



Spektroskopie



Datenbanken und Software

Inhaltsverzeichnis

Datenbanken und Software für Spektroskopie.....1

Spektraldatenbanken.....2

IR-Datenbanken: IR-ATR2

ATR der Basispolymere	ATR der Polymere
ATR kontrollierter und verschreibungspflichtiger Medikamente	ATR der Lösungsmittel
ATR der Anorganische Stoffe	ATR von Steroiden, Androgenen, Gestagenen und Östrogenen
ATR der Organometalle	

IR-Datenbanken: Polymere und zugehörige Stoffe2

Acrylate und Methacrylate	Industrielle Polymere nach Hummel, v.2
Klebstoffe und Dichtmittel	Industrielle Polymere nach Hummel, v.3
Klebstoffe und Dichtmittel (Untergruppe A)	Polymere nach Hummel/Sadtler
Basismomere und Polymere v.1 (nicht modifiziert)	Monomere und Polymere (umfassend)
Basismomere und Polymere v.2 (nicht modifiziert)	Monomere und Polymere v.1 (modifiziert)
Beschichtungschemikalien	Monomere und Polymere v.2 (modifiziert)
Kontrollierte Pyrolysate von Polymeren	Weichmacher
Materialien für die Stromerzeugung	Polymeradditive
Epoxidharze, Härter und Additive	Polymere Verbindungen
Flammschutzmittel	Schutzmaterialien
Polymere nach Hummel	Gummichemikalien
Polymere nach Hummel, Basiszusammenstellung	Chemikalien zur Polymerverarbeitung nach Sadtler/Scholl
Industrielle Polymere nach Hummel, v.1-3	
Industrielle Polymere nach Hummel, v.1	

IR-Datenbanken: Reine organische Verbindungen5

Alkohole und Phenole	Nukleinsäuren, Nukleoside und Nukleotide
Aldehyde	Organometalle, Anorganica, Silane,
Aminosäuren und Peptide	Borane und Deuteriumverbindungen
Anhydride und Lactone	Phosphorverbindungen
Carbonsäuren	Q-Sadtler-Referenzdatenbank
Kondensierte Phase, IR-Standards (umfassend)	Ausgewählte IR-Referenzdatenbank
Farbstoffe, Alkine und Azoverbindungen	Standardauswahl
Ester	Dampfphasenauswahl
Explosive Materialien	Lösungsmittel (unvermischt)
Gase und Dämpfe	Lösungsmittel nach Dampfphase
Kohlenwasserstoffe	Startdatenbank
Kohlenwasserstoffe und halogenierte Kohlenwasserstoffe	Steroiddatenbank
Industrielle Chemikalien, FT-IR, reine organische Verbindungen	Zucker und Kohlenhydrate
Industrielle Chemikalien, FT-IR, basische organische Verbindungen	Schwefelverbindungen
Zwischenprodukte (unvermischt)	Universitätsstandards
Ketone	Dampfphase, IR-Standards (umfassend)
Merck/Sadtler	

IR-Datenbanken: Industrielle Stoffe7

Basistenside (nicht modifiziert)	Petroleumchemikalien
Fette, Wachse und Derivate	Polyole
Tenside nach Hummel	Lösungsmittel (industrielle Qualität)
Zwischenprodukte (industrielle Qualität)	Tenside (umfassend)
Schmiermittel	Tenside v.1 (modifiziert)
Schmiermitteladditive	Tenside v.2 (modifiziert)

IR-Datenbanken: Forensische Wissenschaften9

Automobil-Lackspäne	Aromen und Duftstoffe (IR-Dampfphase)
Biochemikalien	Lebensmittelzusätze
Kanadische Forensik	Georgia State Crime Lab
Häufig missbrauchte Drogen (Säure/Basen)	Pharmazeutische Hilfsstoffe
Farbstoffe	Arzneimittel
Farbstoffe, Pigmente und Beizmittel	Bereitete und verschreibungspflichtige Medikamente
Chemikalien für Fasern und Textilien	Farbstoffe, Pigmente und Beizmittel (Säure/Basen)
Fasern nach Mikroskop	Steroide
Aromen, Duftstoffe und Öle	Steroide, Androgene, Gestagene und Östrogene

IR-Datenbanken: Umwelthanwendungen10

HAZMAT-Datenbank	Vorrangige Schadstoffe
Pestizide und landwirtschaftliche Chemikalien	EPA-Dampfphase nach Sadtler
Schadstoffe (IR-Dampfphase)	Chemikalien zur Wasseraufbereitung

