

Guía de Uso de MS Search - Librería NIST

**Análisis de espectros
de masas**

Librería NIST

La espectrometría de masas es una herramienta fundamental en el análisis químico, que permite la identificación de compuestos mediante la comparación de espectros obtenidos experimentalmente con bases de datos de referencia. MS Search, desarrollado por el National Institute of Standards and Technology (NIST), es un software diseñado para facilitar la búsqueda, comparación y análisis de espectros de masas dentro de la librería del NIST.

Esta guía tiene como objetivo proporcionar una descripción detallada del funcionamiento de MS Search, incluyendo sus principales características, opciones de búsqueda y herramientas de análisis. A lo largo del documento, se explica cómo interpretar los resultados, optimizar las búsquedas y utilizar las funciones avanzadas del software para mejorar la precisión en la identificación de compuestos.

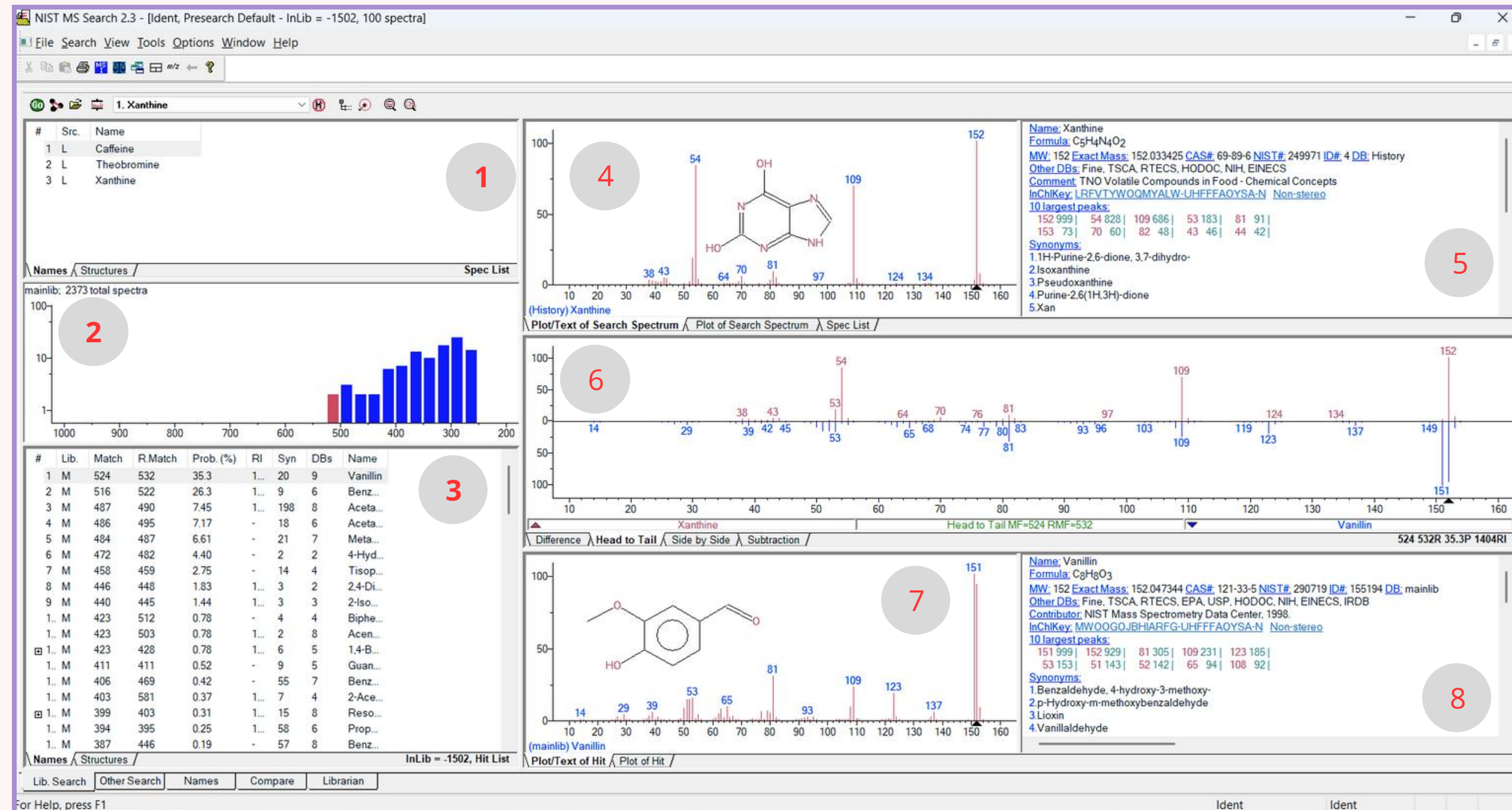
Dirigida a investigadores, analistas forenses y profesionales hispanohablantes en química analítica, esta guía sirve como recurso para el uso eficiente de MS Search en la identificación de sustancias mediante espectrometría de masas.

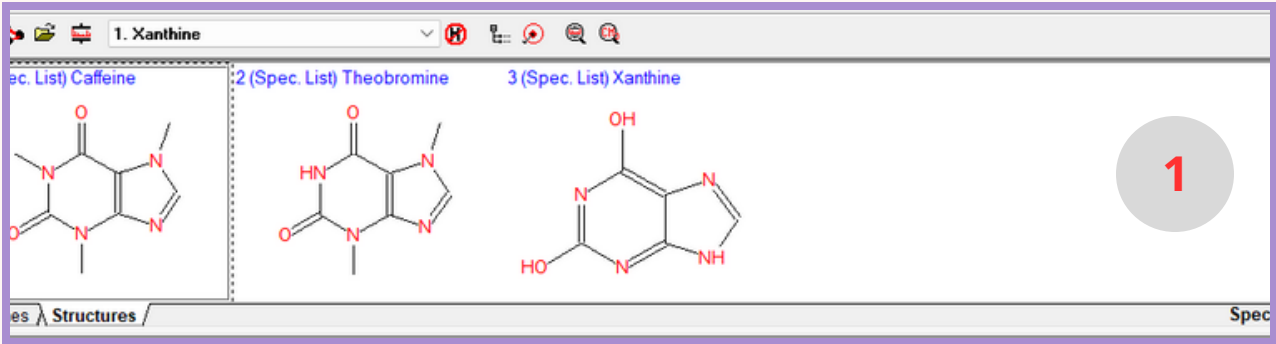
Familiarización con el Programa

Buscar en los programas instalados el icono/programa "MS search v2.3"

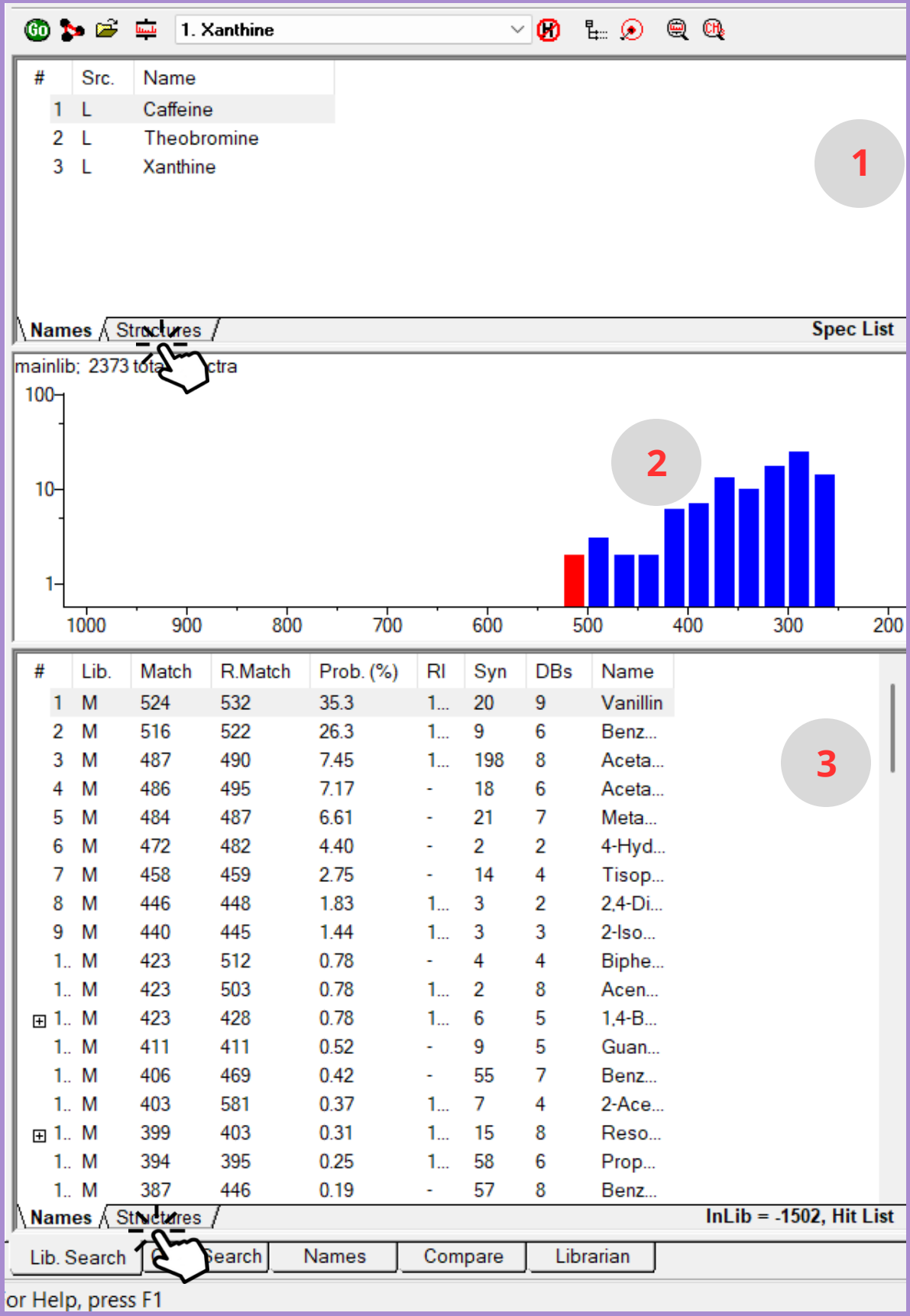
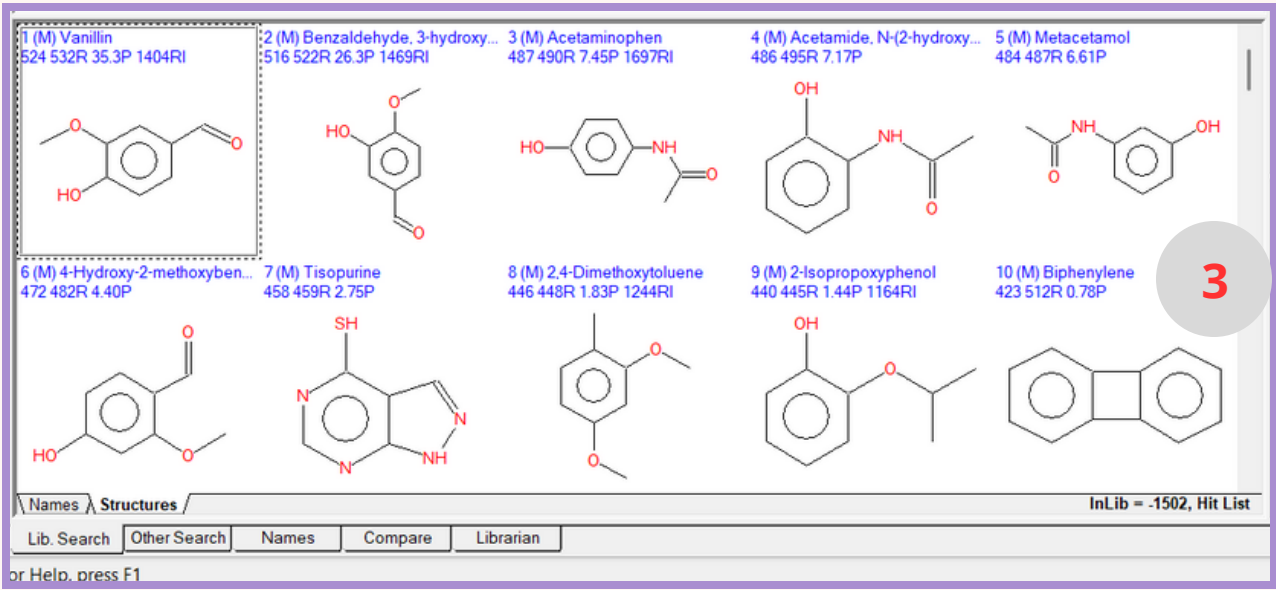


Al abrir el programa, se pueden observar ocho recuadros que contienen información sobre el análisis que se está realizando y sobre los compuestos guardados en la base de datos de las librerías que se están usando.





Al dar clic en la pestaña **“Structures”**, la lista cambia y en vez de los nombres aparece la estructura de los compuestos en vez de su nombre.



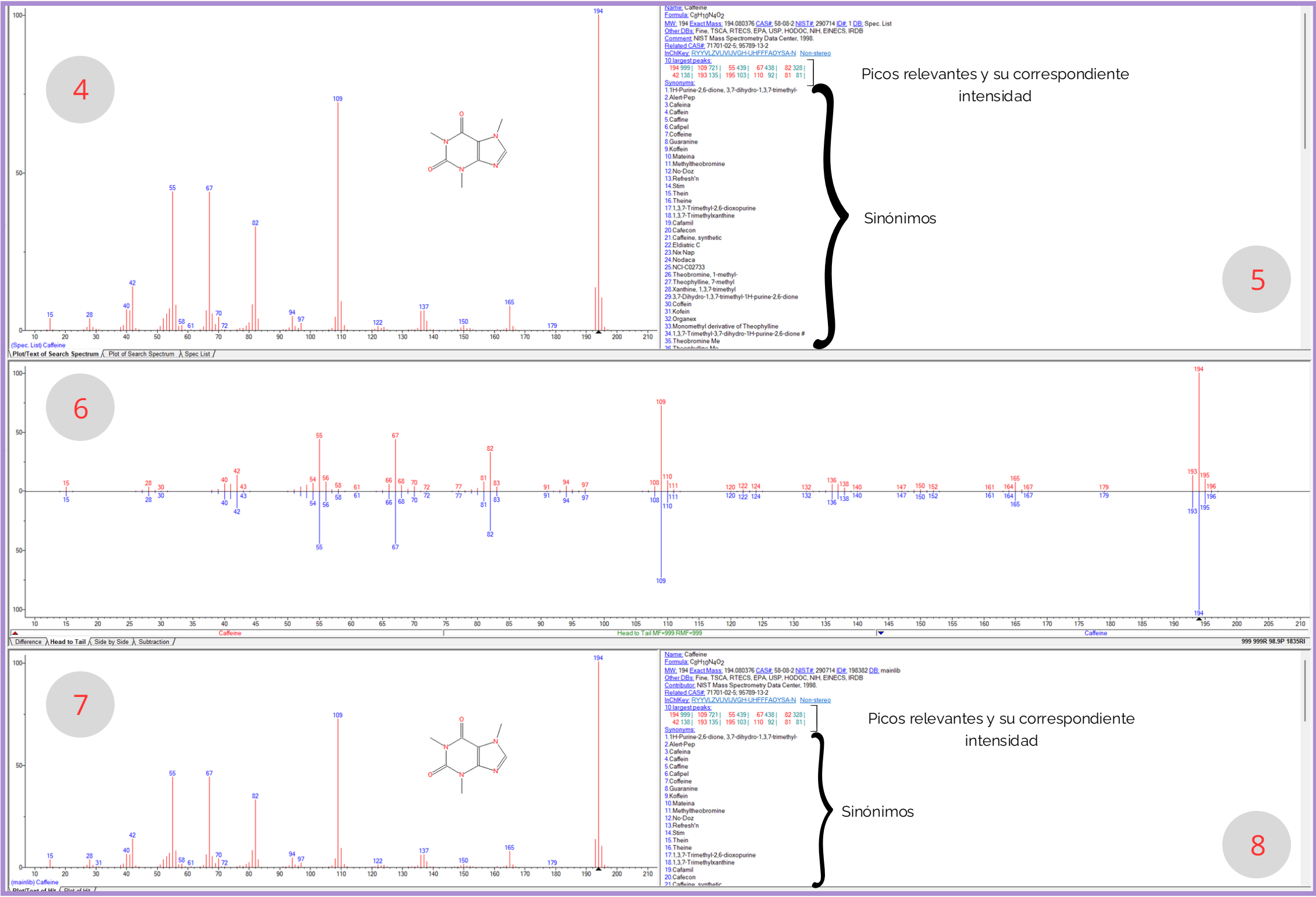
En el recuadro número 1, aparece el historial con los nombres de los compuestos que han sido analizados y comparados en la base de datos de las librerías.

El recuadro número 2 ofrece una representación gráfica que compara el compuesto en análisis con aquellos que el software identifica como similares. El color rojo señala el compuesto con la mayor probabilidad de similitud, mientras que el azul representa los compuestos que pueden compartir una o varias características. Asimismo, la distancia entre estos compuestos puede servir como un criterio para su descarte.

En el recuadro número 3 se presenta la lista de compuestos que poseen similitudes con el compuesto en análisis, los cuales están ilustrados en la gráfica del recuadro número 2. Asimismo, cada compuesto incluye un número que indica el grado de similitud entre el compuesto analizado y el de la biblioteca; cuanto más cercano esté el número a 999, mayor será la similitud.

