



# Biacore™ Simul8

## SPR sensorgram simulation tool

### 簡易マニュアル



June 2023, document version 2.0

# おことわり

本資料はCytiva公式資料ではありません。

そのため、内容の一部に誤りや正確でない表現が入ること、あるいはソフトウェアの仕様変更や時代の流れに伴うアップデートが  
起こり得ることなどをご了承ください。

また、理解のために本来の業界で使用される表現とは異なるご説明を加えている可能性があります。

本資料は二次配布を固く禁じます。

またこの資料を用いることで生じるトラブルなどについては責任を負いかねますので最終的にはご利用のみなさまご自身にて  
問題がないことをご検証いただきますよう強くお願い申し上げます。

# Agenda

1. 基本的な使用方法
2. どんな時に使うと良いのか？

# 1

## 基本的な使用方法

# Biacore™ Simul8（シミュレート）について

本ツールは、webブラウザ上で運用可能なSPRセンサーグラムシミュレーションツールです。

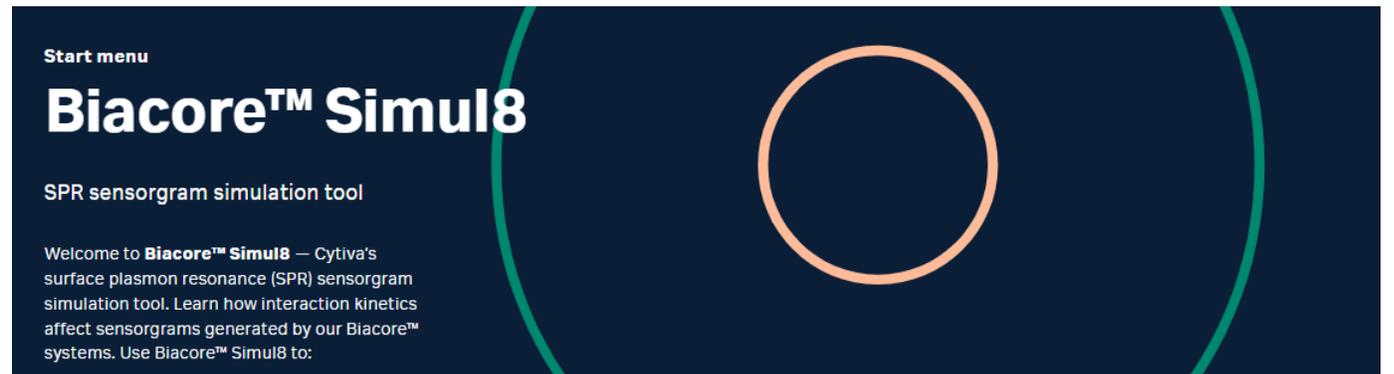
非常に柔軟なパラメータの設定が可能で、既に2021年から公開していましたが、2023年の今、機能がアップデートされました。