IR-Datenbanken: Anorganische Stoffe und Organometalle	11
Anorganische Stoffe	Mineralien und Tonarten
Anorganische Stoffe (Untergruppe A)	Organometalle
Raman-Datenbanken	12
Raman der Basismonomere und Polymere (nicht modifiziert)	Raman der anorganischen Stoffe
Nah-IR-Datenbank	12
Nah-Infrarot-Spektralsammlung gängiger organischer Verbindungen	
NMR-Datenbanken	12
NMR-Metabolitdatenbank	
¹³ CNMR von Monomeren und Polymeren	
Zusätzliche Datenbanken	12
HaveltAll® Jahreslizenz für Datenbanken	13
HaveltAll IR	HaveltAll XNMR
HaveltAll Raman	HaveltAll MS
HaveltAll NMR	HaveltAll UV-Vis
KnowItAll®-Software	14
KnowItAll-Software-Editionen	15
KnowItAll IR/NIR-Edition	KnowItAll-Enterprise-Edition
KnowItAll-Spektroskopie-Edition	KnowItAll-Raman-Edition
KnowItAll-Analyse-Edition	KnowItAll UV-Vis-Edition
KnowItAll-Software-Funktionen	16
SearchIt™	Analyzelt Polymer IR
Spektrale Mischungsanalyse	Analyzelt MVP
Overlay Density Heatmaps	ProcessIt™ NMR
DrawIt™	AssignIt™ NMR
ReportIt™	PredictIt™ NMR
Option zur Datenbankerstellung	ProcessIt MS
Analyzelt™ IR	IUPAC NameIt™ und DrawIt
Analyzelt Raman	Infometrix Pirouette® Software
KnowItAll-Edition – Funktionsvergleich	20
KnowItAll-Dateiformate	21
KnowItAll-Unternehmenslösungen	22
KnowItAll SpecFinder™	
KnowItAll Enterprise Server	
KnowItAll AnyWare™	
Weitere Informationen	23
Lizenzierungsinformationen	
Support- und Upgrade-Richtlinien	
Schulungsoptionen	
KnowItAll-Systemempfehlungen	

www.knowitall.com/literature

Datenbanken und Software für Spektroskopie

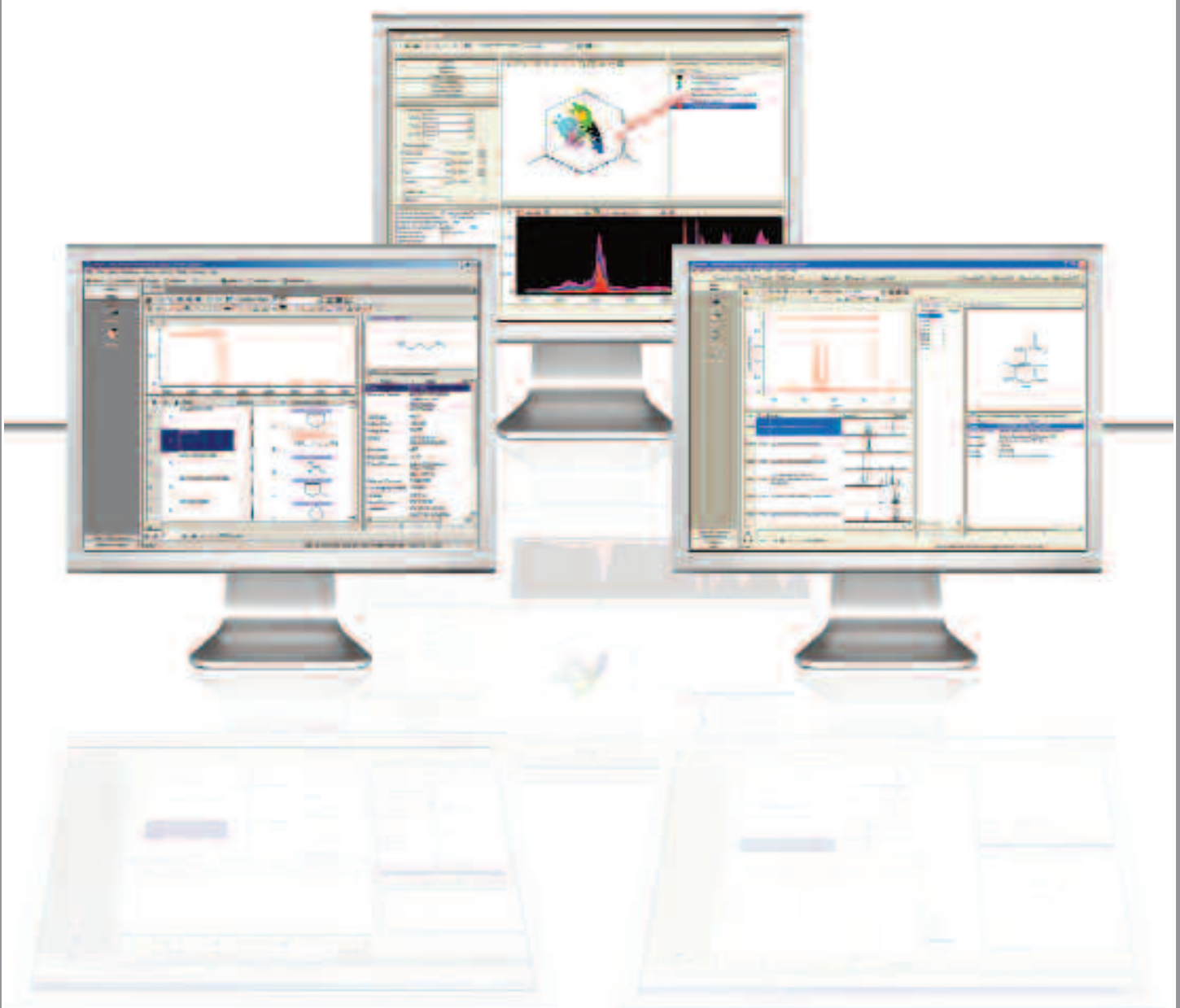
Die Informatikabteilung von Bio-Rad hat sich auf Datenbank- und Softwarelösungen für die wissenschaftliche Gemeinschaft spezialisiert.

