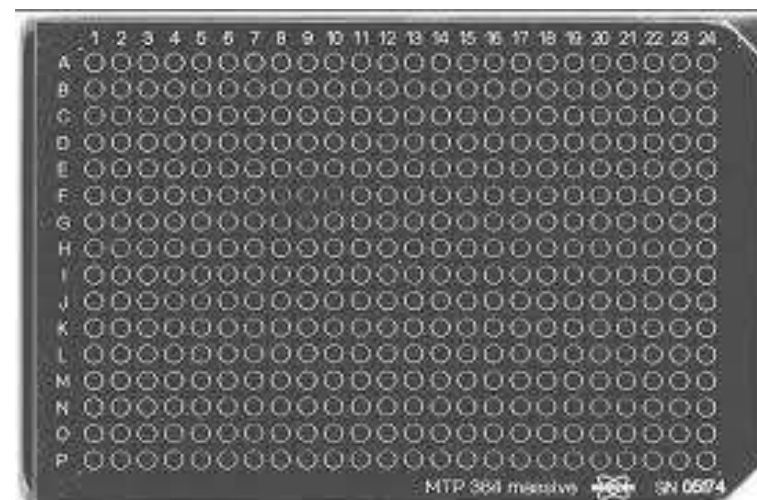
Мишень прибора АЛМАСС БИО



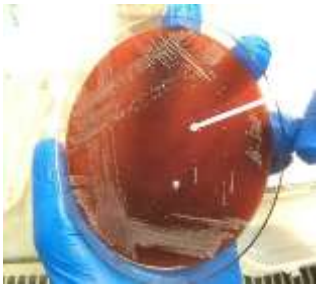
Мишень прибора Microflex



Мишень прибора Ultraflex



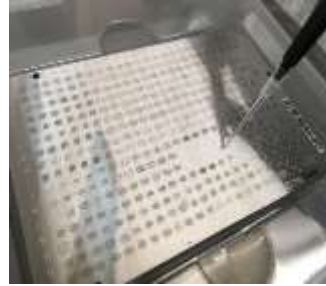
Метод прямого нанесения



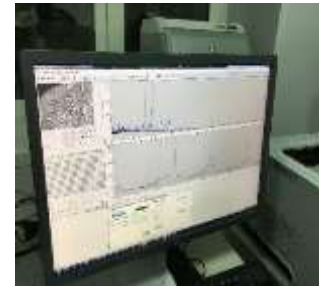
Шаг 1:
Забор биоматериала с чашки Петри



Шаг 2:
Нанесение колонии тонким слоем круговыми движениями от центра к периферии на стальную подложку, высушивание



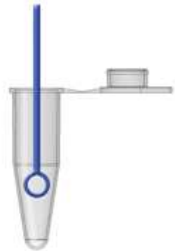
Шаг 3:
Нанесение 1 мкл матрицы (альфа-циано-гидроксикоричной кислоты) поверх пятна высушенного биоматериала



Шаг 4:
Съемка образцов в автоматическом режиме, запись масс-спектров

Пробоподготовка для Bruker и АЛМАСС БИО идентична

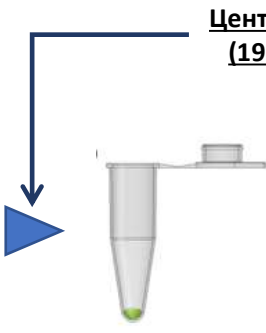
Метод экстракции муравьиной кислотой



Шаг 1:
Ресуспендировать биомассу в 300 мкл H₂O



Шаг 2:
Добавить 900 мкл этанола



Шаг 3:
Отобрать супернатант, сушить осадок при комнатной температуре



Шаг 4:
Добавить от 1 до 80 мкл, 70% муравьиной кислоты и ацетонитрила

Нанести 1 мкл супернатанта на MALDI подложку, высушить, добавить 1 мкл матрицы

Цель работы

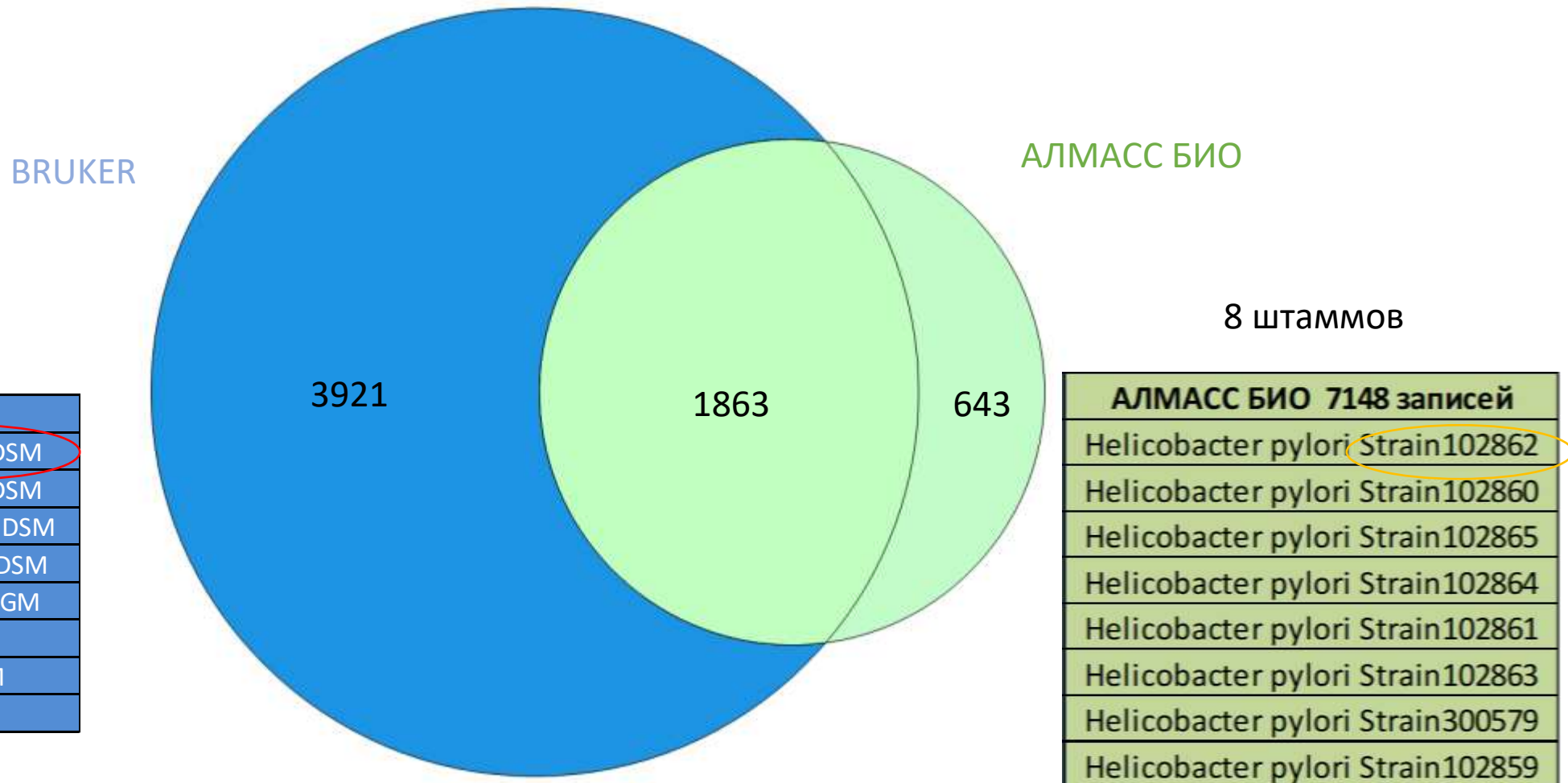
Сравнение приборов Bruker Ultraflexreme с ПО MALDI Biotyper (в БД 10833 штамма) с прибором АЛМАСС БИО 200 (в БД 7146 штаммов) по следующим параметрам:

- 1) Сравнение наполнения базы данных штаммов АЛМАСС БИО 200 и MALDI biotyper
- 2) Сравнение интерфейса и возможностей программ управления и идентификации приборов АЛМАСС БИО 200 и Bruker Ultraflexreme/Microflex
- 3) Сравнение результатов идентификации 70 штаммов клинических изолятов *Helicobacter pylori* на данных приборах