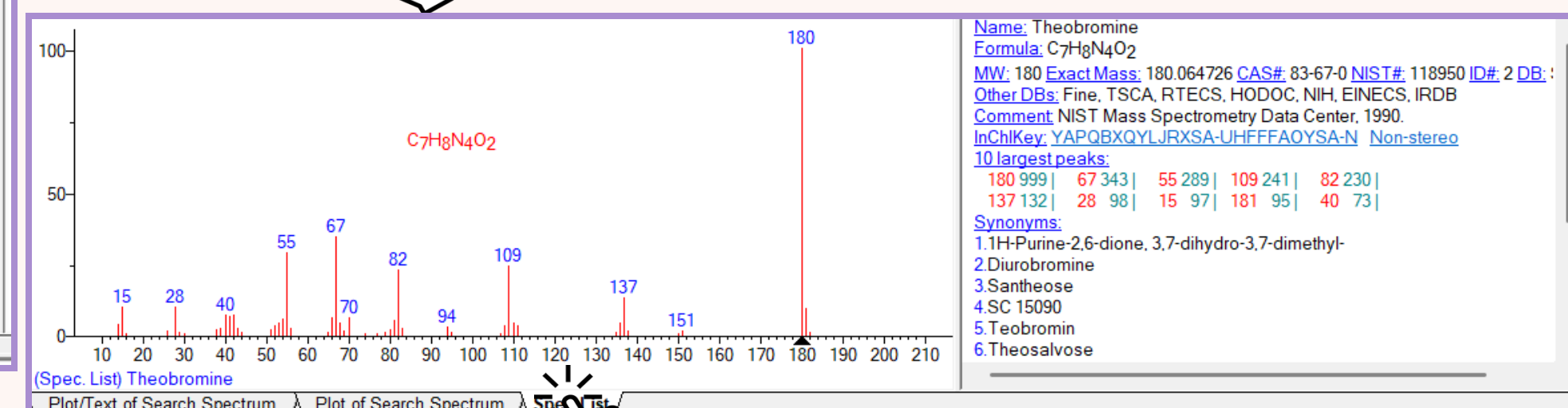
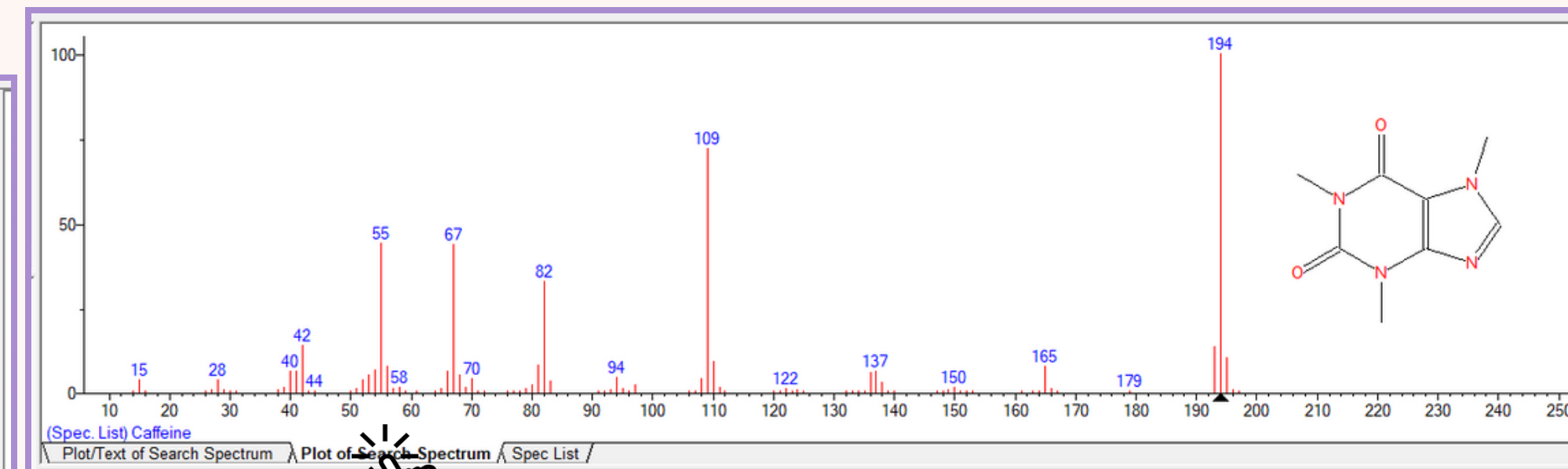
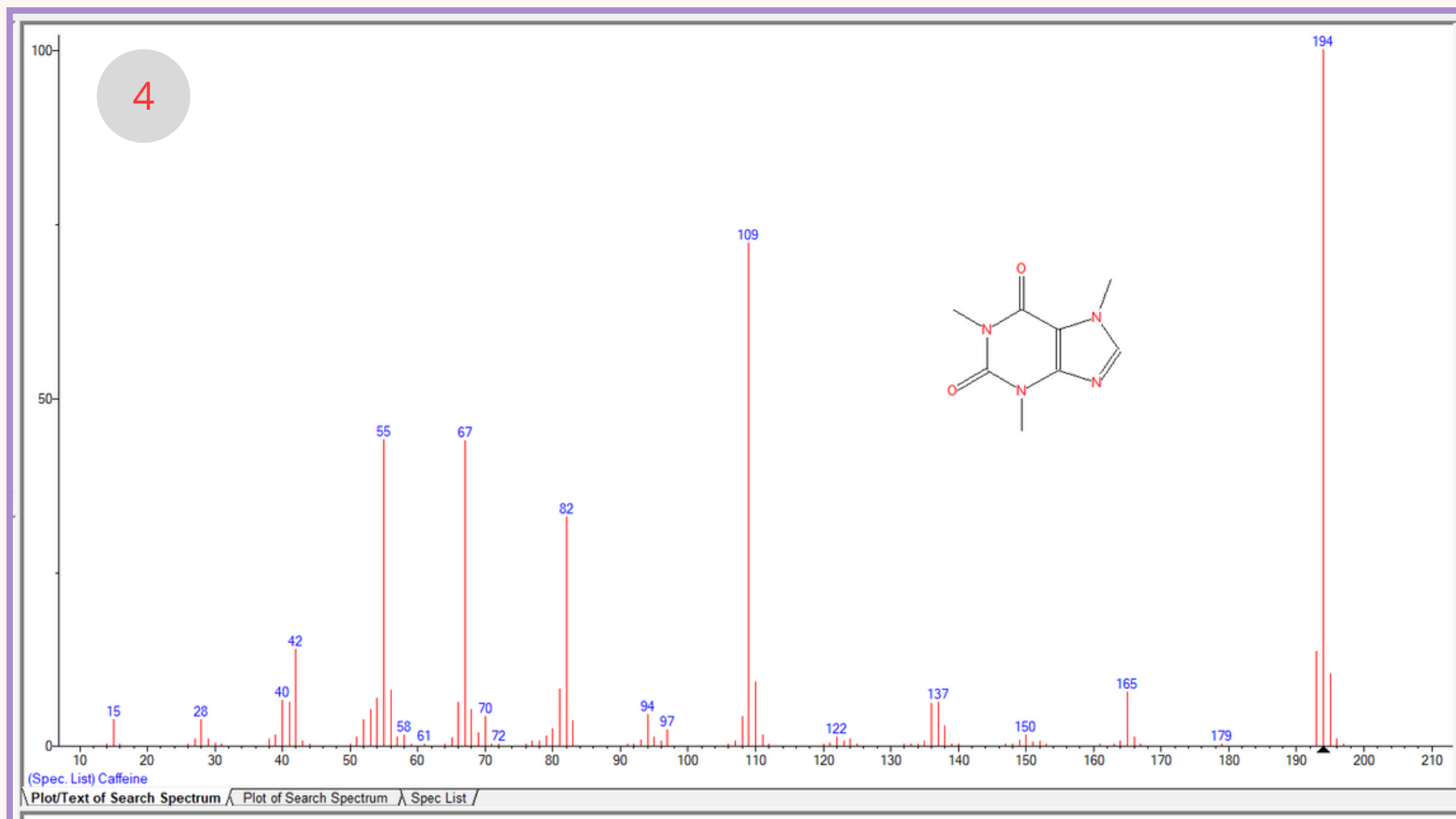
En el recuadro número 4 se presenta el espectro de masas del compuesto en análisis. La estructura del compuesto se muestra cuando el espectro de masas se guarda junto con dicha estructura.

En el recuadro número 6 se presenta el espectro de masas del compuesto en análisis, en contraste con el espectro de masas del compuesto de la librería con el que se desea realizar la comparación. Esto facilita la identificación de los picos correspondientes a fragmentos similares.

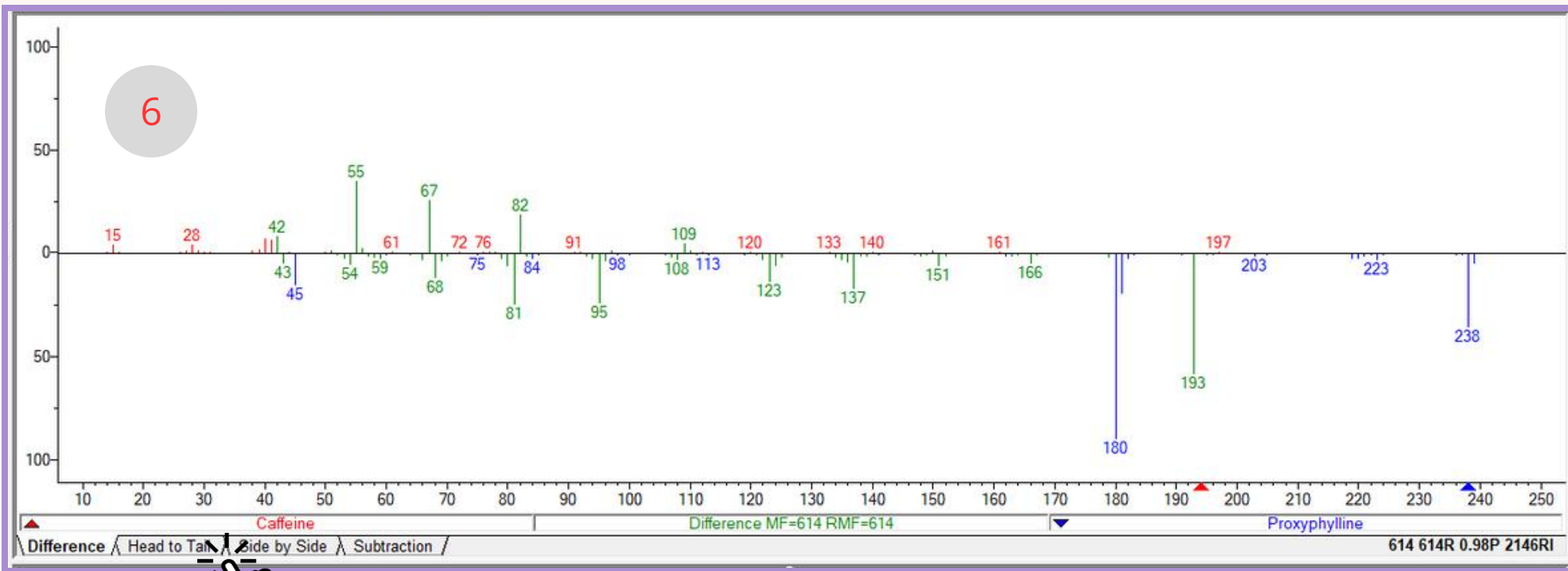


En el recuadro número 7 se muestra el espectro de masas del compuesto de la librería.

En el recuadro número 8 se presenta la información correspondiente al espectro de masas del compuesto de la librería, incluyendo su nombre, fórmula molecular, masa molar, entre otros detalles. Los datos varían según la librería.

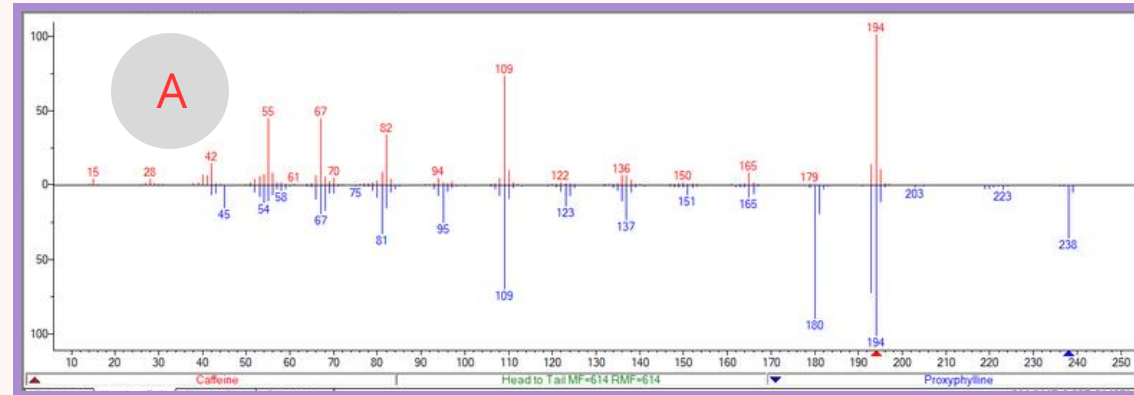


Navegando por las distintas pestañas **“plot of search spectrum”** o **“Spec List”**, se puede visualizar el espectro de masas sin información o el espectro de masas con información, respectivamente, de cualquier compuesto indicado en el recuadro número 1. Esto facilita la observación del espectro más amplio.

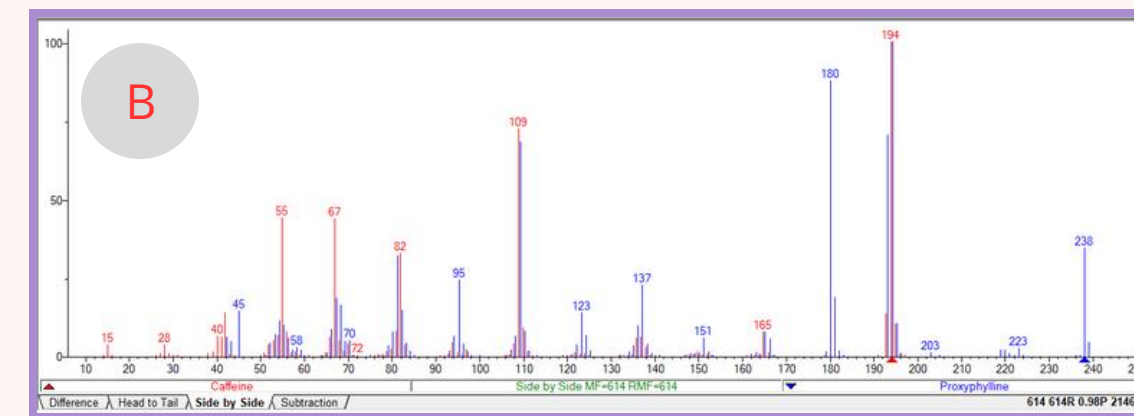


En el recuadro numero 6 en la opción predeterminada “**Difference**”, se puede observar en la parte superior picos en color rojo correspondientes al compuesto desconocido/interés y en la parte inferior picos en color azul correspondientes al compuesto de la librería que se está usando para comparar. Los picos de color verde corresponden a los picos que se encuentran en ambos compuestos. La intensidad del pico de color verde y su posición (superior o inferior) es respectivo al espectro donde la intensidad es mayor.

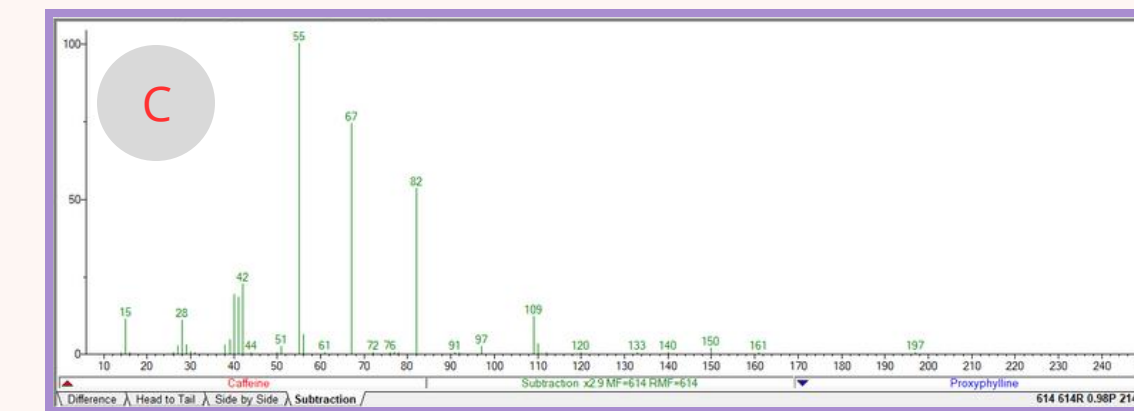
Nota: Los colores de los picos son establecidos por el software, pero pueden ser modificados si así se desea. Además, hacer clic derecho con el mouse ofrece más opciones para interactuar durante el análisis.



Head to tail ; en esta opción aparece en la parte superior (rojo) picos correspondiente al compuesto desconocido/interés y en la parte inferior (azul) picos correspondientes al compuesto del a librerá.

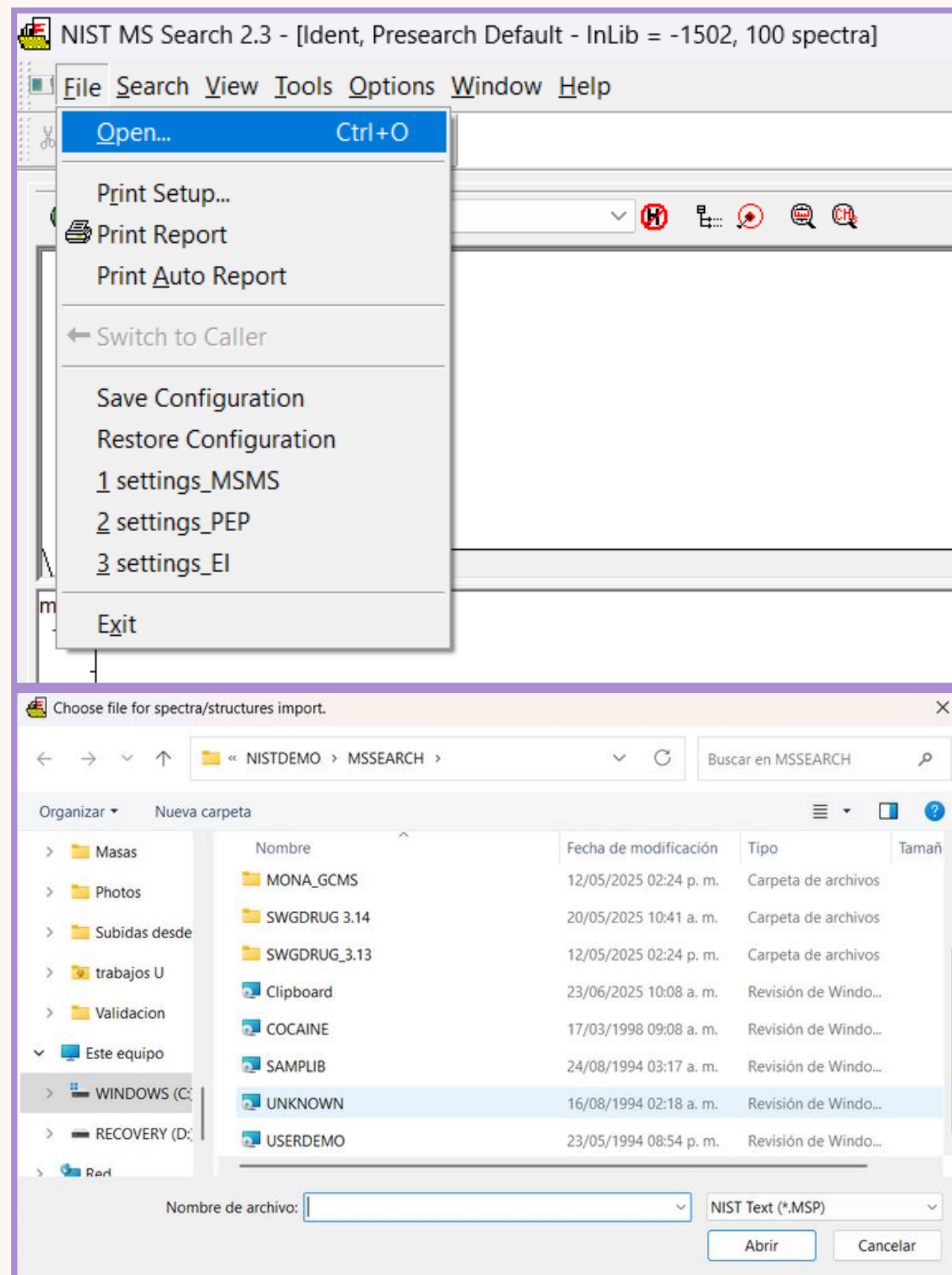


Side by side; en esta opción aparece en la parte superior picos rojos correspondiente al compuesto desconocido/interés y picos azules correspondientes al compuesto de la librería. Un solo plano.



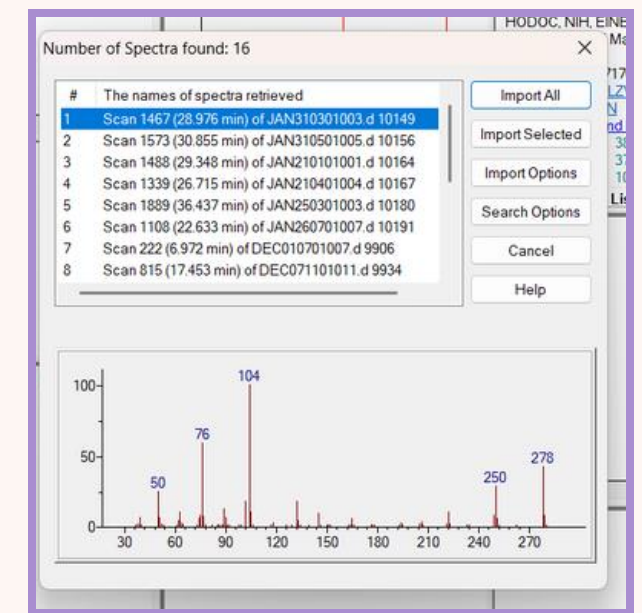
Subtraction; en esta opción aparece picos de color verde que son el resultado de restar los dos espectros. Esta función es usada cuando el espectro proviene de una mezcla.

Menús y Funciones



En la opción “**File**” se encuentra la función “**Open**” por medio de la cual se puede abrir uno o varios archivos a la misma vez.

