

MS-Analysen und Interpretation unbekannter Spektren mittels MassLib - Key Features und Neuigkeiten

Dr. P. Kofel

MSP Kofel, Industriestrasse 26, 3052 Zollikofen

Oft sind die Anforderungen, die die verschiedenen Benutzer an ein Software-Paket stellen, sehr vielfältig. Dies trifft auch auf das Software-Paket MassLib zu, dessen ursprünglicher und seit mehr als 30 Jahren gepflegter Zweck die Strukturaufklärung aus Massenspektren ist. Deshalb wurde MassLib in den letzten Jahren mit zahlreichen neuen Funktionen erweitert.

MassLib kann heute sehr vielfältig eingesetzt werden. Der Anwendungsbereich reicht von der Einzelplatz-Installation auf einem Notebook zur mobilen Auswertung bis hin zur Installation auf einem Terminal-Server mit zentraler Datenarchivierung, firmenweitem Zugang und benutzerdefinierten Rechten.

Automatik-Funktionen gestatten die unbeaufsichtigte Spektrensuche und Erstellung von Berichten. Die Berichte können optional in einem PDF-Dokument zur Nachbearbeitung und/oder zur elektronischen Archivierung abgelegt werden.

Zur Auswertung und zum Vergleich von komplexen GC/MS- und LC/MS-Analysen stehen in MassLib zahlreiche Werkzeuge zur Verfügung, die die interaktive Auswertung, so insbesondere Identifikation, Quantifizierung und Strukturaufklärung, erleichtern. Die Resultate können in einem Report oder in einer Tabelle abgelegt werden.

Zusammenhänge in Analysen oder Zwischen- und Endresultaten können mittels Hilfskurven (z. Bsp. DAD-Daten, UV-Spuren, Ionenspuren, Ähnlichkeits- und Identitätsspuren), Contour Plot und Hauptkomponentenanalyse visualisiert und somit rascher aufgefunden werden.

Da auch ein so vielseitiges Auswertungs-Paket wie MassLib allein nie alle Anforderungen abdecken kann, bietet MassLib jetzt auch noch die Möglichkeit, Spektren im JCAMP-Format exportieren zu können.