

Aufgaben zur Strukturaufklärung

Sommersemester 2017

Marcus Ludwig

20. Juli 2017

Analysieren sie den Datensatz CASMI 2017 mittels GNPS und Sirius. Als Voraussetzung, erstellen Sie sich einen Account bei GNPS (<https://gnps.ucsd.edu/>) und laden Sie Sirius herunter: <https://bio.informatik.uni-jena.de/software/sirius/>

GNPS:

- Starten Sie eine Datenanalyse mit GNPS.
- Setzen Sie als Parameter “Search Analogs: Don’t Search” und “Filter peaks in 50Da Window: Don’t Filter”. Außerdem “Minimum Cluster Size = 1” und “Run MSCluster: No”

Sirius:

- Verwenden Sie nur Elemente, die Sie in Mensch oder Pflanzen erwarten.
- Betrachten Sie alle üblichen Ionisierungen.

Fragen:

- Was sind die GNPS Treffer mit cosine score ≥ 0.90 ?
- Wie sicher enthält challenge 20 eine Hydroxy-Gruppe (für die beste Summenformel). Wie sicher ist es ein Keton?
- Was ist die beste Struktur für challenge 2 die in HMDB enthalten ist?
- Challenge 19: Diese Compound wurde aus menschlichen Körperflüssigkeiten gewonnen. Ergibt die beste gefundene Struktur Sinn? Warum?
- Was ist jeweils die beste Summenformel-Erklärung für challenge 12 und 35, wenn Sie den Tree-score, Tree+Isotope-score oder die beste Struktur betrachten?