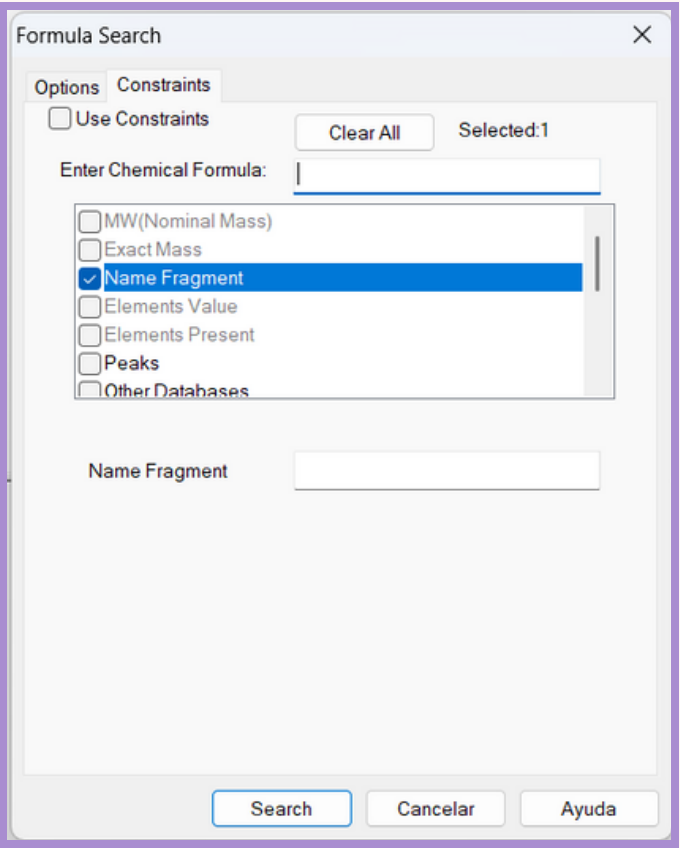
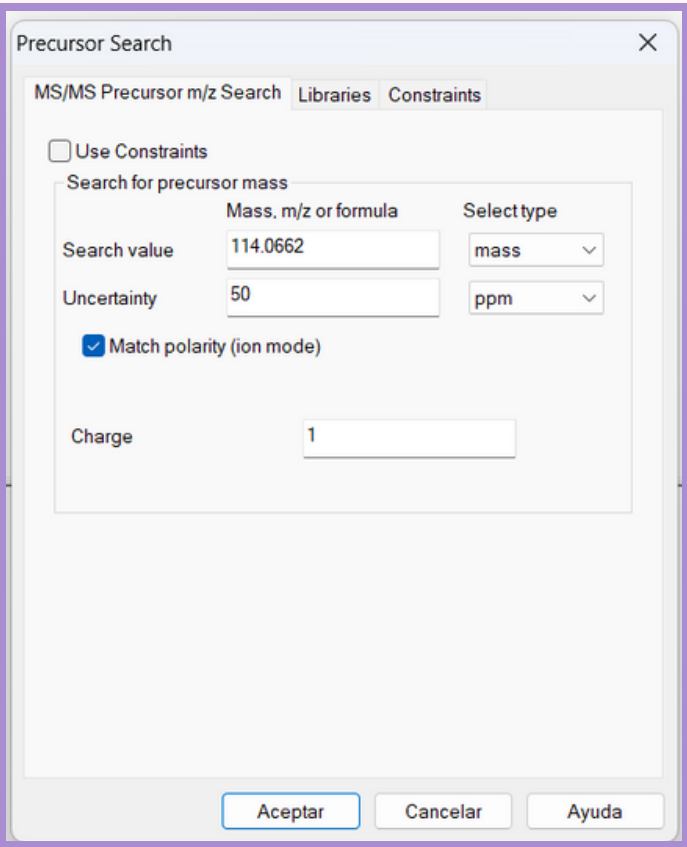
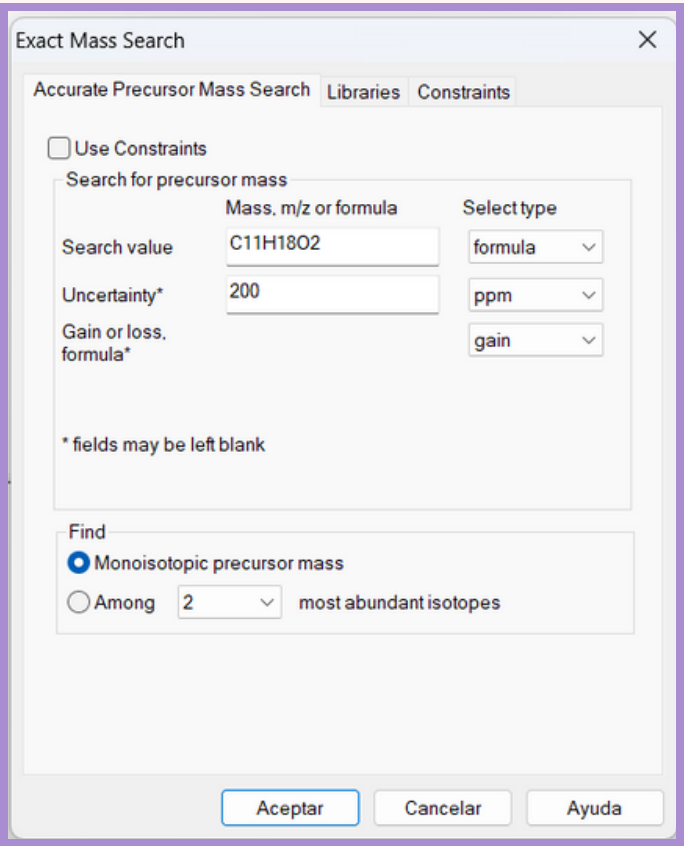
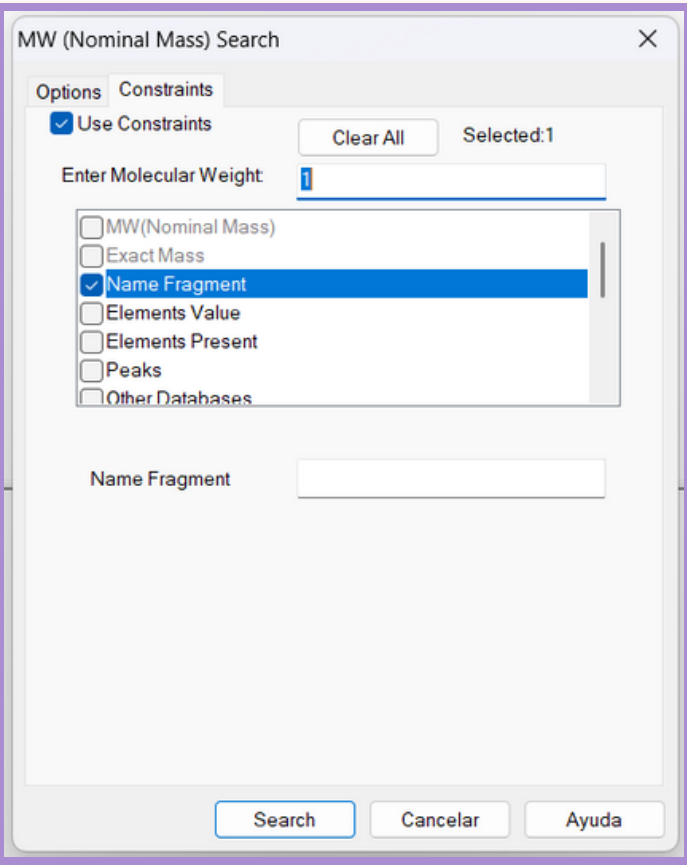
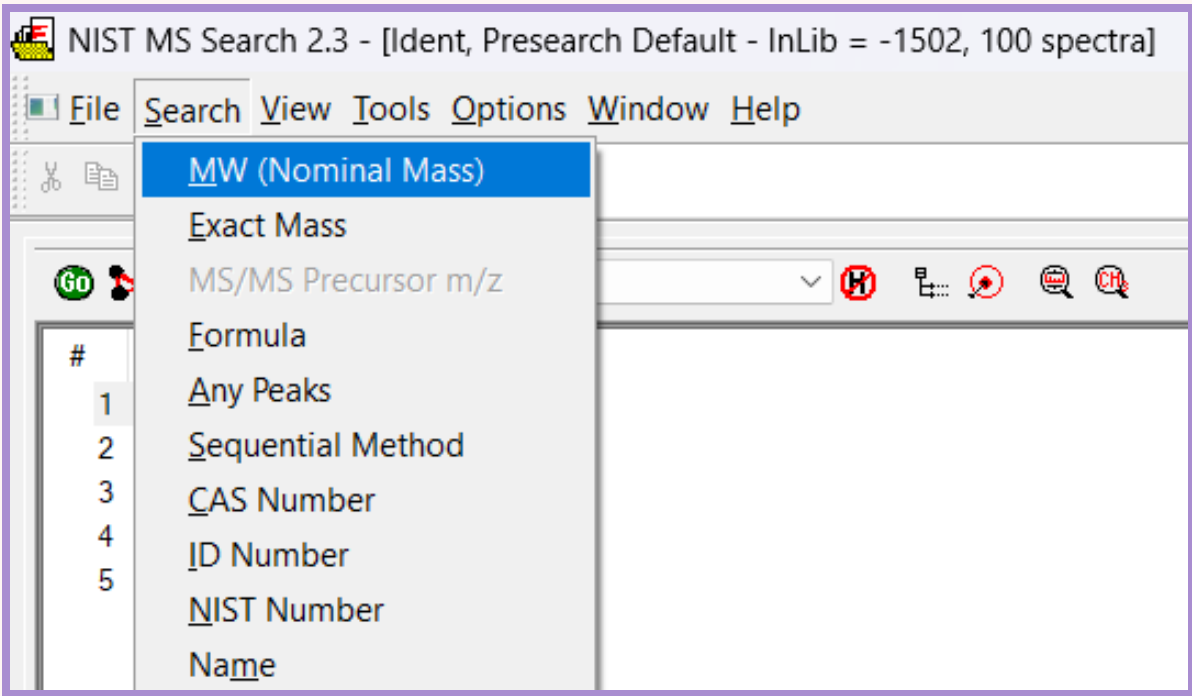
Una vez que se ha seleccionado el archivo, se abre una nueva ventana que ofrece opciones para abrir el archivo elegido o, si hay múltiples archivos, la opción de abrir todos a la vez. Además, la ventana muestra el espectro que se abrirá.



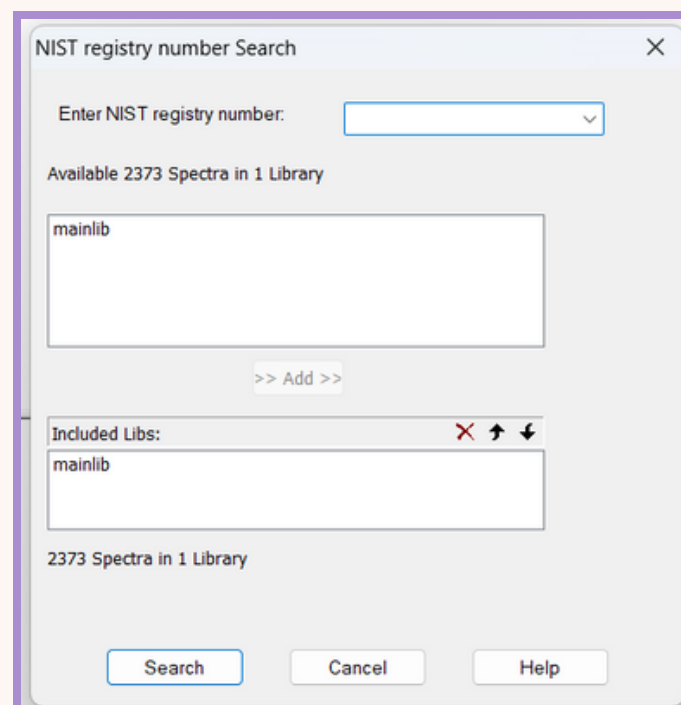
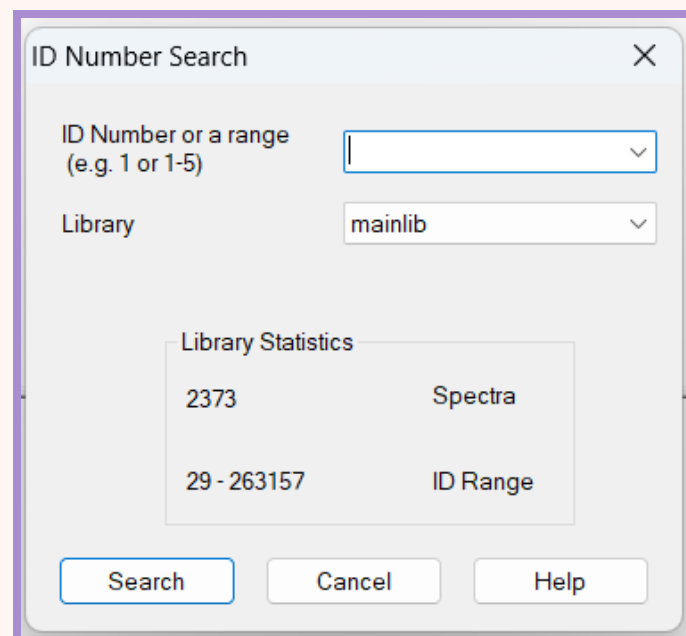
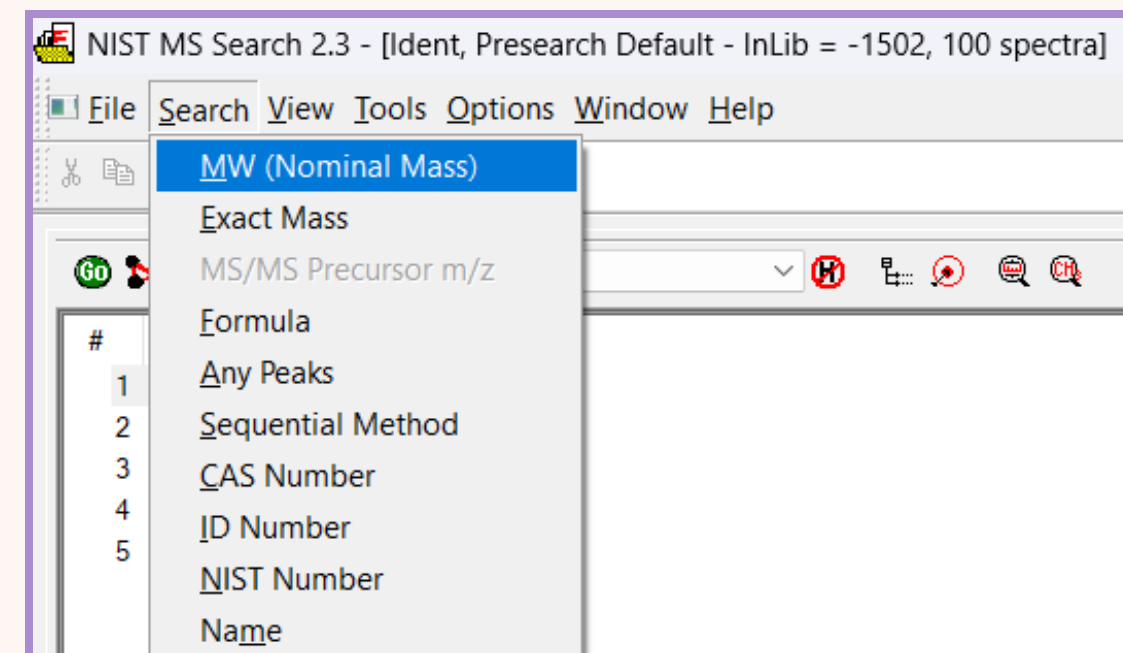
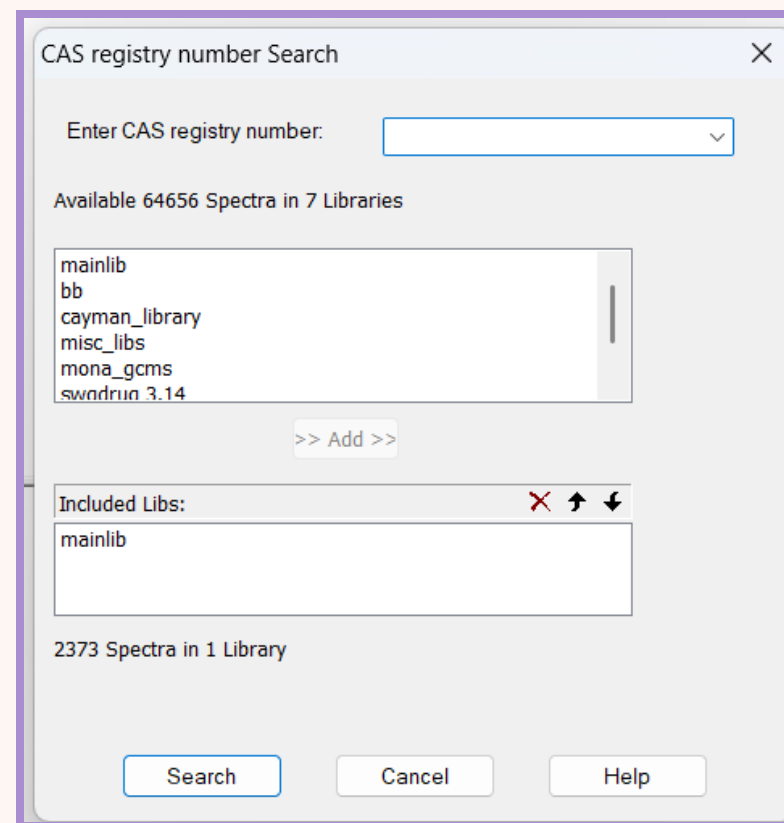
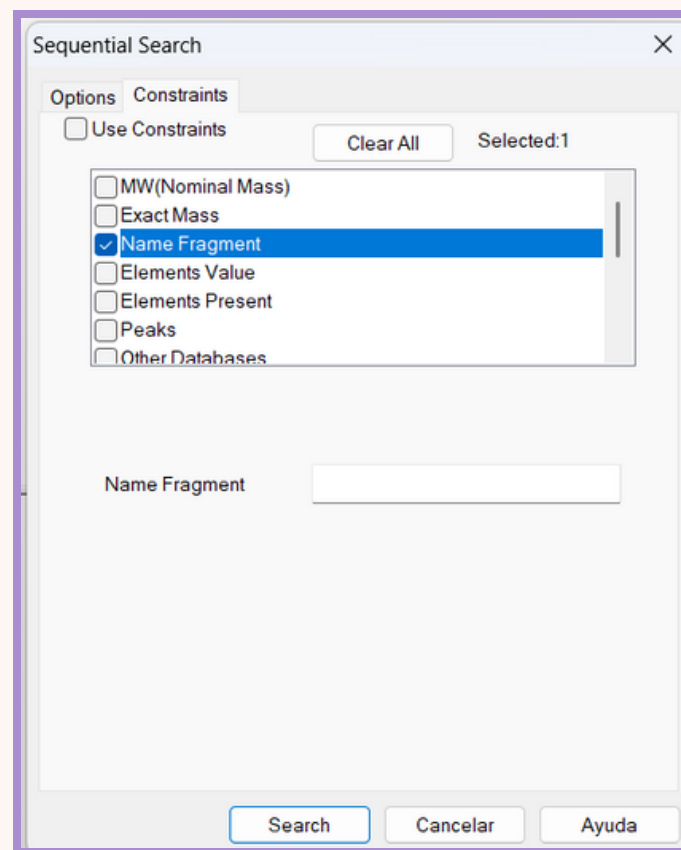
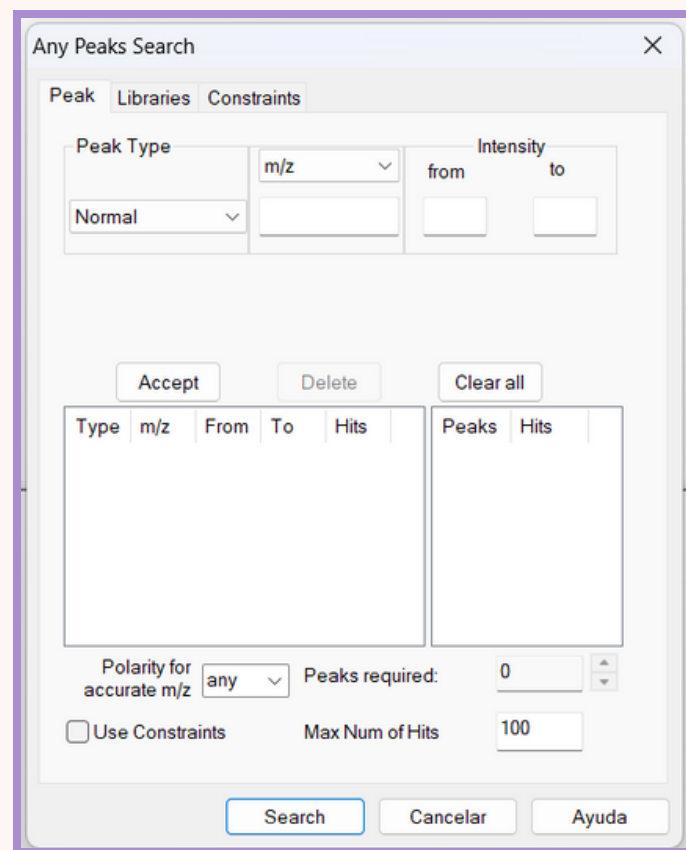
Las otras funciones; “**Print**”, “**Save**” and “**Settings**”, son usadas para imprimir la información que se está analizando, guardar y cambiar las configuraciones establecidas como colores de los picos o posición de las ventanas en la pantalla principal.

La opción “**Search**” es una opción avanzada que permite realizar una búsqueda en la librería con información mas especifica. Como se puede observar en las imágenes, las opciones varían entre nombres, formula o una identificación aun mas especifica como el numero CAS.

Cada función abre una nueva ventana para interaccionar.



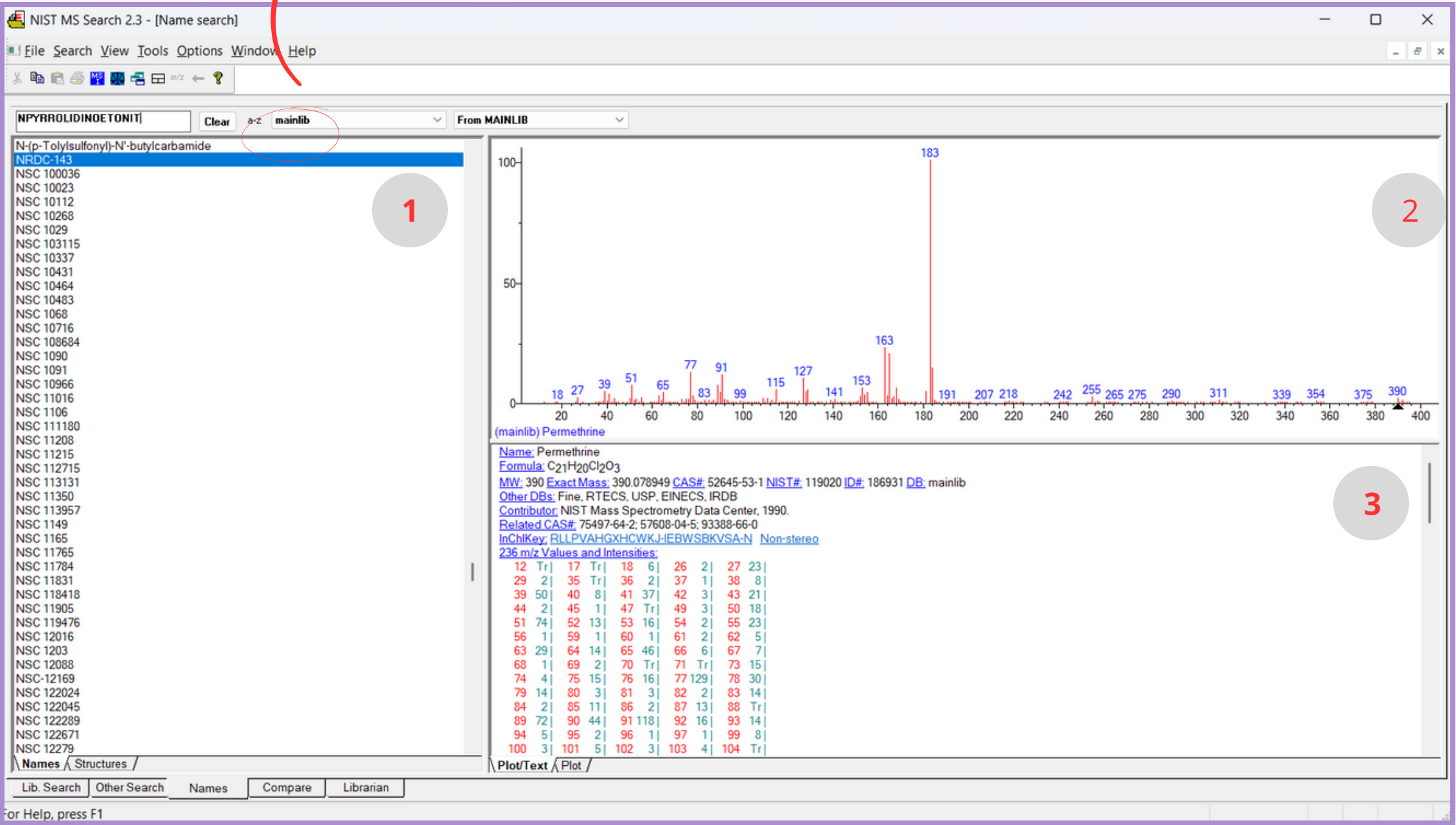
La función de las ventanas emergentes es usar información especifica como masa o nombre de fragmento, su formula, entre otros.