このツールは以下のような場合に役立ちます。

- アッセイパラメータを最適化に
- 解離定数や反応速度定数の検証に
- 全ての光学的バイオセンサーで取得された論文データの検証に

本ツールは以下のwebページからどなたでも無料でご利用いただけます。

<https://apps.cytivalifesciences.com/spr/>



# 画面構成

設定の変更

Basic Settings

**Kinetics**  
Multi-cycle

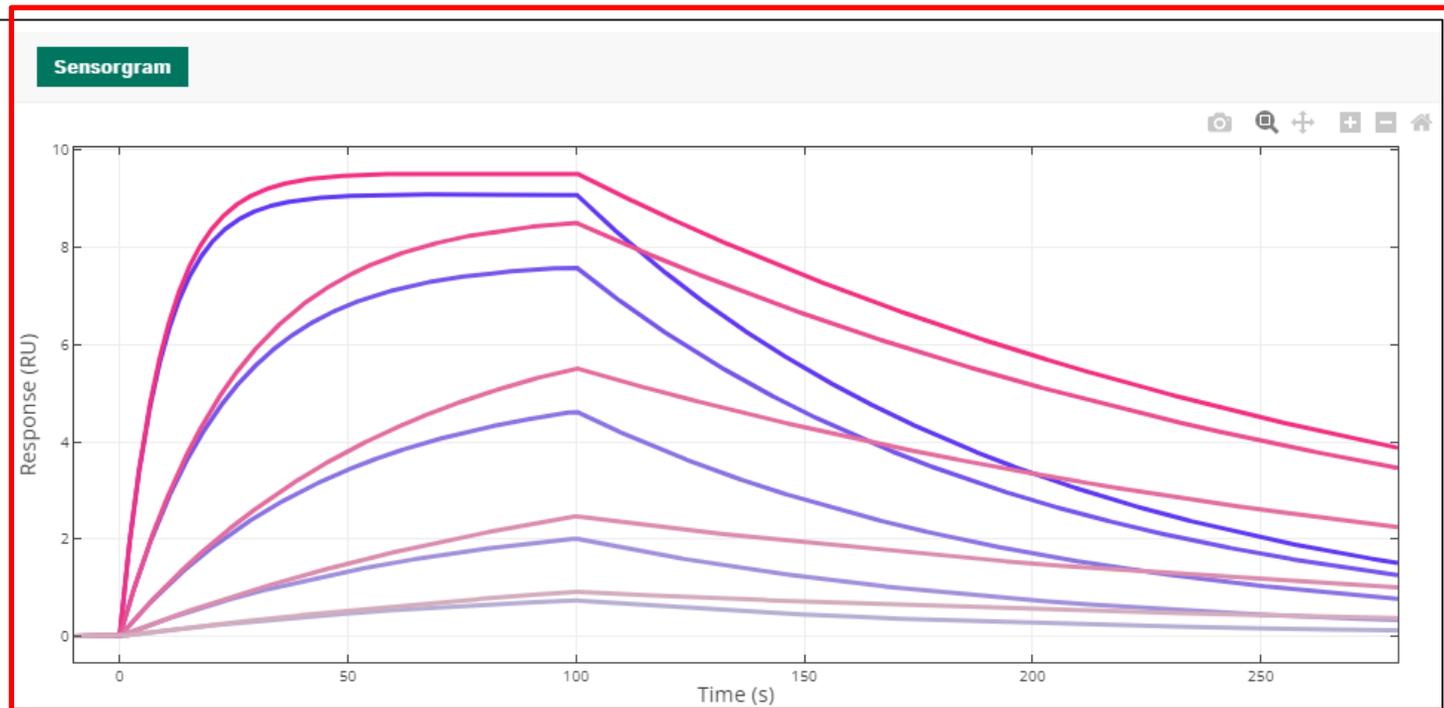
**Model**  
1:1

**Contact time**  
100 Seconds

**Dissociation time**  
180 Seconds

**Baseline time**  
10 Seconds

センサーグラムの表示や画面の変更 (マウスオーバーも可能)



Sample A

Sample B

$k_a$ (1/Ms)	$k_d$ (1/s)	Highest concentration (nM)	$R_{max}$ (RU)	Concentrations per sample series	Dilution factor
1e+7	5e-3	10	10	5	3

+ Add row   Simulate    Auto simulate

パラメータの変更

# Basic

**Basic** Settings

**Kinetics**

Multi-cycle

**Model**

1:1

**Contact time**

— 100 Seconds +

**Dissociation time**

— 180 Seconds +

**Baseline time**

— 10 Seconds +

Multi cycleかSingle cycleを選択

1:1 / Heterogeneous ligand / Bivalent analyte / Two state reaction のモデルから選択

アナライトの添加時間

アナライトの解離時間  
Single cycleの場合は最後の添加からの解離時間

アナライトが添加され始めるまでの時間設定

# Settings

Basic **Settings**

**Concentration unit**

Molar

Millimolar

Micromolar

Nanomolar

**Language**

English 

**Advanced mode**

アナライタの濃度単位設定

(選択できません) Englishのみ対応

# Advanced mode

**Advanced mode**

**Data collection rate**  
— 10 Hz +  
秒間のデータプロット数  
1-40 Hzの間で設定

**Noise**  
0 RU  
理論曲線からの乖離幅  
0-1の間で設定

**Baseline drift**  
0 RU/s  
ドリフトしたセンサーグラムの  
表現

**Bulk shift**  
— 100 RU +  
バルクの大きさの設定



線のように見えるセンサーグラムも、実はプロットの集合体です。10Hzとは、1秒間に10点のプロットデータを取得しているという意味になります。プロット数が増えるほどセンサーグラム形状は滑らかになり、kinetics解析に向きます。実際のBiacoreでは大体10Hzです。