Spektraldatenbanken – mehr als 1,3 Millionen Spektraldatensätze, einschließlich Sadtler-Daten

Bio-Rad ist der führende Hersteller und Anbieter von vollständig überprüften Spektraldatenbanken. Die Sammlung umfasst IR-, Raman-, NIR-, NMR-, MS- und UV-Vis-Daten, die reine Verbindungen und eine breite Palette kommerzieller Produkte abdecken.

KnowItAll®-Software

Bio-Rad hat sich auf Desktop-Software und Unternehmenslösungen spezialisiert, um Wissenschaftler bei der Verwaltung und Analyse *mehrerer* Arten von Spektral- und chemischen Daten in *mehreren* Datei- und Instrumentenformaten zu unterstützen.



Bio-Rad bietet mehr als 1,3 Mio. hochwertige IR-, NMR-, MS-, UV-Vis-, Raman- und NIR-Spektraldatensätze an (einschließlich Sadtler-Daten). Die Sammlungen decken sowohl reine Verbindungen als auch eine breite Palette kommerzieller Produkte ab. Sie eignen sich ideal für die Interpretation, Identifikation, Überprüfung und Klassifizierung von Spektraldaten. Sie können zwischen einzelnen Datenbanken und HavelAll-Jahreslizenzen wählen.

IR-Datenbanken: IR-ATR

 Enthält Strukturen

ATR der Basispolymere **Produktcode 448500** **500 Spektren**

Sammlung ausgewählter Produkte, die eine breite Grundlage für das Lösen von Polymer - und Kunststoffanalyseproblemen schaffen.

ATR kontrollierter und verschreibungspflichtiger Medikamente  **Produktcode 447900** **1 160 Spektren**

Diese Datenbank enthält ATR-IR-Spektren kontrollierter und verschreibungspflichtiger Medikamente und Steroide, die für forensische Labors oder für die Analyse von Medikamentenproben von Interesse sein können.

ATR der Anorganische Stoffe **Produktcode 448600** **260 Spektren**

ATR-Datenbank mit Infrarotspektren anorganischer Verbindungen. Die Spektren sind repräsentativ für zahlreiche Anionen und polyatomare Ionen anorganischer Materialien und werden nach Anionen oder polyatomaren Ionen gemäß der Gruppen im Periodensystem gegliedert.

ATR der Organometalle  **Produktcode 448700** **170 Spektren**

ATR-Datenbank, die speziell für Wissenschaftler zusammengestellt wurde, die sich für organometallische Chemie interessieren.

ATR der Polymere **Produktcode 410700** **2.390 Spektren**

Sammlung kommerziell verfügbarer ATR-Referenzspektren von Monomeren, Polymeren und Ausgangsstoffen. Sie enthält die in Folien, Beschichtungen, Versiegelungen und Laminaten verwendeten Spektren.

ATR der Lösungsmittel  **Produktcode 436100** **620 Spektren**

Die Datenbank enthält ATR FT-IR-Referenzspektren gängiger Lösungsmittel, die mithilfe standardisierter ATR-Techniken erhalten wurden.

ATR von Steroiden, Androgenen, Gestagenen und Östrogenen  **Produktcode 447800** **300 Spektren**

Die von Forensic Spectral Research zusammengestellte Datenbank enthält Steroide, Androgene, Gestagene und Östrogene, die für forensische, pharmazeutische, medizinische und andere Anwendungen von Nutzen sind.

IR-Datenbanken: Polymere und zugehörige Stoffe

 Enthält Strukturen

Acrylate und Methacrylate **Produktcode 447600** **470 Spektren**

Diese Datenbank enthält Spektren von Acryl- und Methacrylverbindungen. Sie umfasst eine Reihe polymerer und monomerer Verbindungen, die in zahlreichen gängigen Produkten verwendet werden.