Además, en esta búsqueda avanzada, existe la posibilidad de navegar en las diferentes librerías donde se desea realizar la comparación o búsqueda de un compuesto, y usar un ID específico como CAS o NIST.

Una de las maneras más comunes, rápidas y sencillas de proceder es realizar una búsqueda por el nombre cuando se conoce el compuesto o se tiene alguna pista sobre él, y se desea confirmar en las librerías existentes.

En esta sección se puede seleccionar entre las diferentes librerías descargadas.

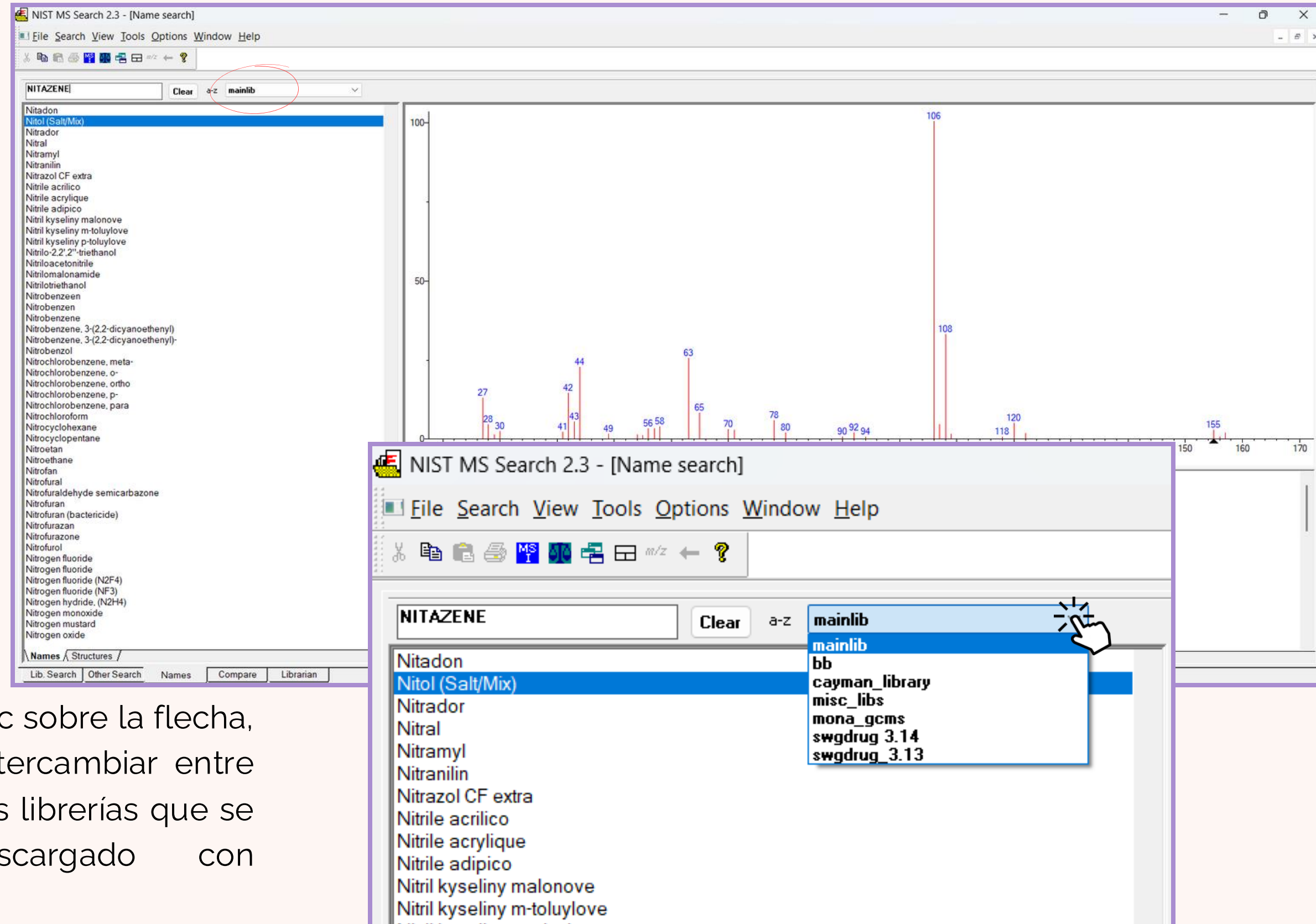


En el recuadro numero 2 aparece el espectro de masas del compuesto a analizar.

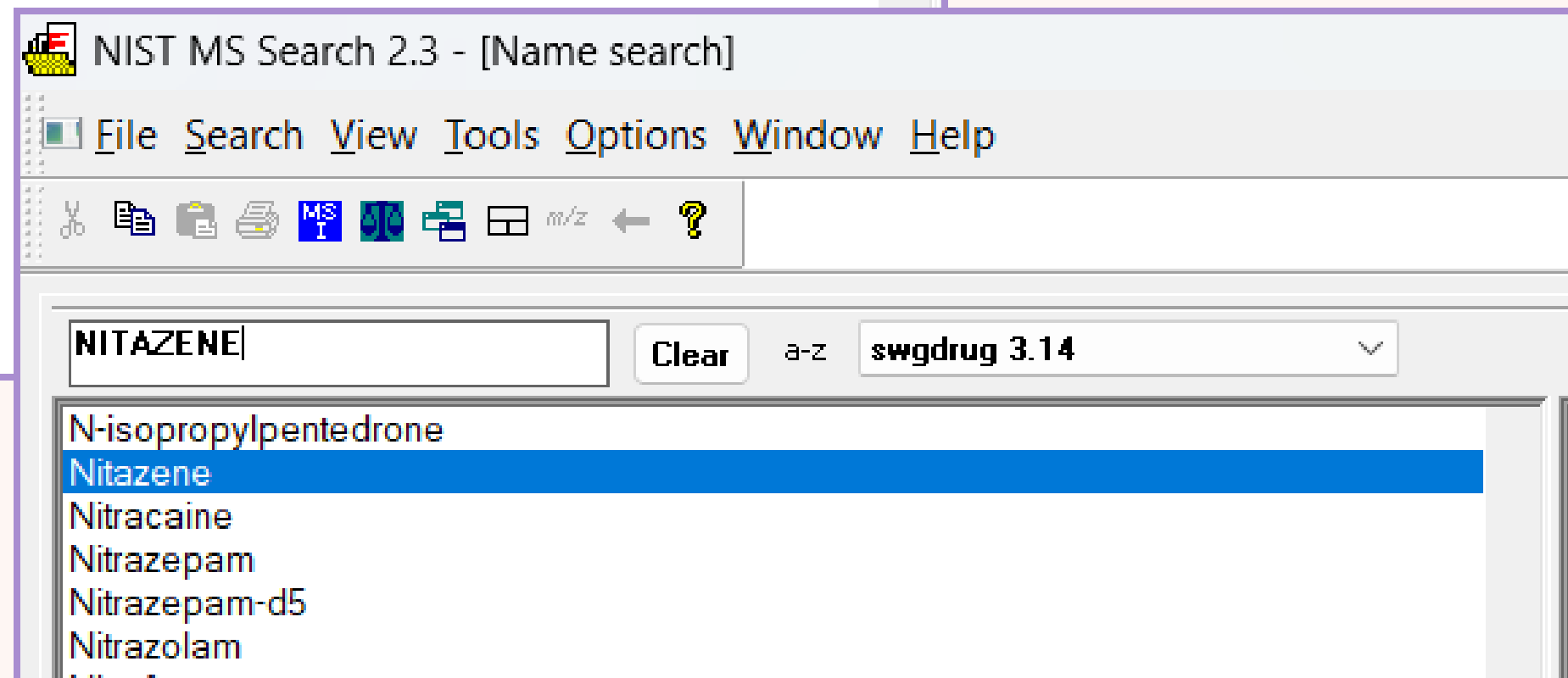
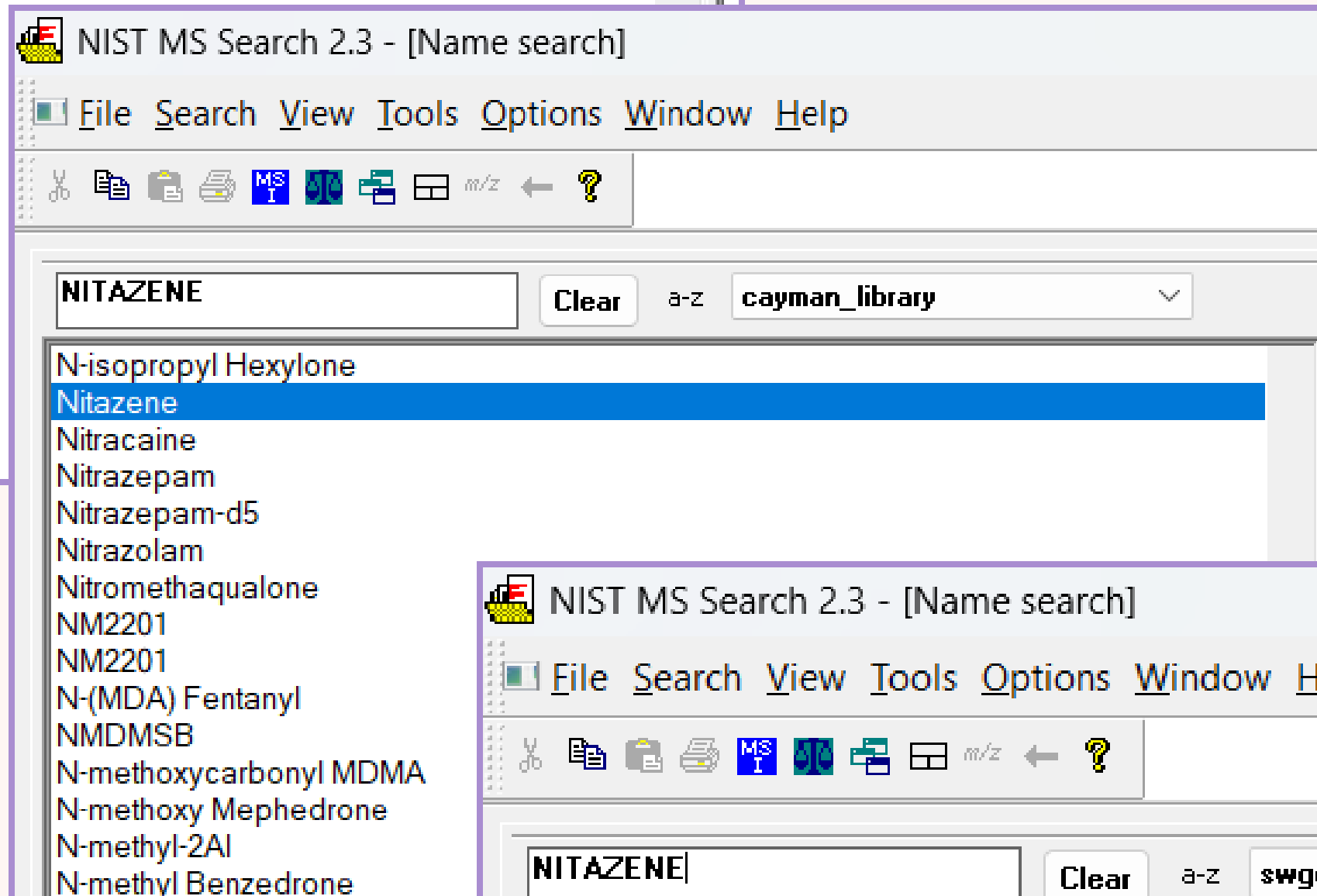
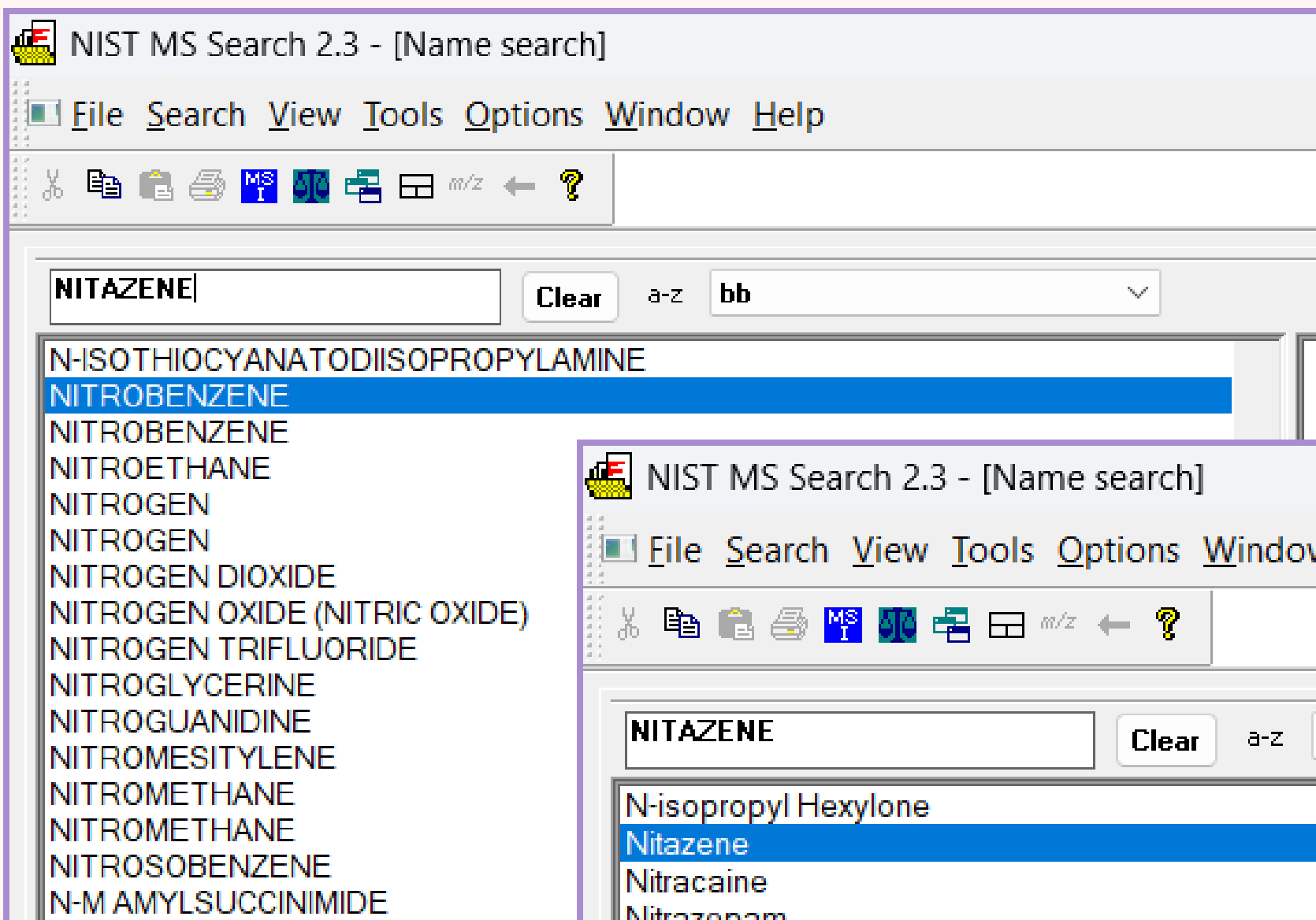
En el recuadro número 3 se presenta la información disponible sobre el compuesto, que incluye: el nombre, el peso molecular, la fórmula, el proveedor y detalles adicionales según el conocimiento que se tenga del compuesto. Asimismo, se muestran los picos junto con su respectivo m/z.

Ejemplo, Analizando Análogos de Nitazene

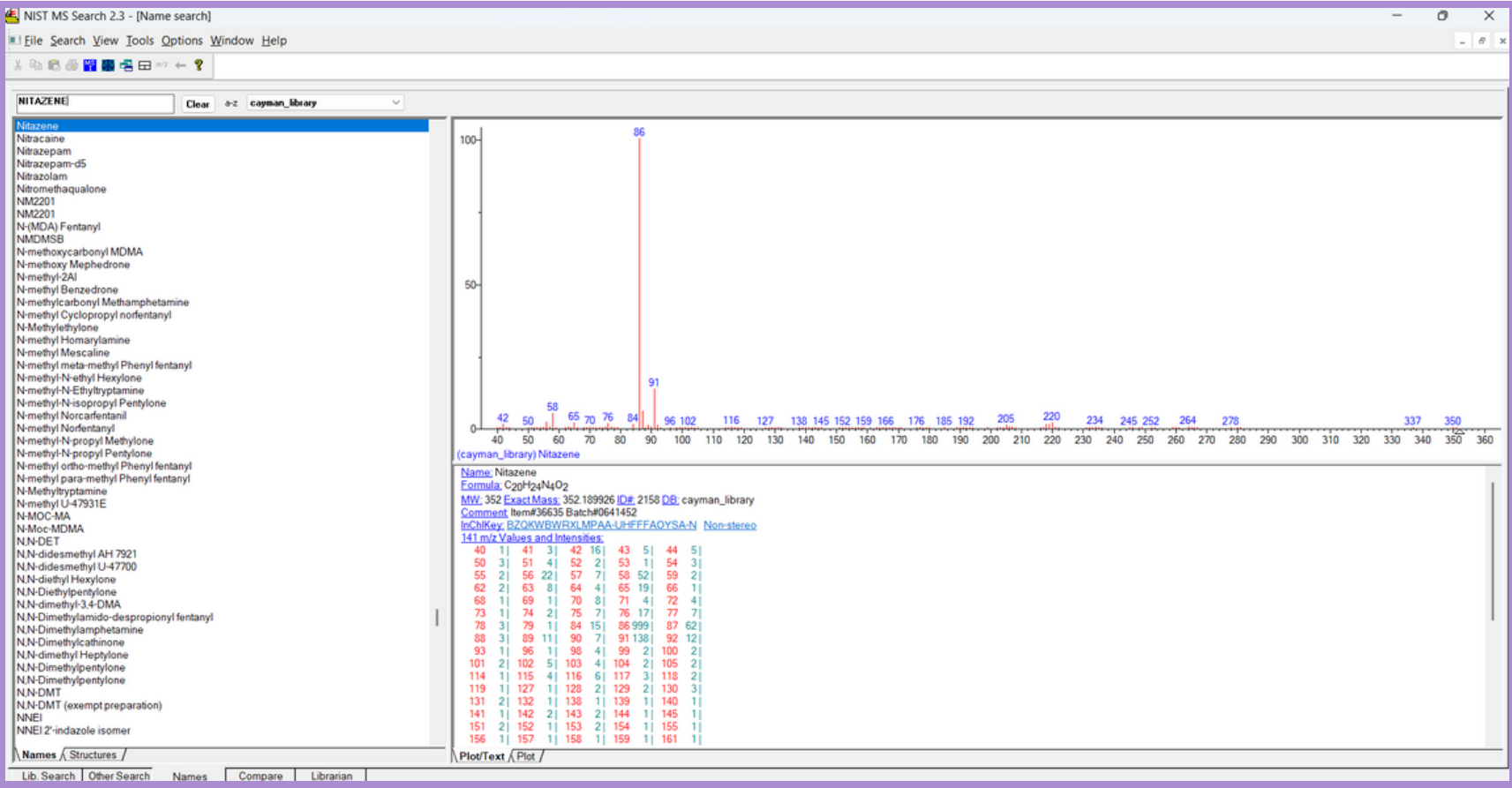
Al digitar el nombre del compuesto de interés, en este ejemplo "**Nitazene**", no se puede observar ninguna coincidencia en la librería predeterminada "**mainlib**"



