





Využijte naplno potenciál Vašeho instrumentu: Knihovny spekter od Wiley

Ivo Novotný, Founder & CEO Labrulez

12. – 13. 11. 2024 XXIV. Mezinárodní konference o separační chemii
a analýze toxických látek



1 KDO JSME?





“

Pomáháme chemikům **najít** to, co skutečně potřebují, a společně být efektivní s jejich **marketingem**.

”

Statistiky 2024

- + 17 400 000 zobrazení v Google
- + 1 000 000 otevřených aplikací
- + 763 000 otevřených stránek
- + (3) 273 000 návštěvníků
- + x00 000 zobrazení LN, TW, FB

LabRulez^{GCMS}LabRulez^{LCMS}LabRulez^{ICPMS}

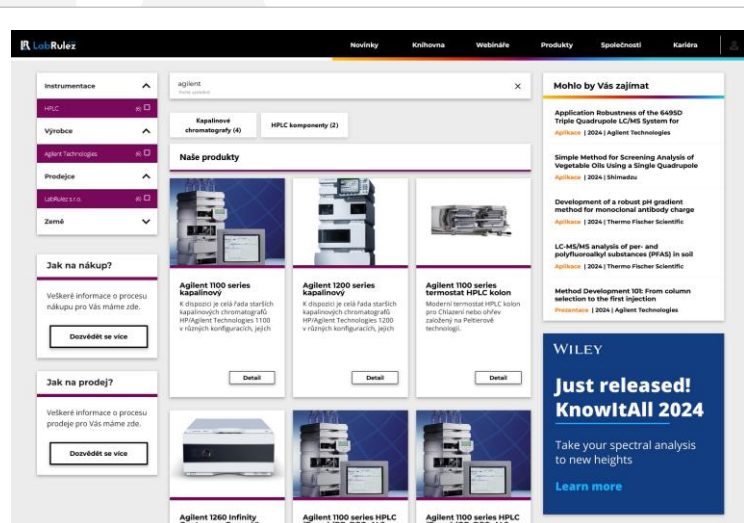
Vše ze světa LC, GC a MS na jednom místě.

Přestaňte hledat a začněte nacházet.



Novinky na portálech LabRulez

Nové sekce a služby spuštěné v posledních měsících



Bazar (Nákup a prodej zánovní techniky)

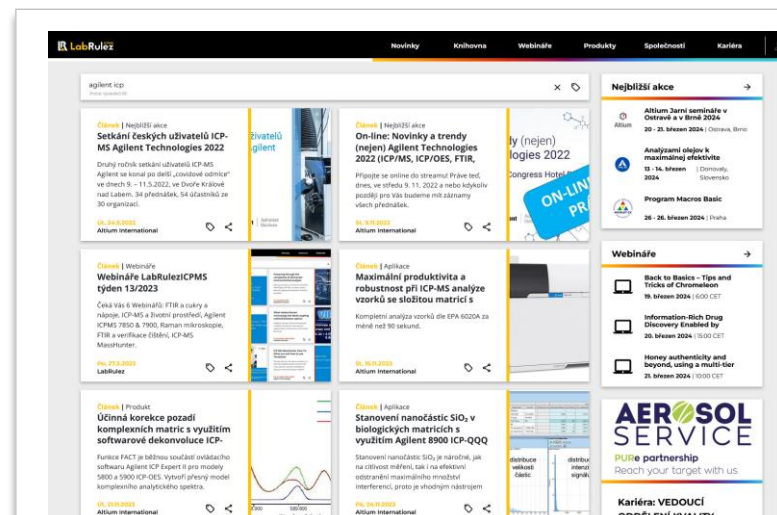
- **Odkoupíme** od Vás analytickou instrumentaci všech značek a stárí
- **Prodejte** svou techniku prostřednictvím LabRulez
- **Poptejte a nakupte kompletní sestavy, moduly nebo náhradní díly s garancí a servisem.**



2023

Říjen

Listopad



LabRulezICPMS (Spektroskopie)

Zdroj novinek, aplikací, článků, teorie, pracovních nabídek, e-shop nebo bazar **ve světě spektroskopie.**



Novinky na portálech LabRulez

Nové sekce a služby spuštěné v posledních měsících



Servisní a demo laboratoř

- Moderně vybavená **laboratoř a servisní centrum**
- **Opravy, údržba a renovace** starší instrumentace různých výrobců