Klebstoffe und Dichtmittel **Produktcode 433000** **2.070 Spektren**

Diese Sammlung umfasst eine breite Palette grundlegender synthetischer Harze und Elastomere, sowie ausgehärtete und nicht gehärtete kommerzielle Endprodukte. Die typischen Produkte bestehen aus Gummiklebern, Kontaktlebern, Heißklebern, Silikonklebern, druckempfindlichen Klebern, Bindemitteln und Dichtmitteln.

Klebstoffe und Dichtmittel (Untergruppe A) **Produktcode 423000** **520 Spektren**

Die Datenbank enthält Klebstoffe und Dichtmittel in elf Klassifikationen, die von der Klebstoffbranche allgemein etabliert wurden. Die Sammlung umfasst weiterhin grundlegende synthetische Harze, Elastomere, ungehärtete Materialien und ausgehärtete kommerzielle Endprodukte.

Datenbank der Basismonomere und Polymere v. 1 (nicht modifiziert) **Produktcode 421900** **1.490 Spektren**

Sammlung ausgewählter Produkte, die eine breite Grundlage für das Lösen von Polymer - und Kunststoffanalyseproblemen schaffen. Diese Sammlung umfasst zahlreiche klassische Verbindungen, sodass sie vor allem als Referenz von Nutzen ist.

Datenbank der Basismomere und Polymere v.2

Produktcode 422500

850 Spektren

(nicht modifiziert)

Sammlung ausgewählter Produkte, die eine breite Grundlage für das Lösen von Polymer- und Kunststoffanalyseproblemen schaffen. Diese Datenbank bietet weitere Spektren und kann zusammen mit v.1 zur Erstellung einer umfassenden Sammlung grundlegender Polymerverbindungen verwendet werden.

Beschichtungskemikalien

Produktcode 421300

720 Spektren

Diese Sammlung bietet eine bequeme und praktische Quelle für Referenzinformationen für Chemiker und Techniker in der Beschichtungsbranche. Diese Datenbank besteht aus zwei Teilen: Teil I – Harze und Teil II – Monomere, Ausgangsstoffe und Additive. Die Datenbank ist nach der Beschichtungsklassifizierung gruppiert und innerhalb der Gruppen nach chemischen Klassen gegliedert.

Kontrollierte Pyrolysate von Polymeren

Produktcode 434000

2.970 Spektren

Diese Datenbank enthält die Spektren von Polymeren, die bei einer konstanten definierten Temperatur pyrolysiert wurden. Sie unterstützt die Identifikation grundlegender Polymerarten.

Materialien für die Stromerzeugung

Produktcode 427000

1.070 Spektren

Diese Datenbank enthält Spektren kommerzieller Produkte, wie z. B. Dichtmittel, Elastomere, Polymere, Schmiermittel und zugehörige Materialien, die in Kraftwerken verwendet werden.

Epoxidharze, Härter und Additive

Produktcode 436300

700 Spektren

Datenbank mit FT-IR-Spektren, die Rohmaterialien zur Herstellung duroplastischer Materialien verwendet werden, darunter Verbundwerkstoffe, Leiterplatten und Elektronikverpackungen sowie Materialien für Lacke, Dichtmittel, Klebstoffe und eine breite Palette von Oberflächenbeschichtungen.

Flammschutzmittel

Produktcode 420400

590 Spektren

IR-Datenbank mit Spektren kommerziell verfügbarer, nicht-reaktiver und reaktiver Flammschutzmittel.

Polymere nach Hummel

Produktcode 465500

2.330 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Professor Dieter O. Hummel: *Atlas der Polymer- und Kunststoffanalyse, Auflage 1, Band 1: Definiert*. Dies ist ein sehr bekanntes und weltweit verwendetes Werk. Es enthält Spektren von Polymeren, Copolymeren und Polymerzusätzen und kann für Qualitätskontrolle, Charakterisierung oder Strukturaufklärung verwendet werden.

Polymere nach Hummel, Basissammlung

Produktcode 465600

1.040 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Dies ist eine Untermenge der Datenbank zu Polymeren nach Hummel und enthält Polymere, Copolymere und Polymerzusätze.

Industrielle Polymere nach Hummel, v. 1-3

Produktcode 465100

5.000 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Eine Sammlung von FT-IR-Spektren und Polymeren, die von Professor Dieter O. Hummel einzeln geprüft wurden. Diese Verbindungen werden in der Industrie aktiv genutzt und wurden direkt bei den Herstellern oder von den für die Entwicklung verantwortlichen Forschungslabors gesammelt.

