

ChemPattern[®] 2017

先进化学计量学系统解决方案软件

Chemmind[®]

科迈恩(北京)科技有限公司
CHEMMIND TECHNOLOGIES (BEIJING) CO., LTD.



2017全面升级，横跨色谱、质谱、光谱平台的化学计量学解决方案，领先的仪器分析大数据挖掘与人工智能系统，复杂体系分析必备工具。



免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

ChemPattern®2017免费试用， 开启您的仪器分析大数据时代！



免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

1. 产品简介

ChemPattern®提供丰富的针对各类高维、高分辨分析仪器数据的前处理、定性、定量分析，以及模式识别和人工智能功能。该系统可广泛应用于复杂体系大数据分析、指纹图谱分析、代谢组学分析、非目标分析以及在线过程控制等领域。此外，作为跨仪器平台的大数据分析和管理系统，ChemPattern®不仅可作为色谱、质谱及光谱仪器工作站增强版本使用，还可兼容LIMS等信息系统。

2.Demo版本内容

该ChemPattern® 2017 Demo软件安装包内含
ChemPattern 2017主程序、符合21CFR part 11要求的数字
证书、HMDB人类代谢物数据库，以及ChemPattern的10
类分析仪器解决方案示例文件等。

3. 安装说明

ChemPattern 2017 Demo Installer.exe安装包或
ChemPattern 2017 Demo Lite Installer.exe精简安装包可选。
ChemPattern 2017可安装和运行于Windows XP、Vista、8、
10的32位及64位操作系统下。

4. ChemPattern®2017新增核心功能

ChemPattern®2017版本先进化学计量学系统解决方案软件在1.0版的基础上引入了许多全新功能，并对多项核心功能进行了全面升级，2017版本共新增及改进内容累计100余处，文本对其中部分新增功能及重要改进进行概要介绍。

5. ChemPattern®2017新增核心功能

ChemPattern®2017版本采用全新Office Ribbon界面设计

- 在MS解决方案中，新增质谱成像化学计量学解决方案
- 在MS解决方案中，新增质谱3D TIC可视化功能模块
- 在LC解决方案中，新增色谱3D DAD光谱可视化功能模块
- 在色谱法和MS解决方案中，新增数字化勾兑系统
- 化学计量学模块中，新增OPLS和OPLS-DA（正交偏最小二乘判别）算法
- 在MS解决方案中，新增自定义化合物数据库的及内置HMDB®人类代谢物数据库
- 在MS解决方案中，新增MS Profiler的定量解决方案，用于基于特征离子定量的化学计量学分析

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

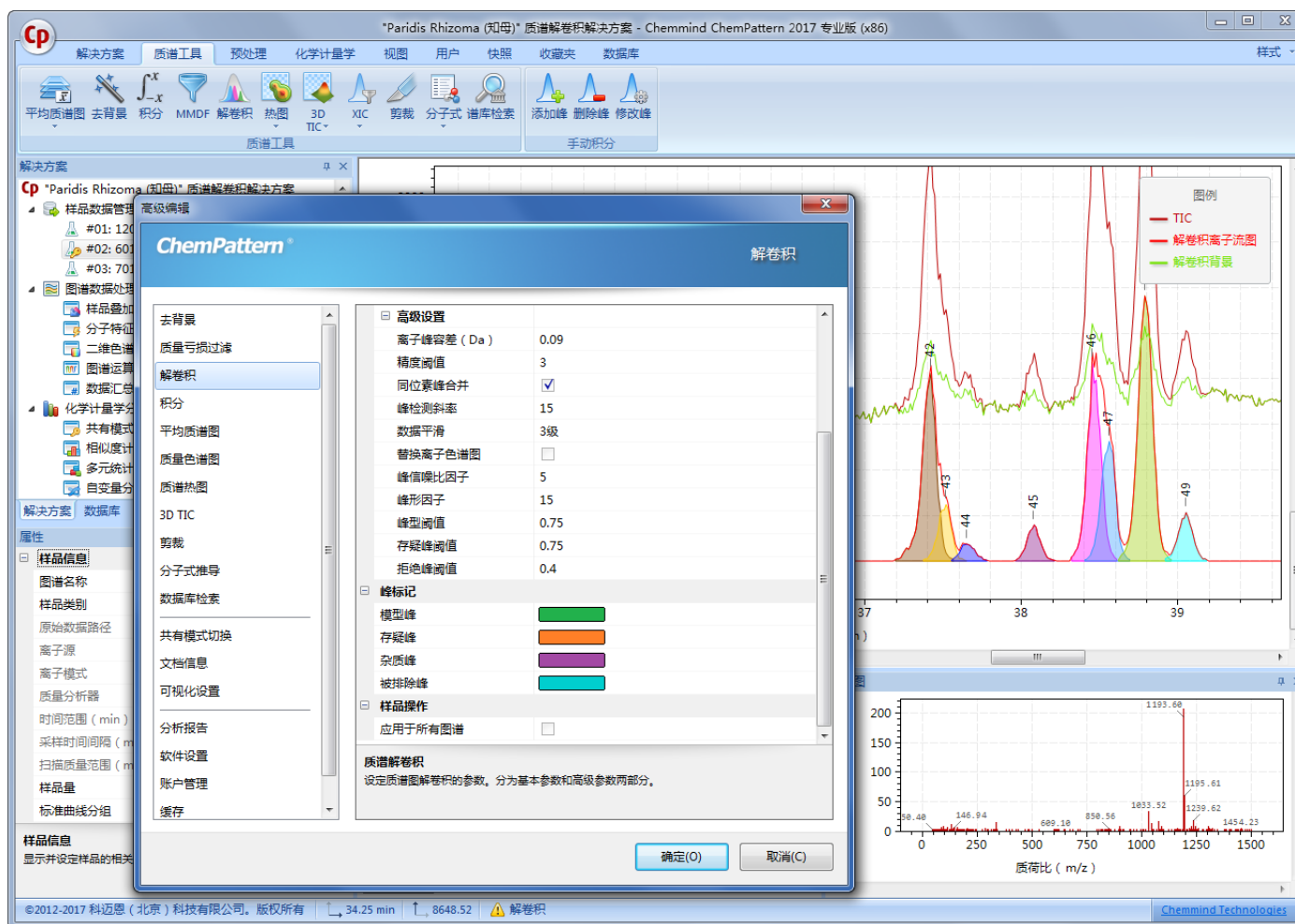
5. ChemPattern®2017新增核心功能

ChemPattern®2017版本采用全新Office Ribbon界面设计

- 在MS解决方案中，新增质谱成像化学计量学解决方案
- 在MS解决方案中，新增质谱3D TIC可视化功能模块
- 在LC解决方案中，新增色谱3D DAD光谱可视化功能模块
- 在色谱法和MS解决方案中，新增数字化勾兑系统
- 化学计量学模块中，新增OPLS和OPLS-DA（正交偏最小二乘判别）算法

5. ChemPattern®2017新增核心功能

- 在MS解决方案中，新增对mzXML格式质谱数据的支持
- 在MS解决方案中，支持导入不同扫描通道数据的cdf文件
- 在MS解决方案中，增加多重质量亏损过滤（MMDF）功能
- 在MS解决方案中，支持导入不等距采样间隔的数据
- 在MS解决方案中，支持导入连续模式（continuum）轮廓质谱图
- 在MS解决方案中，新增质谱化合物结构式推导功能模块
- 光谱模块中，新增拉曼光谱解决方案
- 全面改进的质谱解卷积，功能更加强大
- 改进后的矩阵数据（支持任意类型分析仪器数据）导入向导，使用更加便捷