Сравнение наполнения баз данных MALDI Biotyper и АЛМАСС БИО 200

Штаммов в БД Bruker	Штаммов в БД АЛМАСС БИО
10833	7146

уникальных видов в БД Bruker	Общие виды Bruker, АЛМАСС БИО	Уникальных видов АЛМАСС БИО
3921	1863	643



7 штаммов

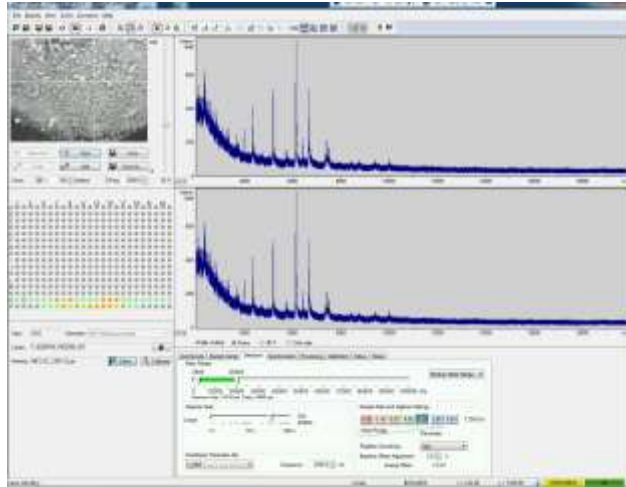
Bruker 10833 записей
Helicobacter pylori DSM 7492 DSM
Helicobacter pylori DSM 9691 DSM
Helicobacter pylori DSM 21031T DSM
Helicobacter pylori DSM 10242 DSM
Helicobacter pylori 26695_се PGM
Helicobacter pylori 151 RLТ
Helicobacter pylori J99 PGM

8 штаммов

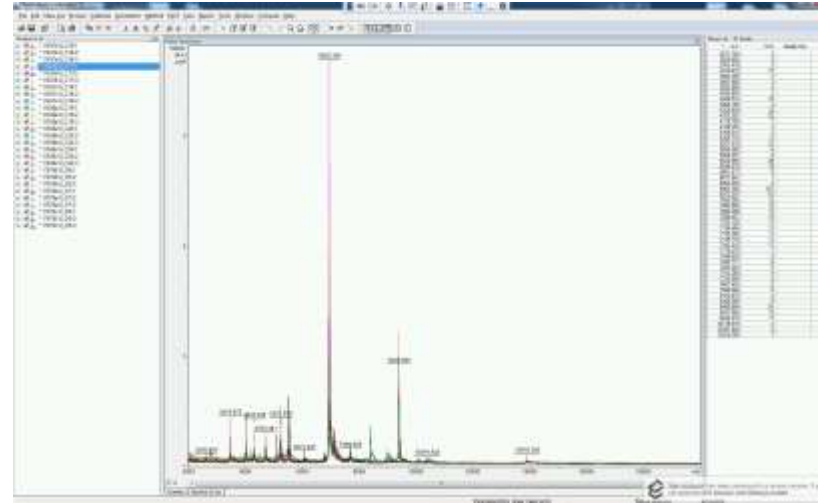
АЛМАСС БИО 7148 записей
Helicobacter pylori Strain102862
Helicobacter pylori Strain102860
Helicobacter pylori Strain102865
Helicobacter pylori Strain102864
Helicobacter pylori Strain102861
Helicobacter pylori Strain102863
Helicobacter pylori Strain300579
Helicobacter pylori Strain102859

Сравнение интерфейса и возможностей программ
управления и идентификации приборов АЛМАСС БИО 200 и
Bruker Ultraflex/Microflex

