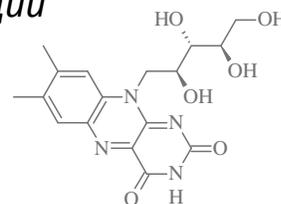


ACD/IXCR – Интеллектуальное Распознавание Компонентов в данных GC-MS

... интересуетесь, какие компоненты составляют Ваш образец?
IXCR автоматически определит и выделит спектры индивидуальных компонентов, найдет их в коммерческих или Ваших собственных спектральных библиотеках и создаст отчет с помощью нажатия всего лишь одной кнопки. Следующие индустрии могут извлечь пользу из функциональности IXCR ...

Пищевые ингредиенты, Ароматы, Вкусы, Запахи...

- Определение “формулы” природных ароматов или продукции конкурентов (**Reverse Engineering, De-Formulation**)
- Быстрые анализ и создание отчета
- Создание вкусов и ароматов по требованию заказчика



• • •

Автоматически разделите все компоненты Вашей смеси и найдите их в Библиотеке GC-MS данных:



- Работа с предустановленной NIST MS-Database
- Приобретите “Wiley Registry™ 9th Edition combined with NIST 08” (796,000 спектров для 667,000 соединений, включая используемые в экологии, а также пищевой и косметических индустриях) библиотеку совместно с программным обеспечением ACD/IXCR
- Создавайте собственные библиотеки MS-спектров

• • •

Экология. Анализ питьевых и сточных вод...

- определение всех примесей и загрязняющих веществ
- автоматическое вычитание “чистого” образца
- автоматический анализ групп образцов

Praveen Kutty, Агентство Охраны Окружающей Среды (UK)

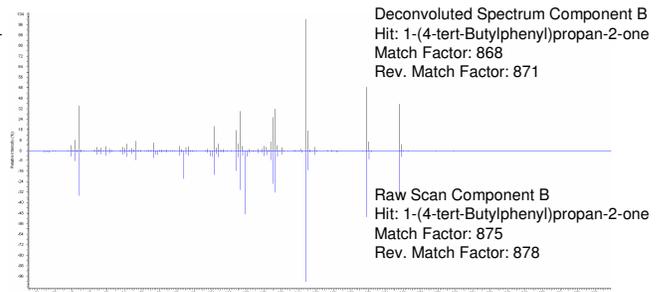
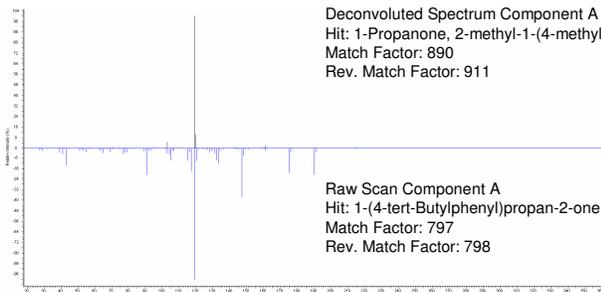
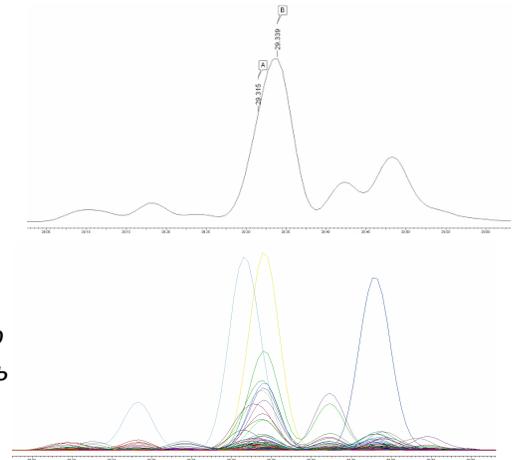
“Честно говоря, это программное обеспечение оказалось весьма полезным для нас. Образцы наших проб как правило сильно загрязнены продуктами окружающей среды, так что их анализ обычными методами крайне затруднен. Программное обеспечение ACD/Labs крайне эффективно для идентификации состава сложных смесей...”



Преимущества использования IXCR...

...разделение перекрывающихся компонентов:

Несколько компонентов часто могут находиться в одном хроматографическом пике с доминированием большего компонента. IXCR делает такие случаи визуально очевидными. Перед деконволюцией, поиск для сканов компонентов A и B (см. рисунок) возвращает один и тот же положительный хит: 1-(4-tert-Butylphenyl)propan-2-one. Зеркальные спектры на нижнем рисунке показывают огромную разницу, которая появляется в спектре компонента A после вычитания пиков перекрывающегося его компонента B. Сложные наборы данных могут потребовать от спектроскописта затраты часов и даже дней на подобный анализ. IXCR может уменьшить это время на несколько порядков, оставив Вам время на чашку кофе!



