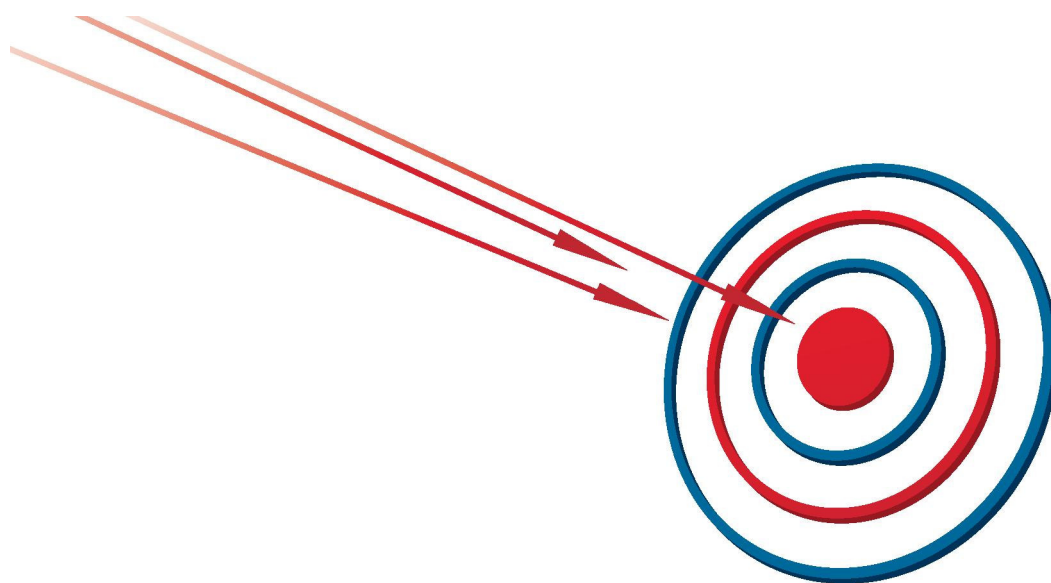
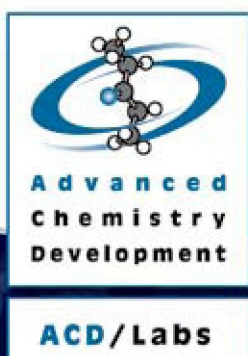


Целевое распознавание соединений в сложных образцах



ACD/IntelliTarget

Программное обеспечение для определения метаболитов, биохимических маркеров, допингового и наркологического контроля, обнаружения запрещенных веществ, контроля качества продукции, мониторинга показателей окружающей среды, медицинских клинических анализов



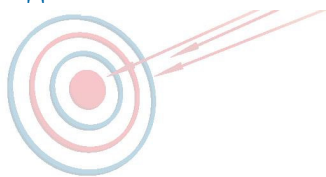
www.acdlabs.com/intellitarget/

Visionary Software

Advancing Research

ACD/IntelliTarget

находит в хроматограммах
интересующие Вас
соединения



Как работает

ACD/IntelliTarget:

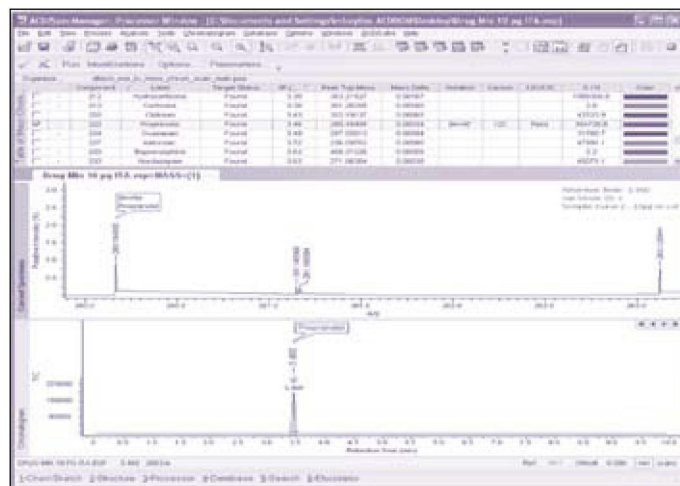
Обозначьте список интересующих Вас соединений, задав химические структуры, формулы или моноизотопные молекулярные массы. Программа выделит компоненты и даже без точных формул идентифицирует $[M+H]^+$, $[M-H]^-$, а также аддукты.