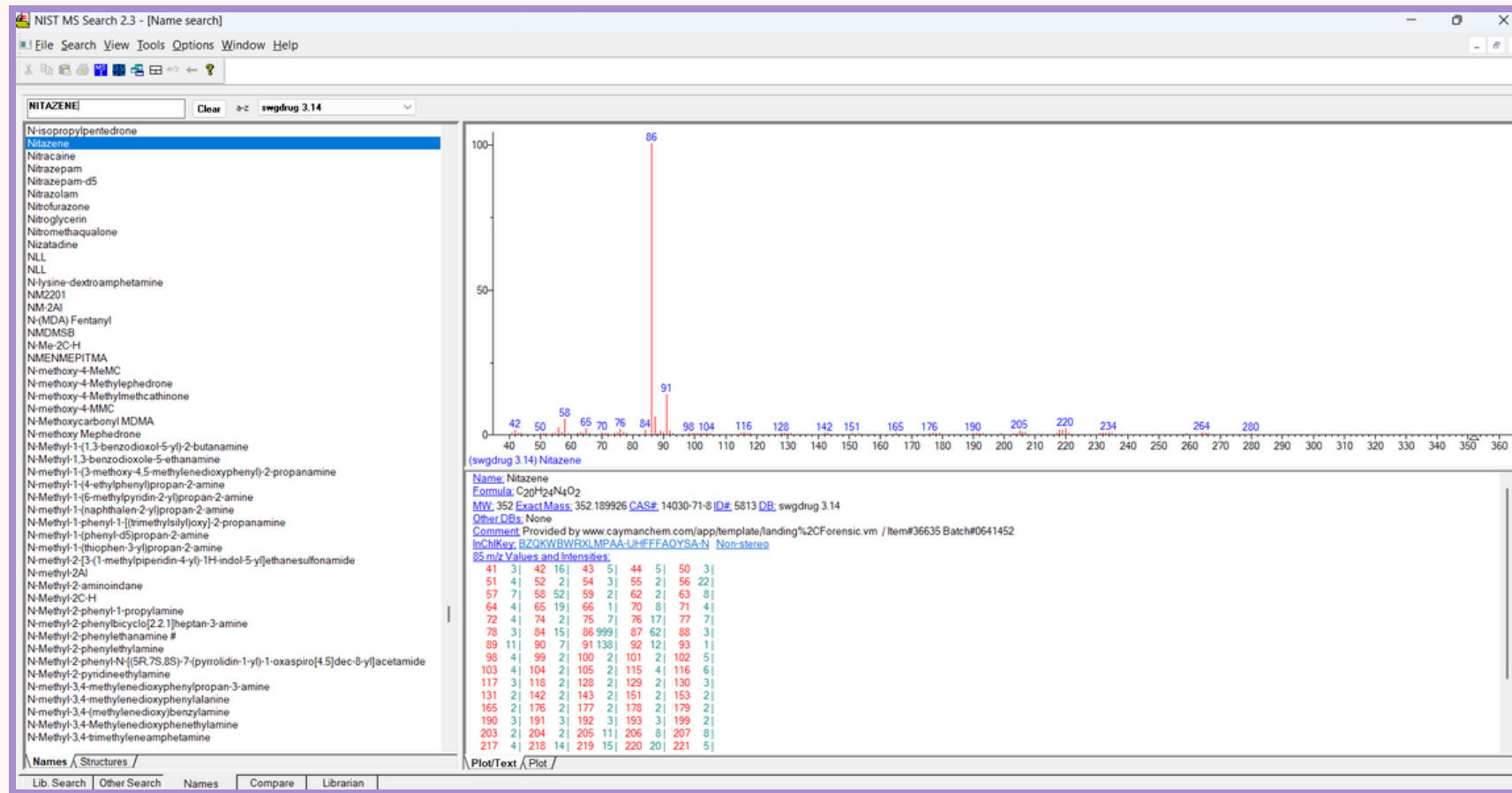
Al realizar clic sobre la flecha, se puede intercambiar entre las diferentes librerías que se hayan descargado con anterioridad.



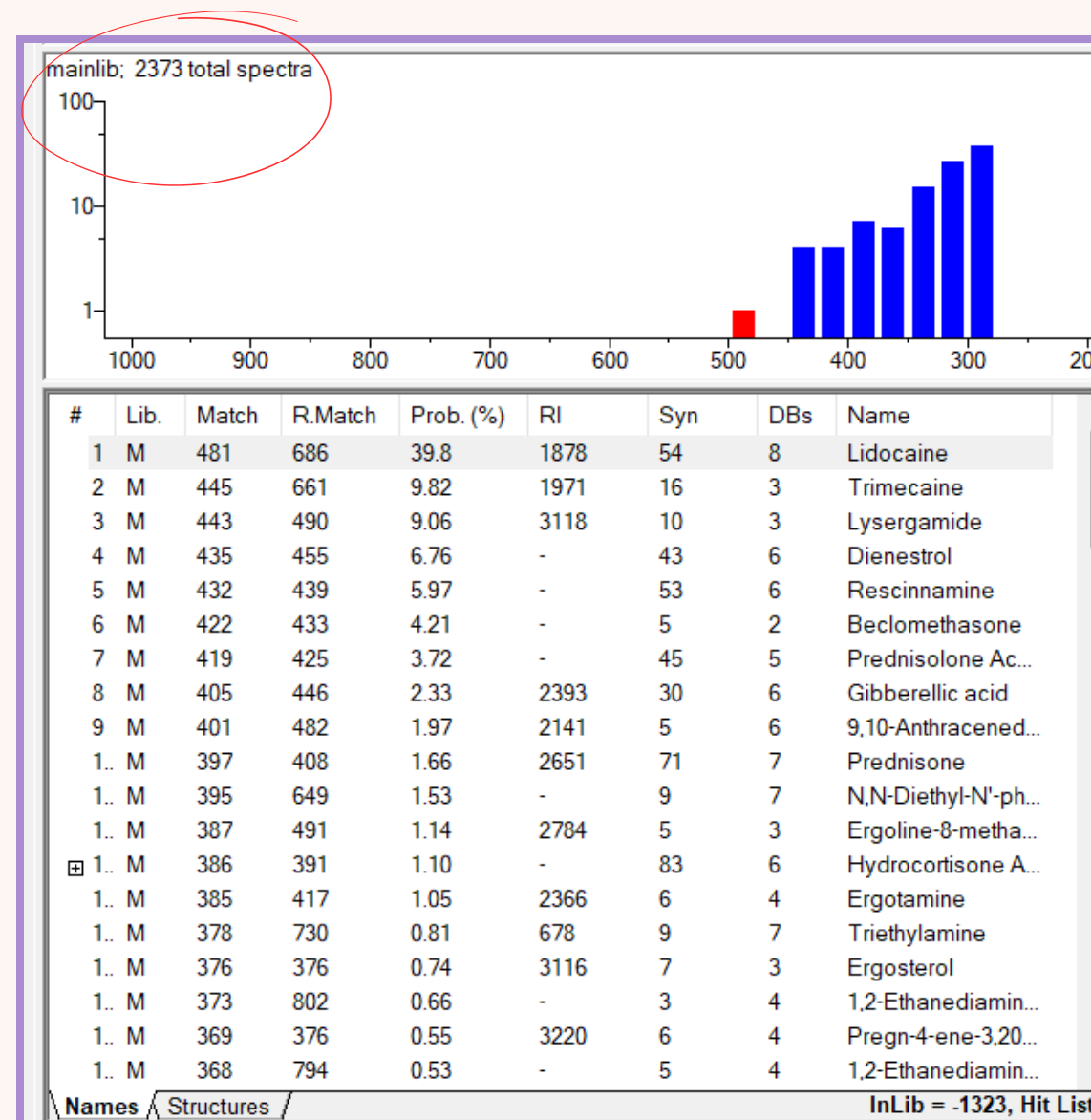
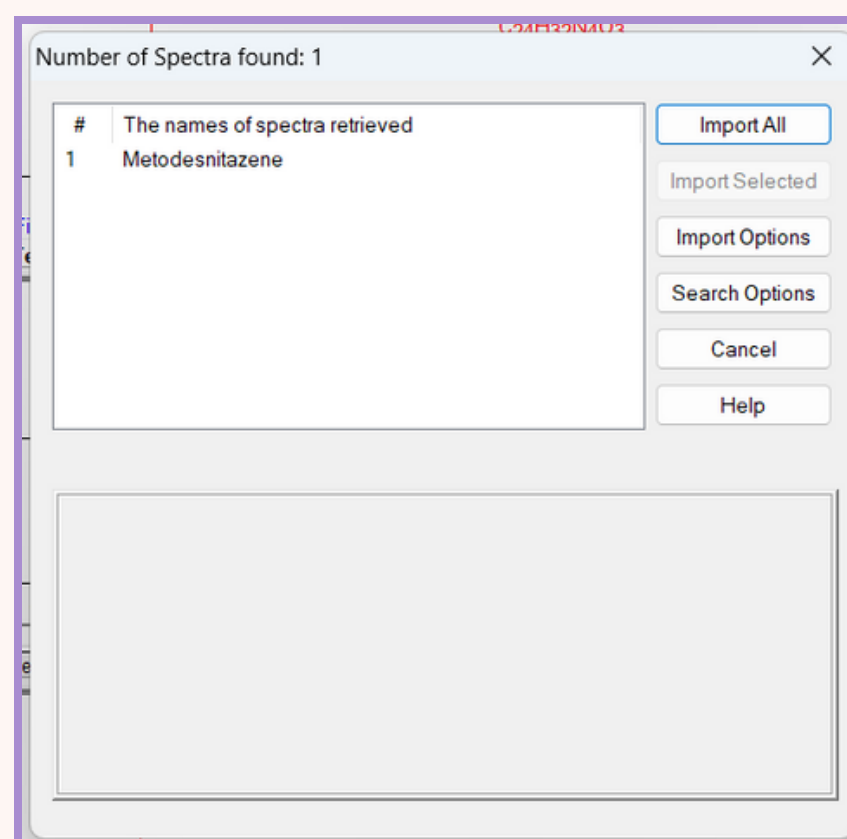
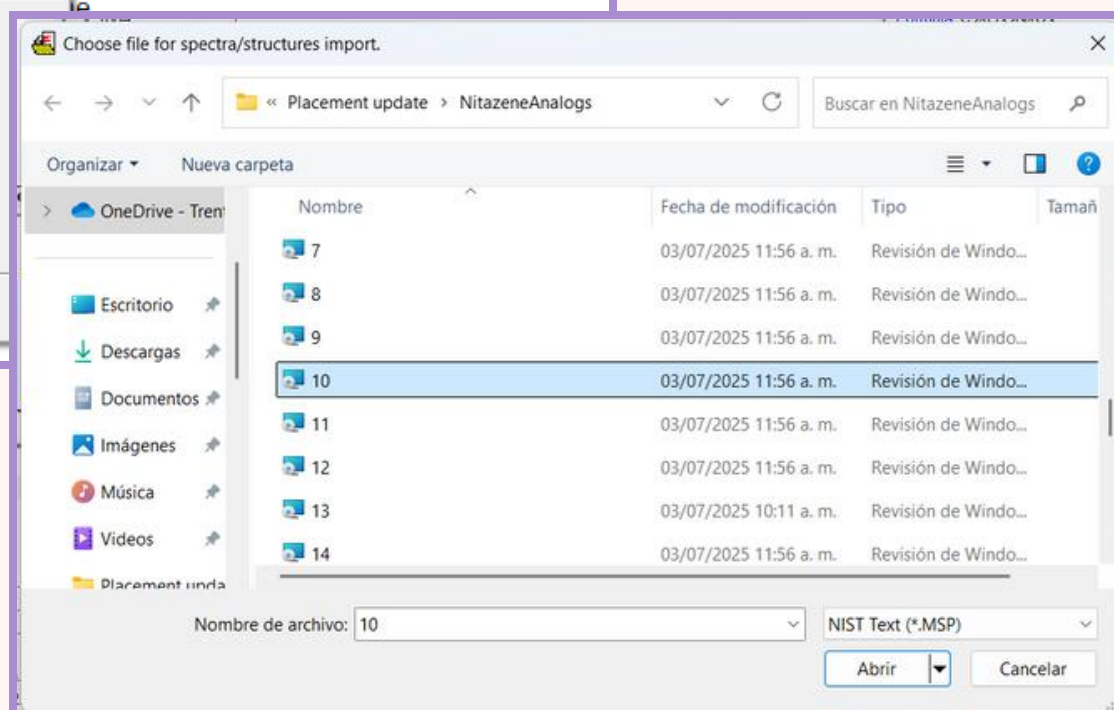
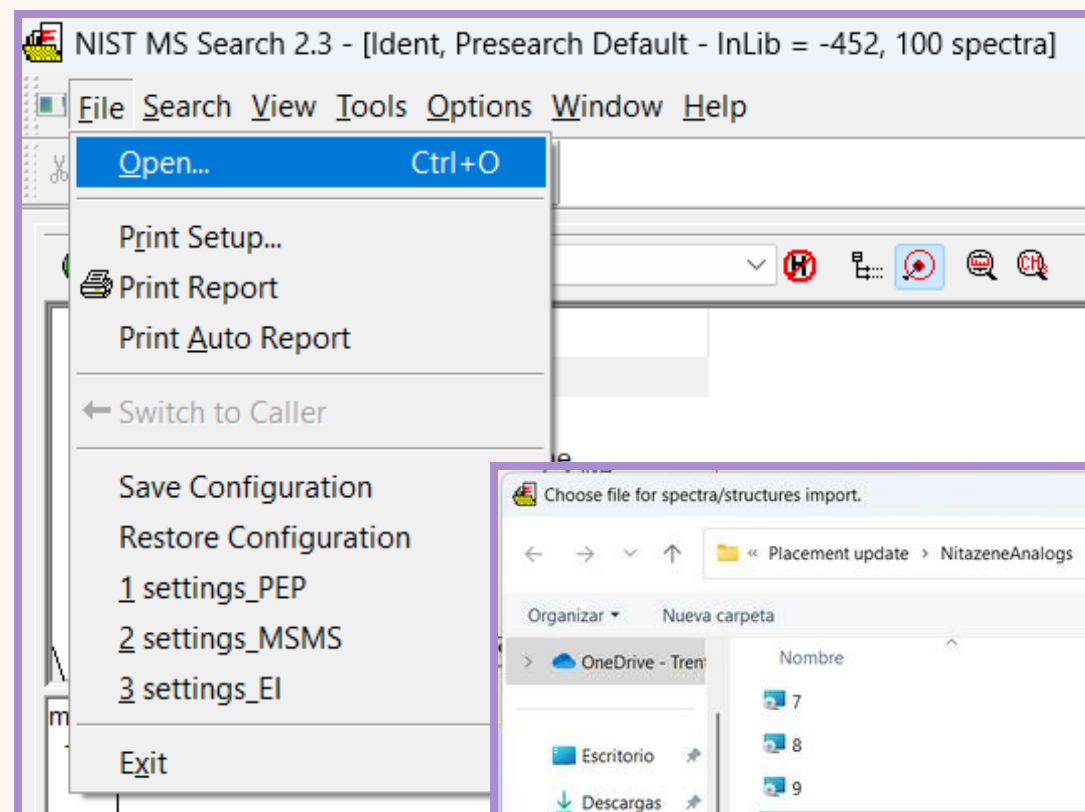
Al navegar por las diferentes librerías, se puede observar que el compuesto de interés “**Nitazene**”, se puede encontrar en “**cayman_library**” y “**swgdrug 3.14**”. También se puede observar que la lista de compuestos es diferente para las tres librerías. Esto indica que entre mas librerías se descarguen, mas opciones se podrán tener al momento de realizar las búsquedas.



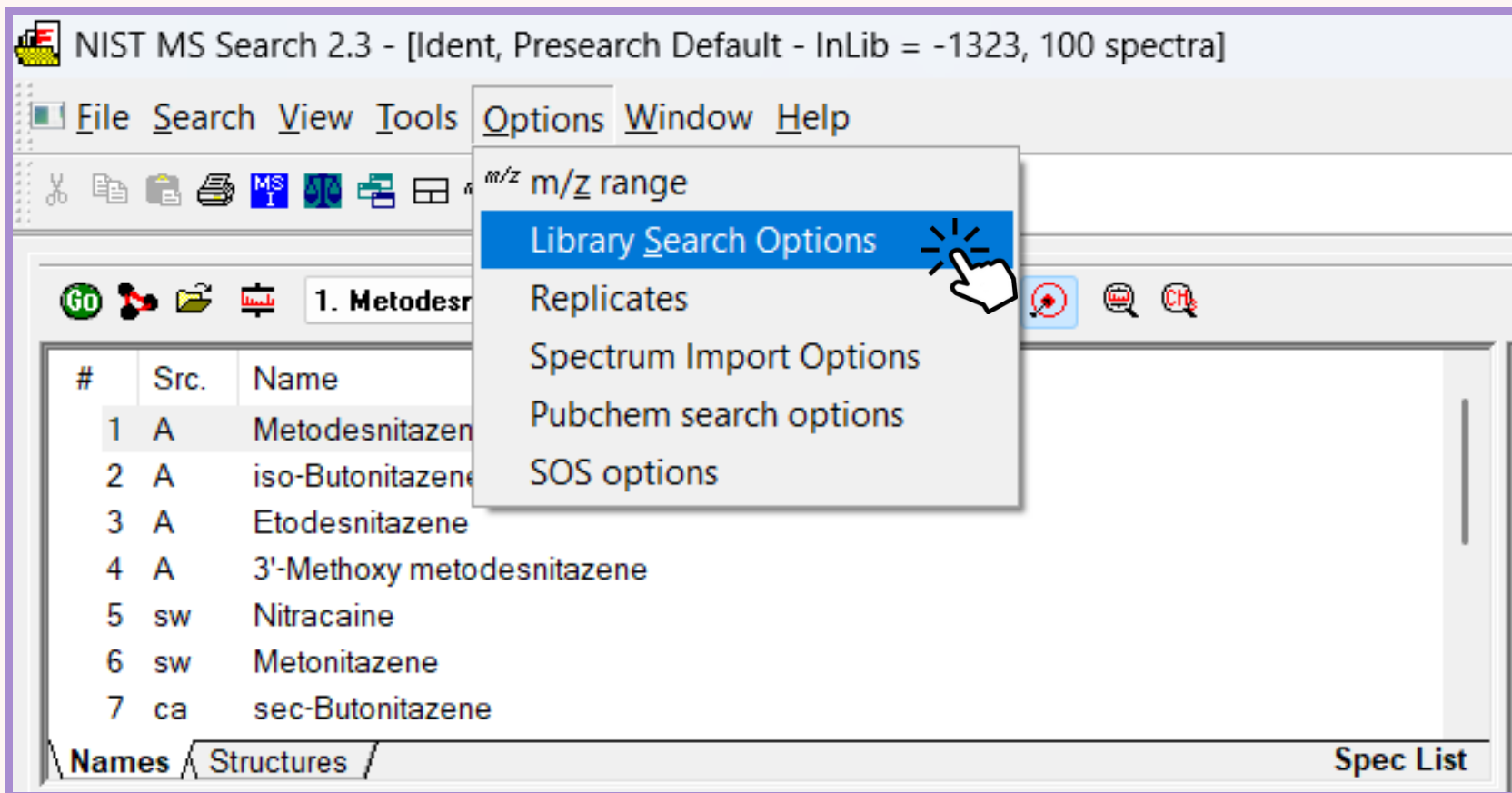
Es importante revisar los comentarios de cada compuesto porque es allí donde se puede confirmar la procedencia del espectro. Por ejemplo, en el espectro observado de la librería “**swgdrug 3.14**” fue obtenido desde la librería de “**cayman_library**”, lo que indica que son el mismo espectro de masas.



Al identificar las librerías, procedemos al análisis del compuesto de interés.