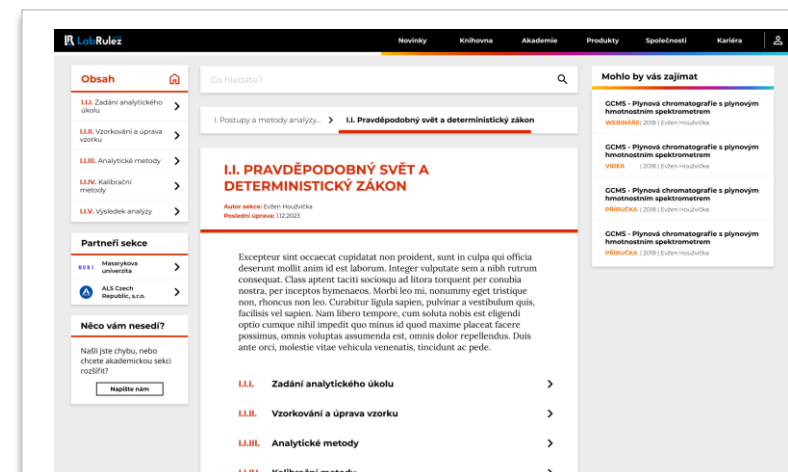


2024

Březen



2025



Akademie

Připravujeme pro Vás **virtuální akademii**, kde naleznete jak komplexní **teoretické informace**, tak i **uživatelské tipy a triky**, odborné **příručky nebo návody**, jak řešit Vaše problémy a výzvy.



2.

Knihovny Wiley pro hmotnostní spektrometrii



O společnosti Wiley Science Solutions

Zdroj nejrozsáhlejších
**sbírek spektrálních
databází a
integrovaných
softwarových řešení**

Cílem je **zlepšit
kvalitu analýz, snížit
chybovost a zvýšit
produktivitu.**

Zahrnuje **širokou
škálu aplikací a
technik** (MS, IR,
Raman, NMR, UV-Vis).

Má více než 50 let zkušeností s publikováním empirických, experimentálních a ověřených dat.

WILEY

GC-MS

Nejširší nabídka knihoven
hmotnostních spekter



Knihovna hmotnostních spekter NIST

Tato databáze, vyvinutá zkušeným týmem MS specialistů v Národním institutu pro standardy a technologie (NIST), představuje výsledek více než čtyřiceti let komplexního budování obsahu, což z ní činí jednu ze základních MS knihoven pro ty, kdo analyzují hmotnostní spektra.

Co je součástí balíčku:

- Knihovna EI hmotnostních spekter (v nativních formátech výrobce)
- 4 MS/MS knihovny
- Knihovna GC Retenčních Indexů
- Software NIST 2023: MS Search, AMDIS, MS Interpreter

Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Nyní v určitých balíčcích k dispozici také ve formátu KnowItAll

WILEY



Wiley Registry of Mass Spectral Data

Základní GC-MS knihovna pro spolehlivou identifikaci

Maximalizujte pravděpodobnost identifikace.

Tato **v praxi ověřená, osvědčená a komplexní knihovna** je navržena pro použití v různých aplikacích. Od běžného necíleného GC-MS screeningu až po použití s přístroji GC/MS-TOF s vysokým rozlišením a přesnou hmotou.

- Poskytuje přístup k **více než 873 000 spektrům** a pokrývá větší množství sloučenin.
- Je **základním nástrojem pro každou laboratoř zabývající se GC-MS analýzou** a laboratorním "standardem", který se neustále vyvíjí.

Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Nyní je k dispozici předplatné KnowItAll pro trvalý přístup k novým datům mezi hlavními vydáními registru Wiley.



Proč Wiley Registry?

Wiley Registry je základním zdrojem informací pro GC-MS.

Široká škála sloučenin

Navrženo pro použití v mnoha různých aplikacích

Spektrální záznamy obsahují "prohledávatelná" metadata.

Data jsou pečlivě vybírána a kontrolována

Zahrnuje replikovaná spektra

Použití v mnoha oborech

Tato knihovna přináší výjimečnou spolehlivost a komplexní zdroj informací pro analýzy, identifikace, klasifikace a verifikace sloučenin pomocí hmotnostní spektrometrie v širokém spektru odvětví, jako jsou:

- Životní prostředí
- Soudní lékařství/toxikologie
- Metabolomika
- Farmacie
- Biotech
- Potraviny/kosmetika
- Obrana/Bezpečnost
- Mnoho dalších!

