

ACD/IXCR – Интеллектуальное Распознавание Компонентов при помощи 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.
Программное обеспечение IXCR незаменимо в экологических и промышленных
исследованиях.*

Экология. Анализ питьевых и сточных вод...

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

Praveen Kutty, Агентство Охраны Окружающей Среды (УК)

*“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...”*



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

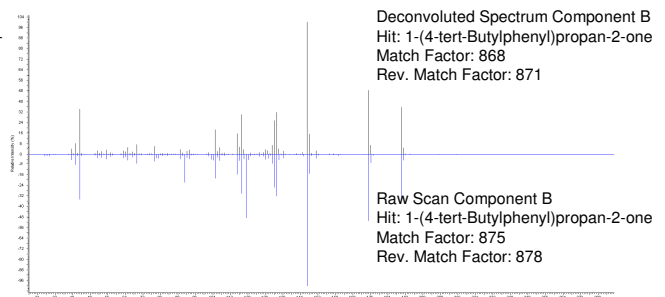
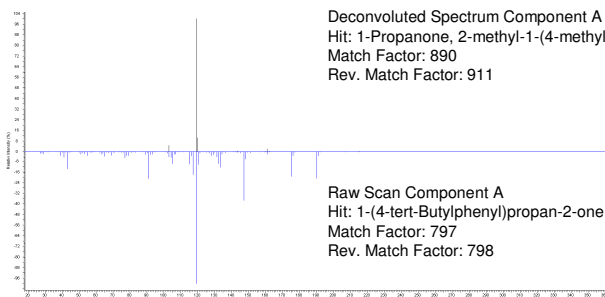
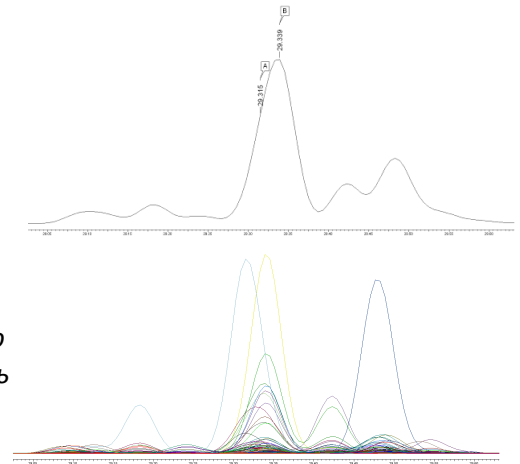


- *Работа с предустановленной NIST MS-Database*
- *Приобретите “Wiley Registry™ 9th Edition combined with NIST 08”
(796,000 спектров для 667,000 соединений, включая используемые
в экологии, а также пищевой и косметических индустриях)
библиотеку совместно с программным обеспечением ACD/IXCR*
- *Создавайте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

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

A	B	Ret. Time (min)	NIST Hit	Match Factor	Rev. Match Factor	Component Area	Component Area %	CAS No.	NIST ID	Source Library
10	6.6524	Cyanoic acid, 2,2-dimethylpropyl ester	290	787	907,625.2	0.149-48.5	4314	replic		
11	6.6724	1,2,4-Triazole	449	798	907,625.2	0.3801-96.4	6287	manlib		
12	6.7027	1,2,4-Triazole	449	807	1,632,428.3	0.290-38.0	112	manlib		
13	6.7027	Butanone, 1-(2-tert-butyl)-3-methyl-	313	801	1,632,428.3	0.20907-04.4	8439	manlib		
14	6.7489	1-(2-methoxy-4-methylphenyl)-3,3,3-trifluoroethane	327	644	1,291,761.5	0.10751-11.5	16763	manlib		
15	6.7489	6,7-Benzo-phenothiazine-3,5-dione	225	625	1,291,761.5	0.1225-11.2	14778	manlib		
16	6.8521	Trifluoromethanesulfonic anhydride	155	309	292,308.4	0.106-21.4	2895	manlib		
17	6.8914	6-Chloro-2-phenyl-1,4-dioxane(2,1:1)	156	638	552,282.8	0.0-0.0	14789	manlib		
18	6.8914	Trifluoromethanesulfonic anhydride	234	617	552,282.8	0.106-21.4	2895	manlib		
19	6.9264	2,3-Dimethylbutane-2,3-dione	22	830	1,648,997.0	0.506-64.3	1720	manlib		
20	6.9264	2,5-Furandione, 3-methyl-	220	796	1,648,997.0	0.616-62.4	1595	manlib		
21	6.9503	Ethyl Acetate	534	524	875,157,680.0	11.141-78.4	7433	manlib		
22	6.9503	Ethyl Acetate	524	524	875,157,680.0	11.141-78.4	7433	manlib		
23	7.0149	Phenanthrene, 9-ethyl-3,6-dimethyl-	169	741	491,454.3	0.3025-37.6	14785	manlib		
24	7.0149	6-Chloro-2-(1-(4-methylphenyl)ethyl)-1,4-dioxane	321	548	491,454.3	0.87051-58.0	16763	manlib		
25	7.1118	2-Oxo-4-phenyl-6-(4-chlorophenyl)-1,4-dioxane	461	788	613,124.0	0.34036-11.5	14778	manlib		
26	7.1118	3-(2H)-Benzofuranone, 6-methoxy-2	430	783	613,124.0	0.7764-84.2	14773	manlib		
27	7.2381	Cyclohexanone, octamethyl-	329	944	11,726,321.1	6.1500-67.2	20501	manlib		
28	7.2381	Cyclohexanone, octamethyl-	893	903	11,726,321.1	6.1500-67.2	20501	manlib		
29	7.2381	Hexane, 4-ethyl-	365	727	3,048,011.5	11.4485-55.2	13181	manlib		
30	7.4635	Heptane, 4-ethyl-	708	802	1,235,508.7	0.13933-74.3	17528	manlib		
31	7.4635	2,3-Dimethyl-3-heptane	690	792	1,235,508.7	0.0-0.0	17970	manlib		