Industrielle Polymere nach Hummel, v. 1

Produktcode 465200

1.910 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Sammlung natürlicher und synthetischer Polymere für das Baugewerbe, natürlicher und synthetischer Fasern, Elastomere, verschiedener Harze, wie z. B. Naturharze, Farbe und Beschichtungsharze, Imprägnierung und Gussharze, Dispersion, Präge- und Drucktinte, Öle, Fette, Wachse, Teere, anorganische Verbindungen, Klebstoffe, Kitten, Bindemittel, Schutzkolloide, Härtemittel, Initiatoren und Aktivatoren, Beschleuniger und Modifikatoren.

Industrielle Polymere nach Hummel, v. 2

Produktcode 465300

1.560 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Eine der weltweit größten kommerziell verfügbaren Sammlungen von Monomeren, die in der Polymerisation eingesetzt werden. Diese Sammlung enthält die folgenden Monomerklassen: Vinylmonomer, Pyrolysate, Alkohole, Phenole, Carbonsäuren und deren Salze, Ester, Anhydride, Amide, Hydrazide, Urethane, Cyanate, Fulminate, Heterozyklen, Amino- und Thiocarbonsäuren, Sulfonamide, technische Lösungsmittel und mehr.

Industrielle Polymere nach Hummel, v. 3

Produktcode 465400

1.520 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Die erweiterte Datenbank zu Polymeradditiven und zusätzlichen FT-IR von Professor Hummel bietet eine umfassende Referenzquelle für Informationen für Polymerchemiker und Techniker. Sie enthält die folgenden Klassen: Antioxidantien, Stabilisatoren (einschließlich PVC-Stabilisatoren), Lichtstabilisatoren, Färbungsmittel, Aufhellungsmittel, Füllstoffe, Weichmacher, Elastifikatoren, Streckmittel, Verarbeitungsmittel, Textilzusätze, Vulkanisiermittel und Gummizusätze.

Polymere nach Hummel/Sadtler

Produktcode 422200

1.920 Spektren

Diese Datenbank ist aus der Zusammenarbeit von Professor Dieter Hummel der Universität Köln und Bio-Rad entstanden. Sie umfasst eine breite Palette von Polymeren, Copolymeren und Polymerzusätzen.

Monomere und Polymere (umfassend)

Produktcode 321900

11.270 Spektren

Die weltweit größte kommerziell verfügbare Sammlung von Infrarotspektren zu Monomeren, Polymeren, Härtern, Antioxidantien, Stabilisatoren, Modifikatoren und anderen Zusätzen, die in der Polymerisation verwendet werden. Die Polymere umfassen aliphatische Kohlenwasserstoffe, Polyester, Polyamide, sulfonierte Polymere, Silikone, Epoxidharze, Vinyl- und Vinylidenpolymere, Zellulosederivate und Methacrylpolymere, heterozyklische Vinylpolymere und polymerisierte Fette. Darüber hinaus sind auch zahlreiche Monomere enthalten.

Monomere und Polymere v. 1 (modifiziert)

Produktcode 422000

1.790 Spektren

Diese Sammlung enthält kommerzielle Produkte (einschließlich Additive), die eine breite Grundlage für das Lösen von Polymer- und Kunststoffanalyseproblemen schaffen. Die Produktklassifizierungen umfassen Polyethylene, Polypropylene, Polystyrole, Polybutadiene, Polyether, Polyacrylate, Polyester und Polyvinylpyridine. Diese Sammlung umfasst zahlreiche klassische Verbindungen, sodass sie vor allem als Referenz von Nutzen ist. (Die Verbindungen wurden von Richard A. Nyquist ausgewählt und geprüft.) Die Spektren sind in 49 chemische Klassen gegliedert und wurden nach der chemischen Komplexität je Klasse sortiert.

Monomere und Polymere v. 2 (modifiziert)

Produktcode 422300

1.700 Spektren

Bio-Rad hat eine Sammlung von Monomeren, Polymeren und Ausgangsstoffen zusammengestellt. Die analytischen Anwendungen umfassen die Identifikation, Qualitätskontrolle, Denaturierungsstudien, Materialauswahl sowie andere Anwendungen, wie z. B. Klassenunterricht. Diese Datenbank enthält Spektren kommerzieller Produkte und bietet eine breite Grundlage für das Lösen von Polymer- und Kunststoffanalyseproblemen. Die Produktklassifizierungen umfassen Polyethylene, Polypropylene, Polystyrole, Polybutadiene, Polyether, Polyacryle, Polyester und Polyvinylpyridine. (Die Verbindungen wurden von Richard A. Nyquist ausgewählt und geprüft.) Die Datenbank enthält 46 Monomer- und Polymerklassen.