Registr Wiley/NIST 2023

Vyzkoušejte kombinovaný výkon dvou základních MS knihoven

- **Wiley/NIST 2023 je nejobsáhlejší** komerčně dostupná **kombinovaná MS knihovna**, která je jasnou volbou pro obecnou identifikaci neznámých sloučenin.
- **Široké a aktualizované pokrytí** zajišťuje identifikaci v různých odvětvích a u široké škály analytů.
- **Více než 3 miliony spekter (včetně EI a tandemových MS dat)** s chemickými názvy a synonymy *zvyšují rychlost a pravděpodobnost správné identifikace.*

Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Obsahuje software NIST 2023 (MS Search, AMDIS, MS Interpreter).
- Nyní je k dispozici předplatné KnowItAll pro trvalý přístup k novým datům mezi hlavními vydáními registru Wiley.

WILEY



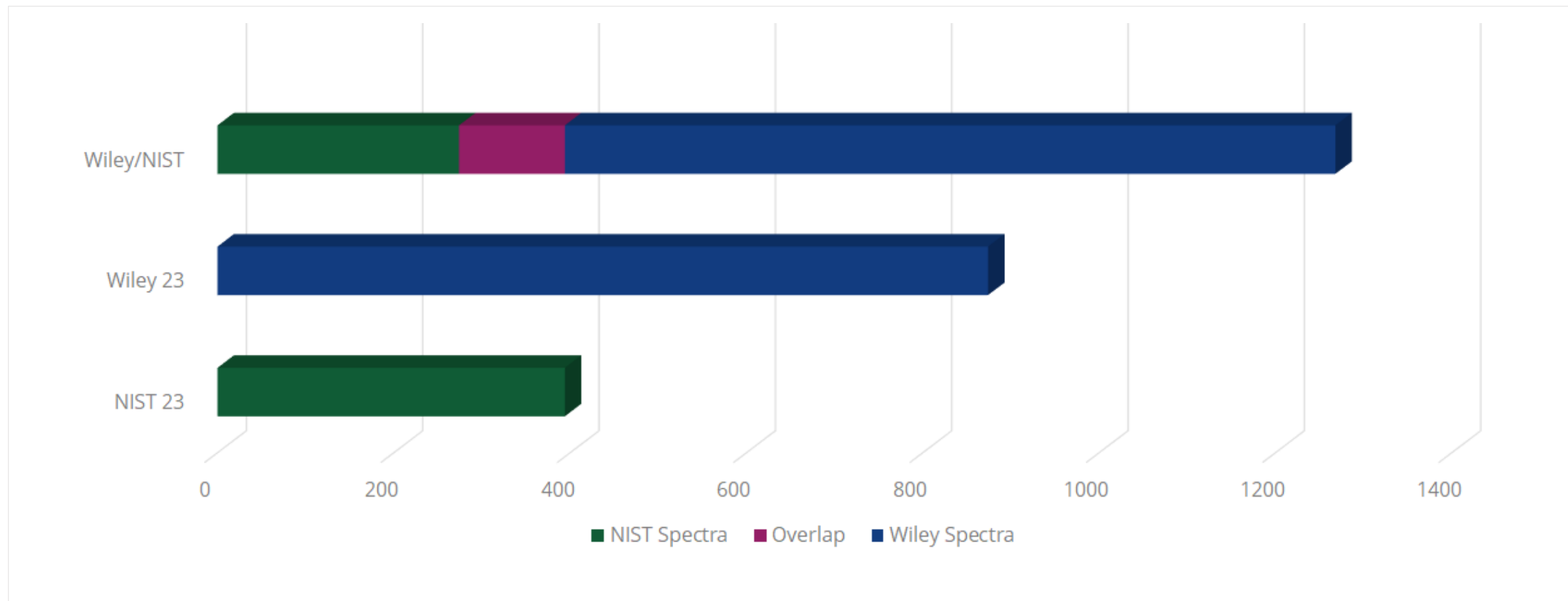
Srovnání s předchozími vydáními (pouze GC-MS data)

