

# Interpretación automatizada. Espectros teóricos

1 - Dado el conocimiento previo sobre:

- Secuencias en BBDD de proteínas
- Probabilidad de que cada tipo de ión se encuentre en un espectro MS/MS:

iones <b>b</b> : 100%	iones <b>b</b> , <b>y</b> + 2H : 50%
iones <b>a</b> : 20%	iones <b>b</b> , <b>y</b> -NH <sub>3</sub> : 20%
iones <b>y</b> : 100%	iones <b>b</b> , <b>y</b> -H <sub>2</sub> O : 20%

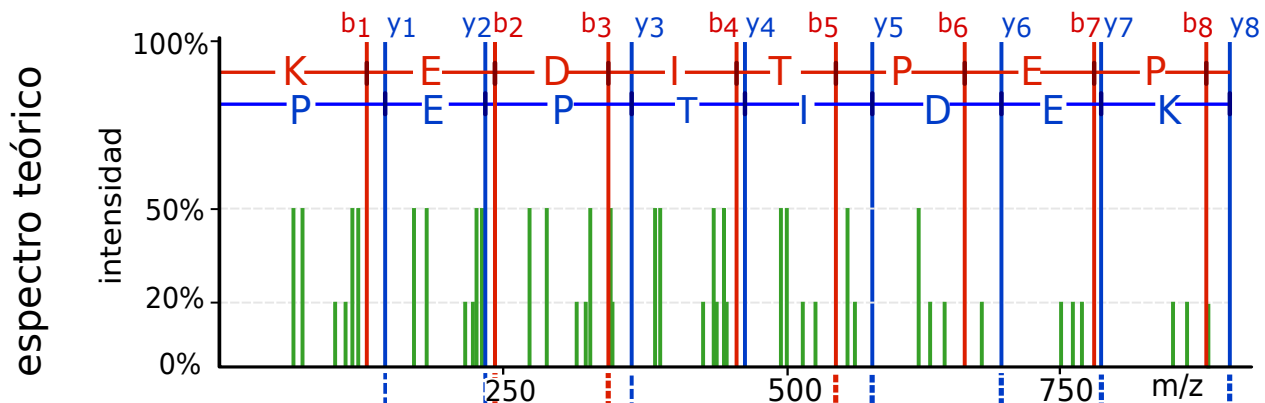
2 - Se puede crear un espectro teórico para una lista de péptidos candidatos elaborada conociendo:

- Enzima proteolítica utilizada
- Rango de tolerancia de masas
- etc

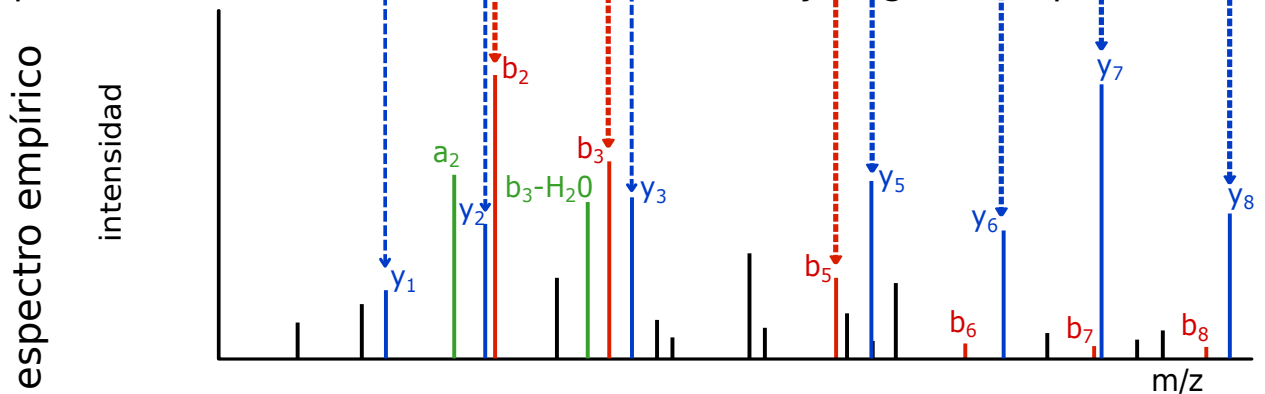
Para cada espectro empírico:

$$\{c \in P : |M_{\text{teórica}} - M_{\text{empírica}}| < \text{Tol}\}$$

**c**: péptido candidato    **P**: péptidos (trípticos) en BD  
**PEPTIDEK**    **Tol**: tolerancia



3 - Y para cada uno de los espectros teóricos obtenidos comparar con el espectro empírico, obtener todos los iones coincidentes y asignar una puntuación



4 - Por último, en base a la puntuación, que indica el grado de similitud, se puede concluir si el espectro empírico corresponde o no al péptido PEPTIDEK