

Interpretación automática usando espectros teóricos. Principios básicos

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

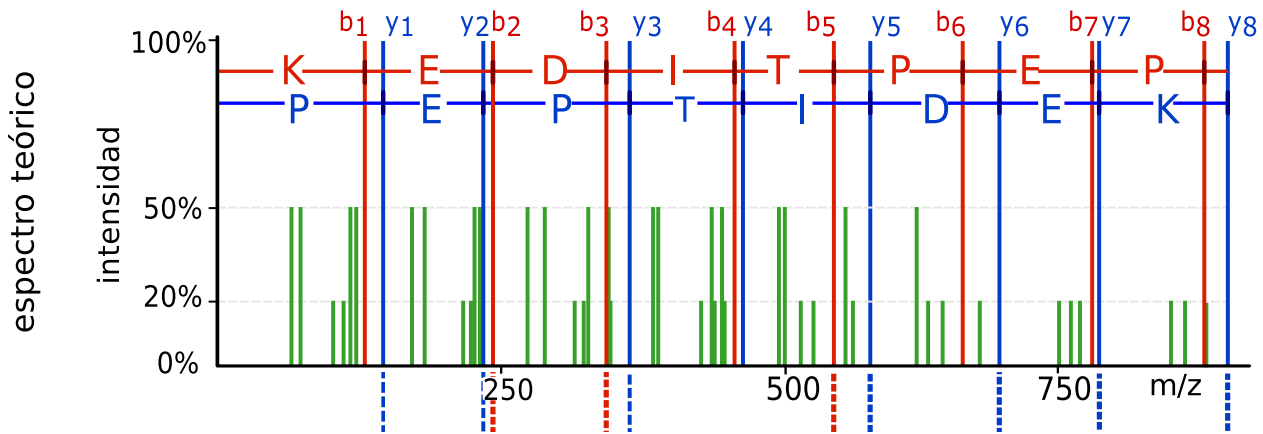
2 - Se puede crear un espectro teórico para una lista de péptidos candidatos elaborada conociendo:

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

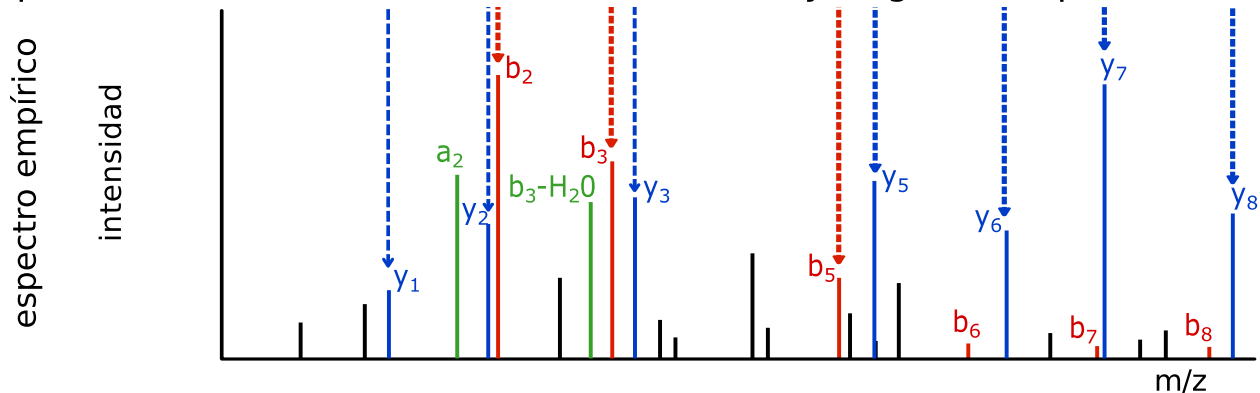
Para cada espectro empírico:

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

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, se puede obtener una lista de los mejores péptidos candidatos que posiblemente han originado el espectro