免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

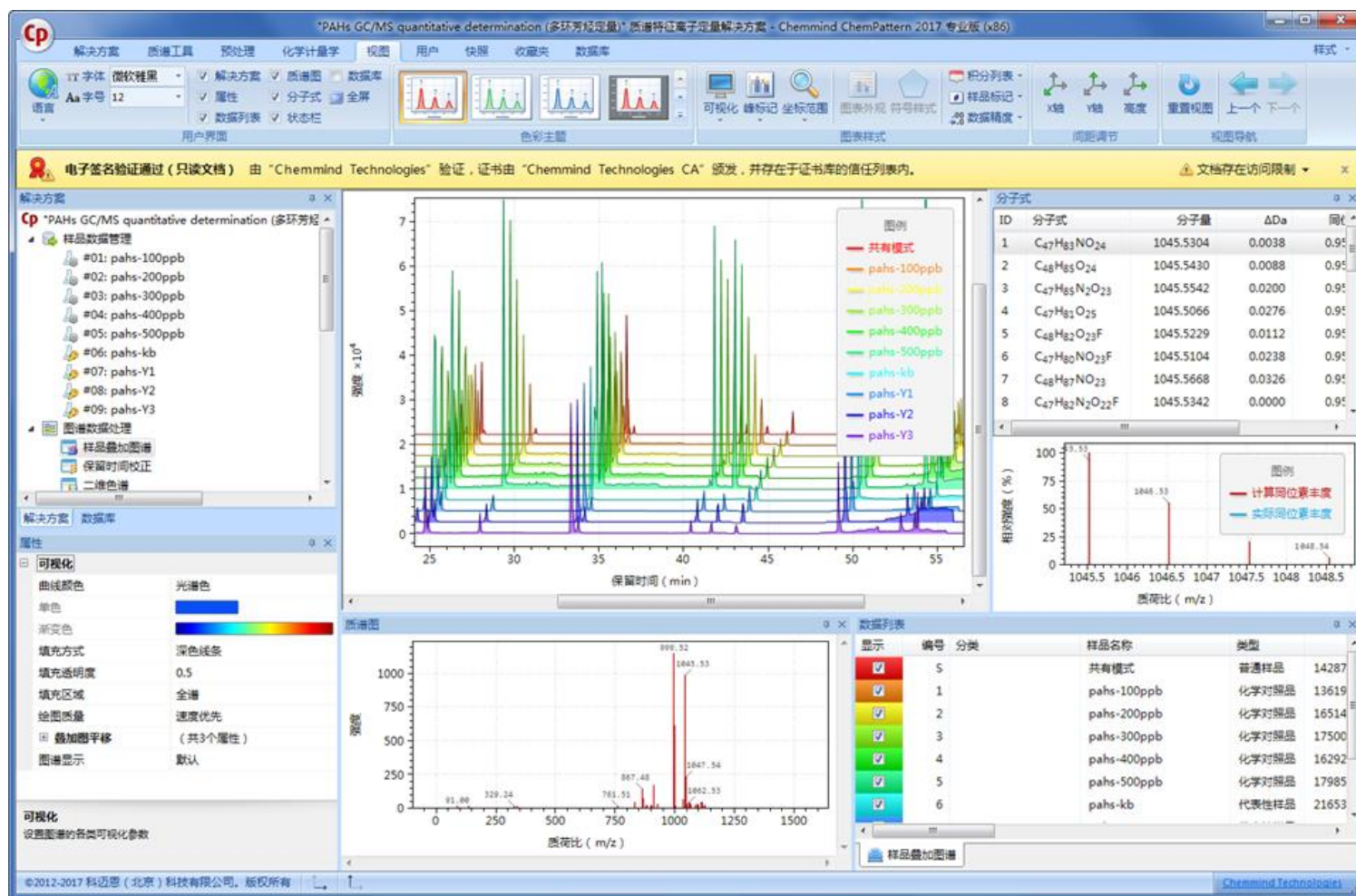


图2. 2017版所采用的全新Office Ribbon界面设计

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

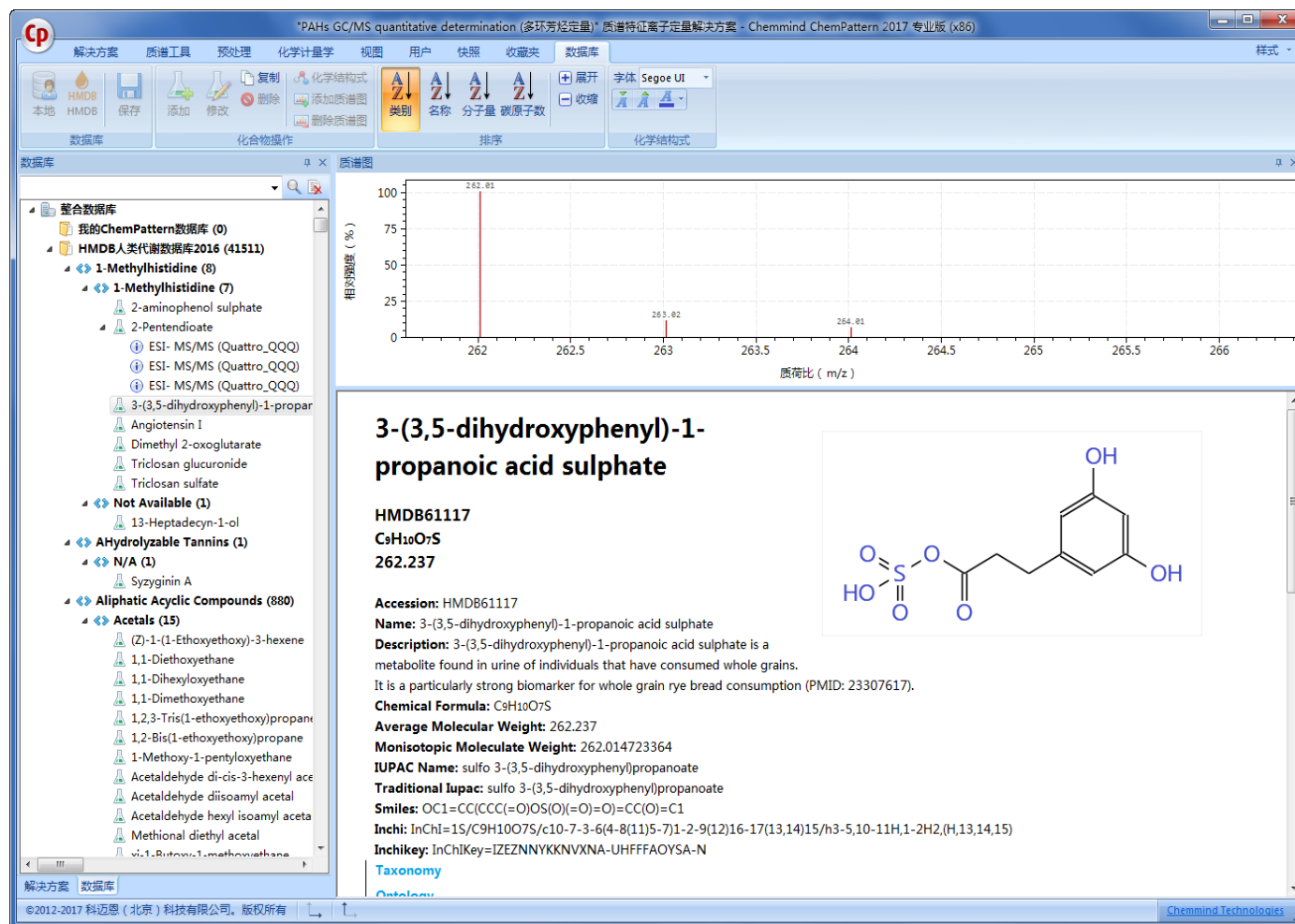


图3. 自定义化合物数据库的及内置HMDB®人类代谢物数据库

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

