

espectro teórico intensidad 50%

b3 y3

Interpretación automática usando espectros teóricos. Principios básicos

lones **b** : 100%

Iones **a** : 20%

Iones y: 100%

PEPTIDEK

b4 y4 b5 y5 b6 y6

Para cada espectro empírico:

{c∈P: |Mteórica - Mempírica | < Tol}

c: péptido candidato P: péptidos (trípticos) en BD

Tol: tolerancia

b7 y7

lones **b**, v + 2H : 50%

Iones **b**, **y** -NH₃ : 20%

lones b, y -H₂O: 20%

1 - Dado el conocimiento previo sobre:

·Probabilidad de que cada tipo de ión

se encuentre en un espectro MS/MS:

2 - Se puede crear un espectro teórico

para una lista de péptidos candidatos

y2b2

elaborada conociendo:

100%

· etc

· Enzima proteolítica utilizada

· Rango de tolerancia de masas

·Secuencias en BBDD de proteínas