Результаты будут отображены в таблице с пометками НАЙДЕНО или НЕ НАЙДЕНО искомого вещества. Вы можете использовать ACD/IntelliTarget для проверки образцов перед дальнейшим количественным анализом или мониторинга наличия или отсутствия отдельных соединений (таких как примеси, возможные метаболиты, биохимические маркеры). ACD/IntelliTarget может быть использован для ускорения скрининга наборов образцов или текущего мониторинга.

Используйте данные LC/MS или GC/MS для точного анализа сложных образцов на предмет одного или сотен известных соединений, избегая ручной обработки и интерпретации.

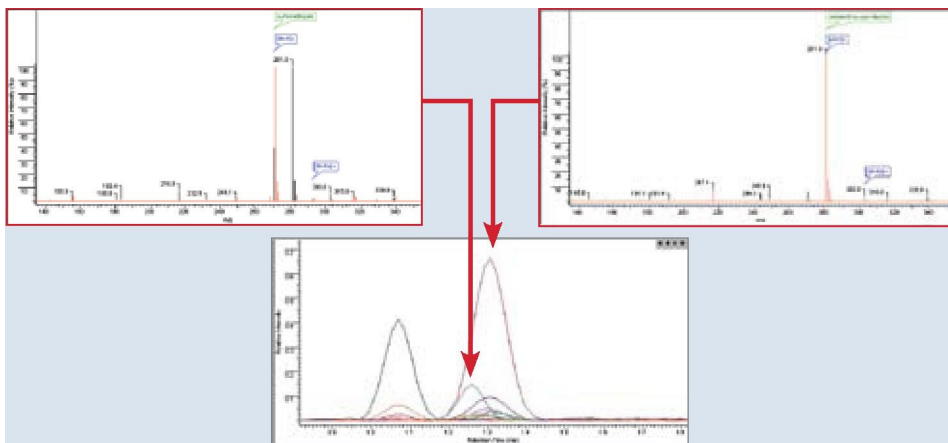
ACD/IntelliTarget интерпретирует экспериментальные данные LC/MS и GC/MS, автоматически выделяет компоненты и отображает результат в таблице, отмечая НАЙДЕНО или НЕ НАЙДЕНО искомого вещества. Программа справляется со своей задачей даже в случае следовых концентраций и в случае, когда компоненты элюируются совместно.

No.	Молекулярная масса	Формула	Исходное	Литература	Найдено	Не найдено	Идентификация
1	100.0468	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
2	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
3	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
4	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
5	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
6	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
7	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
8	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
9	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
10	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
11	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
12	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
13	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
14	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
15	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
16	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
17	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
18	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
19	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено
20	100.0467	C ₈ H ₈ O	Али	Метилбензол	Найдено	Найдено	Найдено



Накладываются пики? Это не проблема!

ACD/IntelliTarget и ACD/IntelliXtract даже в случае перекрывания компонентов используют масс-спектральные данные для идентификации ионизированных молекул, аддуктов, фрагментов и мультимеров. Деконволюция сложных образцов происходит легко и быстро. Результаты представляются в едином виде. Удаётся избежать подводных камней и ошибок ручной интерпретации.



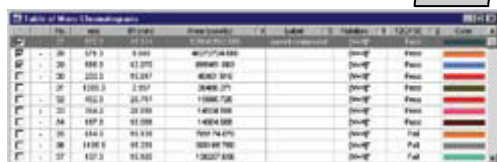
Просматривайте спектр чистого компонента

Вы сможете просмотреть спектр каждого чистого хроматографического компонента как в случае, когда компоненты элюируются отдельно, так и в случае, когда они выходят одновременно.