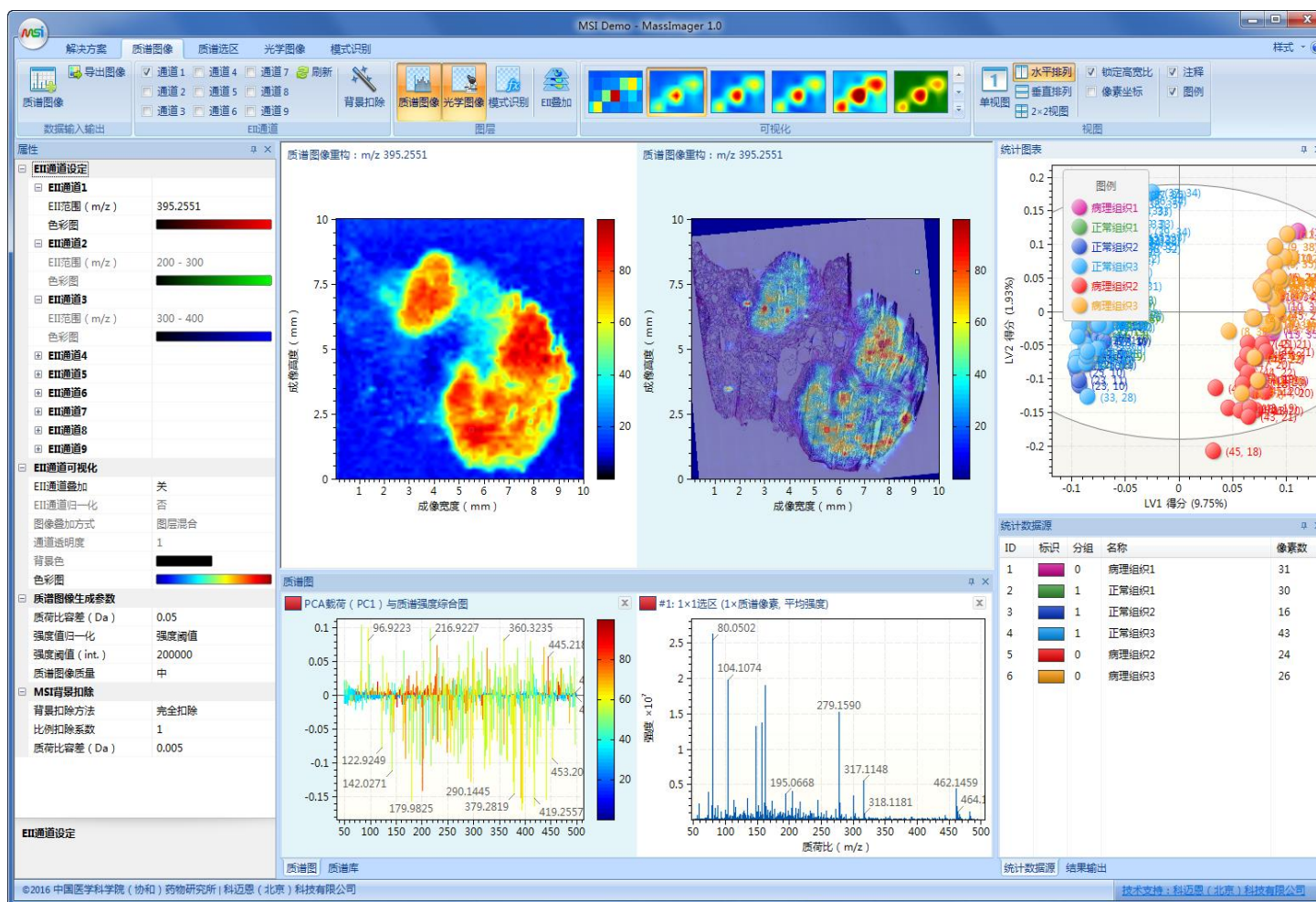


图4. MS解决方案中新增的质谱成像化学计量学解决方案

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

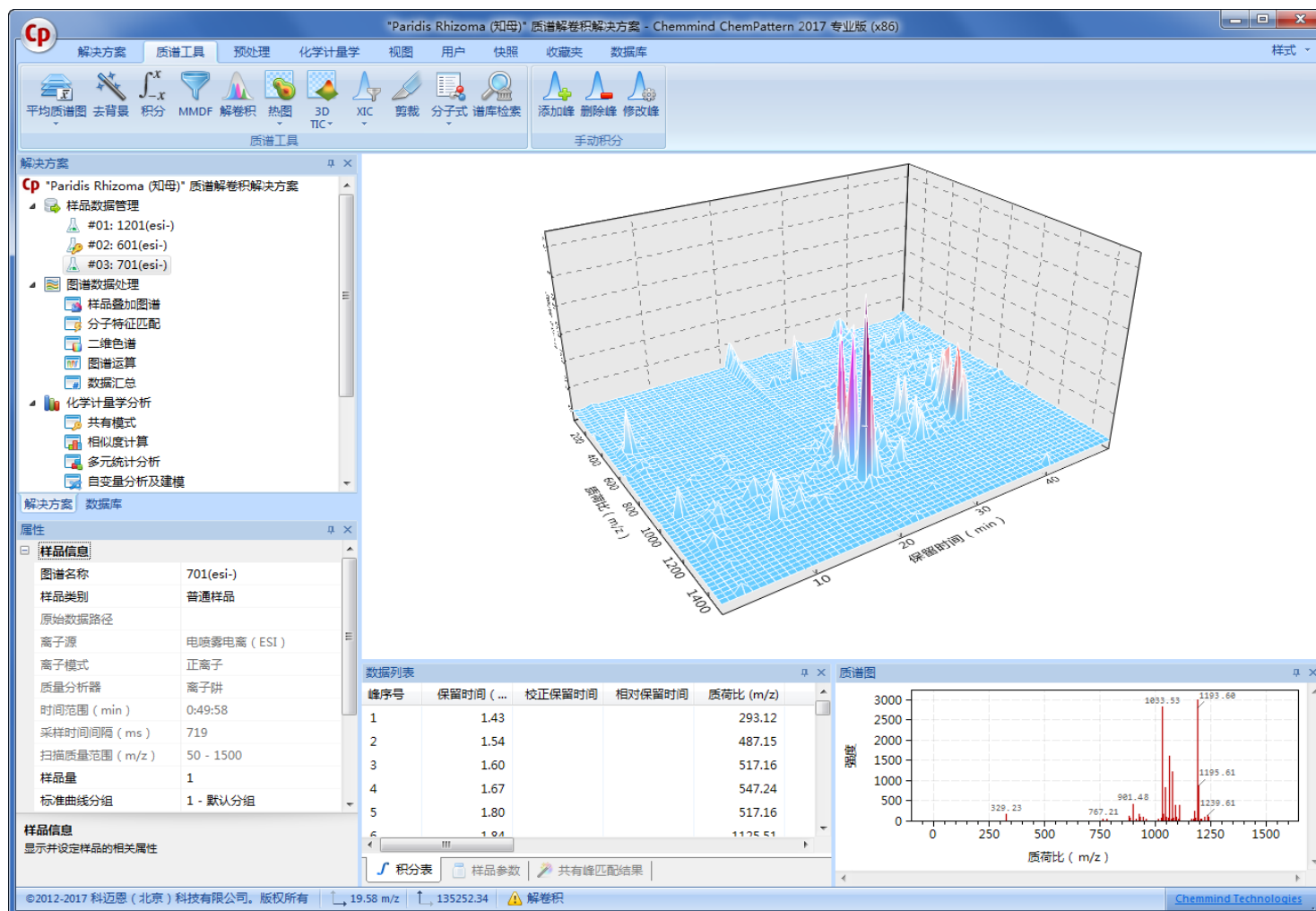


图5. MS解决方案中新增的质谱3D TIC可视化功能模块

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

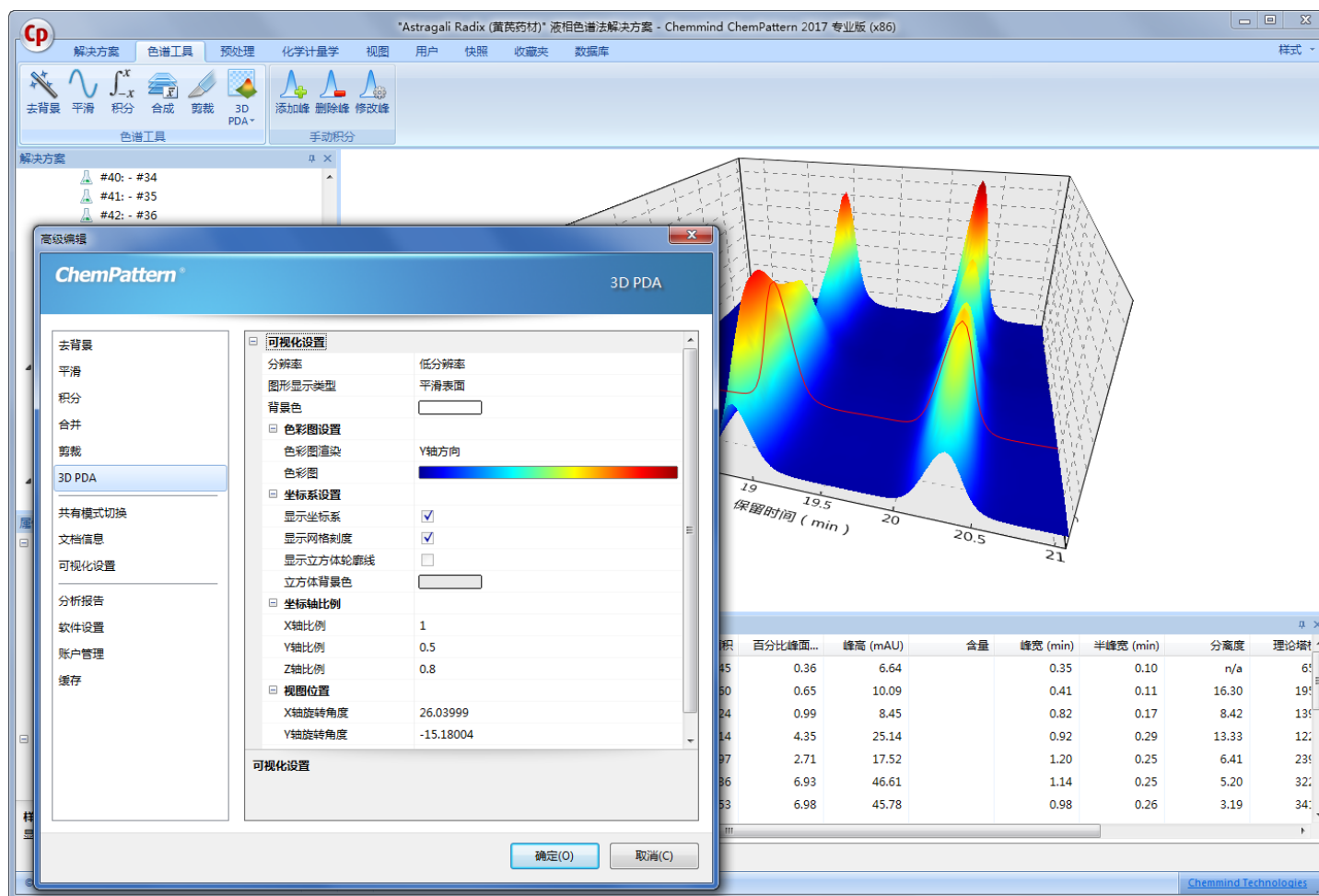


图6. LC解决方案中新增的色谱3D DAD光谱可视化功能模块