Weichmacher

Produktcode 433700

1.480 Spektren

Diese Datenbank enthält eine breite Palette kommerziell verfügbarer Weichmacher, die in der Verarbeitung und Zusammenstellung von Polymeren verwendet werden. Eine Teilliste der Verbindungsklassen aus dieser Sammlung umfasst Formale, Kohlenwasserstoffe, Lactame, Mellitate, Nitrile, Phenoxy- und Polyester, Derivate von Säuren (abietinisch, adipinisch, benzoisch, caprylisch, Zitronen-, fumarisch, isophthalisch, laurinisch, maleinisch, oleinisch, palmitinisch, phthalisch, sebacinisch, stearisch, succininisch und tartrarisch) sowie Derivate von Verbindungen, wie Biphenyle, Epoxidharze, Ether, Ethylendiamin, Glycerin, Glycol und Paraffin.

Polymeradditive

Produktcode 424800

1.740 Spektren

Bio-Rad hat eine Referenzsammlung von Infrarotspektren von Polymeradditiven zusammengestellt, um eine bequeme und praktische Referenzquelle für Informationen für Polymerchemiker und Techniker zusammenzustellen.

Polymerverbindungen

Produktcode 439900

470 Spektren

Diese Datenbank enthält einfache Polymere, die in der Regel im industriellen und wissenschaftlichen Bereich verwendet werden. Sie umfasst Baupolymere, Elastomere, verschiedene Harze, Teere, anorganische Verbindungen, Härter, Initiatoren und Aktivatoren, Beschleuniger und Modifikatoren.

Schutzmaterialien

Produktcode 447500

770 Spektren

Diese Infrarotdatenbank zu Polymeradditiven umfasst Beschichtungen, Inhibitoren, Stabilisatoren, Antioxidantien, Antistatika und Konservierungsmittel.

Gummichemikalien

Produktcode 424300

580 Spektren

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Gummichemikalien und ist nach Grundfunktionen gegliedert. Sie umfasst eine breite Palette chemischer Klassen, die in der Gummibranche verwendet werden, darunter Beschleuniger, Aktivatoren, Verzögerer, Vulkanisatoren, Antioxidantien, Weichmacher, Klebgrmacher und Stabilisatoren.

Chemikalien zur Polymerverarbeitung nach Sadtler/Scholl

Produktcode 423200

1.150 Spektren

Die Sammlung umfasst Reagenzien zur Polymerverarbeitung, wie z. B. Weichmacher, anorganische Füllstoffe und Pigmente, organische Pigmente, UV-Stabilisatoren, fluoreszierende Weißmacher, Antioxidantien, Stabilisatoren, Antistatika, Biozide, Flammschutzmittel, Beschleuniger, Härter und Aktivatoren, Verarbeitungshilfen und Lösungsmittel. Die Datenbank ist zuerst als dritte Auflage des *Polymer-Atlas von Hummel/Scholl* erschienen, der auf den von Dr. Friedrich Scholl vorbereiteten Daten basiert.

IR-Datenbanken: Reine organische Verbindungen

 Enthält Strukturen

Alkohole und Phenole

Produktcode 438100

1.920 Spektren

Diese Datenbank enthält Spektren von Alkohol- und Phenolverbindungen, die als Lösungsmittel und in der Synthese anderer Verbindungen verwendet werden.

Aldehyde

Produktcode 438200

690 Spektren

Diese Datenbank der Aldehydverbindungen ermöglicht den Zugriff auf Stoffe, die in der Duft- und Aromabranche sowie bei der Herstellung pharmazeutischer Zwischenprodukte und Kunststoffadditive von Bedeutung sind.

Aminosäuren und Peptide

Produktcode 438300

790 Spektren

Diese Datenbank enthält Spektren von Aminosäuren, Peptiden und Verbindungen mit der Aminosäure als Einheit. Diese Sammlung von Substanzen mit biologischer Bedeutung ermöglicht den Anwendern die Suche nach Verbindungen, die diese essentiellen Bausteine enthalten.

Anhydride und Lactone

Produktcode 438400

320 Spektren

Datenbank mit Infrarotspektren von Verbindungen, die diese organischen funktionellen Gruppen enthalten.

Carbonsäuren

Produktcode 438500

1.520 Spektren

Diese Datenbank enthält Infrarotspektren von Säureverbindungen, die vor allem bei der Synthese anderer Verbindungen verwendet werden.

IR-Standards für kondensierte Phase (umfassend)

Produktcode 320100

75.570 Spektren

Umfassende Datenbank mit Infrarot-Referenzspektren zu organischen Verbindungen. Sie umfasst die Spektren einfachster aliphatischer, aromatischer, alicyclischer und heterocyclischer Verbindungen sowie zahlreiche komplexe Materialien. Außerdem enthält diese Informationsquelle zahlreiche Reihen sehr einfacher bis sehr komplexer homologer Verbindungen, die spektroskopische Untersuchungen von Trends mit homologen Verbindungen ermöglichen.

Farbstoffe, Alkine und Azoverbindungen

Produktcode 438600

940 Spektren

Diese Datenbank enthält Spektren von Farbstoffen, Alkinen und Azoverbindungen. Sie dient als Referenz zu reinen Farbstoffen für Anwender in der Färb- oder Farbenbranche.