ACD/IntelliTarget и ACD/IntelliXtract быстро и точно идентифицируют ионизированную молекулу, проведя отнесение сигналов в масс-спектре. Вы сможете наложить спектр чистого компонента на экспериментальный, что даст Вам возможность быстро понять, какие ионы имеют похожий хроматографический профиль.

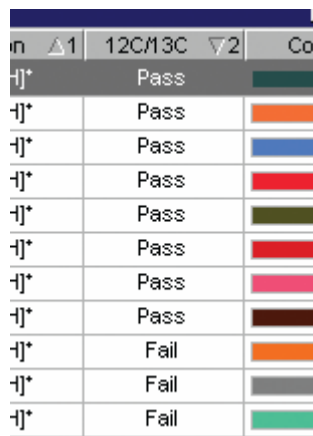
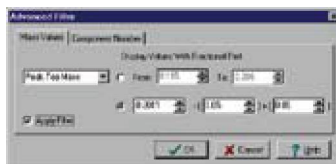
Вы сможете автоматически выделять хроматографические компоненты в наборах сложных данных LC/MS или GC/MS и автоматически относить для каждого компонента $[M+H]^+$ или $[M-H]^-$.

Передовые возможности ACD/IntelliXtract позволят уменьшить время, затрачиваемое на интерпретацию, и подтвердить наличие элюируемых совместно или следовых компонентов, которые могут быть упущены в иных случаях. IntelliXtract сможет помочь аналитикам быстро определить и выделить интересующую их информацию.



Интеллектуальное Распознавание Компонентов для MS-определения с помощью ACD/IntelliXtract (IXCR)

IXCR помогает идентифицировать компоненты образца путём сравнения спектра чистого компонента полученного с помощью IntelliXtract с коммерческой библиотекой спектров. Это делает идентификацию быстрее и легче, насколько это возможно, и позволяет избежать ручной деконволюции и поиска. Для значительного повышения эффективности процесс обработки может быть запущен в пакетном или автоматизированном режимах. Аналитики и спектроскописты могут пройти сквозь процесс поиска компонентов для обращения к деталям спектра сравнения и для большего понимания результатов Интеллектуального Распознавания Компонентов.

Автоматически относите $[M+H]^+$ или $[M-H]^-$

После нахождения пиков индивидуальных ионов, компоненты сгруппировываются вместе, чтобы выделить индивидуальные соединения. Этот процесс называется компонентное представление. После описанной операции воссоздаются спектры чистых компонентов, а ионизированные молекулы $[M+H]^+$ или $[M-H]^-$ автоматически соотносятся с наблюдаемыми сигналами.

Поддерживаемые типы данных

ACD/IntelliTarget и ACD/IntelliXtract совместимы с форматами большинства крупных производителей приборов. Оба продукта нуждаются в инструментах обработки MS-данных, доступных в ACD/MS Processor или ACD/MS Manager v.12.01 и более поздних.

ACD/IntelliXtract

Найдет все те соединения, которые Вы сами не сможете!



Передовые инструменты ACD/IntelliXtract включают:

$^{12}C/^{13}C$ - тест

использует информацию об изотопах, выделенных из наборов данных для определения, согласуется ли соотношение $^{12}C/^{13}C$ для отдельного значения массы.

Фильтр дефекта масс

определяет компоненты, относящиеся к родственным (дочерним) соединениям (например, метаболитам) путём применения фильтра дефекта масс.

Анализ изотопного распределения

идентифицирует компоненты, содержащие Cl, Br, S и определяет количество каждого из атомов на основании изотопного распределения для каждого ионного кластера. Вы можете использовать эту функцию для быстрой генерации эмпирической формулы.



Найдите все иголки в Вашем стоге сена



ACD/IntelliXtract

Программное обеспечение для определения неизвестных метаболитов, биохимических маркеров, примесей, “формулы” природных ароматов и вкусов, установления состава продукции конкурентов (Reverse Engineering, De-Formulation)

www.acdlabs.com/intellixtract/