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

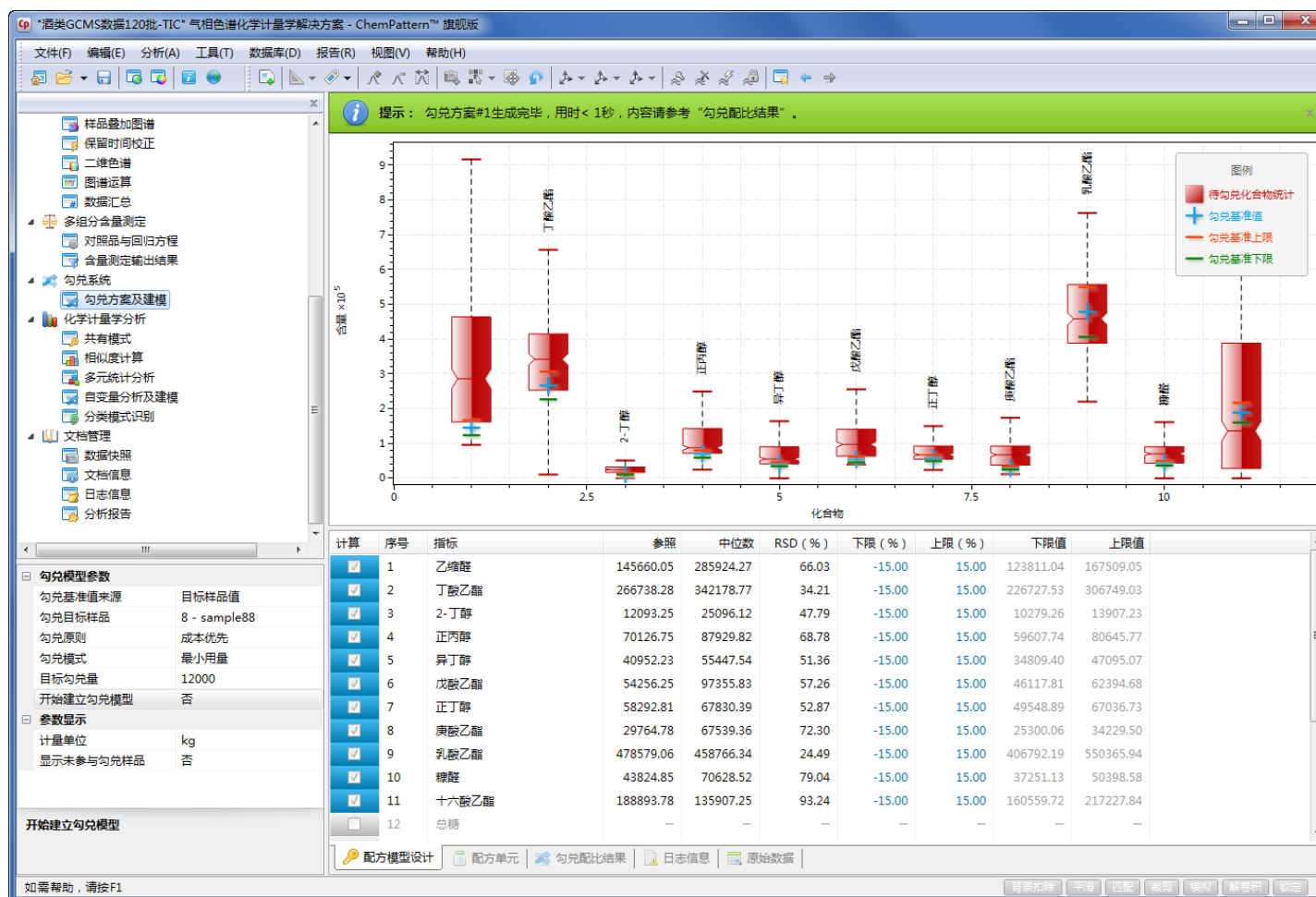


图7.在色谱和质谱解决方案中，新增数字化定量勾兑功能模块

免费试用下载：http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

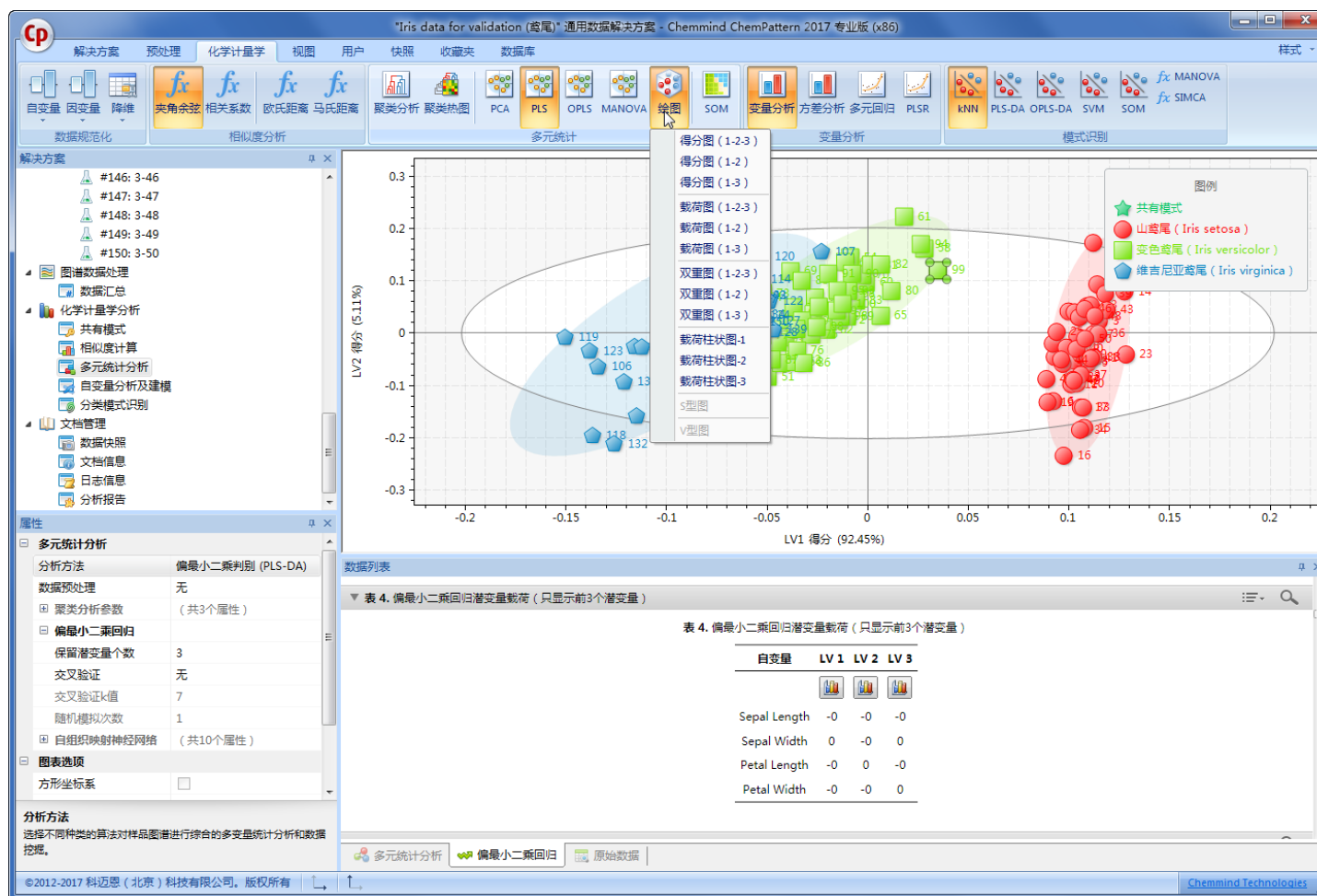


图8. 化学计量学模块中新增的OPLS和OPLS-DA（正交偏最小二乘判别）算法

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

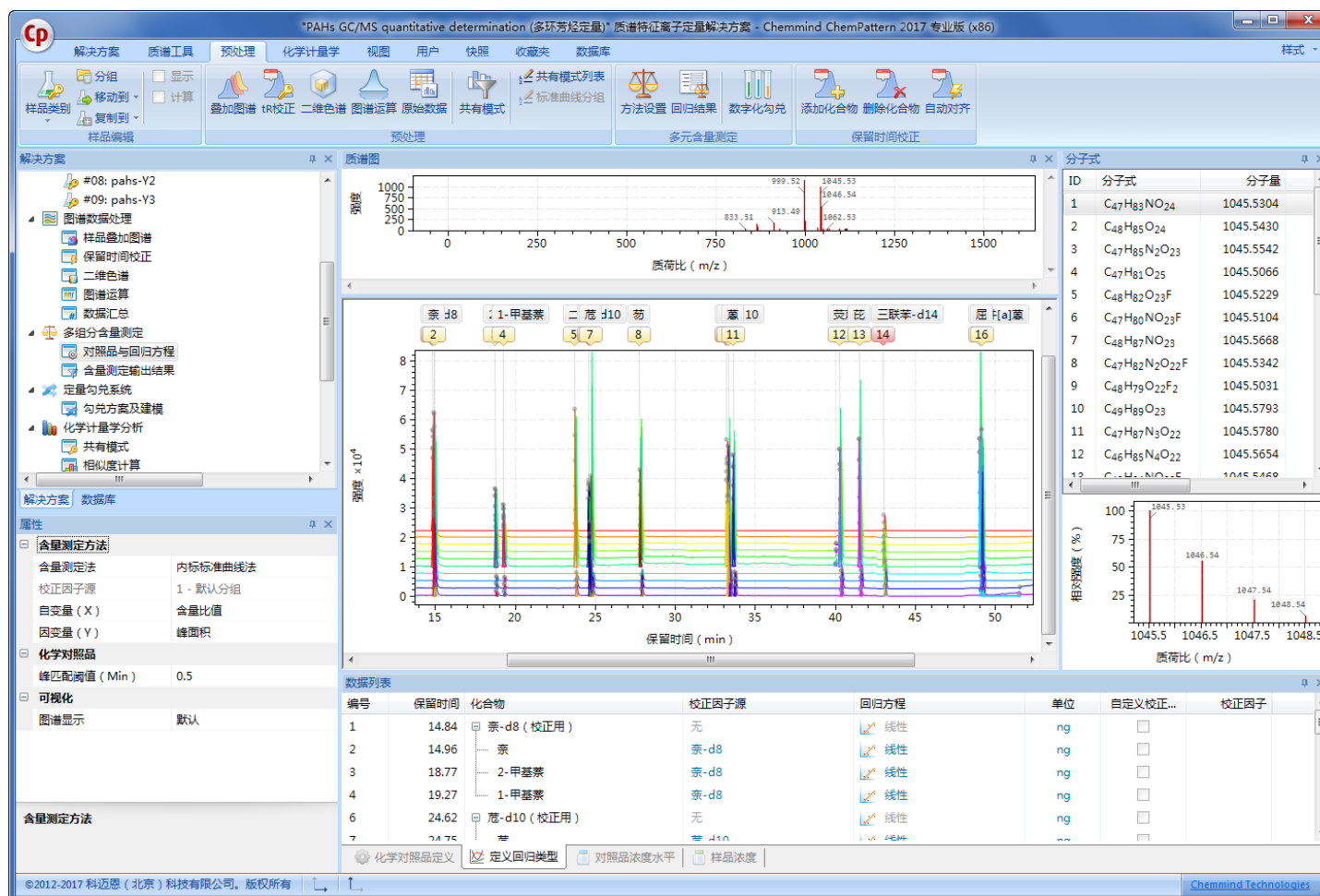


图9. MS解决方案中新增的基于特征离子定量的化学计量学模块

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

样品参数

最小用量	100
单位用量	100
色谱条件	
质谱联用仪器	LC/MS
样品制备/预处理	
色谱条件	
质谱条件	
质谱条件	
进样接口	电喷雾
离子源	电喷雾电离 (ESI)
离子模式	正离子
质量分析器	离子阱
质谱数据存储类型	棒状质谱图
扫描通道总数	1
提取扫描通道	1
扫描获取时间调整	<input type="checkbox"/>
合并时质荷比容差 (Da)	0
仪器信息	
仪器生产厂家/型号	

确定(O) 取消(C)