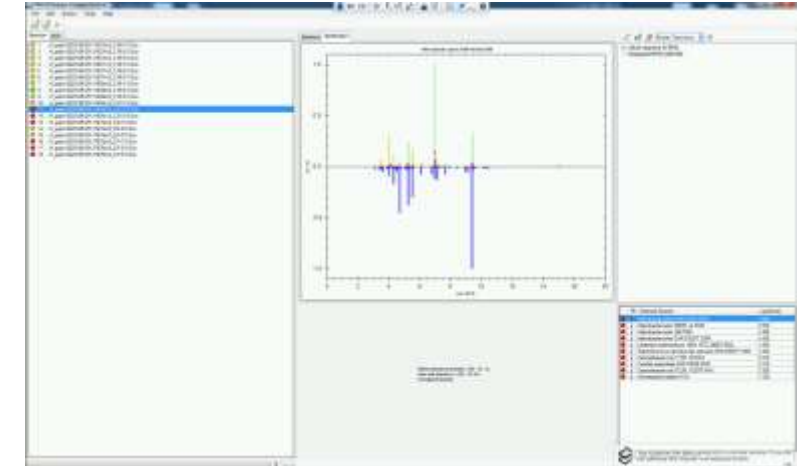
Flex Control



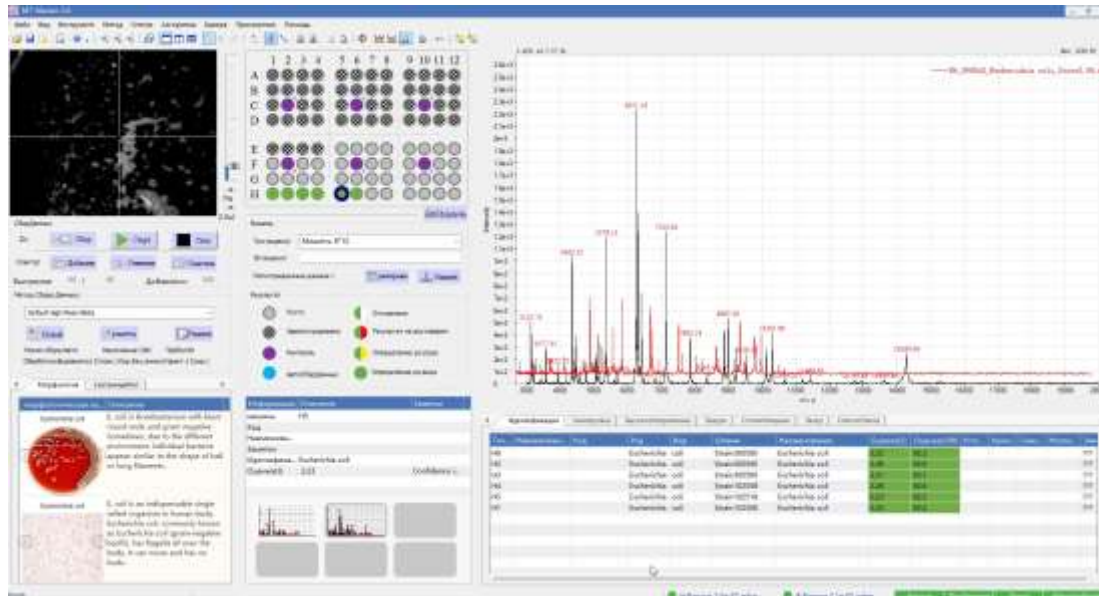
Flex Analysis



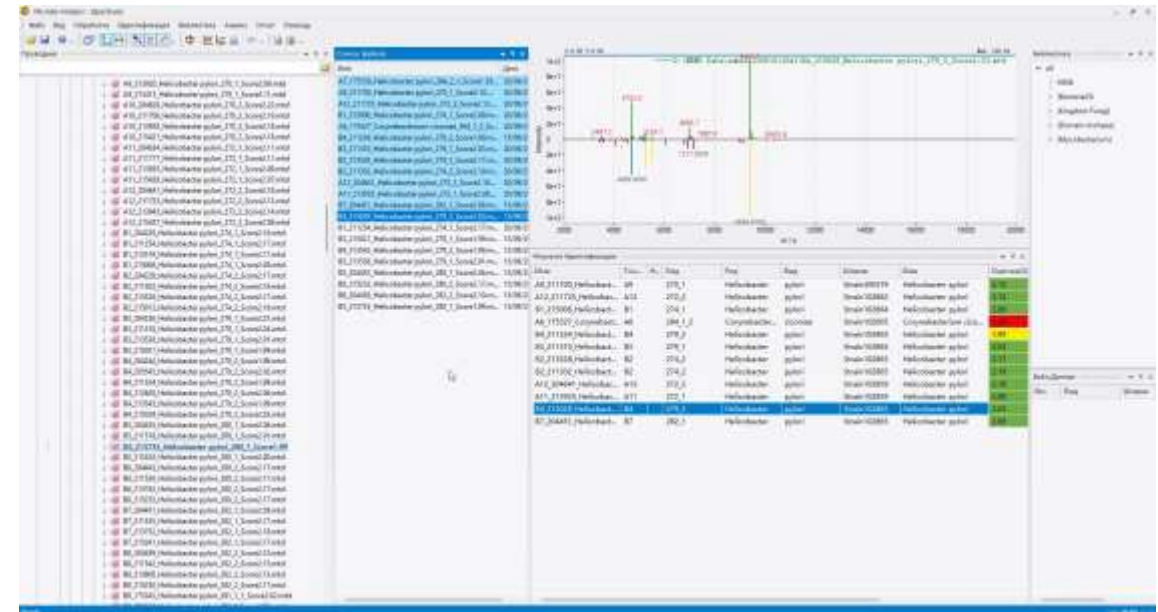
MALDI biotyper compass explorer



MT MASTER



MICROBE ANALYSIS



Программа FLEX CONTROL управление масс-спектрометром Ultraflex и Microflex

The screenshot displays the FLEX CONTROL software interface for managing a mass spectrometer. The main window is titled "flexControl - ultraflex TOF/TOF - [MBT_FC_230112.par]".

Left Panel:

- Камера (Camera):** A grayscale image of the sample spot, with a white arrow pointing to it from the label.
- Сбор данных (Data Collection):** A control panel with buttons for "Clear Sum", "Start", "Save", "Undo", "Add", and "Save As...". Below these are fields for "Shots: 200 / 200" and "Added: 2000 Freq: 2000.0".
- Разметка мишени (Target Marking):** A grid of 23 columns (A-P) and 23 rows (1-23) of dots. A white arrow points to a specific dot in the grid from the label.
- Parameters:** Fields for "Spot: G12:0", "Geometry: MT 384 ground steel", "Carrier: T_0280784_1002350_421", and "Method: MBT_FC_230112.par".

Main Panel:

- Управление аттенюатором (Attenuator Control):** A vertical slider on the left side of the spectrum plot, with a white arrow pointing to it from the label.
- Спектр (Spectrum):** A mass spectrum plot showing intensity (arb) on the y-axis (0.00 to 1.50) versus m/z on the x-axis (0 to 18000). The base peak is at m/z 7067.467. Other significant peaks are labeled with their m/z values: 2355.761, 2376.019, 2878.519, 3491.109, 3513.271, 3544.565, 3555.003, 3701.369, 4439.901, 4664.884, 4708.720, 4750.380, 5389.434, 5755.294, 5777.531, 6336.287, 6980.762, 7024.067, 7098.797, 7109.387, and 7153.114.

Bottom Panel:

- AutoXecute:** A control panel with tabs for "Sample Carrier", "Detection", "Spectrometer", "Processing", "Calibration", "Setup", and "Status". It includes fields for "Method: MBT_AutoX_ASol", "Run: D:\Methods\AutoXSequences\ED_02_10_2f", and buttons for "Run method on current spot", "Start automatic Run", "Pause Run", and "Set Initial Laser Power".
- Data Directory:** A section for "Sample Name" and a legend for data status: Prepared (yellow), For Calibration (purple), MS Measured (green), MS/MS Measured (dark green), Flatline Spectrum (orange), Aborted (red), and MS Laser-Tuning (grey).

Bottom Status Bar:

- For Help, press F1
- Linear
- BDAL@DE
- x = -0.00, y = -0.00
- READY
- RUS

Программа MT Master управление масс-спектрометром АЛМАСС БИО

The screenshot displays the MT Master 2.0 software interface, which is used for managing a mass spectrometer. The interface is divided into several functional areas:

- Camera (Камера):** Located in the top-left corner, it shows a live feed of the sample plate.
- Target Grid (Разметка мишени):** A central 8x12 grid where each cell is marked with a colored circle indicating the status of the target. A callout box labeled "Управление аттенюатором" (Attenuator control) points to this grid.
- Mass Spectrum (Спектр):** A large plot on the right side showing intensity versus m/z. The x-axis ranges from 3000 to 20000, and the y-axis ranges from 0 to 2.6e+3. Several peaks are labeled with their m/z values, such as 3125.74, 3377.35, 4362.35, 5378.13, 6251.19, 7193.30, 7865.19, 8967.20, 9928.51, 10291.86, 11340.43, 12158.29, 13057.86, and 14290.09. A callout box labeled "Спектр" points to this plot.
- Identification (Идентификация):** A table at the bottom right showing the results of the mass spectrometry analysis. The table includes columns for target code, name, code, genus, species, strain, and various quality scores. The results are as follows:

Точ.	Наименован...	Код	Род	Вид	Штамм	Наименование	Оценка(3)	Оценка(100)	Усто...	Культ...	Смес...	Изолак...	Зам
H6			Escherichia	coli	Strain300560	Escherichia coli	2.22	92.2					???
H2			Escherichia	coli	Strain300560	Escherichia coli	2.39	93.9					???
H3			Escherichia	coli	Strain300560	Escherichia coli	2.31	93.1					???
H4			Escherichia	coli	Strain102508	Escherichia coli	2.26	92.8					???
H5			Escherichia	coli	Strain102518	Escherichia coli	2.23	92.3					???
H1			Escherichia	coli	Strain102508	Escherichia coli	2.25	92.5					???
- Control Panel:** Located on the left side, it includes buttons for "Сбор" (Acquire), "Старт" (Start), "Стоп" (Stop), "Добавить" (Add), "Отменить" (Cancel), "Очистить" (Clear), and "Увеличить" (Zoom). It also displays parameters like "Выстрелов: 60 / 60" and "Добавлено: 300".
- Information Panel:** Located at the bottom left, it provides detailed information about the identified organism, Escherichia coli, including its morphology and description.

Результаты идентификации доступны из основного окна управления

MT Master 2.0

Файл Вид Инструмент Метод Спектр Алгоритмы Камера Приложение Помощь

Идентификация

Intensity

m / z

Display: Head to Tail Side by Side Original Spec. Reference Spec.

№.	Род	Вид	Штамм	Наименование	Оценк...	Оценк...	Со...
<input checked="" type="checkbox"/> 1	Escherichia	coli	Strain530001	Escherichia coli	2.42	94.2	0.00
<input type="checkbox"/> 2	Escherichia	coli	Strain102515	Escherichia coli	1.94	84.0	0.00
<input type="checkbox"/> 3	Escherichia	coli	Strain300558	Escherichia coli	1.93	83.0	0.00
<input type="checkbox"/> 4	Escherichia	coli	Strain102508	Escherichia coli	1.83	73.0	0.00
<input type="checkbox"/> 5	Escherichia	coli	Strain102518	Escherichia coli	1.83	73.0	0.00
<input type="checkbox"/> 6	Escherichia	coli	Strain102521	Escherichia coli	1.76	66.0	0.00
<input type="checkbox"/> 7	Escherichia	coli	Strain102513	Escherichia coli	1.73	63.0	0.00
<input type="checkbox"/> 8	Escherichia	coli	Strain102520	Escherichia coli	1.71	61.0	0.00
<input type="checkbox"/> 9	Escherichia	ferusonii	Strain300562	Escherichia ferusonii	1.68	59.3	0.00

Escherichia coli,SBA24h

Escherichia coli

Max: 2496.27

MS Data\admin\221019\1626\D2_162659_Escherichia coli_Score2.27.mtd

12000 13000 14000 15000 16000 17000 18000 19000 20000

СписокПиков

Имя	Оценка(3)	Оценка(100)	Усто...	Культ...	Смес...	Нозок...	Зам
pylori	2.16	91.6					
pylori	2.10	91.0					
pylori	1.82	72.0					
Achromob... xylosoxi...	1.03	36.4					???
D2 Escherichia coli	2.42	94.2					???

СборДанных

ID: Сбор

Спектр: Добавить

Выстрелов: 60 / 6

Метод Сбора Данных: Default High Mass-Nikita

Новый

Режим сбора: Авто

Обработка: Выворнять | Сгла...

Морфология

морфологическая ка...