このNoiseは毎秒ランダムな方向に作成されます。  
(参考) 装置別Short term noise

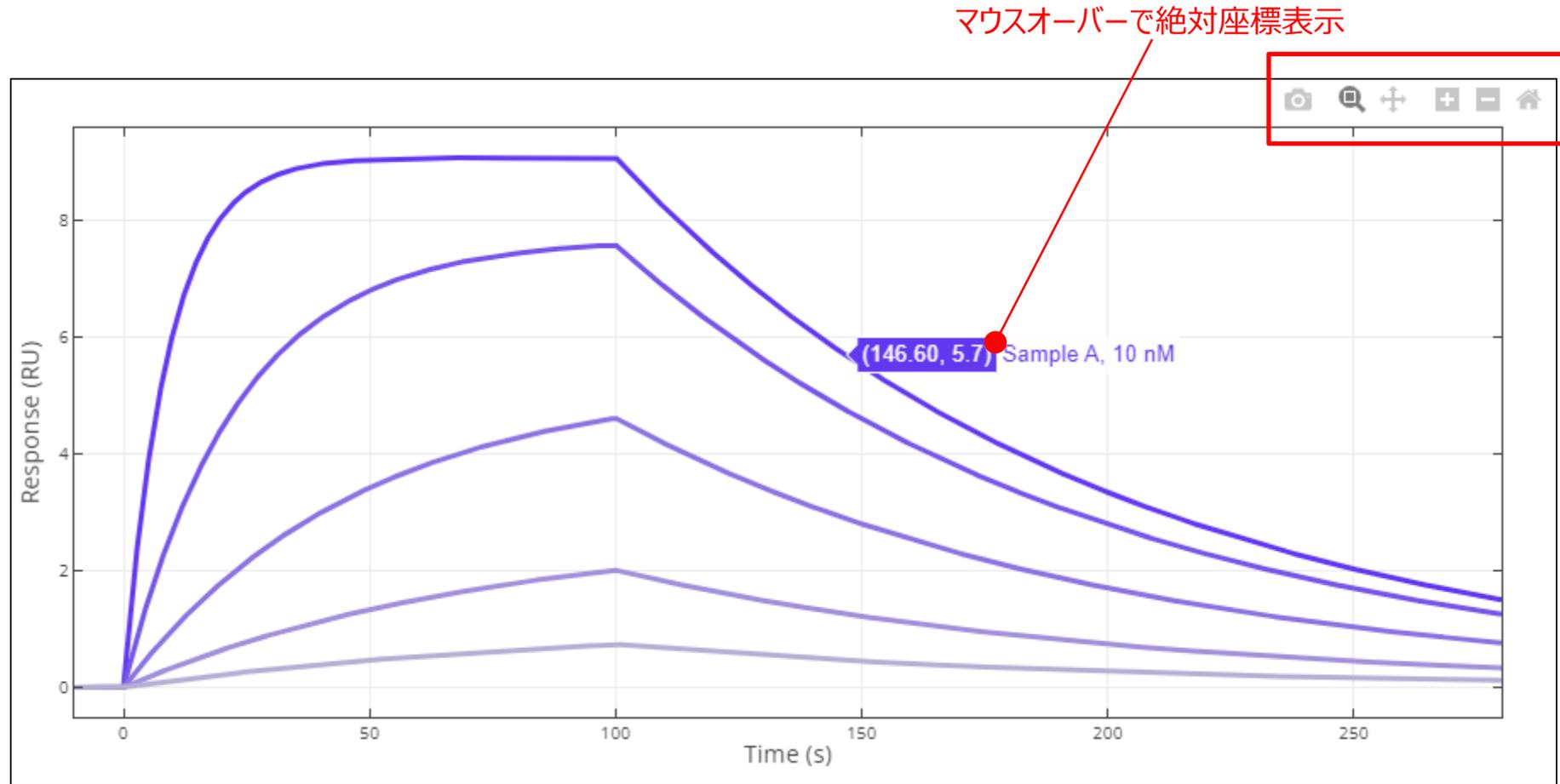
- Biacore 1S+ 0.01 RU (RMS)
- Biacore S200 0.015 RU (RMS)
- Biacore 8 series 0.02 RU (RMS)
- Biacore 1K/1K+/T200 0.03 RU (RMS)
- Biacore X100(PP) 0.1 RU (RMS)