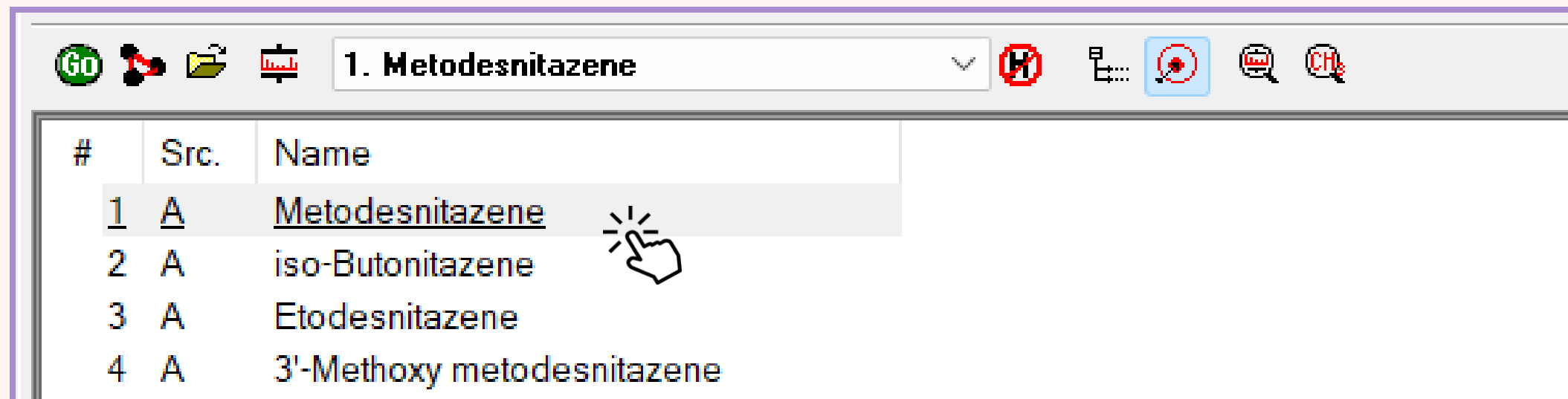
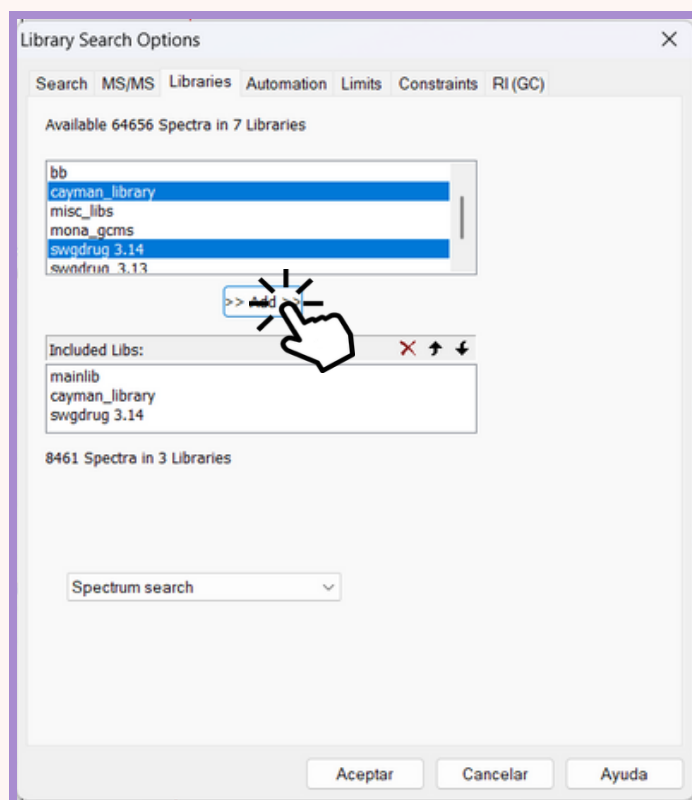
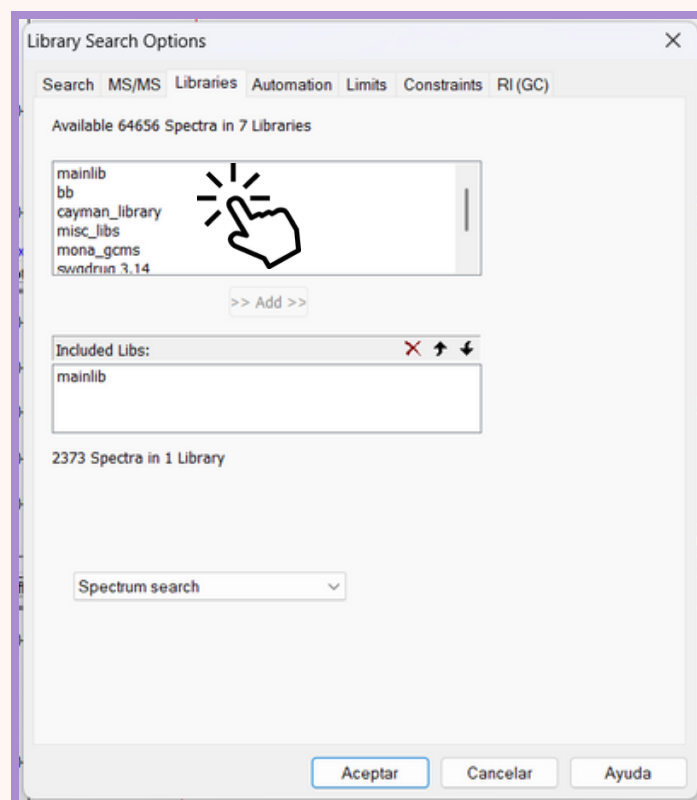


Al realizar la descarga del compuesto de interés y al ser comparado por la librería predeterminada "**mainlib**", se observa que el valor de coincidencia o "**match**" es menor de 50%, por lo tanto se deben habilitar las otras librerías identificadas anteriormente (**cayman_library** y **swgdrug 3.14**) que tienen mas compuestos similares al compuesto de interés.



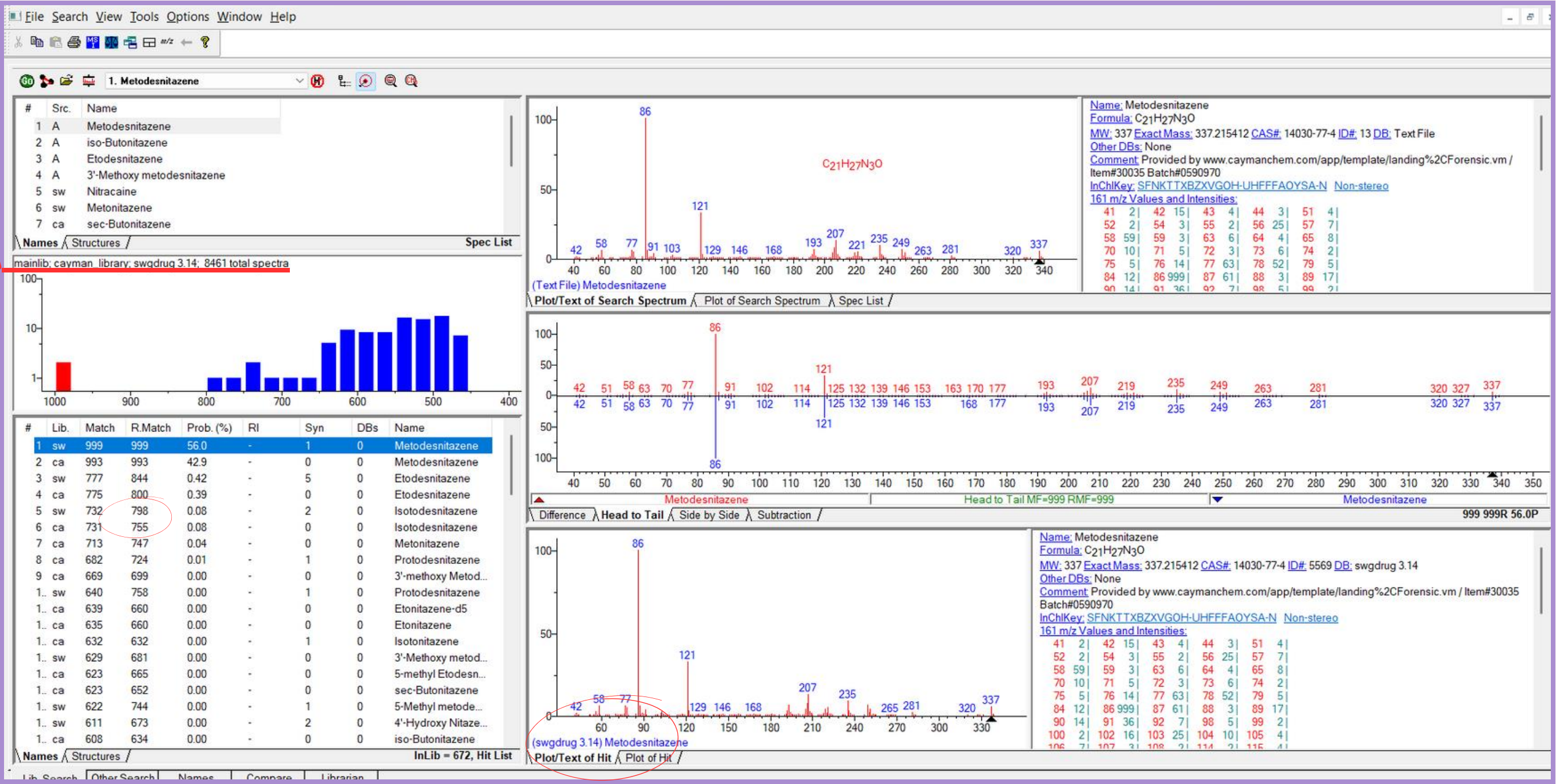
En la pestaña “**Options**”, se puede encontrar la función para interactuar con las librerías. Al hacer clic en “**Library Search Options**” aparece una nueva ventana con diferentes opciones. Se debe seleccionar “**libraries**” y allí aparecerán las librerías que están descargadas y listas para usar. En este caso adicionamos “**cayman_library**” y “**swgdrug**”.

Para actualizar la información en la pantalla se debe realizar doble clic en el compuesto de interés.



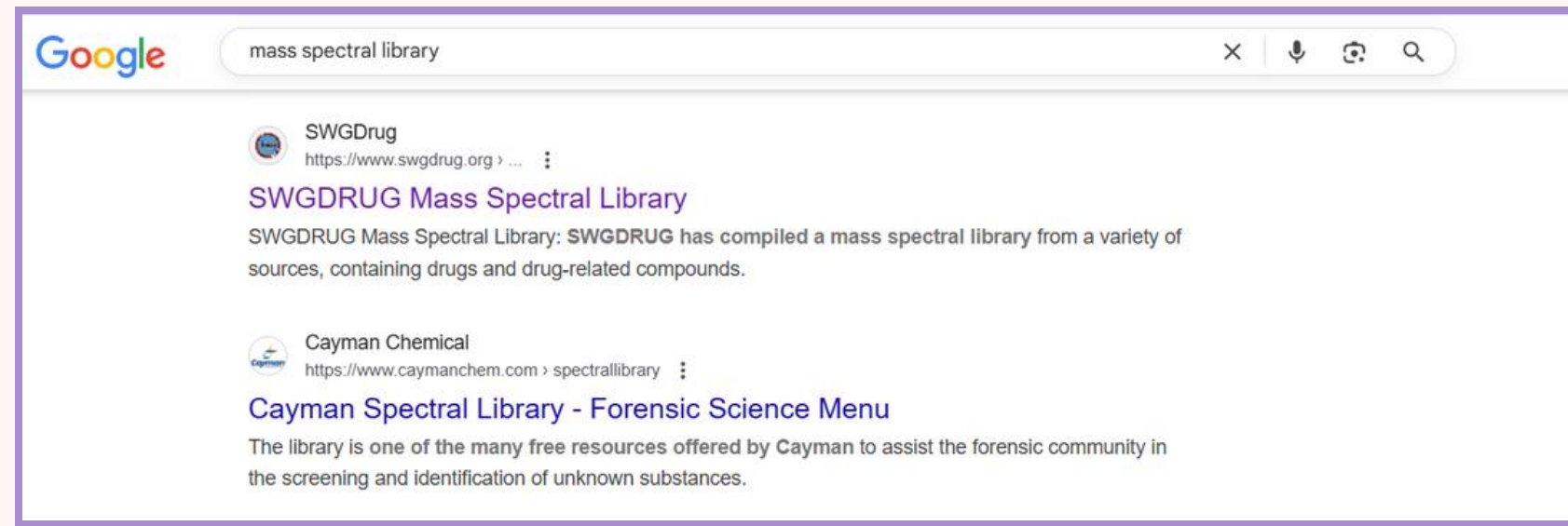
En este recuadro se observa que el número de espectros aumento porque es la suma de los espectros de masas de las tres librerías.

En este recuadro se encontra que el valor de coincidencia (match) aumento y que existen mas opciones para comparar.

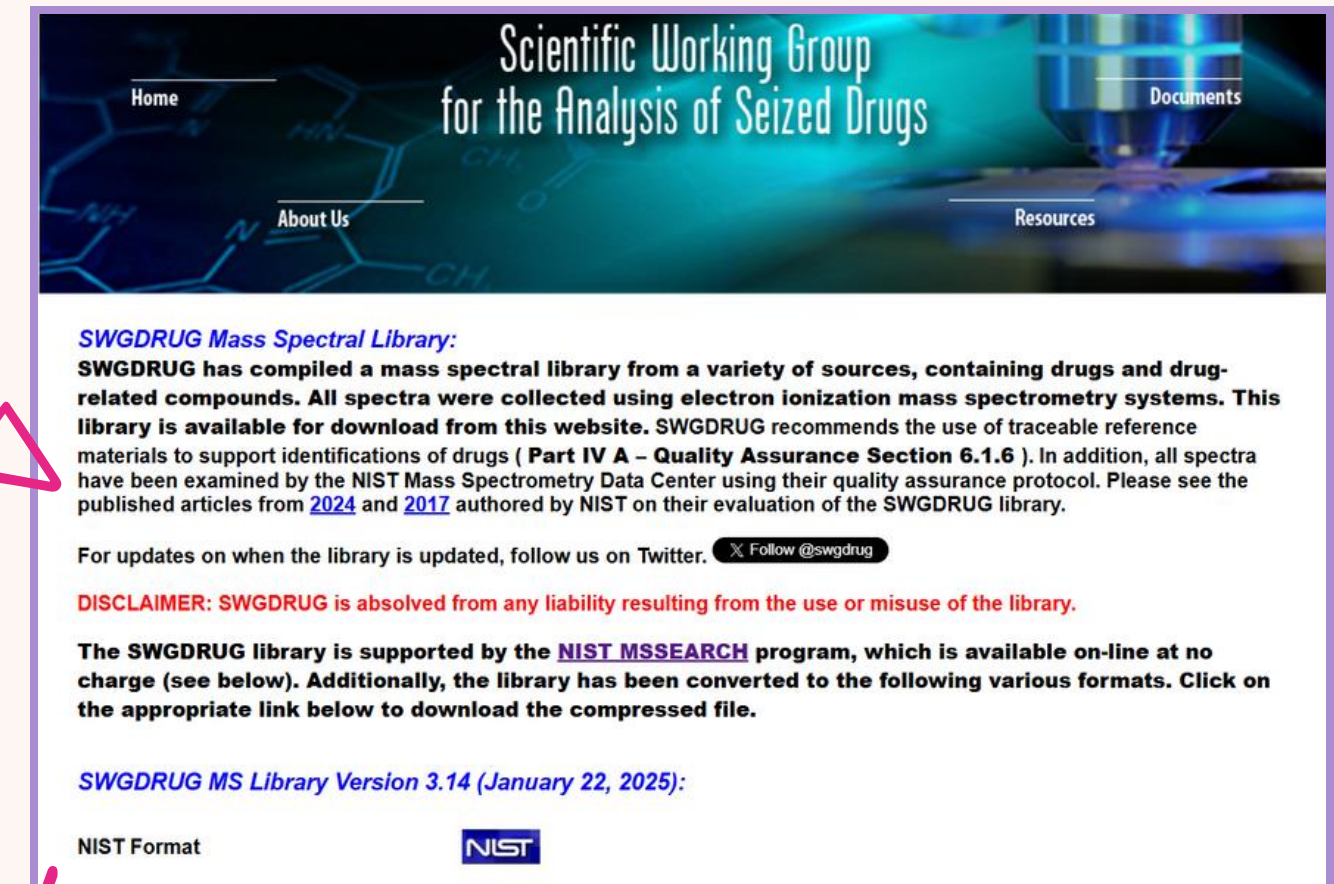


En este espacio se puede encontrar la libreria donde se encuentra el compuesto con el que se esta comparando el compuesto de interés.

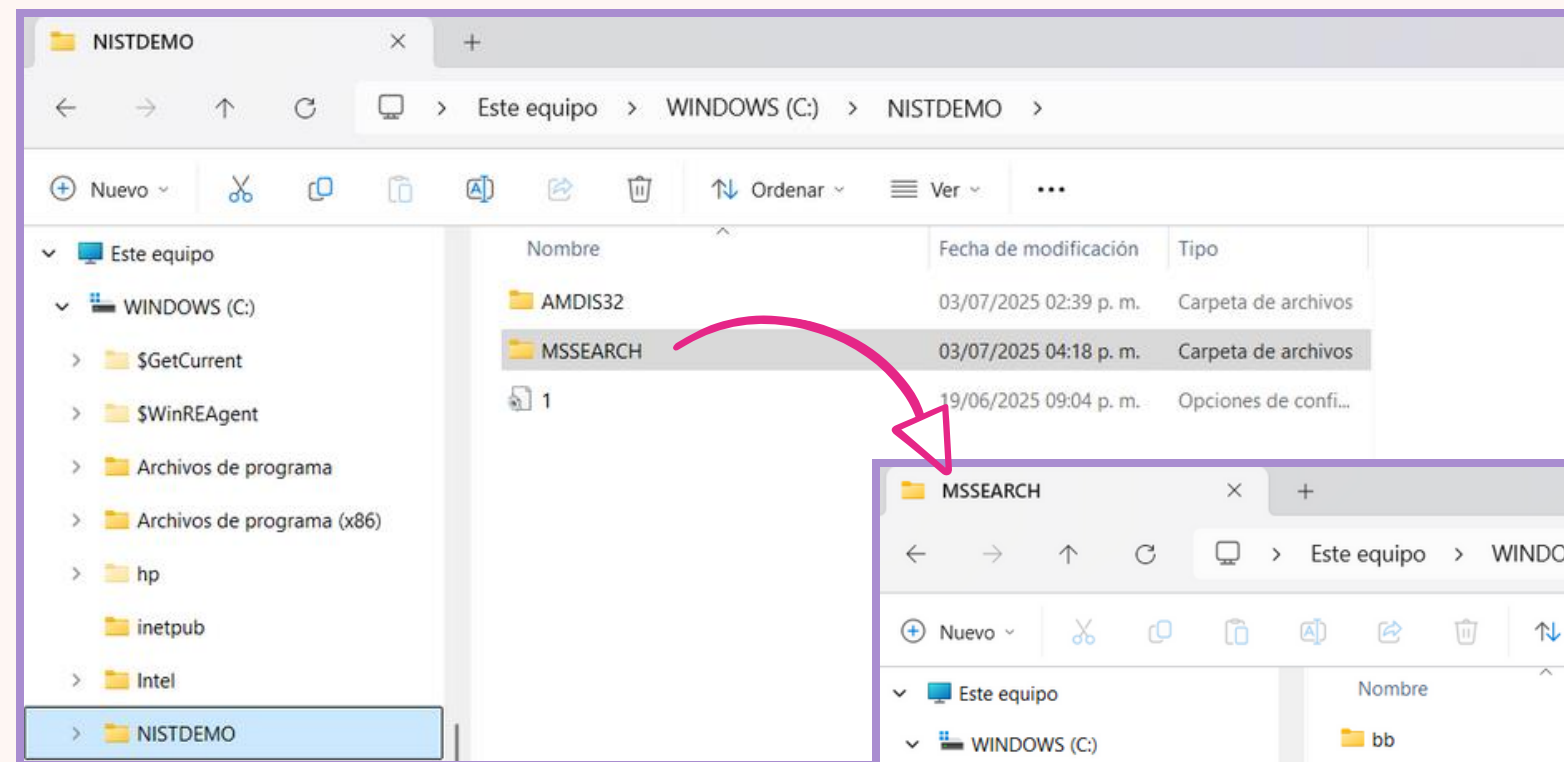
Descarga de Librerías



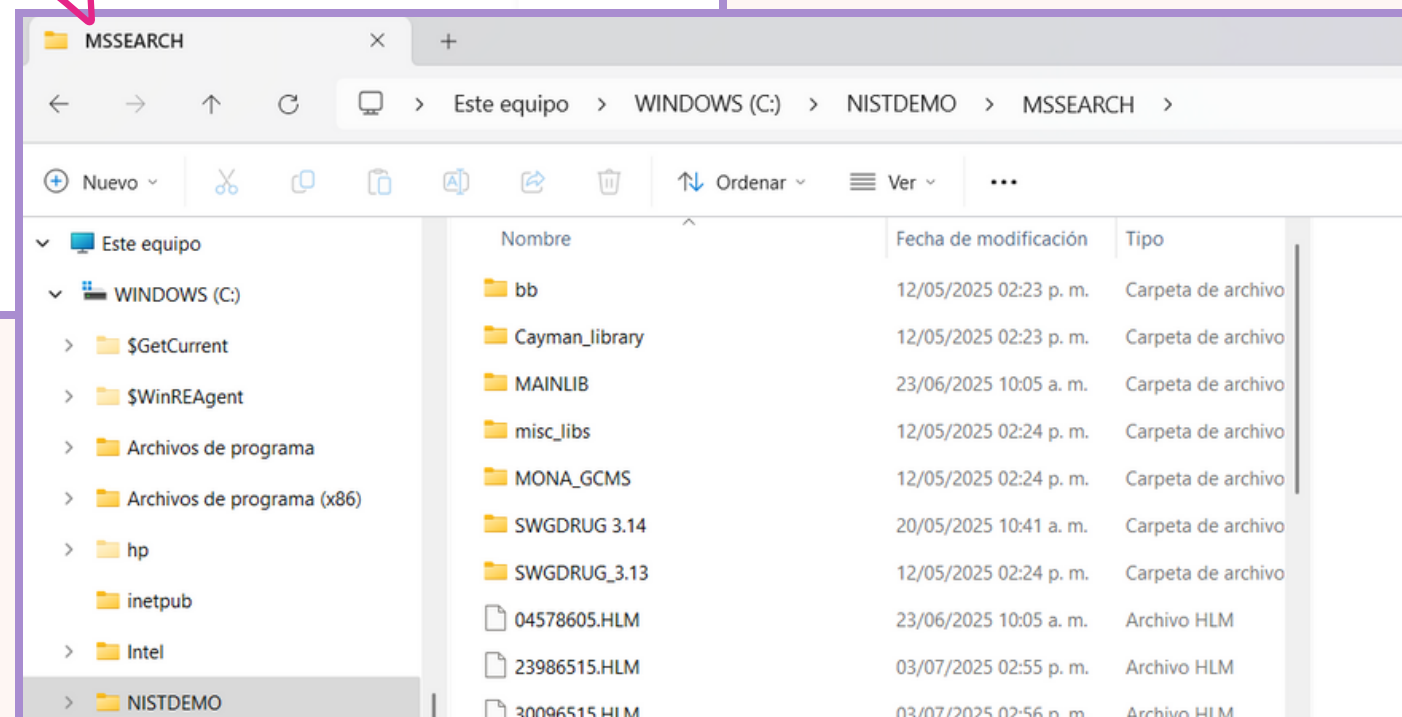
Buscar en google o el buscador de preferencia “**mass spectral library**”, las mas comunes son “**SWGDRUG**” y “**Cayman**”



Abrir la página y descargar el archivo que tenga el dominio o este especificado como **NIST**