Escherichia coli

Escherichia coli

E. coli is an indispensable single celled organism in human body. Escherichia coli, commonly known as Escherichia coli (gram-negative bacilli), has flagella all over the body. It can move and has no buds.

Оценка(3) 2.42 Confidence i...

B2	Achromob... xylosoxi...	Strain100036	Achromobacter xylosoxi...
D2	Escherichia coli	Strain530001	Escherichia coli

Ready

● H.Вакуум 3.1e-02 mbar ● B.Вакуум 2.9e-07 mbar Вакуум ВысНапряж Лазер МишеньВнутри

Регистрация образцов

Регистрация

Импорт и экспорт из Microsoft Excel

Точка	Код	Наименование	Pretreatment method
A1	360_1		Метод 1
F4			Метод 1
H4			Метод 1
F1			Метод 1
C4			Метод 1
G2			Метод 1
F2			Метод 1
G3			Метод 1
F3			Метод 1
E3			Метод 1
E2			Метод 1

Спектр получен, результат недостоверен

Спектр получен, определение до вида

Спектр получен, определение до рода



Регистрация

Точка	Код	Наименование	Pretreatment method
A1	360_1		Метод 1
F4			Метод 1
H4			Метод 1
F1			Метод 1
C4			Метод 1
G2			Метод 1
F2			Метод 1
G3			Метод 1
F3			Метод 1
E3			Метод 1
E2			Метод 1

Импорт (L)
Сохранить как (S)

Можно добавить
фотографию чашки



MICROBE ANALYSIS просмотр спектров и результатов идентификации

The screenshot displays the Microbe Analysis software interface. On the left, a file list shows various mass spectrometry files, with one file circled in red. The top right shows a mass spectrum plot with intensity on the y-axis and m/z on the x-axis. The bottom right shows a table of identification results.

Список файлов

Имя	Дата
A7_175550_Helicobacter pylori_364_2_1_Score1.59...	20/09/2
A9_211700_Helicobacter pylori_270_1_Score2.10...	20/09/2
A12_211725_Helicobacter pylori_272_2_Score2.13...	20/09/2
B1_215006_Helicobacter pylori_274_1_Score2.09...	20/09/2
A6_175527_Corynebacterium ciconiae_364_1_2_Sc...	20/09/2
B4_211324_Helicobacter pylori_279_2_Score1.99...	15/09/2
B3_211310_Helicobacter pylori_279_1_Score2.03...	20/09/2
B2_213528_Helicobacter pylori_274_2_Score2.17...	20/09/2
B2_211302_Helicobacter pylori_274_2_Score2.19...	20/09/2
A12_204641_Helicobacter pylori_272_2_Score2.18...	20/09/2
A11_213935_Helicobacter pylori_272_1_Score2.09...	20/09/2
B7_204451_Helicobacter pylori_282_1_Score2.09...	15/09/2
B4_215029_Helicobacter pylori_279_2_Score2.03...	15/09/2
B1_211254_Helicobacter pylori_274_1_Score1.17...	20/09/2
B3_215021_Helicobacter pylori_279_1_Score1.99...	15/09/2
B4_213543_Helicobacter pylori_279_2_Score1.99...	15/09/2
B3_213536_Helicobacter pylori_279_1_Score2.01...	15/09/2
B5_204435_Helicobacter pylori_280_1_Score2.06...	15/09/2
B6_215233_Helicobacter pylori_280_2_Score2.17...	15/09/2
B8_204439_Helicobacter pylori_282_2_Score2.10...	15/09/2
B5_213735_Helicobacter pylori_280_1_Score1.99...	15/09/2

Результат Идентификации

Имя	Точ...	Н...	Код	Род	Вид	Штамм	Имя	Оценка(3)
A9_211700_Helicobact...	A9		270_1	Helicobacter	pylori	Strain300579	Helicobacter pylori	2.10
A12_211725_Helicobac...	A12		272_2	Helicobacter	pylori	Strain102862	Helicobacter pylori	2.13
B1_215006_Helicobact...	B1		274_1	Helicobacter	pylori	Strain102864	Helicobacter pylori	2.09
A6_175527_Corynebact...	A6		364_1_2	Corynebacter...	ciconiae	Strain102005	Corynebacterium cico...	1.04
B4_211324_Helicobact...	B4		279_2	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	1.99
B3_211310_Helicobact...	B3		279_1	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	2.03
B2_213528_Helicobact...	B2		274_2	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	2.17
B2_211302_Helicobact...	B2		274_2	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	2.19
A12_204641_Helicobac...	A12		272_2	Helicobacter	pylori	Strain102859	Helicobacter pylori	2.18
A11_213935_Helicobac...	A11		272_1	Helicobacter	pylori	Strain102859	Helicobacter pylori	2.09
B4_215029_Helicobact...	B4		279_2	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	2.03
B7_204451_Helicobact...	B7		282_1	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	2.09

Файлы сохраняются с «наглядным» именем

MICROBE ANALYSIS просмотр спектров и результатов идентификации

The screenshot displays the Microbe Analysis software interface. On the left, a file explorer shows a directory structure with files named A1 through A11. The main window features a mass spectrum plot with intensity on the y-axis (ranging from 1e-2 to 1e+2) and m/z on the x-axis (ranging from 2000 to 20000). The spectrum shows several peaks, with the most prominent ones labeled with their m/z values: 2624.5, 3473.3, 3473.0300, 4325.7, 5249.7, 6069.4, 6066.5100, 6947.1, 6944.9500, 7687.3, 9273.0, 9362.5900, 10398.4, 10392.3000, 13868.24530.1, and 15300.0. Below the plot, a table titled 'Результат Идентификации' (Identification Result) lists the identified strains and their characteristics.

Имя	Точ.	Наименован...	Код	Род	Вид	Штамм	Имя	Оценка(3)	Оценка(100)	соде.
A2_211228_Helicobact...	A2	204b	204b	Helicobacter	pylori	Strain102859	ОААААУ,Е%4	2.01	90.1	0.00
A3_211237_Helicobact...	A3	227_1	227_1	Helicobacter	pylori	Strain300579	ОААААУ,Е%4	1.99	89.0	0.00
A4_214956_Helicobact...	A4	227_2	227_2	Helicobacter	pylori	Strain300579	ОААААУ,Е%4	1.97	87.0	0.00
A9_211700_Helicobact...	A9	270_1	270_1	Helicobacter	pylori	Strain300579	Helicobacter pylori	2.10	91.0	0.00
A10_213928_Helicobac...	A10	270_2	270_2	Helicobacter	pylori	Strain102859	Helicobacter pylori	2.18	91.8	0.00

A 'Results' window is open in the foreground, showing a list of 10 identified species:

No.	Род	Вид	Штамм	Имя	Оценка(3)	Оценка(100)	соде...	Заметки
1	Helicobacter	pylori	Strain102859	Helicobacter pylori	2.18	91.80	0.00	
2	Helicobacter	pylori	Strain102864	Helicobacter pylori	1.84	74.00	0.00	
3	Helicobacter	pylori	Strain300579	Helicobacter pylori	1.76	66.00	0.00	
4	Helicobacter	pylori	Strain102862	Helicobacter pylori	1.75	65.00	0.00	
5	Helicobacter	pylori	Strain102861	Helicobacter pylori	1.75	65.00	0.00	
6	Helicobacter	pylori	Strain102860	Helicobacter pylori	1.71	61.00	0.00	
7	Helicobacter	pylori	Strain102865	Helicobacter pylori	1.47	51.88	0.00	
8	Helicobacter	pylori	Strain102863	Helicobacter pylori	1.34	47.29	0.00	
9	Campylobacter	ureolyticus	Strain101445	Campylobacter ureolyticus	1.15	40.59	0.00	
10	Halococcus	morruhae	Strain102817	Halococcus morruhae	1.09	38.47	0.00	

The 'Библиотека' (Library) panel on the right shows a taxonomic hierarchy: Bacteria, Kingdom Fungi, Domain Archaea, and Mycobacterium. The 'Библи.Данные' (Bibliography Data) panel at the bottom right is currently empty.