※ここでのRMS(Root Mean Square)を解説するなら、実測データの各プロットにおける理論曲線からの距離の平均値です。したがって表記の数値をそのまま入れ込めばおおよそ該当の装置で得られるセンサーグラムに近いと言えます。

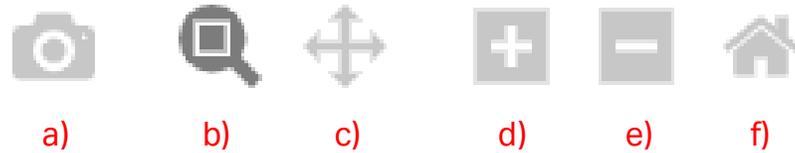


(参考) 装置別Baseline drift  
Biacore 8 series/1 series/T200/S200 /X100(PP)  
→全て < ±0.005 RU/sec

# ワーキングスペース（センサーグラムが映る領域）の操作



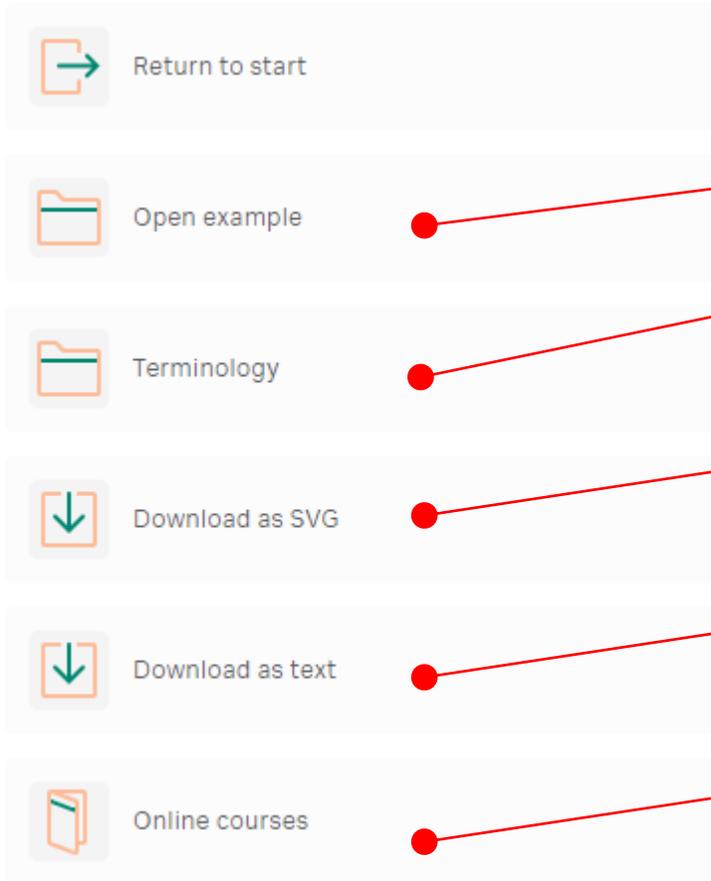
# アイコンの説明



- a) ワーキングスペースのスナップショットを撮る機能ですが、現在うまく稼働していないようです。
- b) Zoomボタンです（デフォルトで選択済み）。ワーキングスペース上でドラッグすることで拡大可能です。
- c) Pan（画面移動）ボタンです。クリック後、ワーキングスペースでドラッグすることで写したい画面の範囲を選択可能です。なお、X軸、Y軸の適当な位置にマウスオーバーした際に⇄に変化しますが、この状態でも似たような移動が可能です。
- d) Zoom inボタンです。現在のワーキングスペースの中央に向けてズームインします。
- e) Zoom outボタンです。現在のワーキングスペースの中央からズームアウトします。
- f) Reset axesボタンです。ズームなどを繰り返したのち、一番初めの画面拡大倍率に戻すときに使用します。なお、この機能はワーキングスペース上で左ダブルクリックした場合でも同様です。