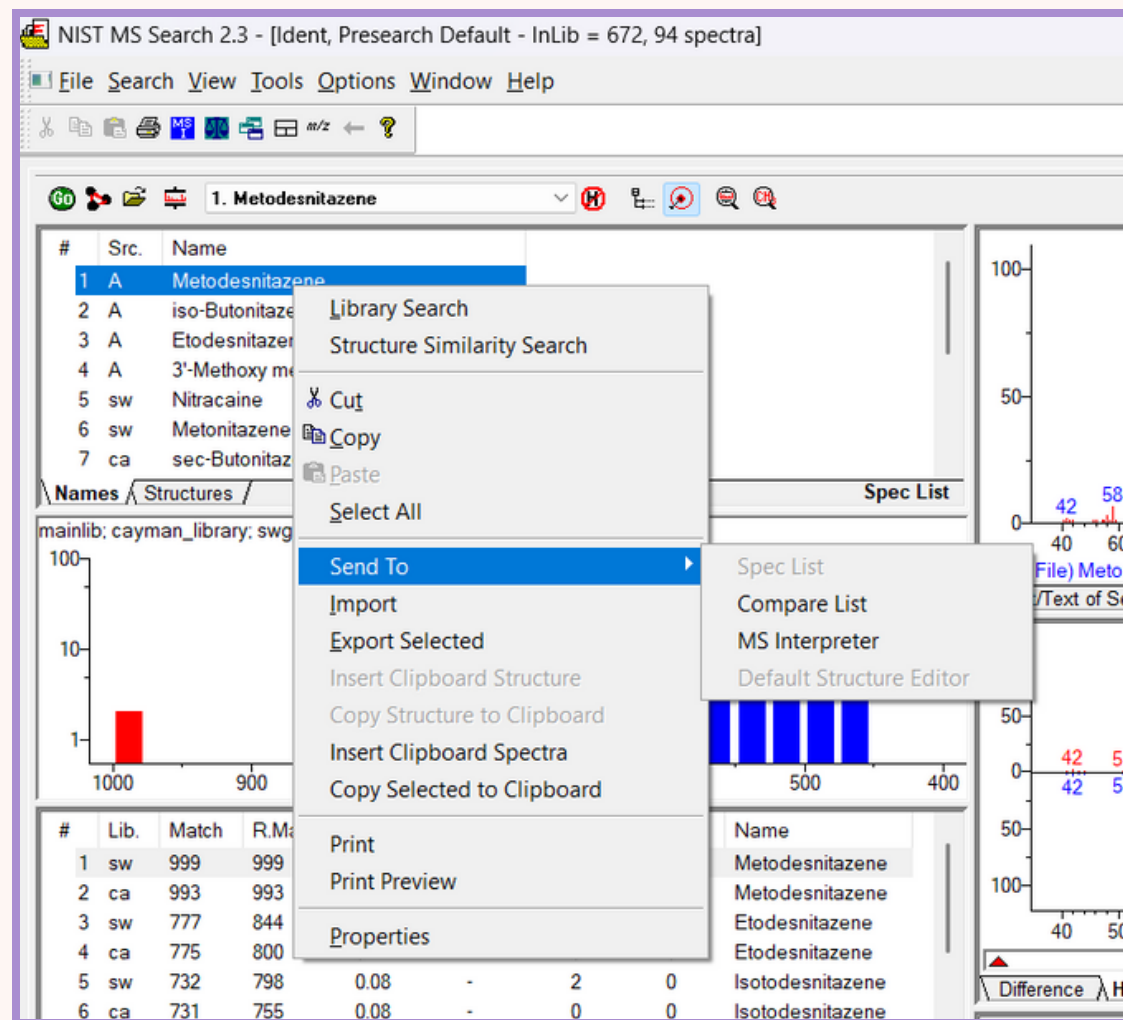



Buscar la carpeta de NIST, en los archivos del computador y pegar la carpeta descargada dentro de la carpeta **MSSEARCH**

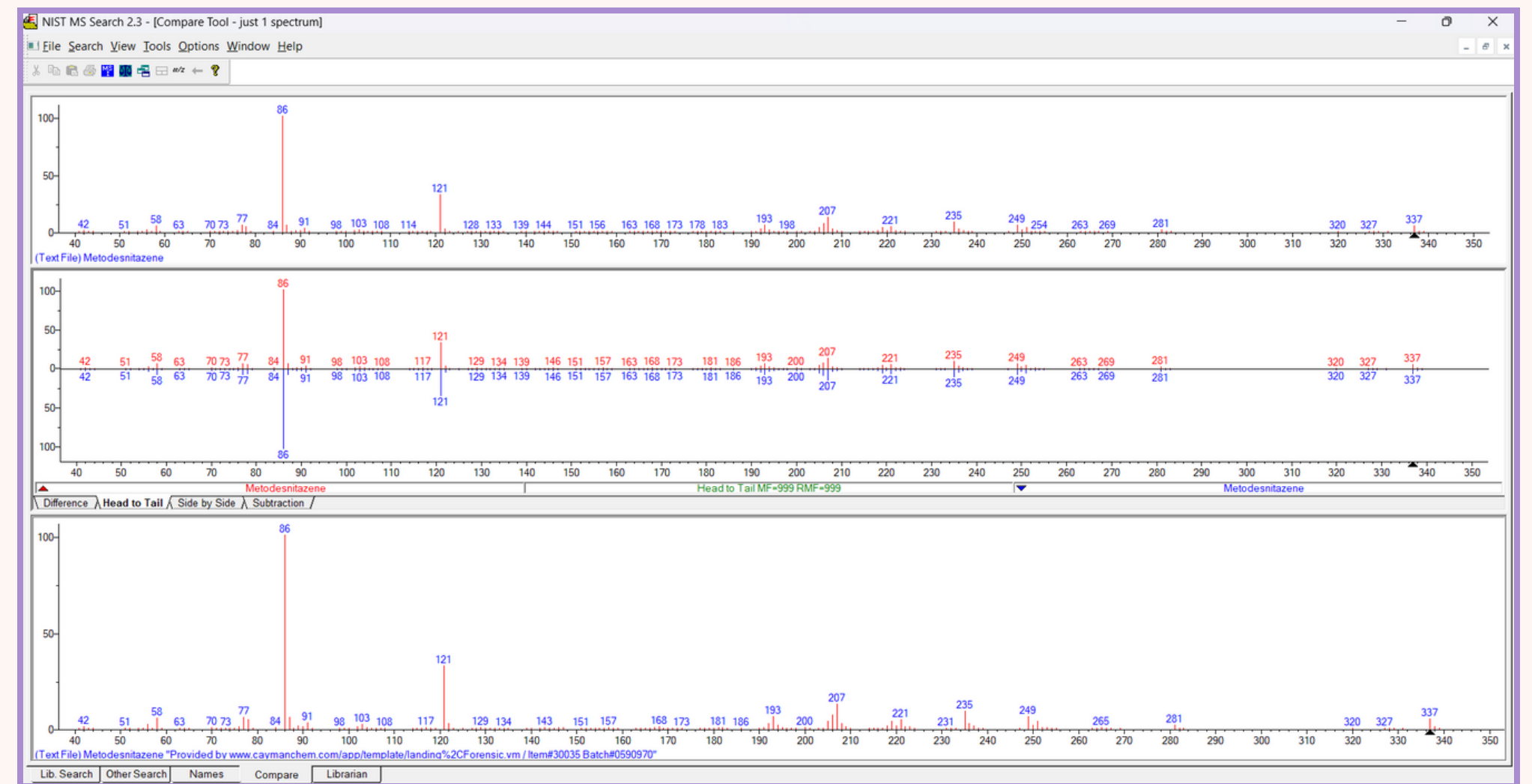


En la carpeta **MSSEARCH** deben estar todas las librerías que se desean usar en el software.

Funciones Adicionales



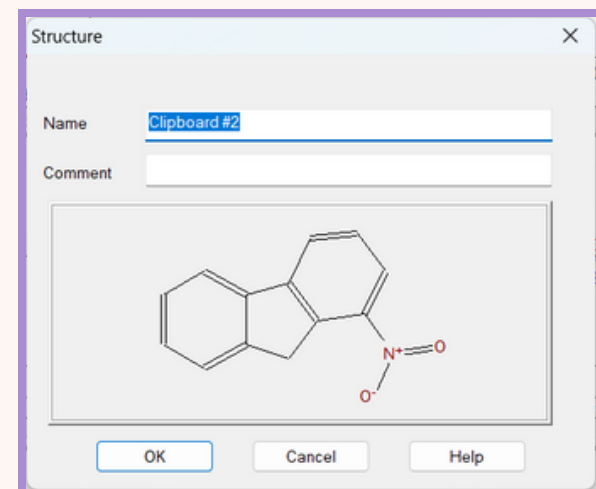
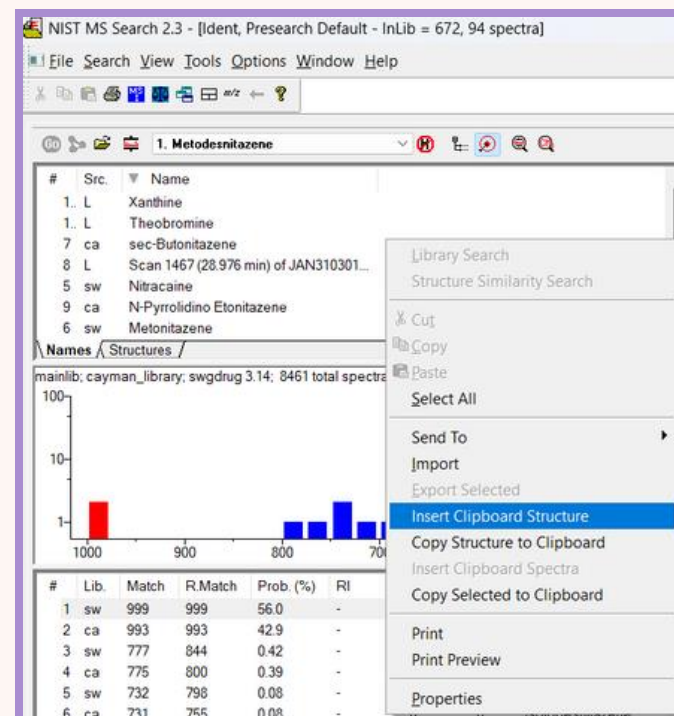
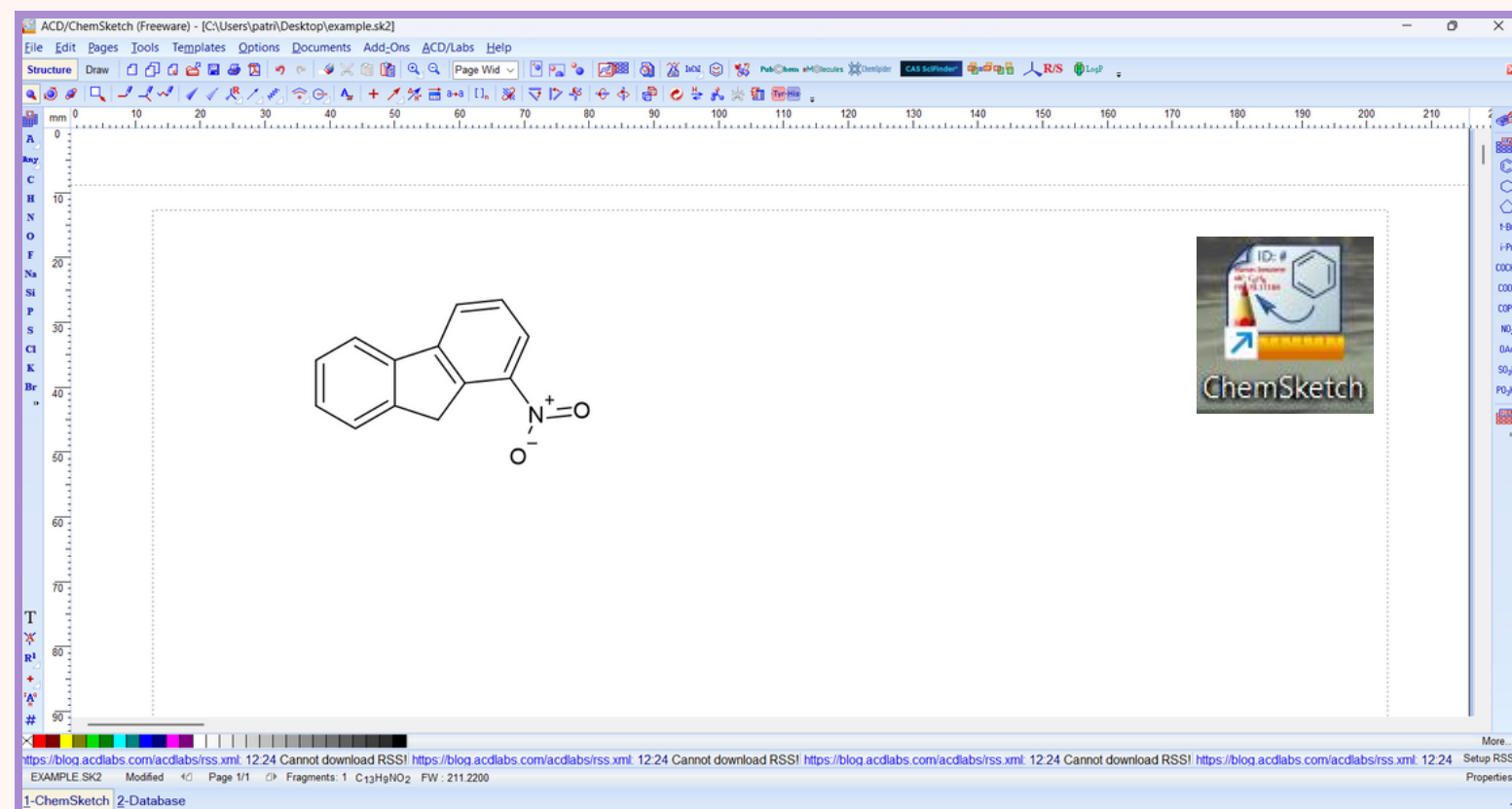
 MS Interpreter



Al dar clic derecho sobre el compuesto de interés, se observan mas funciones como; “**Import**” para abrir un nuevo espectro, “**Export selected**” para guardar el compuesto seleccionado, “**Sent to**” “**Compare list**” para enviarlo a la opción de comparar donde solo se observan los compuestos con mas alto porcentaje de concordancia (match), o “**Sent to**” “**MS interpreter**” para abrir un nuevo programa y analizar cada pico y su correspondiente fragmento.

Herramientas Adicionales

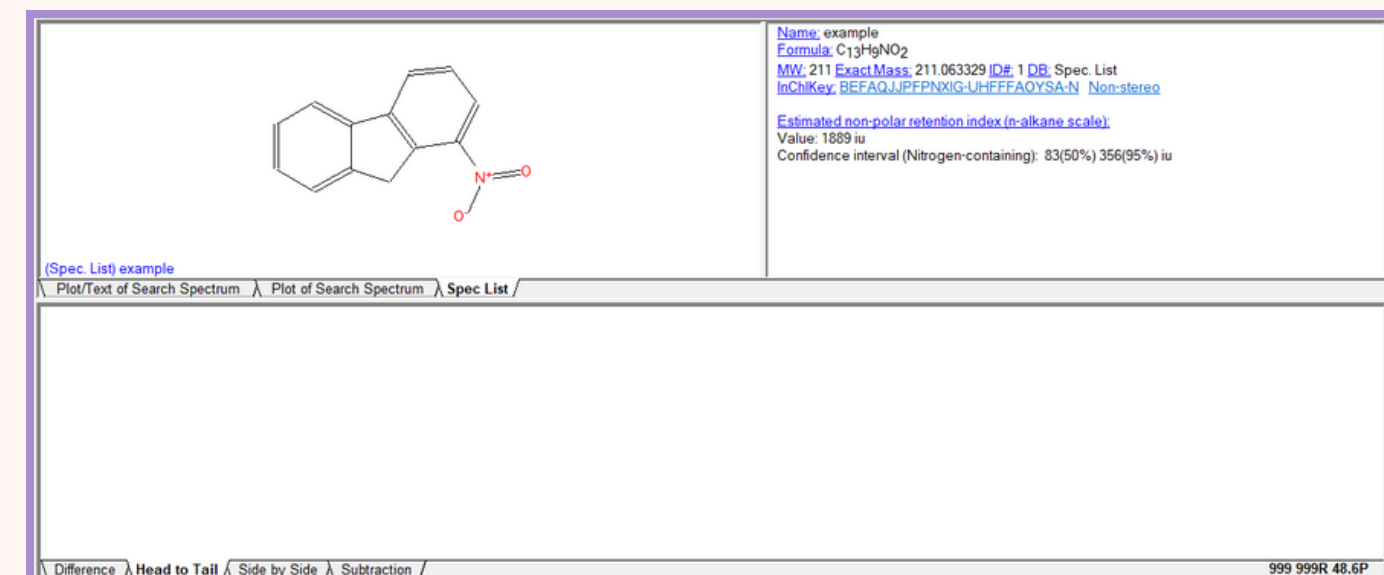
1. ChemSketch



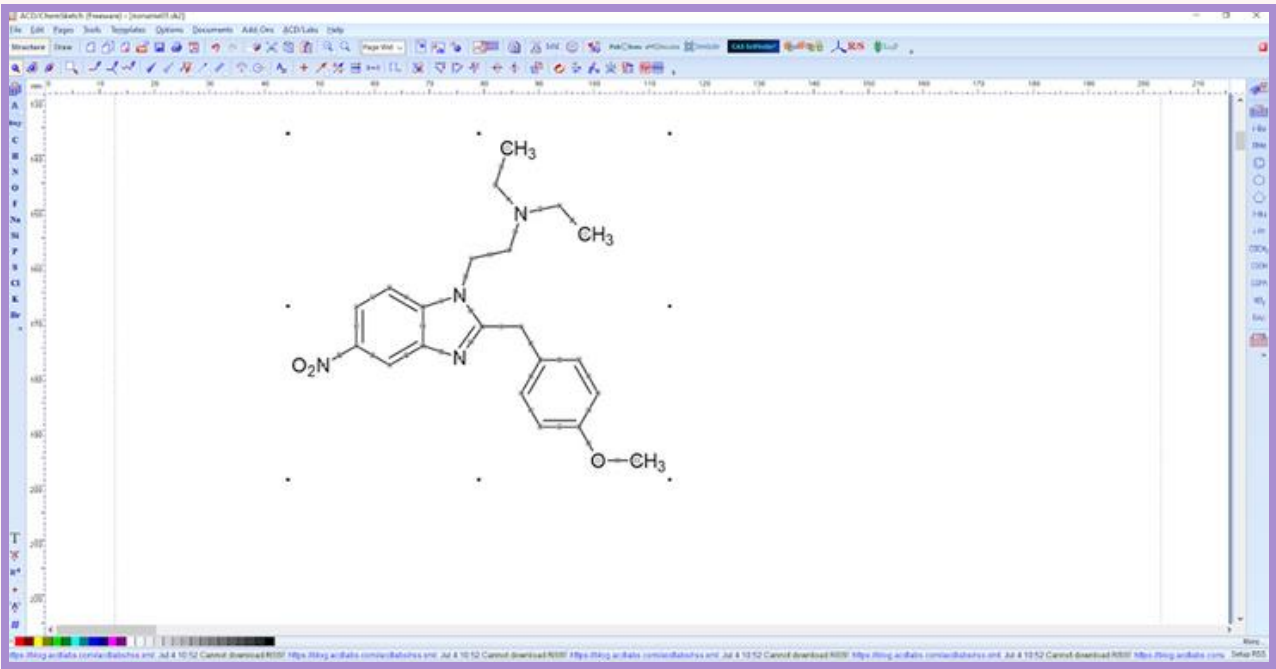
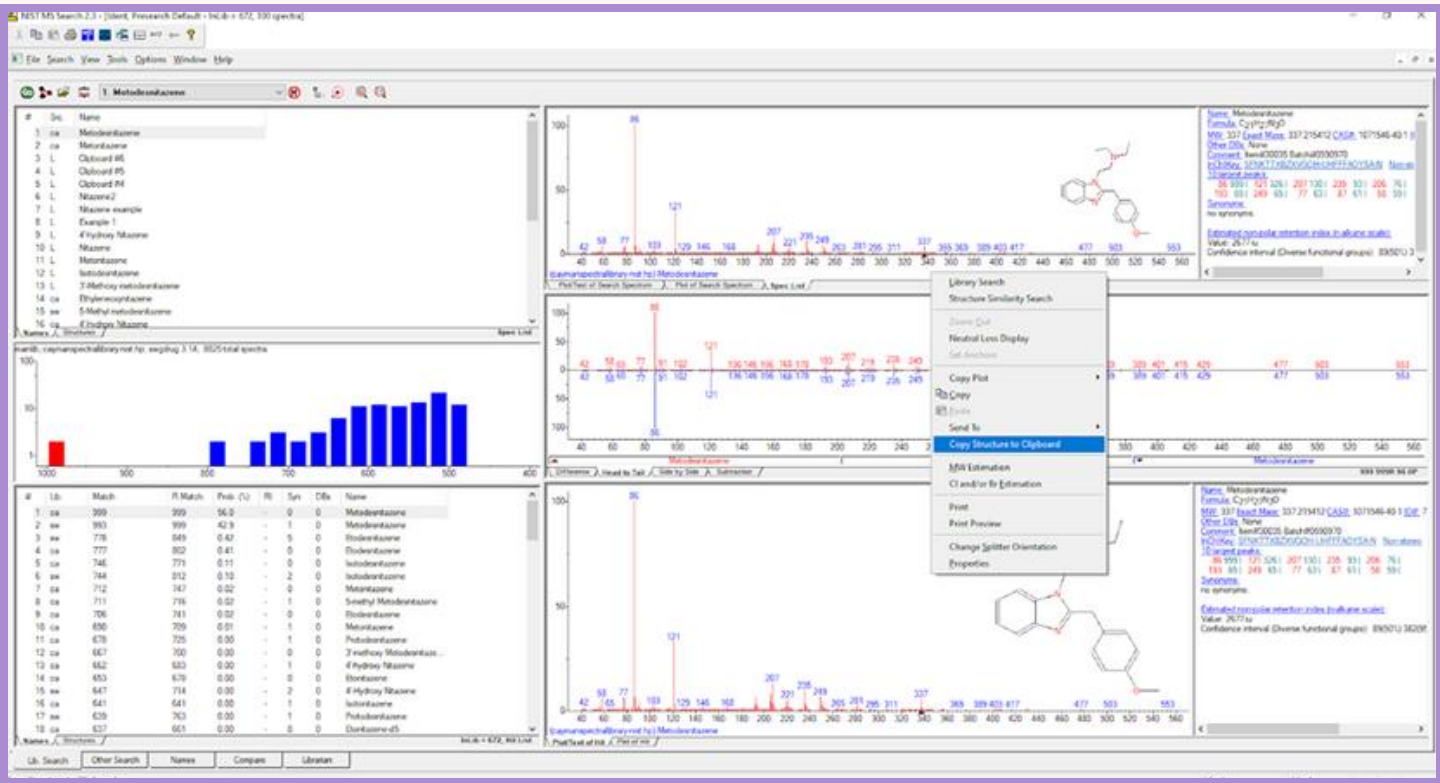
Una herramienta externa que se puede usar con el software “**MS Search**” y “**MS Interpreter**” es “**ChemSketch**”.

