

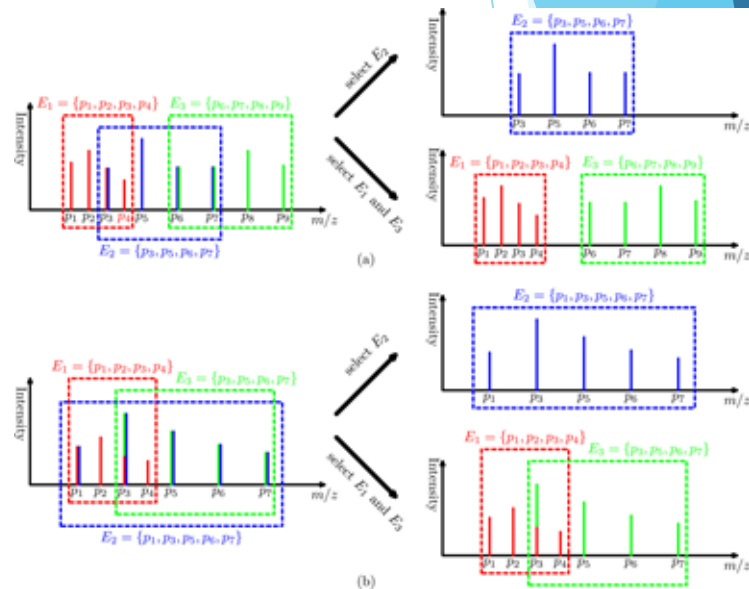
Анализ возможностей применения top-down методов деконволюции к данным bottom-up масс- спектрометрии высокого разрешения

Студент: Гусев Андрей

Руководитель: Вяткина Кира Вадимовна

Деконволюция в масс-спектрометрии

- Масс-спектрометр позволяет измерить отношение массы m к заряду z для ионов, образующихся при ионизации компонентов пробы, и определить интенсивность ионного тока для зарегистрированных значений m/z .
- Зарегистрированным значениям m/z соответствуют пики в масс-спектре, высота которых соответствует интенсивности ионного тока для соответствующего значения m/z .
- Один и тот же фрагмент в разных экземплярах молекулы может иметь разный изотопный состав.
- Необходимо выделить наборы пиков, соответствующие конкретному фрагменту с разным изотопным составом - так называемые изотопные кластеры. Далее от них можно будет перейти к нейтральной массе фрагмента.



Top-down и bottom-up подходы

- ▶ В масс-спектрометрии белков существуют различные подходы.
- ▶ При top-down подходе молекула исследуется целиком, при bottom-up предварительно разрезается на пептиды.
- ▶ В bottom-up случае наблюдается меньше фрагментов с редкими (тяжелыми) изотопами.

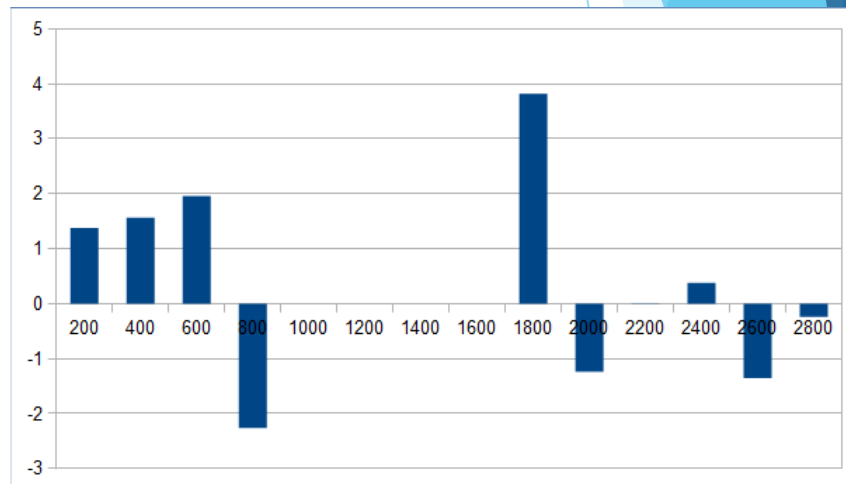
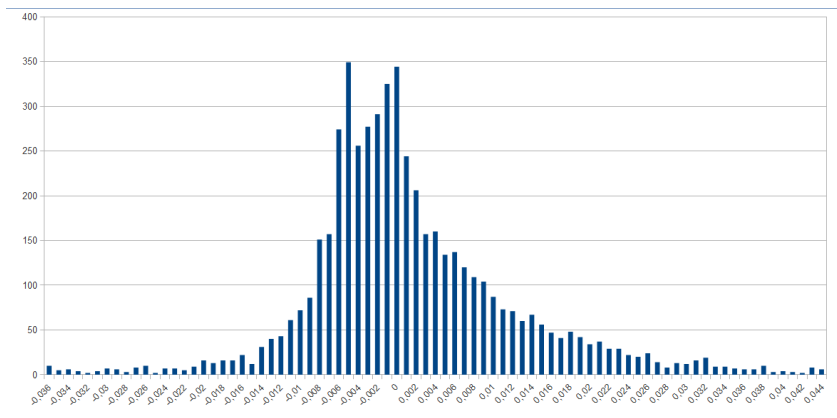
Задача

- ← MS-Deconv и ThermoXtract - программы для деконволюции в top-down масс-спектрометрии, Hardklor изначально был предназначен для обработки bottom-up данных, но часто используется и при top-down подходе.
- ← Требовалось сравнить работу MS-Deconv, ThermoXtract и Hardklor на bottom-up данных масс-спектрометрии высокого разрешения и выяснить, когда и как эти программы ошибаются.

Решение

- ← Написать программу для обработки данных.
- ← Сравнить количество пиков, присутствующих в результатах деконволюции при помощи каждой из трех программ.
- ← Выяснить, какие из них могут быть аннотированы.
- ← Для аннотированных пиков проанализировать значения абсолютного и относительного отклонения от теоретической массы.

Решение



Результаты

- ▶ Проанализированы результаты деконволюции белка CAN2 посредством MSDeconv, ThermoXtract и Hardklor, а также результаты их идентификации по базе данных.
- ▶ Наилучшие результаты - у MS-Deconv
- ▶ Ошибка зависит от массы иона, причём не только в абсолютном, но и в относительном значении.