Добавление штаммов в базу данных

Добавление штаммов в базу данных Bruker biotyper

Получение
масс-спектров
24 точки
FLEX CONTROL



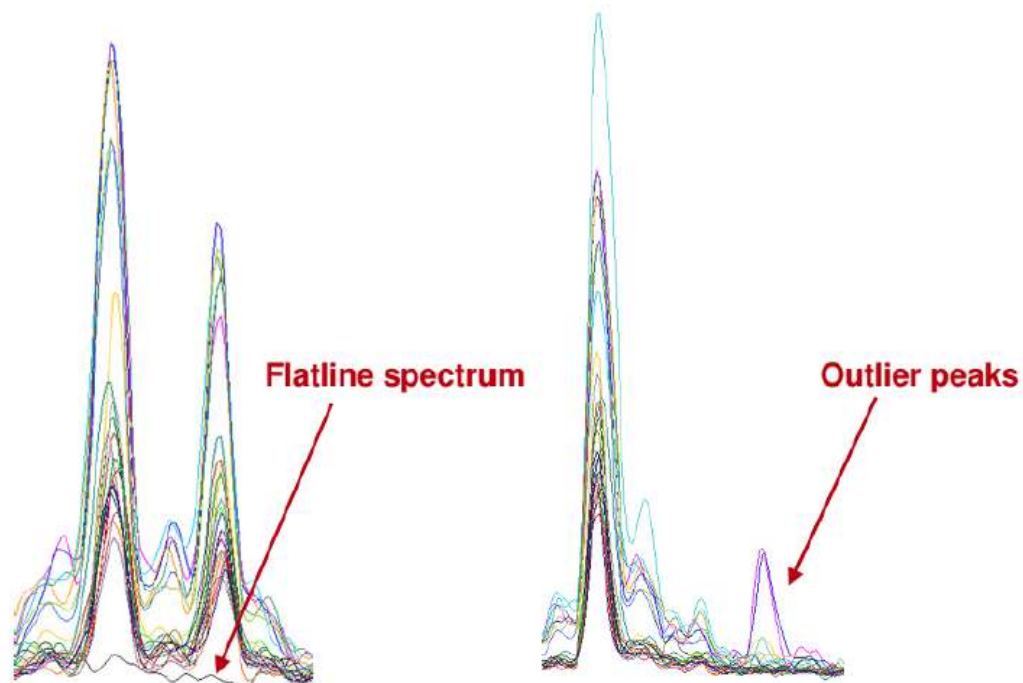
Первичная обработка
спектров, сглаживание,
вычитание базовой линии
FLEX ANALYSIS



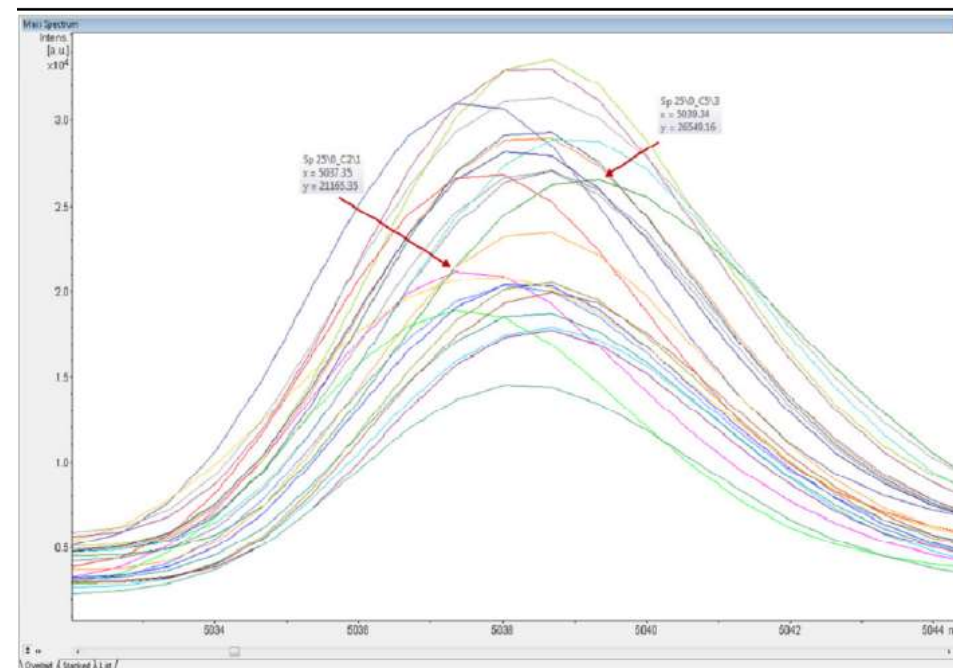
«Ручная»
визуализация –
контроль качества
спектров
FLEX ANALYSIS



Добавление
«отфильтрованных»
спектров в
COMPASS
EXPLORER,
создание записи и
добавление в БД



Теперь проверьте смещение пиков для каждой отдельной массы. Выделите пики от 3000 до 10 000 Да с шагом 1000 Да. Допустимое смещение пиков между спектрами для самой большой и самой маленькой масс не должно превышать 500 ppm.



Добавление штаммов в БД в программе Microbe analysis

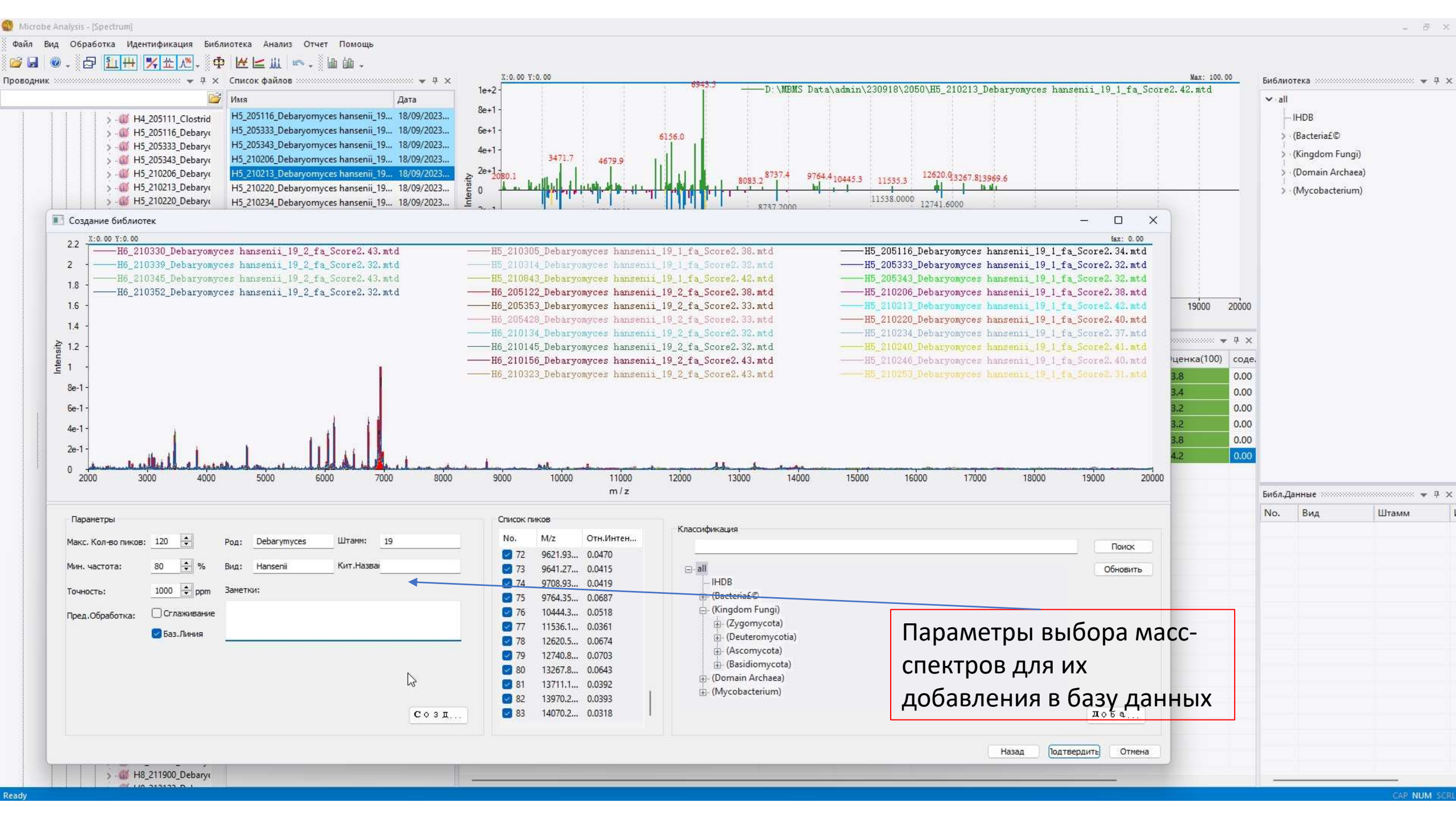
The screenshot displays the Microbe Analysis software interface, which is used for identifying microbial strains based on mass spectrometry data. The main window shows a mass spectrum plot with intensity on the y-axis (ranging from 0 to 1e+2) and m/z on the x-axis (ranging from 2000 to 20000). The plot shows several peaks, with the most prominent one at m/z 6156.0. Other labeled peaks include 3080.1, 5471.7, 4679.9, 8083.2, 8737.4, 9764.4, 10445.3, 11535.3, 12620.0, 15267.8, and 15649.6.

