



サブスクリプションIRスペクトルデータベース KnowItAll™ IRスペクトルライブラリー

KnowItAll IRスペクトルライブラリーはバイオ・ラッド インフォマティクス事業部が提供するすべてのIRスペクトルデータベース約23万件に、最先端サーチツールIDエキスパートを追加したスペクトル解析の新しいテクノロジーです。

長年培ってきた経験と分光学に基づいて開発されたアルゴリズムで膨大なスペクトルデータベースから最適な解析情報を素早く引きだします。

■ 利用期間を設定するIRデータベース23万件

KnowItAll IR スペクトルライブラリーは一年単位で利用期間を設定します。サドラーのブランド名で有名な 23 万件の IR スペクトルデータベースが収録されています。サーバー上のデータベースは常に更新されており、ライセンスの有効期間内はインターネット経由で最新のデータベースとアプリケーションをダウンロードすることができます。KnowItAll IR スペクトルライブラリーの利用にインターネット環境は必要ありません。

■ 最先端サーチツールIDエキスパート付

KnowItAll IR スペクトルライブラリーにはクイックサーチツール ID エキスパートがついています。スペクトルがロードされると同時にスペクトル検索を開始し、大幅に向上したサーチスピードでより確度の高い検索結果を提供します。ロードされたスペクトルを検証し、ノイズの除去やベースライン補正、不純物領域の設定、ATR 補正などの必要性を示唆し、初心者でも安心して操作することができます。

■ スペクトルサーチと混合物サーチ

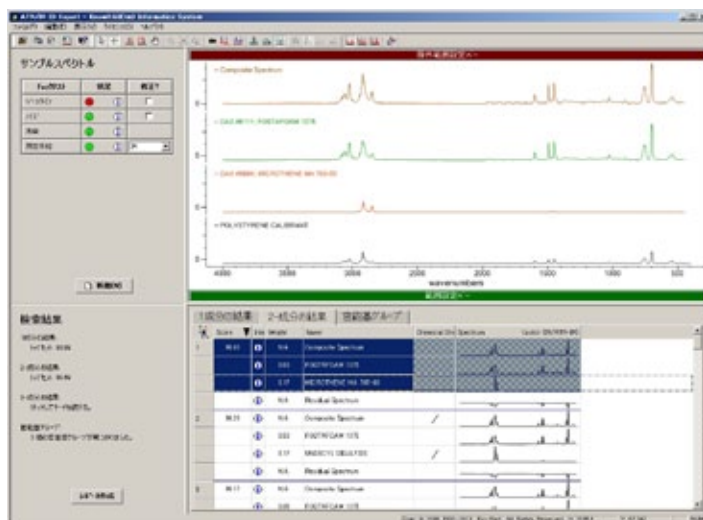
ID エキスパートは通常のスเปクトルサーチと 5 コンポーネントまでの混合物検索を自動的に行います。膨大なデータベースに複雑な計算を行う混合物サーチは本来時間のかかるツールですが、新しく開発されたアルゴリズムにより、快適なサーチ環境を実現しました。測定スペクトルの要素となりえる化合物をあらゆる角度から模索します。

■ 最適化

ID エキスパートは測定スペクトルとデータベーススペクトルを検証し、補正を行います。これによりより高い検索結果を提供することができます。

■ 官能基グループの検索

ID エキスパートはスペクトルサーチと同時に、ピークに由来する官能基グループのリストを作成し、スペクトルの解釈や解析をサポートする情報も提供します。IR ID エキスパートの官能基知識ベースには高分子の IR スペクトルに固有の官能基グループも含まれています。スペクトル解釈のトレーニングツールとしてもご利用いただけます。



IRデータベース

バイオ・ラッド インフォマティクス事業部のIRスペクトルデータベースは、サドラーのブランド名で世界中のケミストに100年以上にわたり、ケミカル情報を提供してまいりました。現在も専用ラボで新しいサンプルを測定し、続々とデータベース化されています。

■ 23万件を誇る高品質なスペクトル

長年、蓄積したスペクトルだけでなく、米国本社では現在でも社内でスペクトル測定をしたり、外部からのスペクトルの提供を受け、データを収集しています。これらは検証を重ねたうえでデータベースとして商品化しています。

■ 広範な化合物

有機化合物、高分子関連、工業製品、法化学関連、無機化合物、規制薬物などさまざまな分野から集められたサンプルのスペクトルが収録されています。試薬や原材料、市場に出回った製品、中間生成物などあらゆる行程でのサンプルが集められています。

■ 物性情報

サドラーの有機化合物のデータベースは化合物名で登録されており、化学構造式や化学組成や同意語などのケミカル情報、測定方法などが物性情報として追加されています。化学メーカーや関連産業から寄せられたサンプルは商品名や商標で登録され、はサンプル提供者とそこから供給されたサンプル情報が追加され、スペクトル解析の手がかりとすることができます。

■ 測定手法

サンプルの形状により固相、気相、顕微スペクトルや主流となった ATR 法によるスペクトルなどサンプルの特性やスペクトルの測定方法などがデータベースごとに分類されているほか、物性情報にも登録されています。

■ 多岐におよぶサポートファイルフォーマット

ID エキスパートはスペクトルファイルの共通フォーマットである JCAMP をはじめ、国内外の分光器メーカーのファイルフォーマットをサポートしており、測定スペクトルをそのままロードさせることができます。

■ サポートファイルフォーマット

Agilent (*.dt)
Bomem (*.a01)
Bruker (*.*)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir, *.rnm)
Generic XY Data (*.*)
Horiba MDW (*.mdw)
JASCO (*.jws, *.jld)
JCAMP (*.dx, *.jdx)
JEOL (*.wsf)
Mattson (*.ras, *.abs)
PE Spectrum (*.sp)
Sadtler IRF (*.irf)
Shimadzu (*.irs)
Spectacle/Shimadzu (*.irs)
Thermo/Nicolet (*.spa)

■ IRスペクトルライブラリー オーダー情報

891010 KnowItAll IRスペクトルライブラリー1年

891020 KnowItAll IRスペクトルライブラリー1年更新

☞ ライセンス満了前に更新の発注をされる場合更新特別価格が適用されます。クイックサーチツールIDエキスパート付。

■ オプション

8634J KnowItAll IRエディション

8636J KnowItAll IRエディションプラス

8631M KnowItAll Analyticalエディション

880300 KnowItAll Vibrational Spectroscopyエディション



バイオ・ラッド インフォマティクス事業部の前身サドラーリサーチラボラトリーの創始者 Samuel P. Sadtler(左)、Samuel S. Sadtler、Philip S. Sadtler。

バイオ・ラッド ラボラトリーズ株式会社
インフォマティクス事業部

BIO-RAD

〒140-0002
東京都品川区東品川 2-2-24 天王洲セントラルタワー 20F
電話 03-6361-7080 FAX 03-5463-8483
E-mail: informatics_jp@bio-rad.com