Ester

Produktcode 438700

1.800 Spektren

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Estern. Die Verbindungen werden vor allem in der Duftbranche verwendet, aber ihre Anwendung ist weit verbreitet.

Explosive Materialien

Produktcode 438800

720 Spektren

Diese Datenbank enthält Verbindungen, die als explosiv oder als ein Bestandteil explosiver Materialien eingestuft werden. Die Datenbank enthält Verbindungen aus der „Liste explosiver Materialien 2002“ des Bureau of Alcohol, Tobacco, and Firearms. Darüber hinaus sind Azide, Nitrat-Sprengstoffgemische, Pikratsprengstoffe, Peroxide und Perchlorate enthalten.

Gase und Dämpfe

Produktcode 420500

150 Spektren

Die Spektren in dieser Datenbank umfassen permanente Gase sowie Dämpfe flüchtiger Flüssigkeiten, die häufig in Labors und Verarbeitungsanlagen eingesetzt werden. Viele der enthaltenen Verbindungen sind eine nützliche Referenz für atmosphärische Kontaminierungsanalysen hinsichtlich der geltenden Luftqualitätsbestimmungen, darunter der National Ambient Air Quality Standards Act und der Occupational Safety and Health Standards Act. Die Datenbank enthält die folgenden chemischen Klassen: Kohlenwasserstoffe, Aldehyde, Freone, Stickstoffverbindungen und Schwefelverbindungen.

Spektraldatenbanken

Kohlenwasserstoffe **Produktcode 439000** **1.060 Spektren**

Diese Datenbank enthält Infrarotspektren von Kohlenwasserstoffverbindungen und dient als bequeme Referenz für Forscher.

Kohlenwasserstoffe und halogenisierte Kohlenwasserstoffe **Produktcode 439100** **1.880 Spektren**

Diese Datenbank enthält Infrarotspektren von Kohlenwasserstoffen und halogenisierten Verbindungen.

Industrielle Chemikalien, reine organische FT-IR-Stoffe **Produktcode 465800** **20.310 Spektren**

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. FT-IR-Spektrensammlung organischer Verbindungen, die als industrielle Chemikalien verwendet werden.

Industrielle Chemikalien, einfache organische FT-IR-Stoffe **Produktcode 465900** **1.000 Spektren**

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Die Sammlung umfasst Spektren gängiger organischer Verbindungen, die individuell aus der Sammlung organischer FT-IR-Verbindungen von Chemical Concepts ausgewählt wurden.

Zwischenprodukte (unvermischt) **Produktcode 422900** **490 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Chemikalien, die als Zwischenprodukte bei der Herstellung anderer Endprodukte anfallen. Sie sind in 17 Verbindungs-Hauptklassen gegliedert. Einschließlich Säuren, Alkohole, Aldehyde, Amine, Nitrile, Sulfide, Ketone, aromatische Kohlenwasserstoffe etc.

Ketone **Produktcode 439200** **1.810 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Ketonverbindungen, die zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden können.

Merck/Sadtler **Produktcode 424500** **2.940 Spektren**

Diese Datenbank basiert auf den im *Merck FT-IR-Atlas* reiner Substanzen aus dem Merck-Schuchardt-Programm verwendeten FT-IR-Spektren.

Nukleinsäuren, Nucleoside und Nucleotide **Produktcode 439300** **1.450 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Nucleinverbindungen. Die Verbindungssammlung kann zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden und wurde für jene entwickelt, die Molekularprozesse untersuchen.

Organometalle, Anorganica, Silane, Borane und Deuteriumverbindungen **Produktcode 439400** **1.140 Spektren**

Diese Datenbank mit Infrarotspektren wurde speziell für die Arbeit mit mit Bor-, Silicium- und Deuteriumverbindungen sowie Organometallen und anorganischen Stoffen entwickelt.

Phosphorverbindungen **Produktcode 439500** **1.110 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Phosphorverbindungen, die zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden können.

Q-Sadtler-Referenzdatenbank **Produktcode 426000** **10.000 Spektren**

Umfassende Datenbank mit reinen organischen Verbindungen, die vor allem in akademischen und industriellen Labors eingesetzt werden. Die Datenbank deckt eine breite Palette chemischer Klassen aus kommerziell verfügbaren Quellen ab. Sie wird häufig in Vorlesungen zur organischen Chemie und anderen Themen verwendet, um die chemische Identität durch einen Vergleich der funktionalen Gruppen nachzuweisen. Diese Datenbank kann auch als Referenz für industrielle Labors verwendet werden, um organische Verbindungen mithilfe von Infrarotspektroskopie zu identifizieren.

Ausgewählte IR-Referenzdatenbank **Produktcode 400000** **2.500 Spektren**

Diese Datenbank enthält reine organische Chemikalien und kann zur Identifikation und Klassifizierung reiner Proben verwendet werden. Sie dient auch als Referenz, wenn keine umfassenderen Sammlungen zur Verfügung stehen.