Below the main plot, there is a section titled "Создание библиотеки" (Library Creation) which displays a list of reference spectra files. The files are organized into two columns, each with a color-coded line representing the spectrum. The files are named with their respective m/z values and scores, such as "H6_210330_Debaryomyces_hansenii_19_2_fa_Score2.43.mtd".

At the bottom of the interface, there are two tables: "Доступные данные" (Available Data) and "Выбранные данные" (Selected Data). The "Доступные данные" table lists files with columns for No., Имя (Name), Размер (Size), and Дата (Date). The "Выбранные данные" table shows a list of files that have been selected for analysis, with columns for No., Имя, Размер, and Дата.

On the right side of the interface, there is a "Библиотека" (Library) panel showing a hierarchical view of the database. The library is organized into categories: all, IHDB, (Bacteria), (Kingdom Fungi), (Domain Archaea), and (Mycobacterium). Below this, there is a table with columns for "ценка(100)" (score) and "score", showing values for different files.

The interface also includes a "Проводник" (File Explorer) window at the top left, which shows a list of files in the current directory. The files are listed with their names and dates, such as "H4_205111_Clostrid", "H5_205116_Debary", "H5_205333_Debary", "H5_205343_Debary", "H5_210206_Debary", "H5_210213_Debary", "H5_210220_Debary", and "H5_210220_Debary".



Параметры выбора масс-спектров для их добавления в базу данных

Построение дендрограмм

Построение дендрограмм в ПО COMPASS EXPLORER (Bruker)

MALDI Biotyper Compass Explorer

File Edit Action Tools Help

Spectrum [D:\Data\BIOTYPER_LAB\2023\10\02\...] MSP

Spectrum Identification

Streptococcus salivarius 0807M25049501 IBS

1 ...1a\0_M9\1\1SLin
2 ...1g\0_M1\1\1SLin
3 ...2a\0_M10\1\1SLin
4 ...2g\0_M2\1\1SLin
5 ...3a\0_M11\1\1SLin
6 ...3g\0_M3\1\1SLin
7 ...4g\0_M4\1\1SLin
8 ...5g\0_M5\1\1SLin
9 ...6g\0_M6\1\1SLin
10 ...7g\0_M7\1\1SLin
11 ...8g\0_M8\1\1SLin

Bruker Taxonomy

- cellular organisms (0/9045)
- Unassigned MSPs (346/346)

Dendrogram

Edit View

Copy

MSP Dendrogram

Helicobacter pullorum CCUG 33839 CBB
Helicobacter cinaedi CCUG 18818T NVU
Helicobacter canis CIP 104753T CBB
Helicobacter pylori DSM 21031T DSM
Helicobacter pylori DSM 9691 DSM
Helicobacter pylori DSM 7492 DSM
Helicobacter pylori DSM 10242 DSM
Helicobacter pylori 151 RLT
Helicobacter pylori J99 PGM
Helicobacter pylori 26695_ce PGM

Distance Level

1000 900 800 700 600 500 400 300 200 100

Selected MSP (9459) | Current MSP | Spectrum Scores (10)

MSP Name	Creation Date
Helicobacter pullorum CCUG 33837T NVU	9/1/2008 7:54 AM
Helicobacter pullorum CCUG 33839 CBB	4/15/2010 11:51 AM
Helicobacter pullorum CCUG 33840 CBB	4/15/2010 11:51 AM
Helicobacter pullorum NCTC 13154 CBB	4/15/2010 11:43 AM
Helicobacter pullorum NCTC 13156 CBB	4/15/2010 11:52 AM
Helicobacter pullorum NCTC 13157 CBB	4/15/2010 11:52 AM
Helicobacter pylori 151 RLT	7/8/2010 11:23 AM
Helicobacter pylori 26695_ce PGM	11/8/2007 7:53 AM
Helicobacter pylori DSM 10242 DSM	3/30/2009 2:48 PM
Helicobacter pylori DSM 21031T.DSM	3/30/2009 11:00 AM
Helicobacter pylori DSM 7492 DSM	9/1/2009 5:41 AM
Helicobacter pylori DSM 9691 DSM	9/1/2009 5:41 AM
Helicobacter pylori J99 PGM	5/9/2007 10:02 AM
Herbaspirillum aquaticum DSM 21191T DSM	5/31/2012 12:19 PM
Herbaspirillum autotrophicum DSM 712 DSM	6/1/2012 11:41 AM

Построение дендрограмм в ПО Microbe analysis

Microbe Analysis - (Freeview)

Файл Вид Обработка Идентификация Библиотека Анализ Отчет Помощь

Проводник

Список файлов

Имя	Дата
A9_213920_Helicobacter pylori_270_1_Score2.09.mtd	
A9_215413_Helicobacter pylori_270_1_Score2.11.mtd	
A10_204626_Helicobacter pylori_270_2_Score2.22.mtd	
A10_211708_Helicobacter pylori_270_2_Score2.19.mtd	
A10_213928_Helicobacter pylori_270_2_Score2.18.mtd	
A10_215421_Helicobacter pylori_270_2_Score2.16.mtd	
A7_175550_Helicobacter pylori_364_2_1_Score1.59...	20/09/2
A9_211700_Helicobacter pylori_270_1_Score2.10...	20/09/2
A12_211725_Helicobacter pylori_272_2_Score2.13...	20/09/2
B1_215006_Helicobacter pylori_274_1_Score2.09.m...	20/09/2
A6_175527_Corynebacterium ciconiae_364_1_2_Sc...	20/09/2
B4_211324_Helicobacter pylori_279_2_Score1.99.m...	15/09/2

Библиотека

- all
 - ITDB
 - (Bacteria)
 - (Kingdom Fungi)
 - (Domain Archaea)
 - (Mycobacterium)

Топологический анализ

Идентификация

Имя	Оценка(3)
Strain300579 Helicobacter pylori	2.10
Strain102862 Helicobacter pylori	2.13
Strain102864 Helicobacter pylori	2.09
Strain102005 Corynebacterium cico...	1.59
Strain102865 Helicobacter pylori	1.99
Strain102865 Helicobacter pylori	2.03
Strain102865 Helicobacter pylori	2.17
Strain102865 Helicobacter pylori	2.19
Strain102859 Helicobacter pylori	2.18
Strain102859 Helicobacter pylori	2.09
Strain102865 Helicobacter pylori	2.03
Strain102865 Helicobacter pylori	2.09
Strain102865 Helicobacter pylori	2.01