图10. MS解决方案中新增支持导入不同扫描通道数据的cdf文件

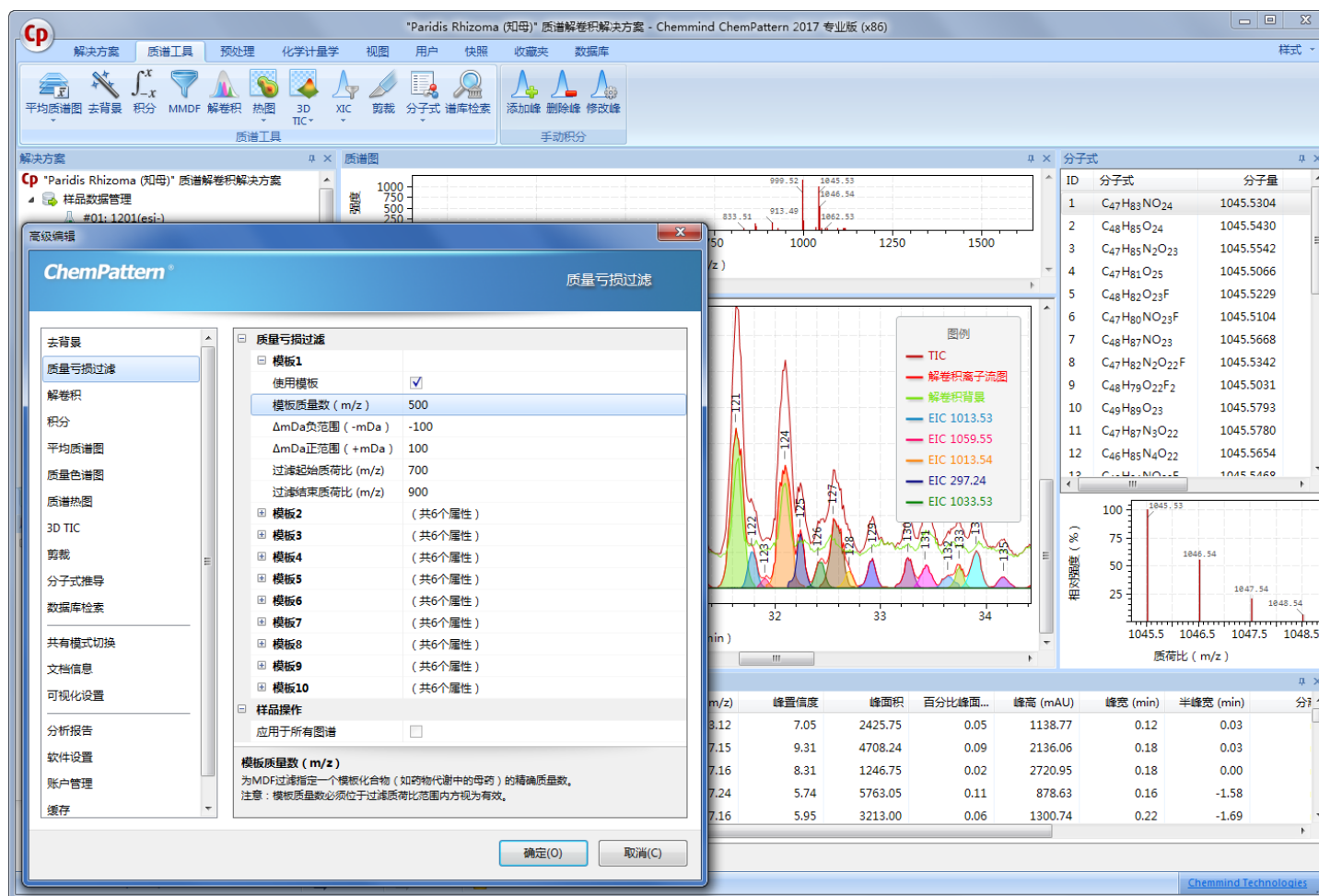


图11. MS解决方案中增加多重质量亏损过滤 (MMDF) 功能

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

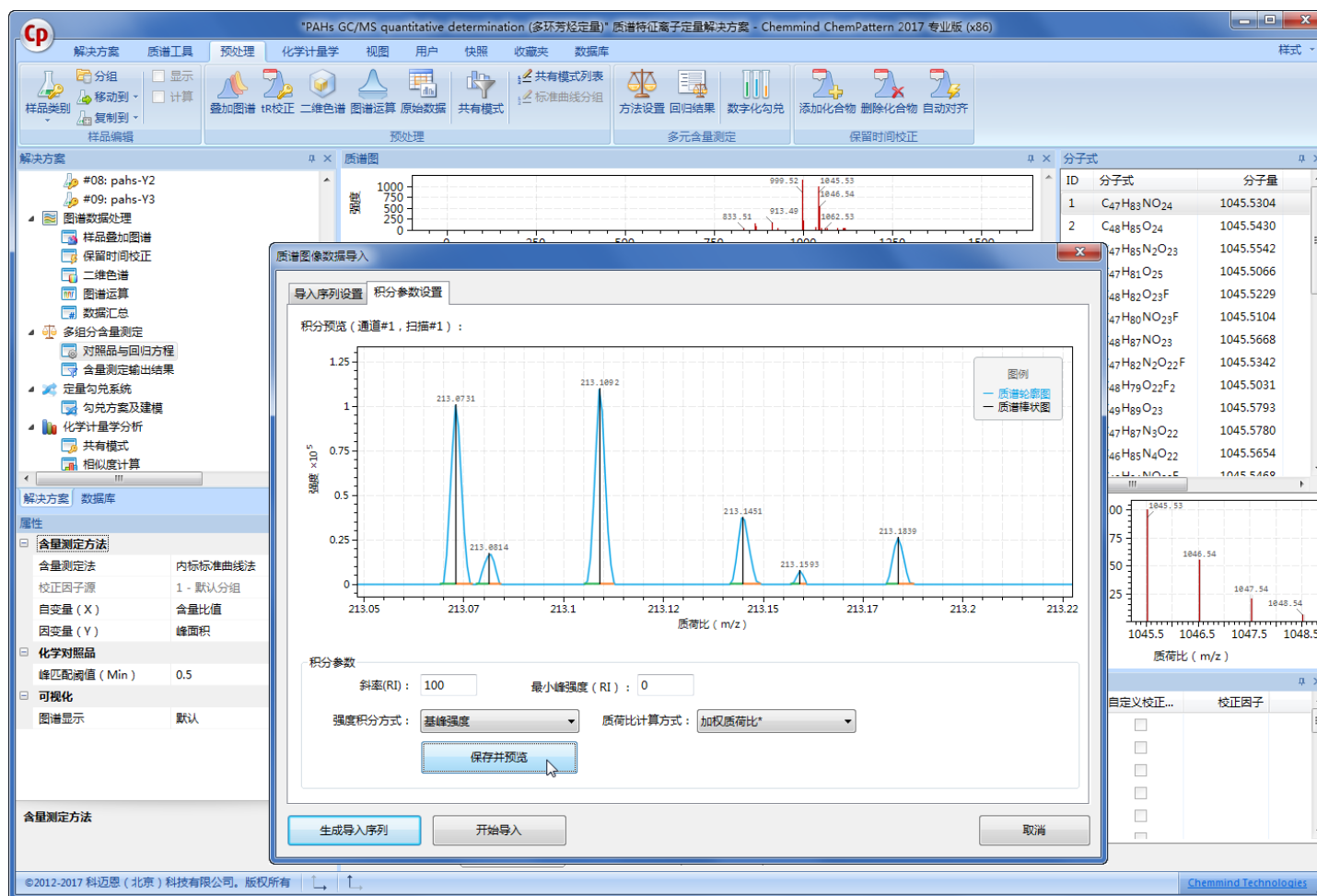