ChemSketch es una herramienta que permite realizar la estructura de un compuesto y copiarla directamente en MS Search en la opción “**Insert Clipboard Structure**”.

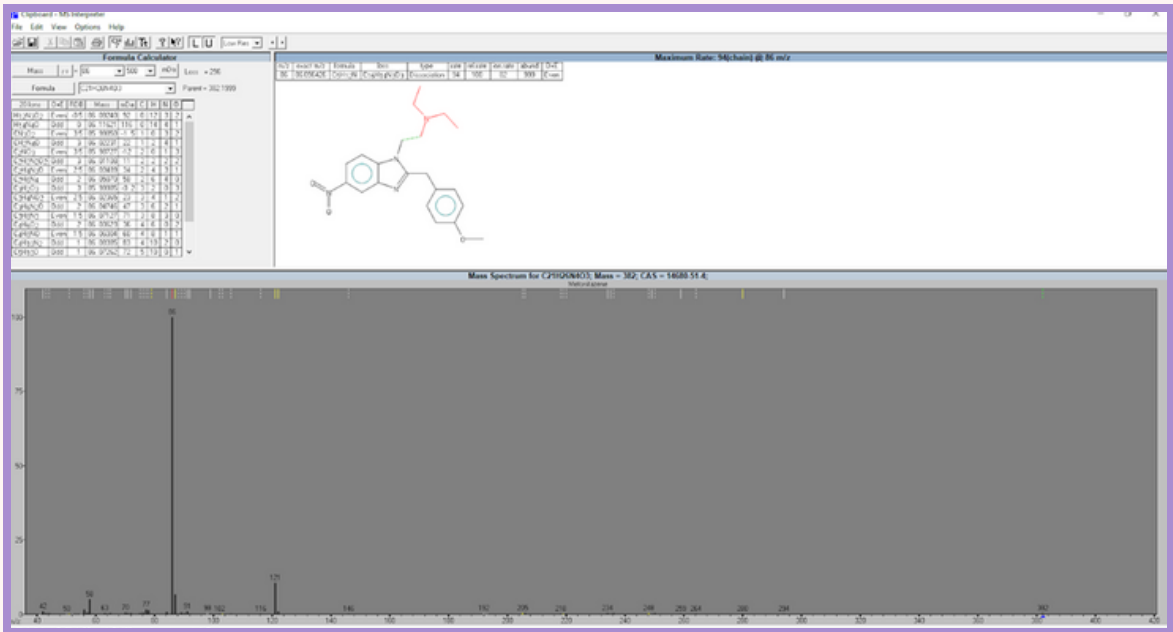
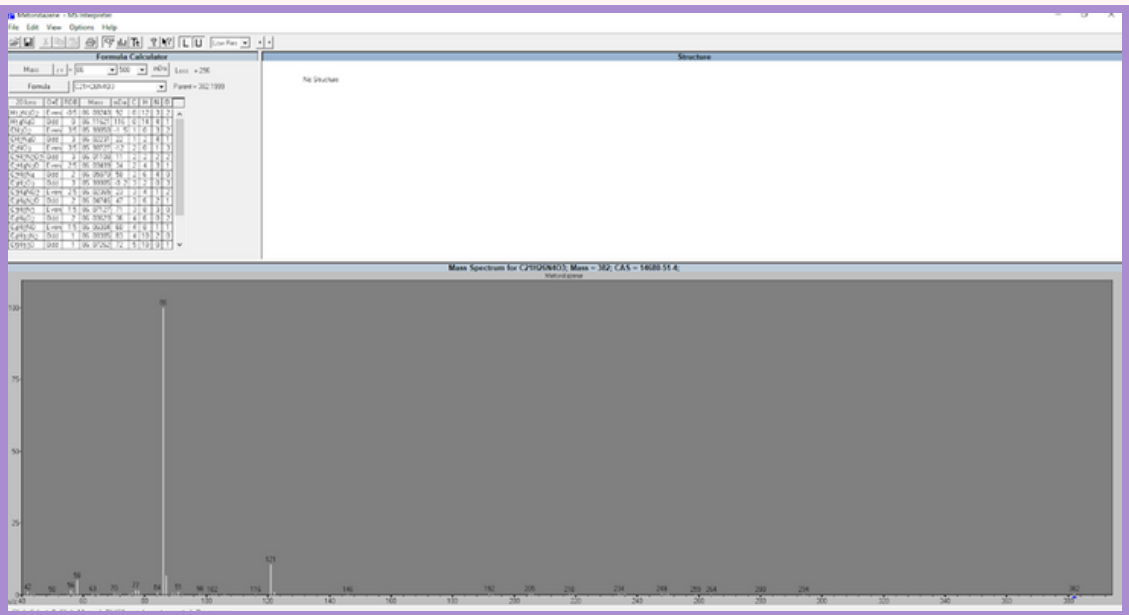
Esta opción es usada con mas frecuencia para crear una librería o para obtener básica información del compuesto.



Además, se puede copiar una estructura directamente del software “**MS Search**” en la opción “**Copy Structure to Clipboard**” y pegarla en “**ChemSketch**”.



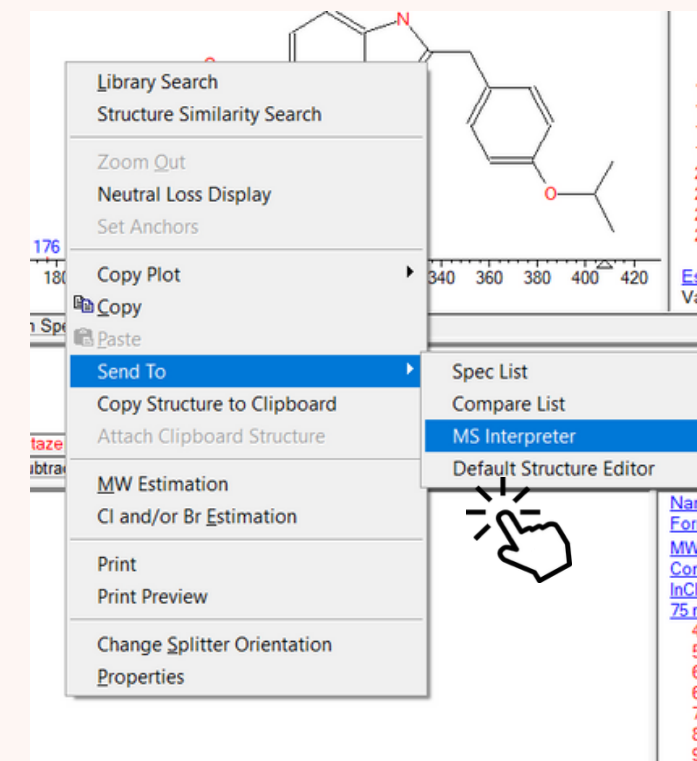
Otra ayuda que brinda esta herramienta es que una estructura de “**ChemSketch**” puede ser copiada y pegada en “**MS interpreter**” si el espectro a analizar no fue guardado con una estructura y así poder interpretar los fragmentos.



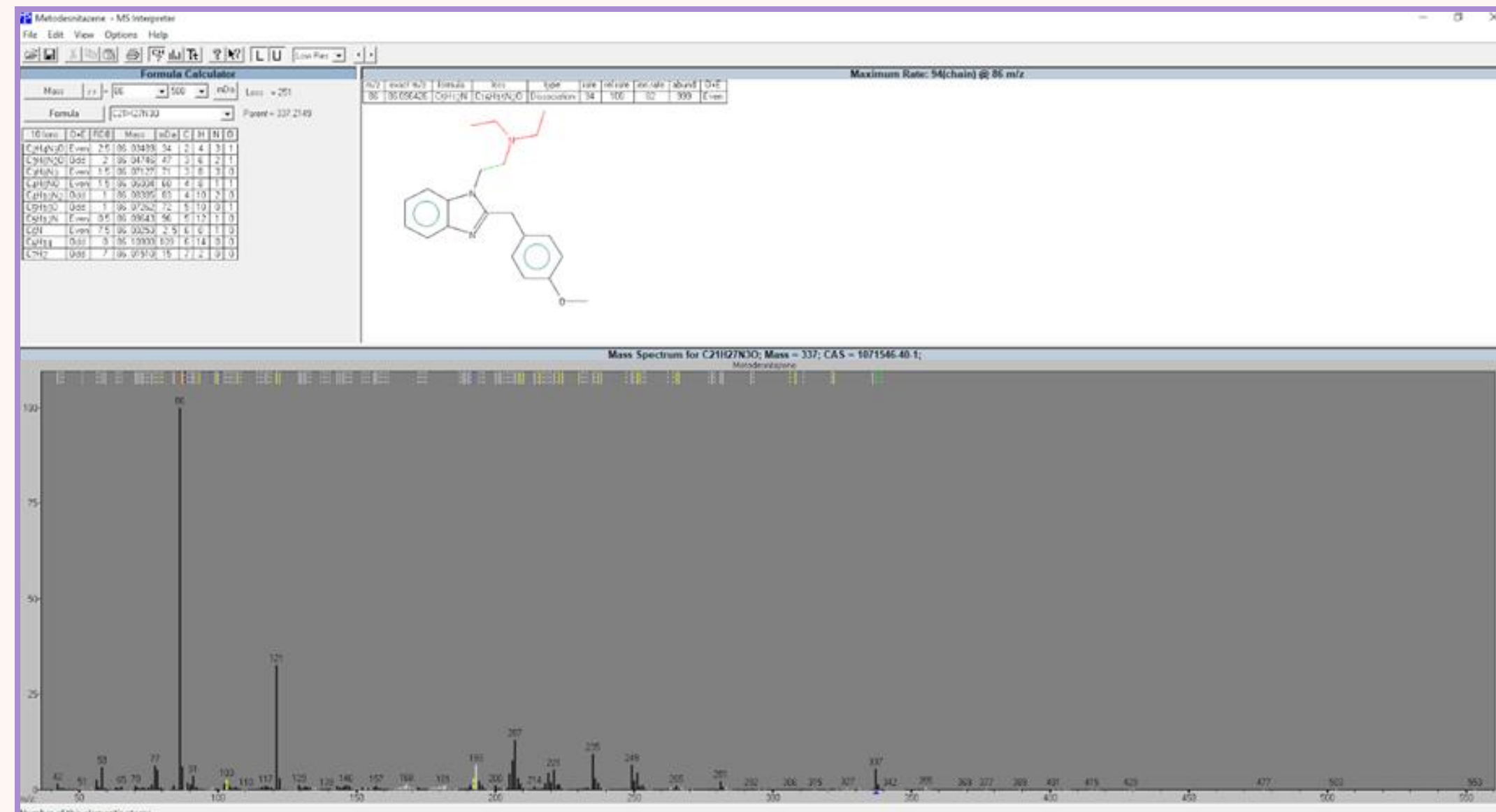
2. Mass Interpreter

NIST MS Interpreter es una herramienta que ayuda a entender mejor los espectros de masas, usados para identificar sustancias químicas.

- Muestra de dónde podrían venir los picos (señales) que aparecen en el espectro.
- Ayuda a calcular fórmulas químicas y analizar los isótopos.
- Puede trabajar con datos normales o muy precisos, y también con espectros obtenidos por diferentes métodos (como EI o MS/MS).



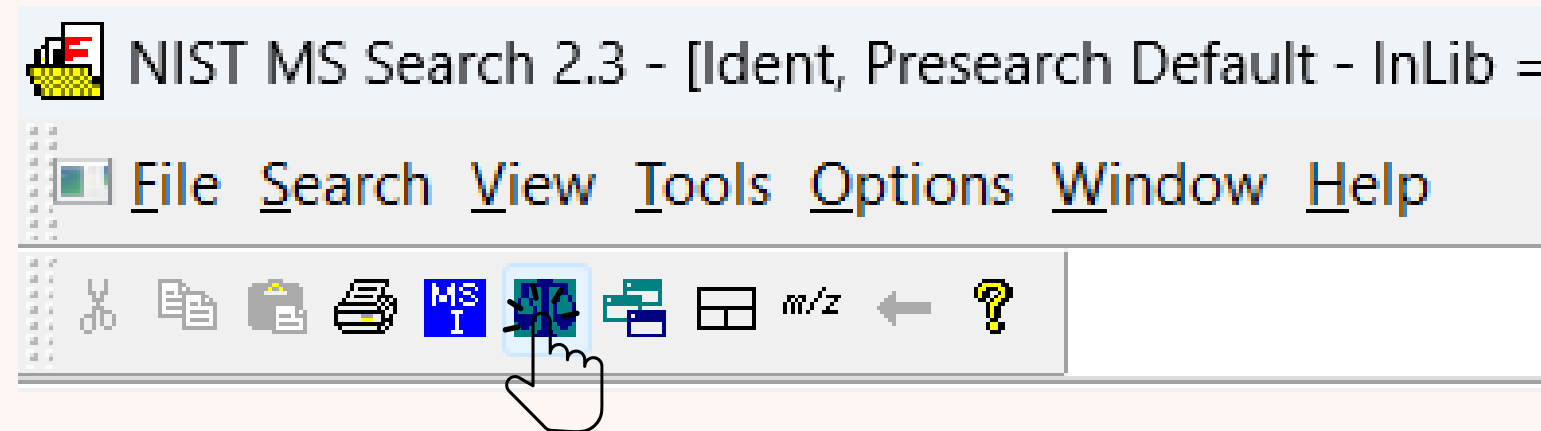
Hacer clic derecho sobre el espectro de masas y selecciona "Enviar a MS Interpreter".



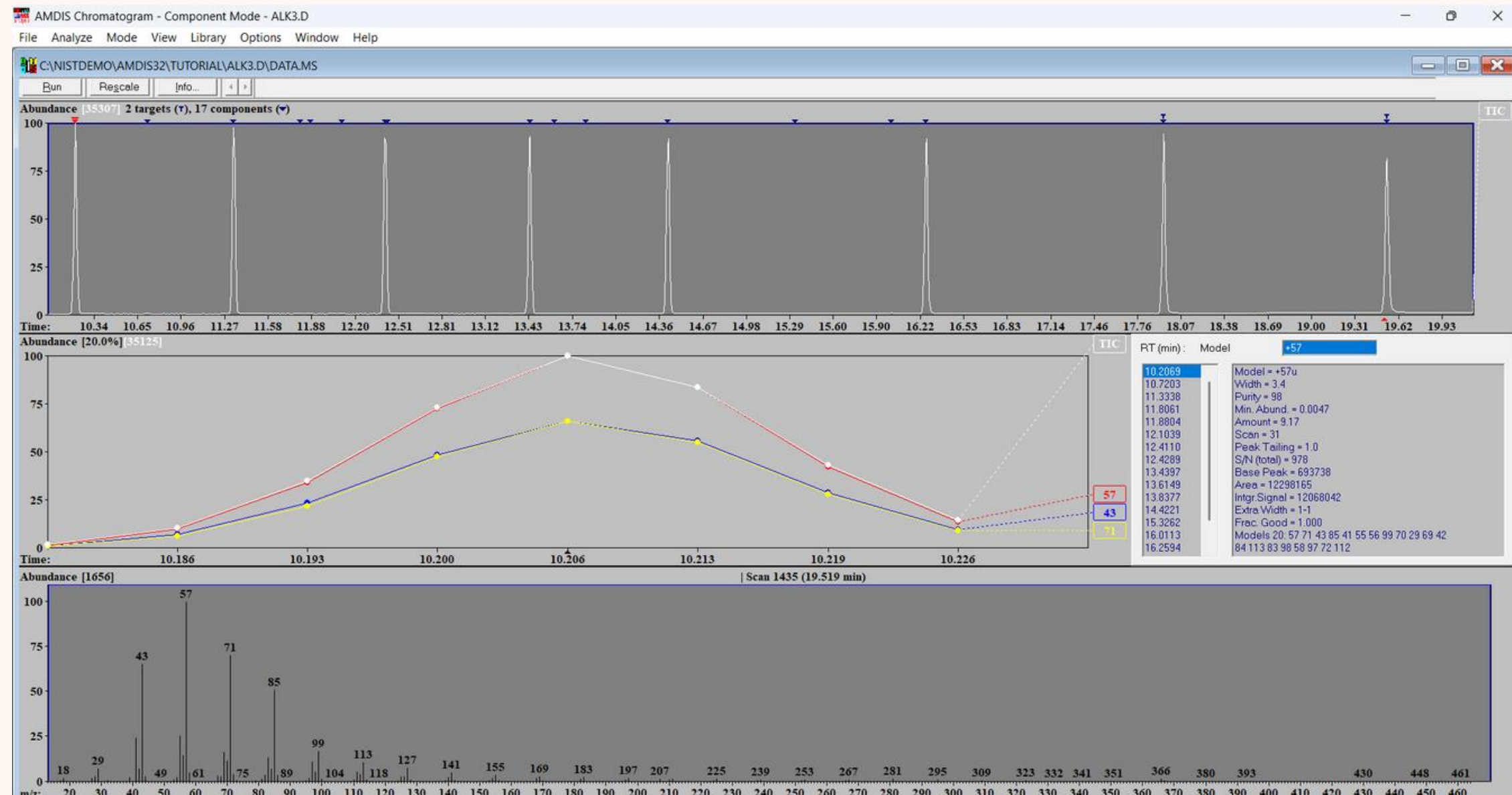
3. AMDIS Chromatogram

AMDIS es un programa que ayuda a analizar datos de cromatografía de gases con espectrometría de masas (GC/MS). Su función principal es encontrar compuestos específicos dentro de una muestra, de forma automática.

- Primero, separa los diferentes componentes que hay en los datos de la muestra (esto se llama deconvolución).
- Luego, compara cada componente con una librería de compuestos conocidos.
- Si encuentra una coincidencia suficientemente buena, lo muestra como un "acierto" o library hit.
- Puede usar información adicional llamada índice de retención para mejorar la identificación.
- Tiene funciones para identificar clases de compuestos, procesar varios archivos a la vez (batch processing), y conectarse fácilmente con el programa NIST MS Search.



Hacer clic en el ícono de AMDIS y el programa se abrirá.



Agradecimientos

Quisiera expresar mi agradecimiento al Dr. Arun Moorthy del laboratorio CRAFTS, quien propuso la idea de desarrollar esta guía con el objetivo de profundizar mi conocimiento en el programa MS-Search. Asimismo, agradezco al Dr. Yamil Simon del NIST por sus valiosas sugerencias que contribuyeron significativamente al desarrollo de esta guía.

Referencias

- Tvasailor. (2025, June 22). University Lab or Beginner's Course EI NIST Search. A "Little" Mass Spec and Sailing. <https://littlesandsailing.com/2023/08/university-laboratory-for-gcms-data-processing/>
- Cayman Chemical. (n.d.). Cayman Spectral Library. <https://www.caymanchem.com/forensics/publications/csl>
- SWGDRUG Mass Spectral Library. (n.d.). <https://www.swgdrug.org/ms.htm>

Contacto y Comentarios

Esta guía no es una traducción oficial del manual de uso del software “MS Search”. Esta guía fue elaborada con el propósito de explorar en detalle algunas de las funciones más relevantes que, en mi criterio como autora, consideré fundamentales para desarrollar mi proyecto de grado en **CRAFTS lab** en **Trent University**, enfocado en el análisis de espectros de análogos de Nitazene.

Además declaro que este trabajo ha sido realizado de manera independiente y que no he recibido ningún tipo de apoyo financiero ni colaboración institucional por parte del National Institute of Standards and Technology (NIST).

Si tienes dudas, sugerencias o simplemente deseas conocer más sobre el programa, no dudes en escribirme a mi correo electrónico: **patricialape@gmail.com**

Angela Patricia Alape

Estudiante de Maestría en Ciencias en Ciencias Forenses en Trent University

Proyecto de grado: Herramienta Clasificadora para Identificar Análogos de Nitazene mediante Espectros de Masas y Análisis de Fragmentación