Доступные данные

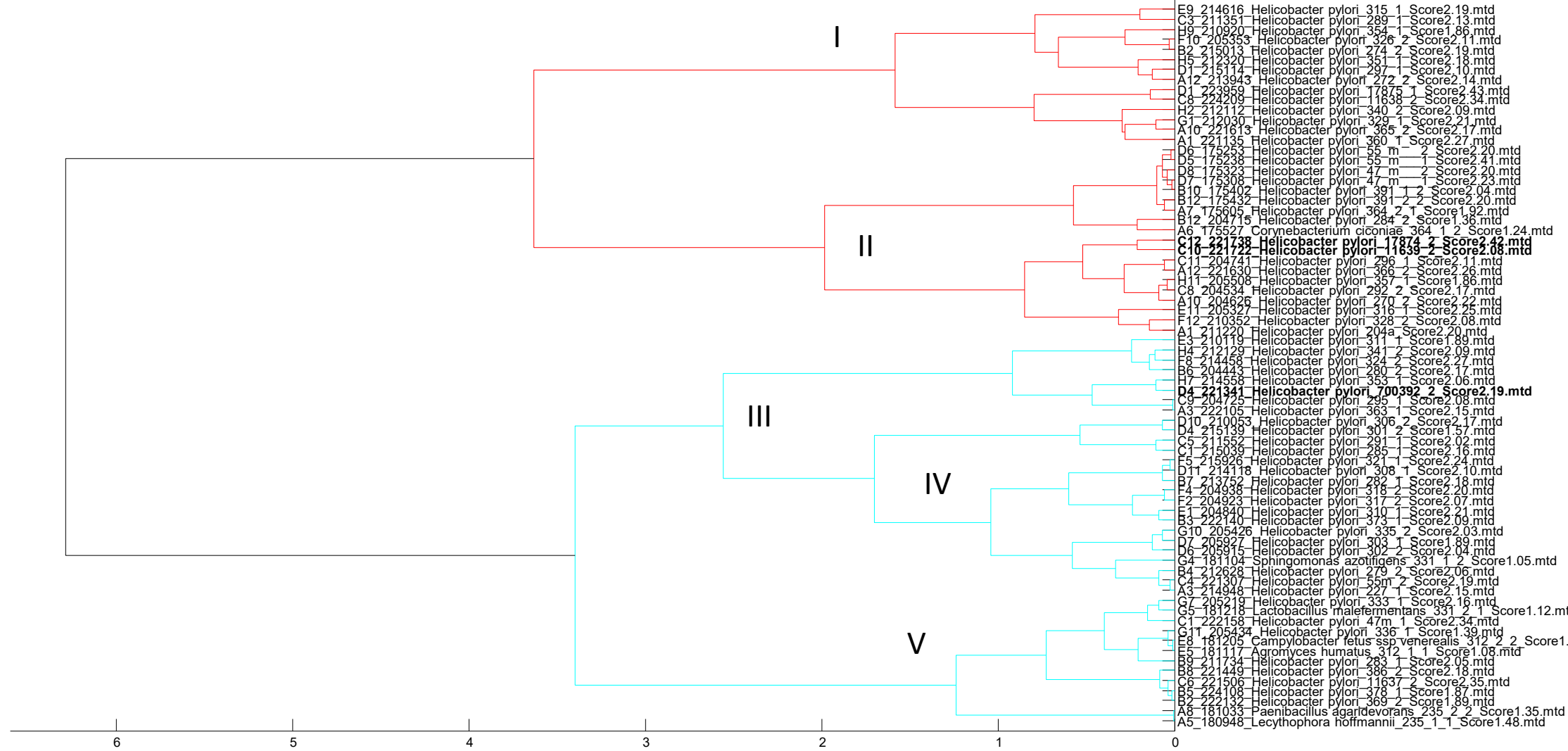
П Р О В О Д И Т Е

№	Имя	Размер	Дата
1	A7_175550_Helicobacter pylori_364_2_1_Score...	1,041 KB	20/09/2023 17:...
2	A9_211700_Helicobacter pylori_270_1_Score2...	1,041 KB	20/09/2023 16:...
3	A12_211725_Helicobacter pylori_272_2_Score...	1,041 KB	20/09/2023 16:...
4	B1_215006_Helicobacter pylori_274_1_Score2...	1,041 KB	20/09/2023 16:...
5	A6_175527_Corynebacterium ciconiae_364_1_...	1,041 KB	20/09/2023 17:...
6	B4_211324_Helicobacter pylori_279_2_Score1...	1,041 KB	15/09/2023 22:...

Выбранные данные

№	Имя	Размер	Дата
1	A1_211220_Helicobacter pylori_204a_Score2...	1,041 KB	20/09/2023 16:...
2	A1_221135_Helicobacter pylori_360_1_Score2...	1,041 KB	15/09/2023 22:...
3	A3_214948_Helicobacter pylori_227_1_Score2...	1,041 KB	20/09/2023 16:...
4	A3_222105_Helicobacter pylori_363_1_Score2...	1,041 KB	15/09/2023 22:...
5	A5_180948_Lecythophora hoffmanni_235_1_...	1,041 KB	20/09/2023 18:...
6	A6_175527_Corynebacterium ciconiae_364_1_...	1,041 KB	20/09/2023 17:...
7	A7_175605_Helicobacter pylori_364_2_1_Score...	1,041 KB	20/09/2023 17:...
8	A8_181913_Pantoea agasthanae_234_1_...	1,041 KB	20/09/2023 18:...

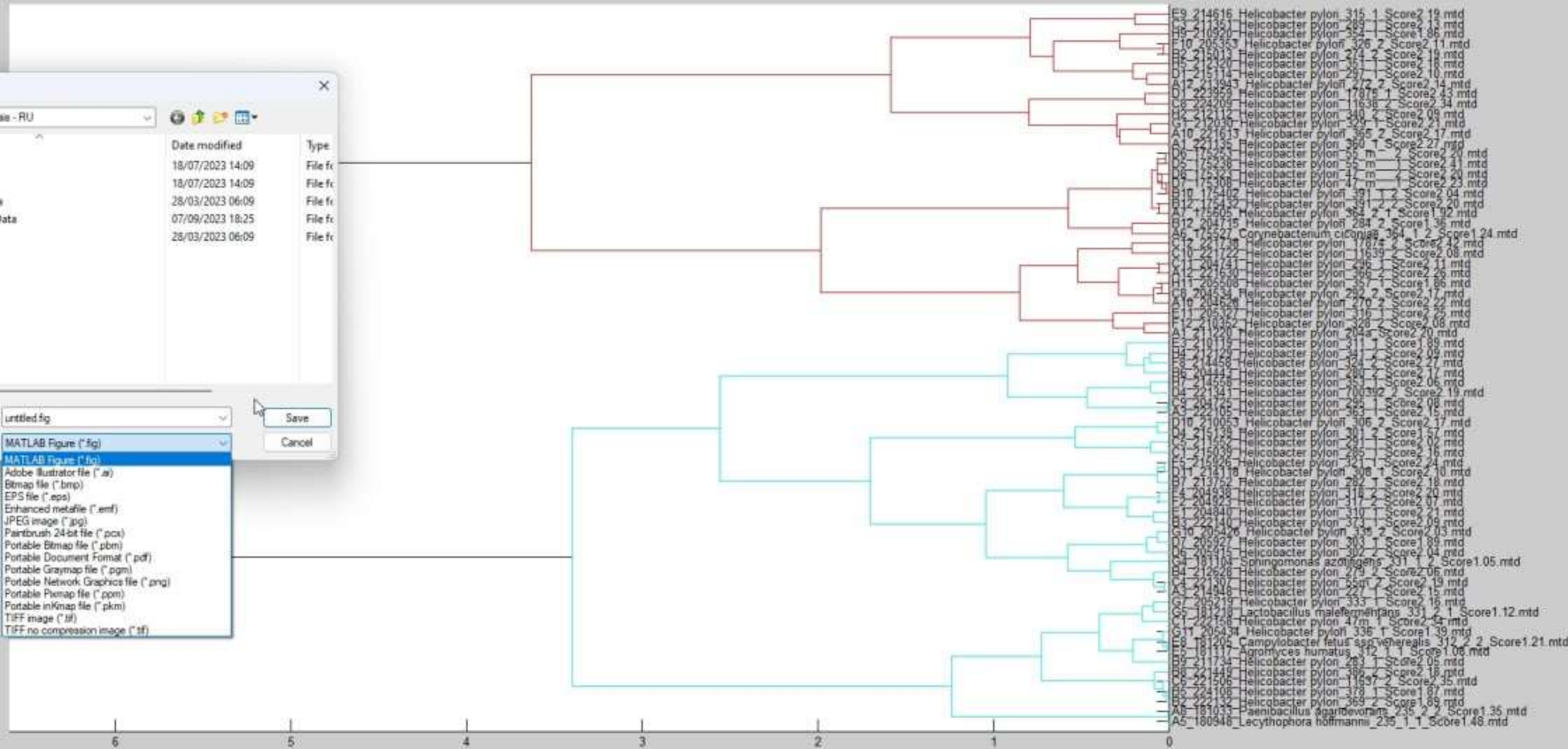
След. Отмена



Невозможно добавить штаммы из БД фирмы производителя



Save As dialog box showing file name 'untitled.fig' and save as type 'MATLAB Figure (*.fig)'. The 'Save as type' dropdown menu is open, listing various file formats such as Adobe Illustrator file (*.ai), Bitmap file (*.bmp), EPS file (*.eps), Enhanced metafile (*.emf), JPEG image (*.jpg), Paintbrush 24-bit file (*.pcx), Portable Bitmap file (*.pbm), Portable Document Format (*.pdf), Portable Graymap file (*.pgm), Portable Network Graphics file (*.png), Portable Pixmap file (*.ppm), Portable Inkmap file (*.pkm), TIFF image (*.tif), and TIFF no compression image (*.tiff).