图12. MS解决方案中支持导入连续模式 (continuum) 轮廓质谱图

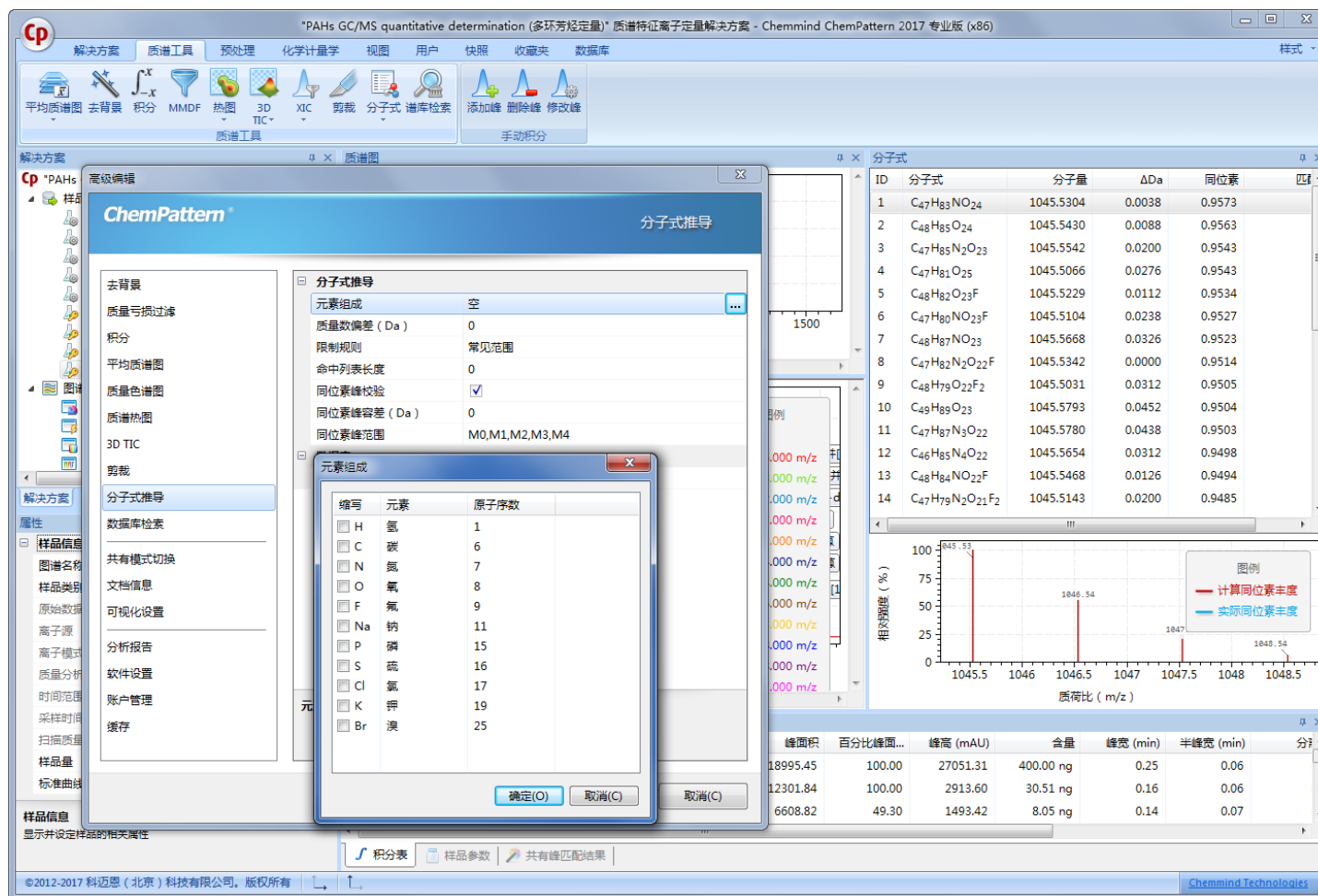


图13. MS解决方案中新增的质谱化合物结构式推导功能模块

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html