Typ dat	WR23 (2023)	WR12 (2020)	WR11 (2017)	WR10 (2014)	NIST23*	NIST20*	NIST17*	NIST14*	WR23/NIST*
Hmotnostní spektra	873K	817K	776K	719K	394K	351K	307K	276K	1,118,00
Struktury s možností vyhledávání	840K	785K	741K	685K	347K	307K	307K	276K	1,148,00
Jedinečné sloučeniny	709K	668K	633K	584K	341K	307K	262K	237K	950,200

* **Poznámka:** Nezahrnuje MS-MS data z knihoven NIST a WR/NIST. Výpočet v databázi WR/NIST EI = WR + NIST a odečet případných překryvů.

Srovnání registru Wiley a NIST 23

Tento graf porovnává pouze GC-MS údaje.



Knihovna hmotnostních spekter designových drog

Vyvinuta s cílem pomoci v boji proti celosvětové epidemii opioidů

- Každoročně aktualizovaná MS knihovna je **nejobsáhlejší** sbírkou spekter drog, léčivých přípravků, bojových chemických látek a dalších relevantních sloučenin.
- Obsahuje **34 209 hmotnostních spekter** 26 195 unikátních chemických sloučenin s podrobnými informacemi a chemickými strukturami pro každou z nich.
- **Pečlivě připraveno ve spolupráci** s kriminalistickými laboratořemi i s dalšími partnery z celého světa.

Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Nyní v určitých balíčcích k dispozici také ve formátu KnowItAll



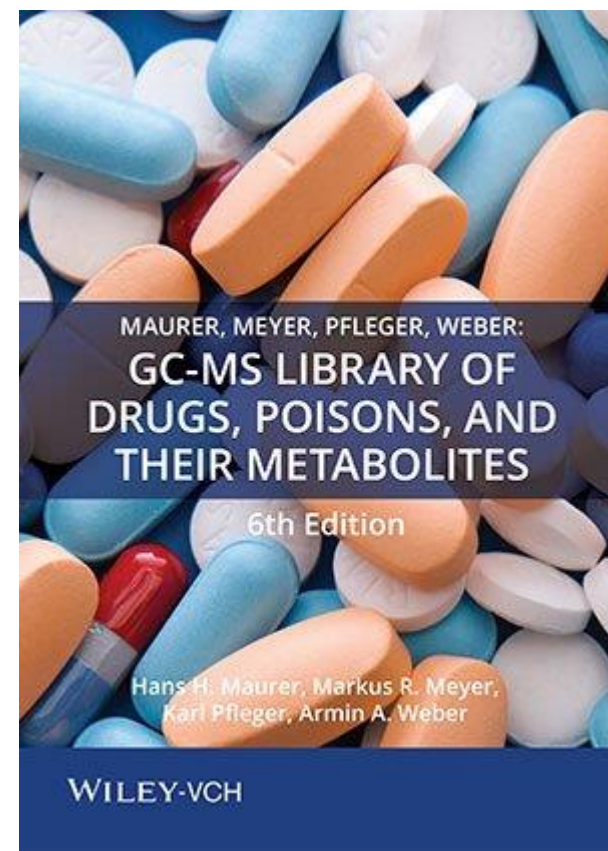
Maurer, Meyer, Pfleger, Weber: (MMPW): GC-MS Library of Drugs, Poisons, and Their Metabolites 6th Edition (MMPW)

Základní zdroj informací pro klinické a forenzní toxikology - *nově aktualizováno!*