Сравнение результатов идентификации 70 штаммов клинических изолятов *Helicobacter pylori* на приборах АЛМАСС-БИО (Альгимед) и Bruker Ultraflexreme

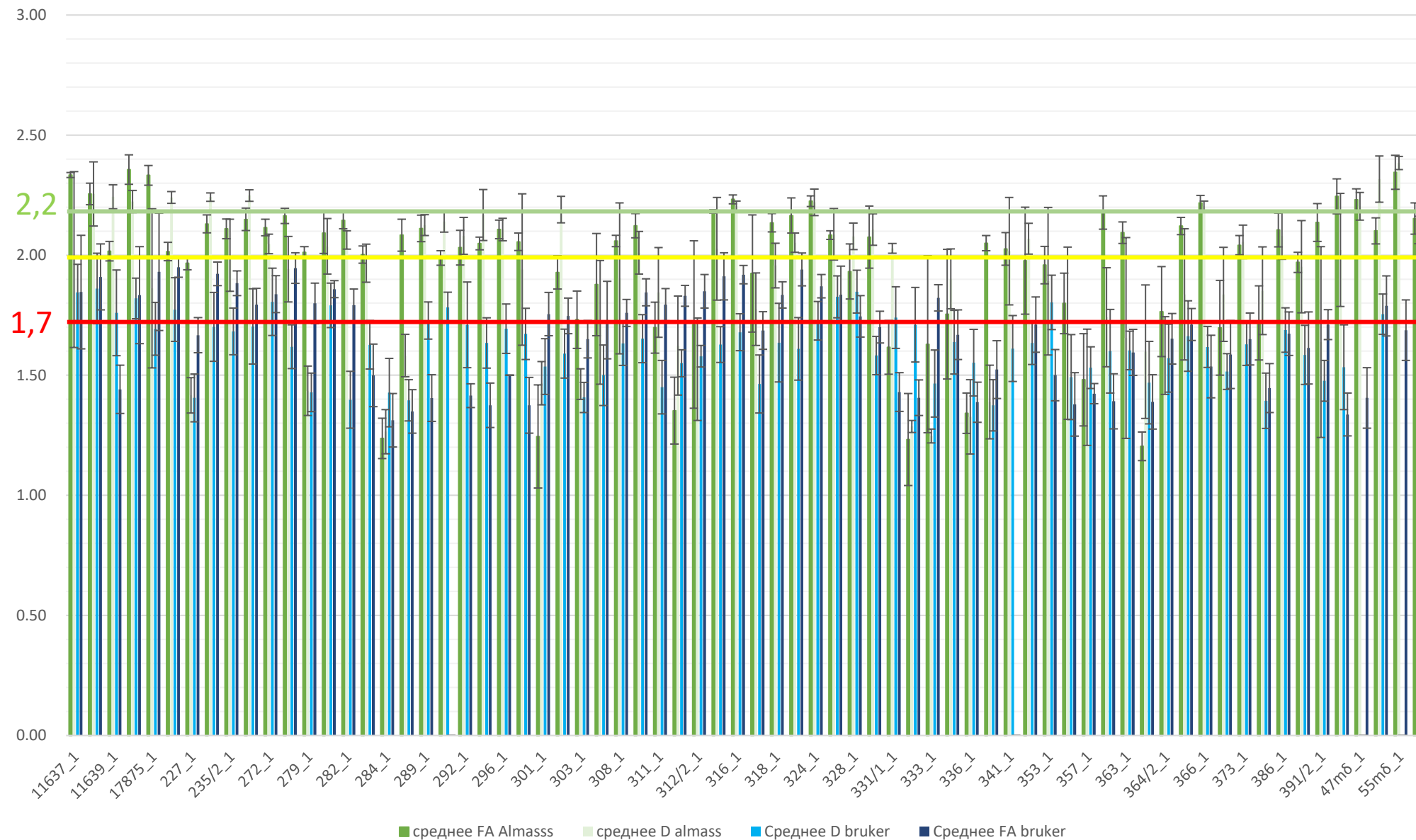
Колонии наносили на мишень прямым нанесением (расширенный протокол) в 5 биологических повторностях (отдельные колонии) и в 4 технических повторностях по протоколу с лизисом муравьиной кислотой. Далее проводили масс-спектрометрический анализ стандартными методами для типирования

Bruker 10833 записей
Helicobacter pylori DSM 7492 DSM
Helicobacter pylori DSM 9691 DSM
Helicobacter pylori DSM 21031T DSM
Helicobacter pylori DSM 10242 DSM
Helicobacter pylori 26695_ce PGM
Helicobacter pylori 151 RLT
Helicobacter pylori J99 PGM

АЛМАСС БИО 7148 записей
Helicobacter pylori Strain102862
Helicobacter pylori Strain102860
Helicobacter pylori Strain102865
Helicobacter pylori Strain102864
Helicobacter pylori Strain102861
Helicobacter pylori Strain102863
Helicobacter pylori Strain300579
Helicobacter pylori Strain102859



Идентификация клинических изолятов бактерии *Helicobacter pylori* на масс-спектрометрах АЛМАСС
БИО и Bruker Ultraflexreme



Сравнение результатов идентификации 70 штаммов клинических изолятов *Helicobacter pylori* на приборах АЛМАСС-БИО (Альгимед) и Bruker Ultraflexxtreme

	Score >2.0			Score >1.7	
	АЛМАСС БИО 200	Bruker Ultraflexxtreme		АЛМАСС БИО 200	Bruker Ultraflexxtreme
прямое нанесение	44 из 70 (62.8%)	0 из 70 (nd)		прямое нанесение	47 из 70 (67.1%)
ФА метод	43 из 70 (61.4%)	3 из 70 (4.3%)		ФА метод	61 из 70 (87.1%)



Порционная матрица,
Растворитель для матрицы

Стандарт

Выводы

- 1) Проведено сравнение наполнения базы данных штаммов программно-аппаратных комплексов АЛМАСС БИО 200 (Альгимед Россия) и MALDI biotyper (Bruker, Германия). Определено, что общих видов в БД 1831, уникальных видов в БД MALDI biotyper 3921 в БД АЛМАСС БИО 643.
- 2) Проведено сравнение интерфейса и возможностей программ управления и идентификации приборов АЛМАСС БИО 200 и Bruker Ultraflex/Microflex в плане удобства работы, освоения программного обеспечения и функциональности.
- 3) Проведено сравнение результатов идентификации 70 штаммов клинических изолятов *Helicobacter pylori* на данных приборах. На приборе АЛМАСС БИО идентифицировано до вида 44 из 70 (62.8%) исследуемых штаммов, до рода 61 из 70 (87.1%); на приборе Bruker Ultraflex до вида определено 3 из 70 (4.3%) штаммов, до рода 31 из 70 (44.2%).

Пожелания для прибора АЛМАСС био 200

- 1) Сделать базу данных «открытой», чтобы была предоставлена информация о штаммах, как это реализовано у компании Bruker
- 2) Добавить в MICROBE ANALYST возможность добавления штаммов из базы данных для построения деревьев по масс-спектрам. Это нужно, в частности, для определения расстояния на дереве между видами
- 3) Добавить возможность экспорта дерева в формат newick – это универсальный формат для построения деревьев, его используют множество сторонних программ для визуализации деревьев.

БЛАГОДАРНОСТИ

Жуховицкому Владимиру Григорьевичу - зав. лабораторией индикации и ультраструктурного анализа микроорганизмов

Фролову Илье Станиславовичу

Насибуллиной Аделии Фанзелевне

Панурину Никите Александровичу

Поляковой Александре Никитичне

Дмитриевой Марине



Сотрудники фирмы Альгимед

Спасибо за внимание!