# MENU

※画面右上の三本リーダーから



$k_a$ や $k_d$ を一定にした時の影響を検証するためのいくつかのデータがプリセット

Biacore専門用語についての解説

SVG形式でワーキングスペースの画像をダウンロード可能  
snapshotのツールの代わりとしてご利用いただけます

text形式でワーキングスペース画像のXY座標情報をダウンロード可能  
Excelで区切り文字をセミコロン(;)として開くとセンサーグラムの再描画が可能

本社のオンライン学習サイトへのリンク  
(一部日本語資料もございます)

# アナライツ情報のタブ

展開

パラメータの詳細変更  
(次スライド)

<input checked="" type="checkbox"/>	Sample A						
<input checked="" type="checkbox"/>		$k_a$ (1/Ms)	$k_d$ (1/s)	Highest concentration (nM)	$R_{max}$ (RU)	Concentrations per sample series	Dilution factor
		1e+7	1e-2	10	10	5	3

+ Add row

Simulate

Auto simulate

シミュレートするアナライツの数を増やす

シミュレートしたアナライツのセンサーグラムをワーキングスペースに反映させる  
デフォルトではAuto simulateにチェックが入っているのでAdd rowで追加したアナライツは即時反映される

# アナライトの詳細設定

## Edit

Description  
Sample A

$k_a$   
1e+7 1/Ms

$k_d$   
1e-2 1/s

Highest concentration  
10 nM

Concentrations per sample series  
5

Dilution factor  
3

Input  $R_{max}$   Calc  $R_{max}$

$R_{max}$   
10 RU

アナライト名

$R_{max}$ の入力

## Calc $R_{max}$ を使った一例

Input  $R_{max}$   Calc  $R_{max}$

### Equation

$$R_{max} = (MW_A / MW_L) \times R_L \times S_m$$

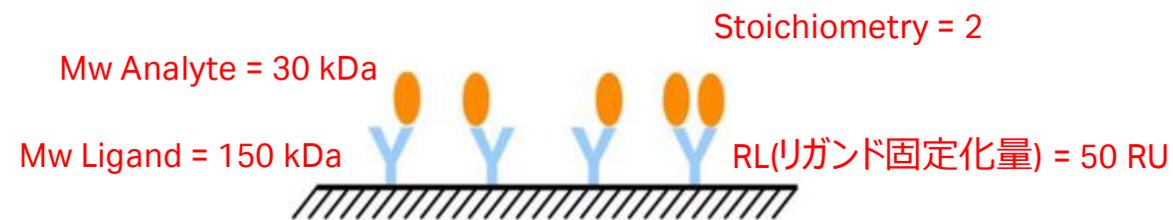
Mw analyte  
30000

Mw ligand  
150000

RL  
50

Stoichiometry  
2

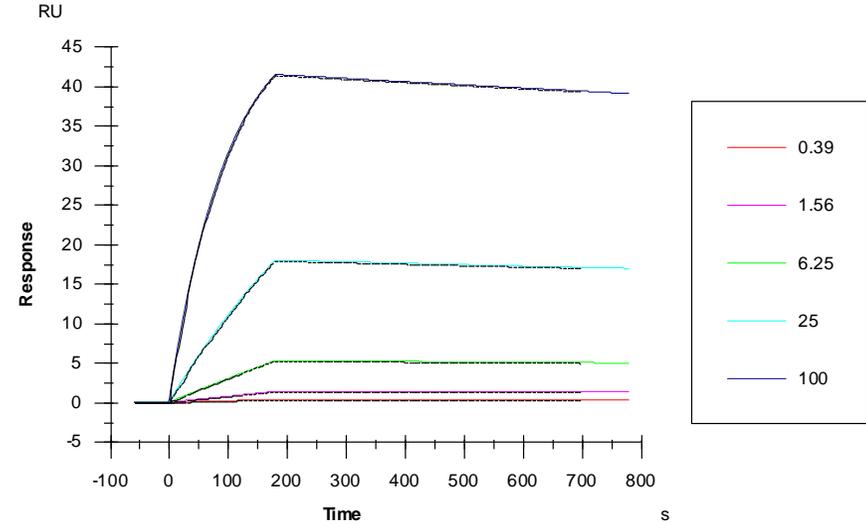
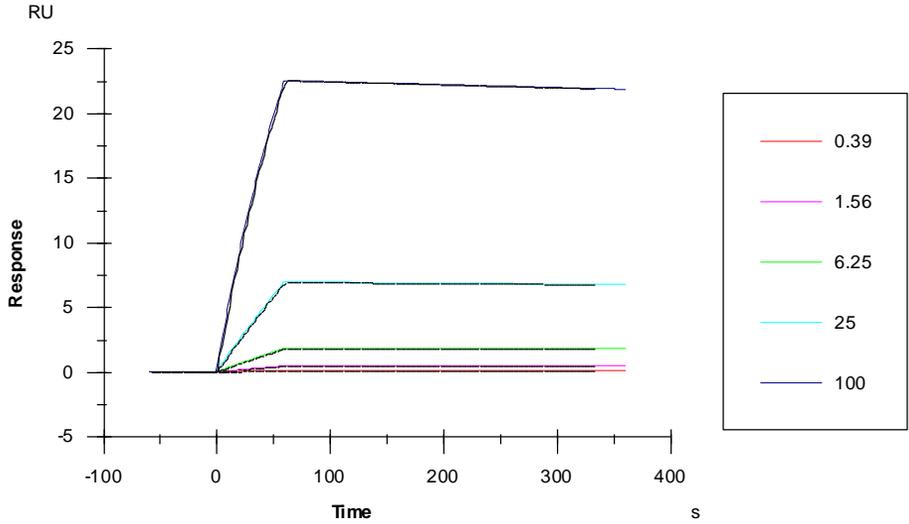
Rmax: 20



