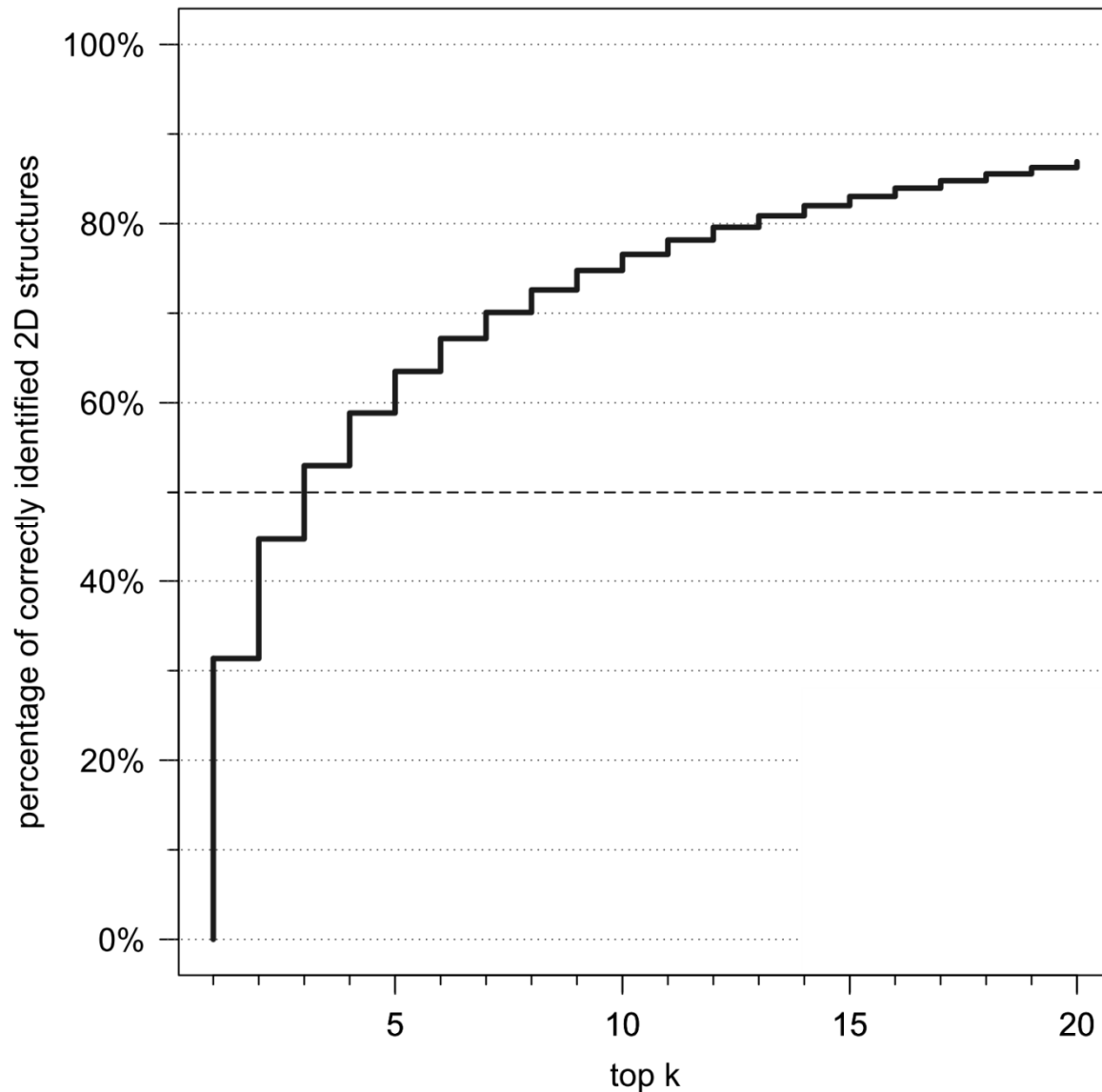
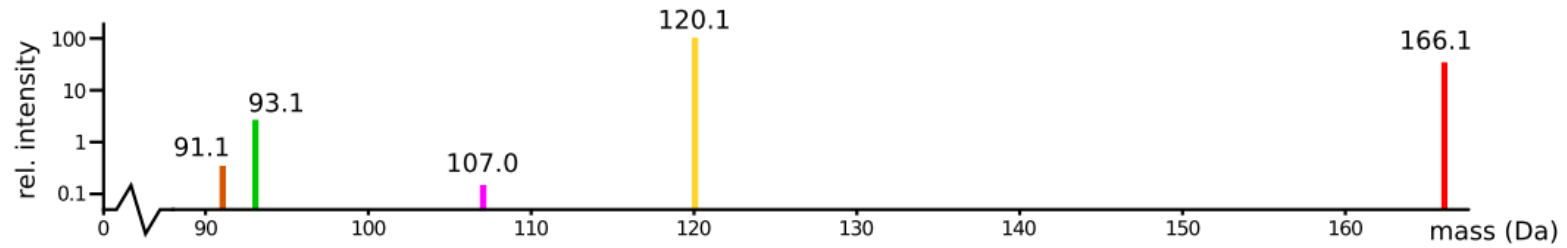


