

Travaux Pratiques – traitement des données FTMS

Jasmine Hertzog

jasmine.hertzog@univ-lorraine.fr

Ces travaux pratiques ont pour objectif de mettre en application les notions vues dans le cours « Extraction, calibration et visualisation des données » avec l'utilisation de deux logiciels de traitement de données : DataAnalysis (Bruker) et Composer (Sierra Analytics). Après une première phase de démonstration, les participants pourront se familiariser avec les fonctionnalités de ces deux logiciels au travers un jeu de données FTMS.

Avec DataAnalysis, plusieurs étapes clés du traitement de données seront vues : élaboration d'une liste de calibration, paramètres de liste de masse, attribution de formules moléculaires, distributions isotopiques...

La liste de pics - comportant les valeurs de m/z et leur intensité respective – obtenue à partir de DataAnalysis sera ensuite employée dans Composer pour l'attribution de formules moléculaires et la réalisation de représentations graphiques.