# 2

どんな時に使うと良いのか？

# 適切な添加時間、解離時間の指標とする



Contact time = 60sec

Dissociation time = 300sec

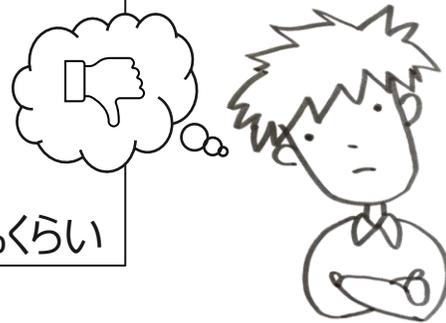
$k_a = 1.52e5$

$k_d = 1.2e-4$

$K_D = 0.78 \text{ nM}$

$R_{max} = 42 \text{ RU}$

各パラメータのSE値：ギリギリ10%くらい



Contact time = 180sec

Dissociation time = 600sec

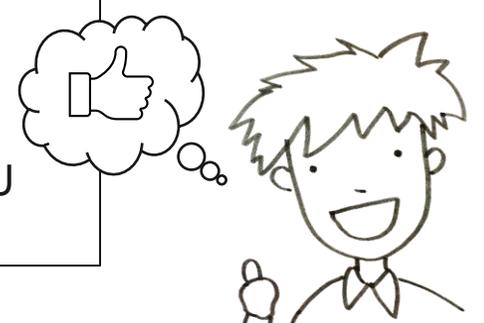
$k_a = 1.0e5$

$k_d = 1.0e-4$

$K_D = 1 \text{ nM}$

$R_{max} = 50 \text{ RU}$

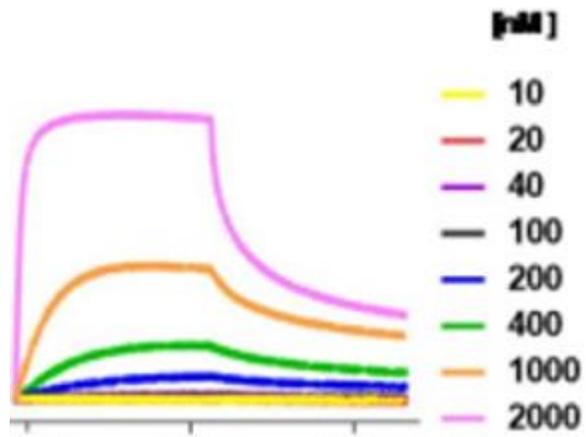
各パラメータのSE値：10%以下



結合相では最高濃度でRmaxに近く平衡状態に達しそうなデータが得られていると良く、  
解離相は5-10%程度解離が見えていると良い

# Paperで記載されているパラメータを入力してみる

Data from paper

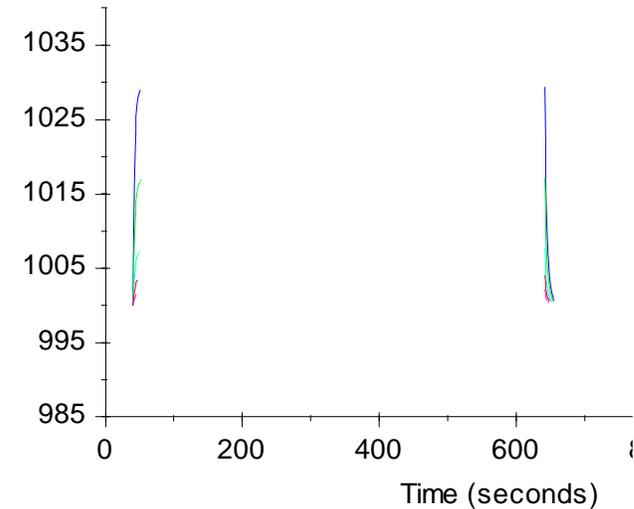


Reported

$$k_a = 5.82 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$k_d = 0.28 \text{ s}^{-1}$$

Simulated



Paperで報告されている値が本当に正しいか不安な時はシミュレーションしてみると良い



**Thank you**



## 【お問合せ先】

グローバルライフサイエンステクノロジーズジャパン株式会社

バイオダイレクトライン 内線 # 2をご選択ください

TEL: 03-5331-9336 / FAX: 03-5331-9370

e-mail: Tech-JP@cytiva.com

[www.cytivalifesciences.co.jp](http://www.cytivalifesciences.co.jp)

Cytiva and the Drop logo are trademarks of Life Sciences IP Holdings Corporation or an affiliate.  
Biacore is a trademark of Global Life Sciences Solutions USA LLC or an affiliate doing business as Cytiva.

Any use of software may be subject to one or more end user license agreements, a copy of, or notice of which, are available on request.

© 2022 Cytiva

本資料の使用については、お客様施設内での使用に限ります。他社への転送、譲渡等は禁じます。本資料の著作権その他の知的財産権は、グローバルライフサイエンステクノロジーズジャパン株式会社に帰属します。無断転載、無断コピー、改ざん、二次利用を禁じます。

掲載されている価格は2023年4月現在の希望小売価格です（消費税は含まれておりません）。希望小売価格は単なる参考価格であり、弊社販売代理店が自主的に設定する販売価格を何ら拘束するものではありません。掲載されている製品は試験研究用以外には使用しないでください。掲載されている内容は予告なく変更される場合がありますのであらかじめご了承ください。掲載されている社名や製品名は、各社の商標または登録商標です。お問合せに際してお客さまよりいただいた情報は、お客さまへの回答、弊社サービスの向上、弊社からのご連絡のために利用させていただく場合があります。

弊社は、資料の掲載内容の正確性を記すべく、情報を随時更新しておりますが全ての情報が最新であることを保証するものではありません。

したがって、当資料上の掲載内容に誤りがあった場合でも弊社は責任を負いかねます。