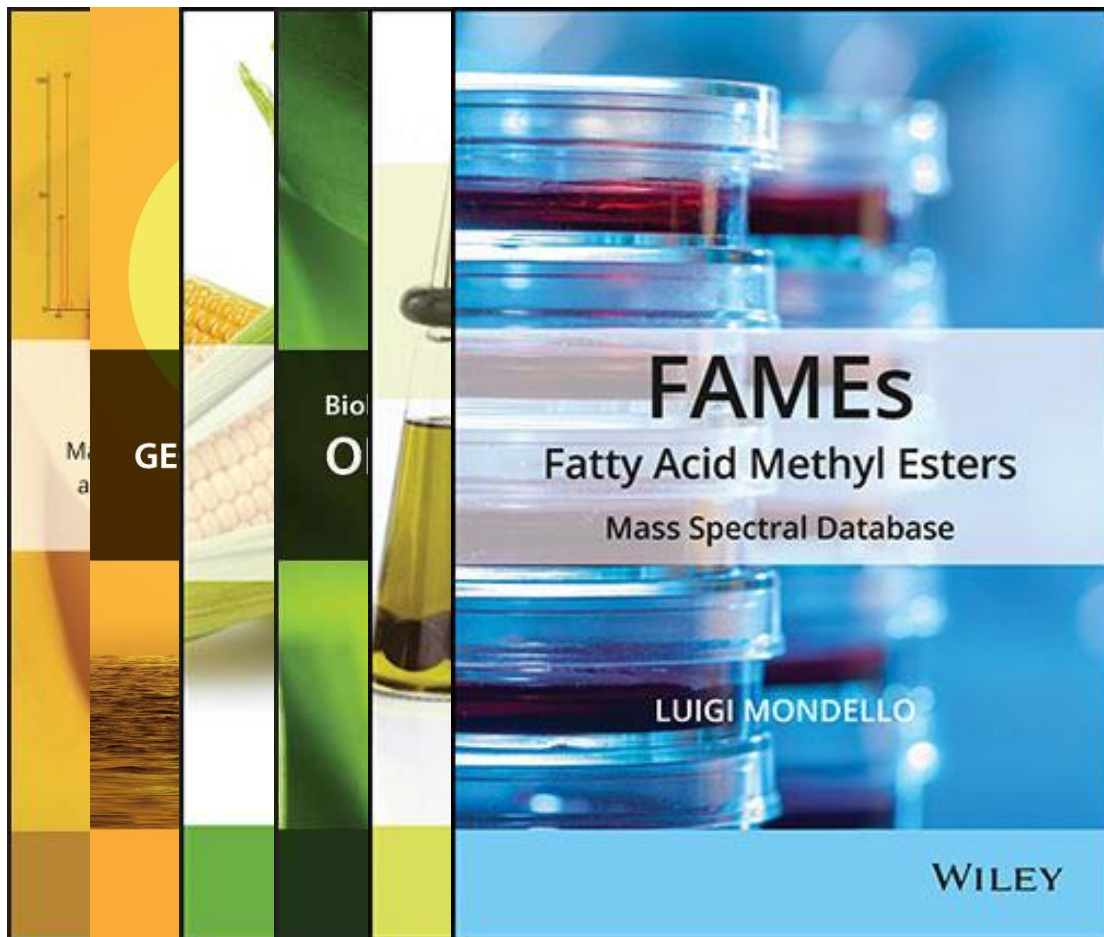
- *Standard* pro každou laboratoř zabývající se klinickou toxikologickou analýzou drog, jedů a příbuzných sloučenin, který **zlepšuje a urychluje laboratorní analýzu**.
- Obsahuje **10 948 hmotnostních spekter** a retenčních indexů GC
- Sloučeniny ze **175 kategorií** včetně psychoaktivních látek, téměř všech relevantních léčiv a více než **7800 jejich metabolitů**.
- Všechny látky jsou klasifikovány podle svých toxikologických kategorií.

Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Nyní v určitých balíčcích k dispozici také ve formátu KnowItAll



Další knihovny hmotnostních spekter



Kompatibilita softwaru/instrumentace

- K dispozici v nejběžnějších formátech výrobců přístrojů;
viz kompatibilita zde: <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/>
- Nyní v určitých balíčcích k dispozici také ve formátu KnowItAll