Summenformeln und Strukturen

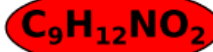


- angenommen, ich kenne die Summenformel eines unbekanntem Metaboliten
- hilft mir das, um seine Struktur zu bestimmen?
- Suche in einer Datenbank von Strukturen von "Biomolekülen" (aus PubChem gefiltert) mit ca. 200000 Strukturen
- wenn mehr als ein Kandidat die richtige Summenformel hat, ziehen wir zufällig die Reihenfolge

Fragmentierungsgraph: Knoten



Peak: 166.1 Da



Peak: 120.1 Da



Peak: 107.0 Da

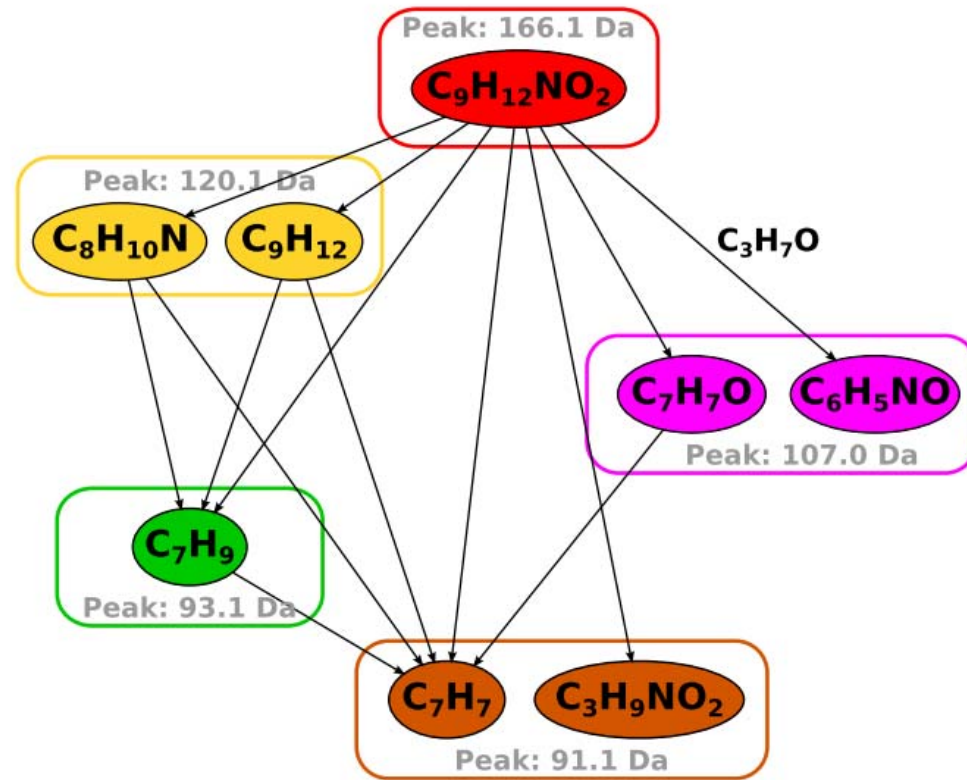
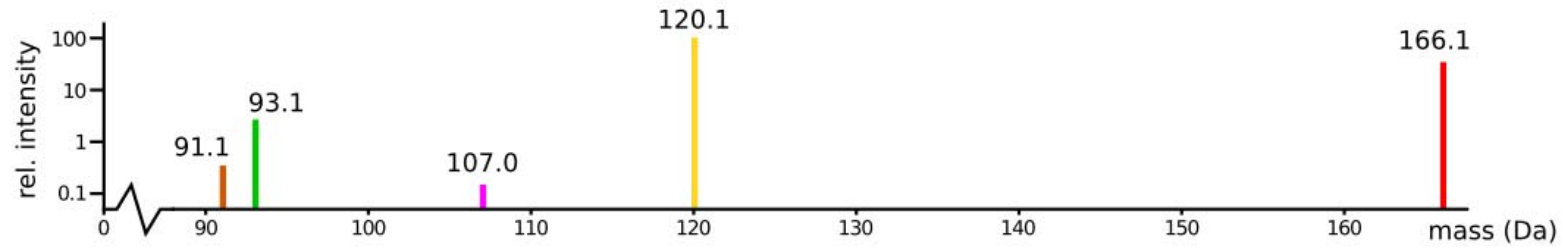


