

Massenspektrenbibliothek NIST 2020



Produktinformation

NIST 2020 Produktinformation

Massenspektrenbibliothek

Mit der Version 2020 stellt das **National Institute of Standard and Technology** eine neue Version seiner Massenspektrenbibliothek zur Verfügung.

Die Bibliothek beinhaltet 350.643 Spektren von 306.869 Komponenten. Jedes Spektrum wurde von mindestens zwei Experten auf schlüssige Fragmentierungsmuster überprüft. Damit definiert NIST zur Identifikation einen neuen Qualitätsstandard für MS Bibliotheken. Um auch die Retentionsinformationen von Substanzen verwenden zu können, enthält die Datenbank weiterhin Retentionsindices von über 139.498 Komponenten, davon sind von 111.788 auch MS Spektren enthalten. Außerdem findet sich zu nahezu jeder Substanz auch die Strukturformel. Ein weiteres Highlight ist eine spezielle Bibliothek mit über 1.3Mio MS/MS Spektren von 186.000 Vorläuferionen, basierend auf 31.000 Komponenten.

Sowohl die Datenbank mit den Retentionsindices wie auch die MS/MS-Datenbank sind separat erhältlich.

Das NIST 2020 Paket enthält neben der Datenbank Softwarepakete, die den Umgang mit den Daten vereinfachen. Der Browser ermöglicht es, sehr einfach in der Datenbank zu recherchieren. Eine Suche nach Trivialnamen ist ebenso möglich wie Suchen nach Elementarzusammensetzungen, CAS Nummern, Molgewicht etc. Selbstverständlich ermöglicht die Browsersoftware den Vergleich von unbekanntem Spektren mit der Datenbank.

Das ebenfalls enthaltene AMDIS-Datensystem kann zur Auswertung und Dekonvolution von GC-MS-Chromatogrammen verschiedener Hersteller verwendet werden. Es können 18 verschiedene Datenformate eingelesen werden.

Kleine Hilfsprogramme zur Interpretation von Massenspektren und zur Berechnung von Isotopenmustern runden das Gesamtpaket ab. Eine ausführliche Dokumentation wird mitgeliefert.

Hinweis: Für die MS-Bibliothek NIST ist ein englisches Handbuch verfügbar.

Technische Änderungen vorbehalten

Axel Semrau GmbH & Co. KG
Stefansbecke 42
45549 Sprockhövel
Tel.: 02339 / 12090
Fax: 02339 / 6030
www.axelsemrau.de
info@axelsemrau.de