WILEY

WILEY

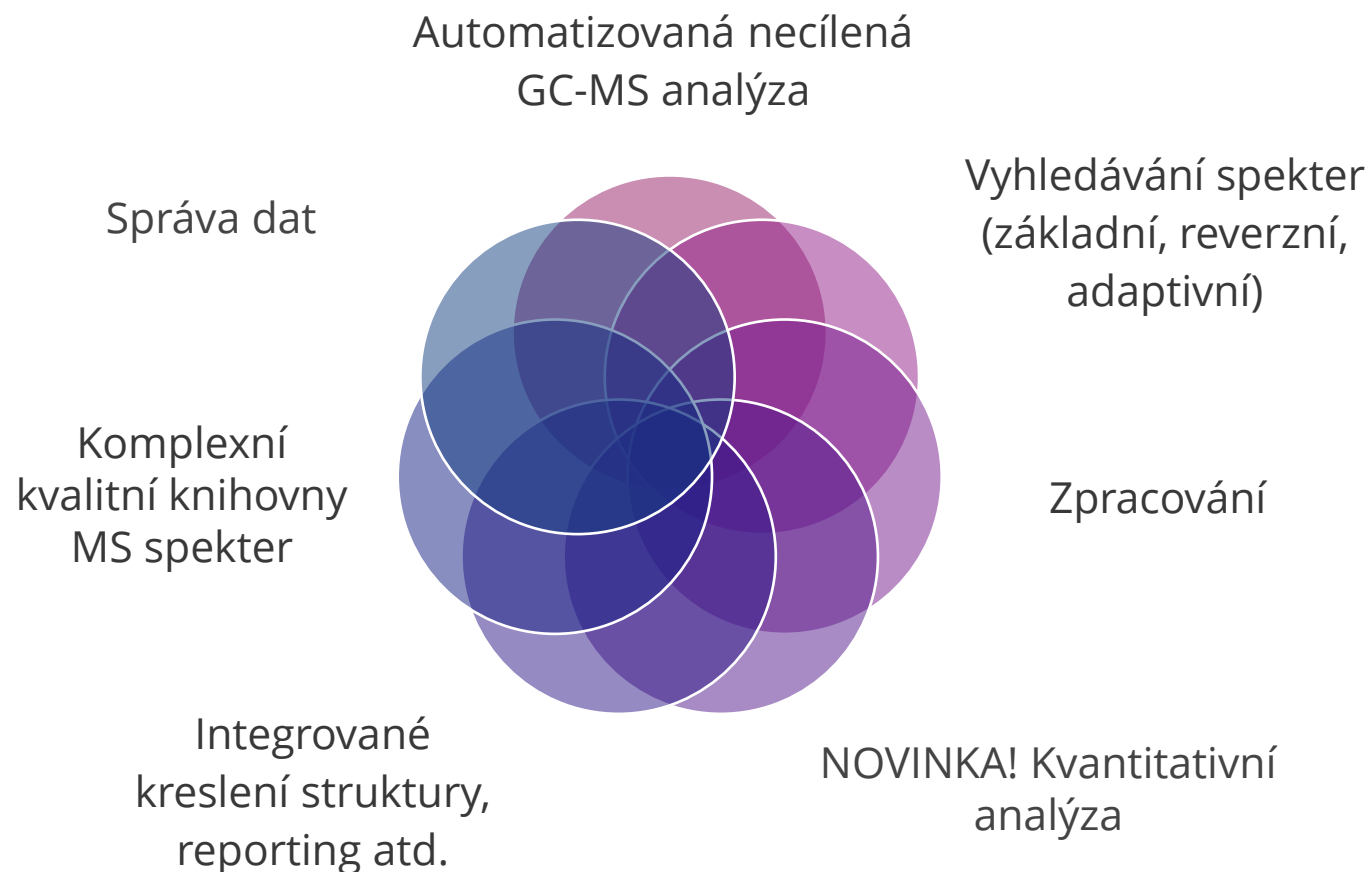
KnowItAll Solutions



PROPRIETARY & CONFIDENTIAL

Integrované sady nástrojů KnowItAll pro zefektivnění MS analýzy

KnowItAll je navržen tak, aby pracoval stejně jako vy, se všemi nástroji potřebnými pro efektivní spektrální analýzu v jediném, snadno použitelném rozhraní!



Sbírky knihoven spekter KnowItAll

Kolekce zahrnují přístup ke stovkám knihoven včetně renomovaných knihoven Wiley / Sadtler, Wiley Registry of Mass Spectra, Hummel Libraries, KnowItAll Sigma Aldrich Libraries a mnoha dalších.

IR - 339K+ spekter

NMR - 932K+ spekter (CNMR, HNMR, XNMR)

MS - 934K+ (až 1,3 milionu spekter s volitelnými balíčky)

UV-Vis - 30K+ spekter

Raman - 25K+ spekter

Obsah předplatného se může měnit, protože data mohou být ze sbírek pravidelně přidávána nebo odstraňována.

PŘIHLASTE SE K NAŠEMU NEWSLETTERU

Nové informace
každý týden

Články

Aplikace

Nejbližší akce

Webináře

Nabídky práce

A další...



Děkuju za pozornost