Guy Gudmunsen, Wessex Water plc. (UK)

"ACD/IXCR помог мне в очень многом, так как состав анализируемых нами промышленных стоков очень сложен. Автоматизация и деконволюция со стороны IXCR существенно повысили и мои познания. Я научился доверять этой программе. Процесс составления отчетов и докладов также стал существенно быстрее..."

...автоматическое вычитание чистого или контрольного образца:

Сравниваете два различных состава? Хотите вычистить "чистый" образец из группы анализов воды? Функция IXCR's COMPARE отследит компоненты, содержащиеся в контрольном или "чистом" образце и проинформирует, когда они найдены в рабочих образцах с учетом заданного уровня игнорирования

| Ret. Time (min) | NIST Hit | Match Factor | Rev. Match Factor | Component Area | Component Area % | CAS No. | MST ID | Source Library |
|-----------------|---|--------------|-------------------|----------------|------------------|---------|--------|----------------|
| 6.6524 | Cyanoic acid, 2,2-dimethylpropyl ester | 295 | 787 | 907,625.2 | 0.149-48.5 | 4314 | respil | |
| 6.6724 | 1,2,4-Triazole | 449 | 798 | 907,625.2 | 0.2801-96.4 | 6287 | manlib | |
| 6.7027 | 1,2,4-Triazole | 446 | 907 | 1,632,428.3 | 0.295-38.6 | 112 | manlib | |
| 6.7027 | Butanone, 1-(2-Butyl)-3-methyl | 313 | 801 | 1,632,428.3 | 0.2997-04.4 | 8439 | manlib | |
| 6.7489 | 1-(4-Methylphenyl)-4-methylphenyl-3,3,3-trifluoroethane | 327 | 644 | 1,291,761.5 | 0.10751-11.5 | 16763 | manlib | |
| 6.7489 | 6,7-Benzophenothiazine-3,3-dioxide | 225 | 628 | 1,291,761.5 | 0.1225-11.2 | 14778 | manlib | |
| 6.8521 | Trifluoromethanesulfonic anhydride | 155 | 309 | 292,308.4 | 0.136-21.4 | 2895 | manlib | |
| 6.8914 | 1-(4-Chlorophenyl)-3-methyl-2-butanol | 156 | 638 | 552,282.8 | 0.0-0.0 | 14789 | manlib | |
| 6.8914 | Trifluoromethanesulfonic anhydride | 234 | 617 | 552,282.8 | 0.136-21.4 | 2895 | manlib | |
| 6.9264 | 2,3-Dimethylbutane-2-thione | 23 | 830 | 1,648,997.0 | 0.506-64.3 | 1752 | manlib | |
| 6.9264 | 2,5-Furandione, 3-methyl | 220 | 796 | 1,648,997.0 | 0.616-62.4 | 1595 | manlib | |
| 6.9503 | Ethyl Acetate | 534 | 524 | 875,157,680.0 | 11.141-78.6 | 7433 | manlib | |
| 6.9503 | Ethyl Acetate | 794 | 524 | 875,157,680.0 | 11.141-78.6 | 2791 | manlib | |
| 7.0149 | Phenanthrene, 9-ethyl-3,6-dimethyl | 169 | 741 | 491,454.3 | 0.3625-37.6 | 14785 | manlib | |
| 7.0546 | 4-Chloro-2-(4-methylphenyl)phenol | 321 | 548 | 491,454.3 | 0.87051-58.0 | 16763 | manlib | |
| 7.1118 | 2-(2,4-Dichlorophenyl)-6-(4-chlorophenyl)phenol | 401 | 788 | 613,114.0 | 0.34036-11.5 | 14778 | manlib | |
| 7.1118 | 3-(2,4-Dichlorophenyl)-6-(4-chlorophenyl)phenol | 430 | 783 | 613,114.0 | 0.7764-84.2 | 14773 | manlib | |
| 7.2381 | Cyclohexanone, octamethyl | 329 | 944 | 11,726,321.1 | 6.1550-67.2 | 28501 | respil | |
| 7.2381 | Cyclohexanone, octamethyl | 893 | 903 | 11,726,321.1 | 6.1550-67.2 | 28501 | respil | |
| 7.2381 | Hexane, 4-ethyl | 365 | 727 | 3,048,011.5 | 11.4485-55.2 | 13181 | manlib | |
| 7.4835 | Heptane, 4-ethyl | 708 | 802 | 1,235,508.7 | 0.13933-74.3 | 17528 | manlib | |
| 7.4835 | 2,3-Dimethyl-3-heptane | 690 | 792 | 1,235,508.7 | 0.0-0.0 | 17970 | manlib | |