Peak: 93.1 Da

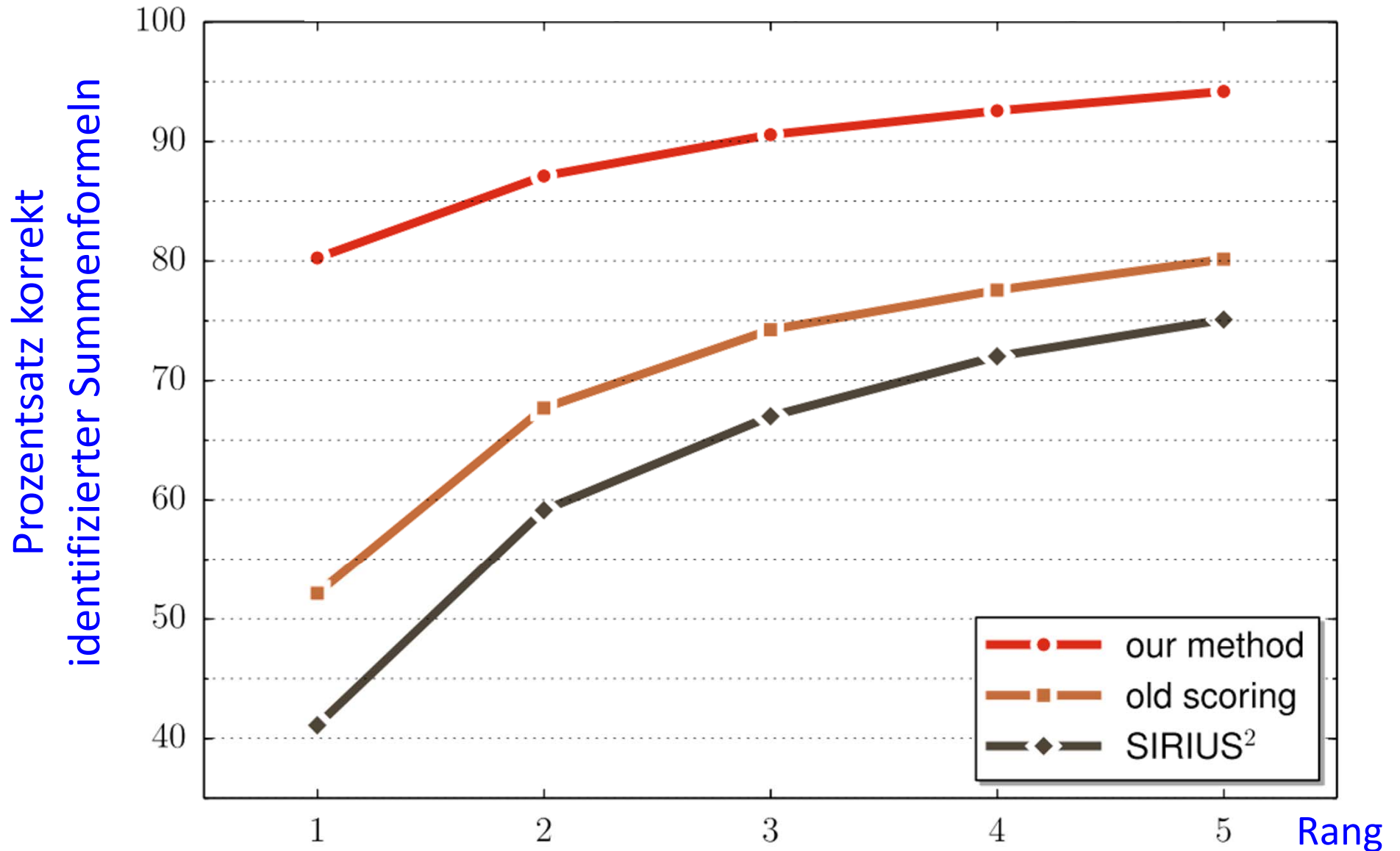


Peak: 91.1 Da

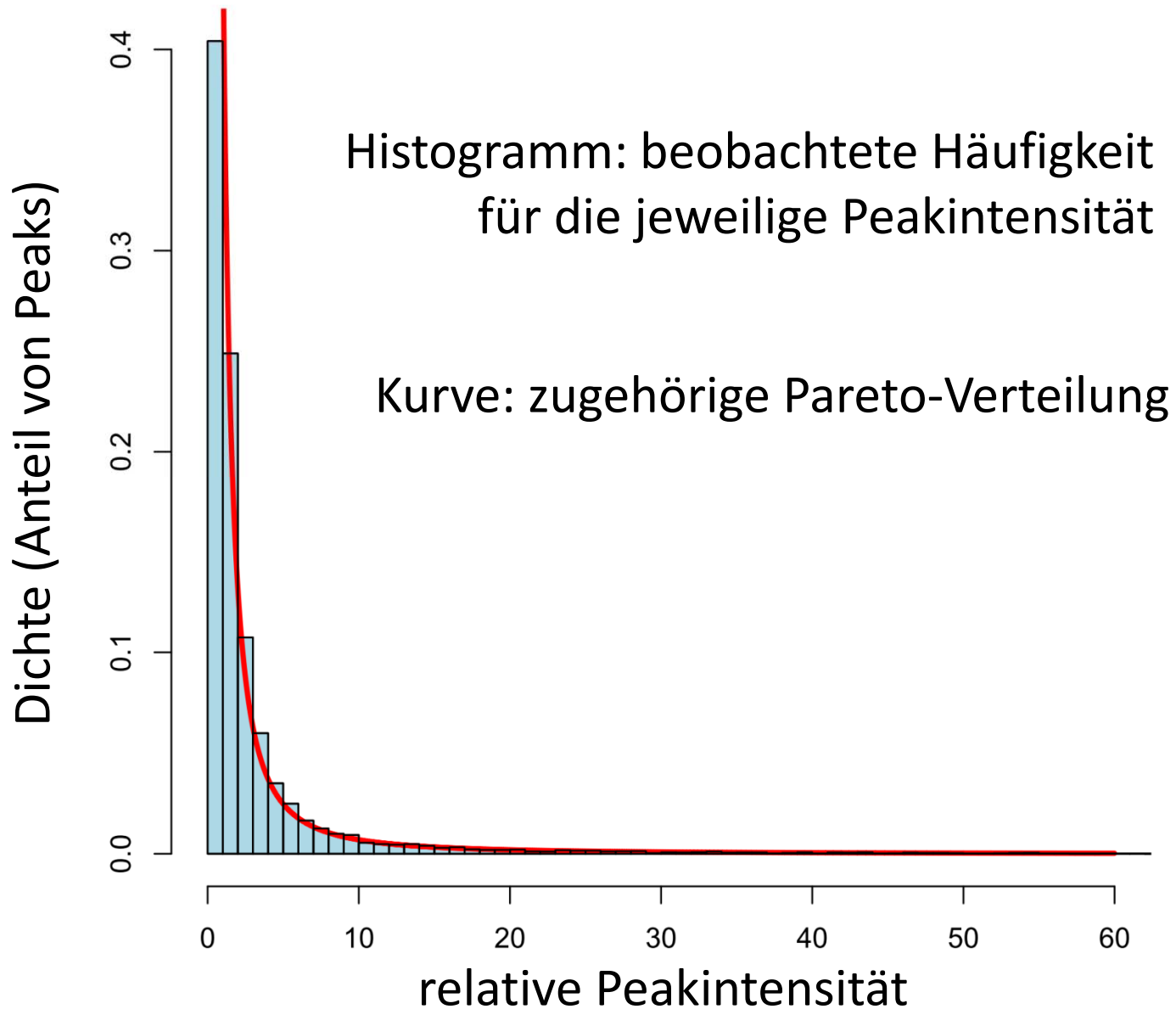
Fragmentierungsgraph: Kanten



Evaluation Fragmentierungsbäume und Summenformeln



Peakintensitäten für Rauschpeaks



Massen von Verlusten (losses)