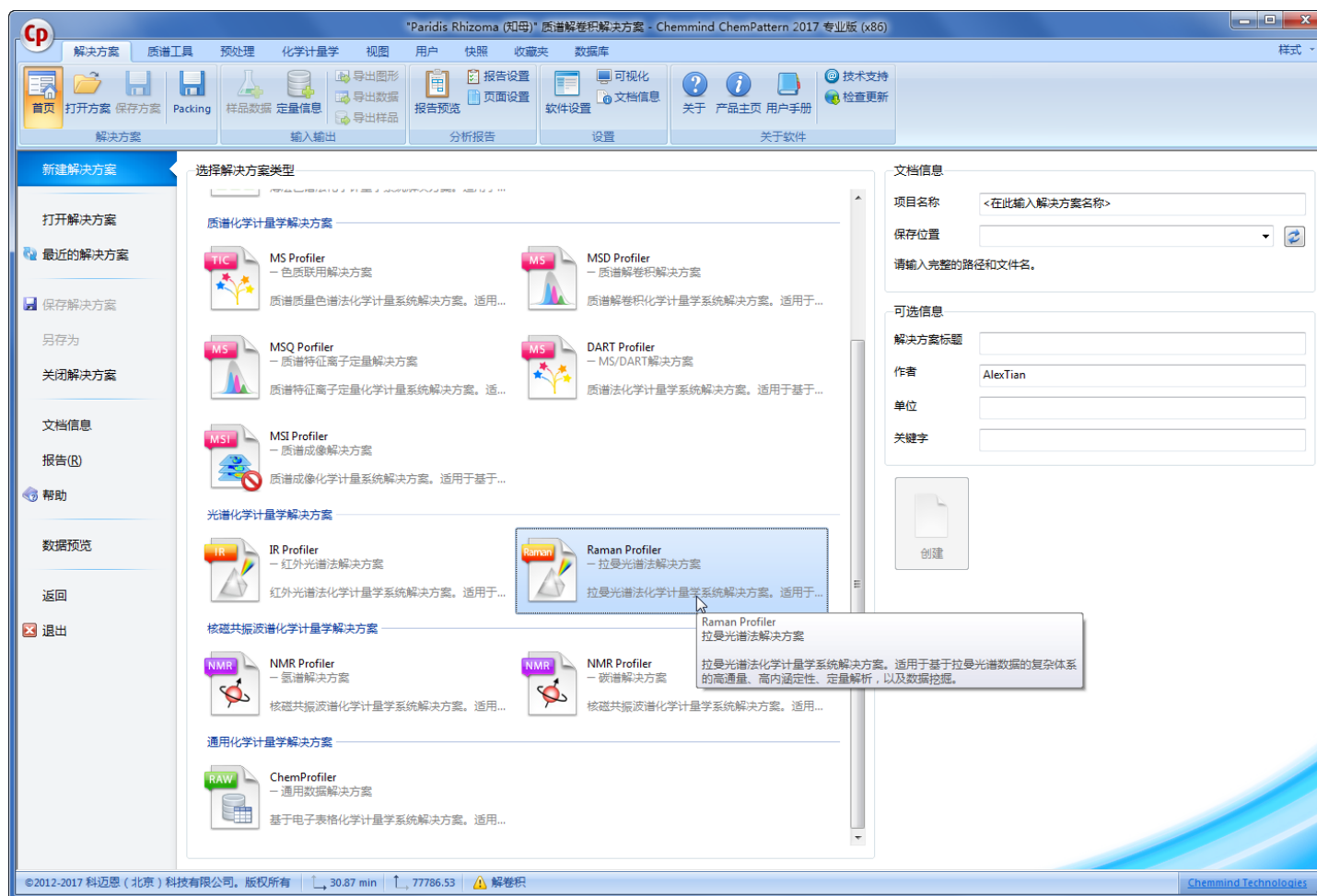


图14. 光谱模块中新增拉曼光谱解决方案

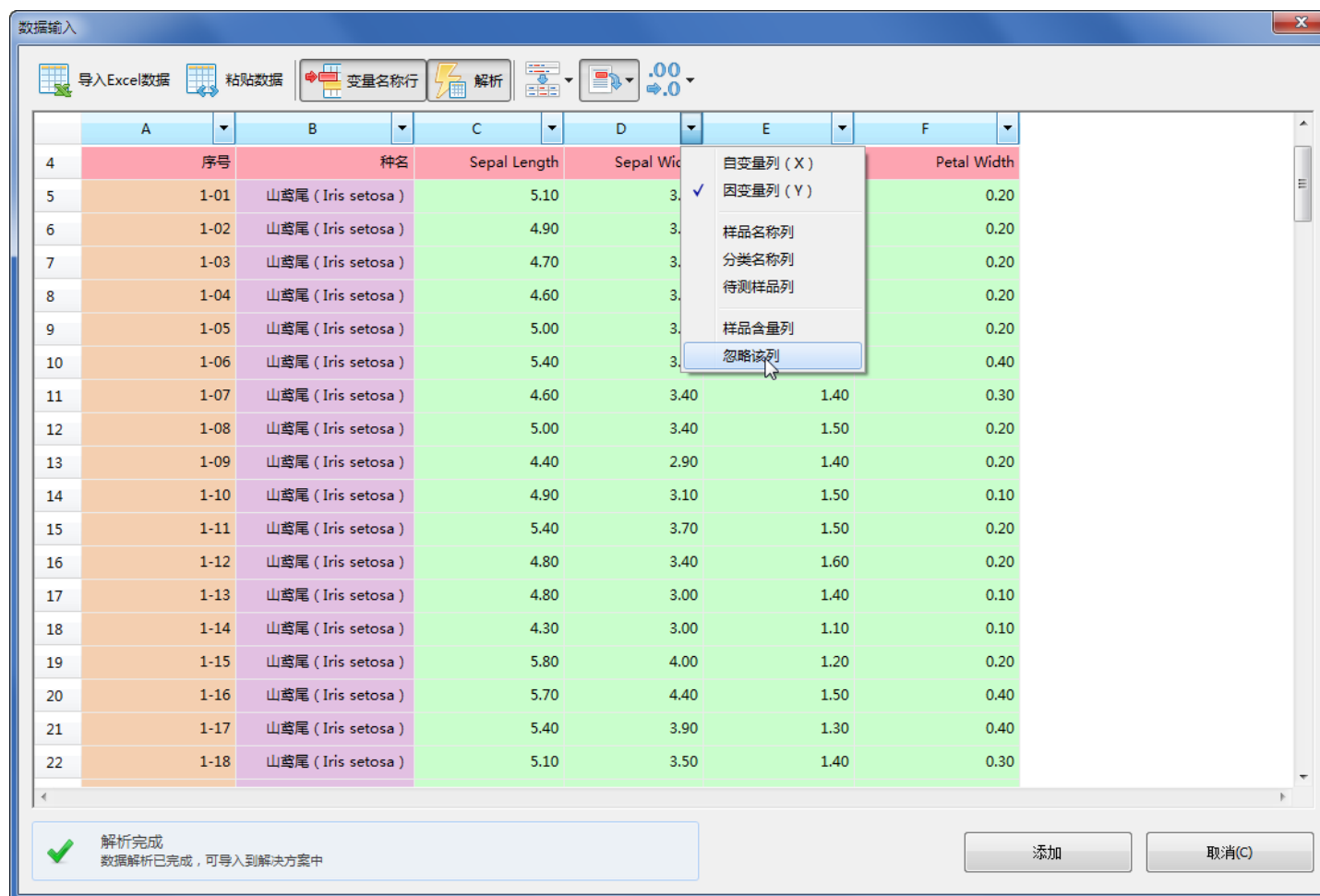


图15. 改进后的矩阵数据（支持任意类型分析仪器数据）导入向导

免费试用下载: http://www.chemmind.com/cn/support_download.html