Standardauswahl  **Produktcode 420200** **2.490 Spektren**

Diese Datenbank enthält Spektren zu einer breiten Palette von einfachen und komplexen reinen Verbindungen. Sie wurde entwickelt, um den Bedarf an einer kleinen, bequemen Sammlung von Infrarotspektren organischer Verbindungen zu decken, wenn keine umfassenderen Sammlungen zur Verfügung stehen.

Ausgewählte Dampfphasen  **Produktcode 422800** **500 Spektren**

IR-Datenbank mit Dampfphasenspektren zur Ergänzung von Nyquists *Interpretation von Dampfphasen-Infrarotspektren – Gruppenfrequenzdaten*. Diese Datenbank bietet eine grundlegende Sammlung von Verbindungen, die mithilfe der Dampfphasentechnologie analysiert wurden.

Lösungsmittel (unvermischt)  **Produktcode 436000** **630 Spektren**

Diese Datenbank enthält die FT-IR-Referenzspektren gängiger Lösungsmittel zur Unterstützung der Identifikation und Analyse dieser Lösungsmittel. Es handelt sich um eine umfassende Sammlung, die in jedem Forschungslabor eingesetzt werden kann.

Lösungsmittel nach Dampfphase  **Produktcode 436200** **620 Spektren**


Die Datenbank enthält FT-IR-Referenzspektren gängiger Lösungsmittel. Spektroskopiker, die Verbindungen in Dampfphase aus der Gaschromatografie identifizieren, erhalten mit dieser Datenbank ein nützliches Hilfsmittel zur Darstellung hochwertiger Spektren für die Evaluierung und Interpretation von Dampfphasen-Infrarotspektren.

Startdatenbank  **Produktcode 405000** **11.800 Spektren**

Die Sadtler-Startdatenbank ist eine Sammlung von Infrarot-Referenzspektren, einschließlich organischer Chemikalien und Monomer- bzw. Polymerverbindungen mit Markennamen.

Steroiddatenbank  **Produktcode 439600** **860 Spektren**

Diese Datenbank mit Infrarotspektren enthält speziell Steroidverbindungen.

Zucker und Kohlenhydrate  **Produktcode 439700** **570 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Zuckern und Kohlenhydraten, die zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden können. Kohlenhydrate enthalten eine breite Palette von Zuckern, Stärken und Fasern.

Schwefelverbindungen  **Produktcode 439800** **1.090 Spektren**

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren von Schwefelverbindungen, die zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden können.

Universitätsstandards  **Produktcode 420100** **300 Spektren**

Diese Datenbank dient als kleine und bequeme Sammlung von Infrarotspektren organischer Verbindungen für Hochschuleinführungen in die organische Chemie und für die ergänzenden Laborkurse zu experimenteller organischer Chemie und qualitativer organischer Analyse. Die Verbindungen sind nach chemischen Klassen gegliedert.

Dampfphasen-IR-Standards (umfassend)  **Produktcode 320300** **9.190 Spektren**

Die Sammlung umfasst IR-Dampfphasenspektren gängiger reiner organischer Verbindungen und unterstützt die Identifikation unbekannter Verbindungen mit GC-IR, TGA-IR oder mit anderen Dampfphasen-Analysemethoden. Die Verbindungen eignen sich vor allem zur Identifikation von Schadstoffen und Toxinen.

IR-Datenbanken: Industrielle Stoffe

Basistenside (nicht modifiziert) **Produktcode 436700** **850 Spektren**

Diese Sammlung dient Wissenschaftlern, die mit oberflächenaktiven Stoffen arbeiten, als Referenzdatenbank für repräsentative Verbindungen. Enthält die FT-IR-Spektren anionischer, kationischer und nicht-ionischer Verbindungen.

Fette, Wachse und Derivate

Produktcode 432500

1.800 Spektren

Zu den Verbindungen in dieser Datenbank zählen tierische Fette und Öle, tierische Wachse (roh und raffiniert), Fettsäuren, Fettsäureester (nicht Triglyceride), Fettamide, Fettamine, unverseifbare Materialien, andere Fettderivate, marine Fette und Öle, Mineralwachse (roh und raffiniert), modifizierte Mineralwachse, modifizierte pflanzliche Wachse, synthetische Wachse, Seifen, pflanzliche Fette und Öle sowie pflanzliche Wachse (roh und raffiniert).

Tenside nach Hummel

Produktcode 465700

1.030 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Diese Datenbank enthält Spektren von Tensiden, die von Professor Dieter O. Hummel zusammengestellt wurden. Die Daten wurden mithilfe von Forschungsproben und industriellen Tensiden erstellt, um eine umfassende Verbindungsdatenbank für die Verwendung von Tensiden zu schaffen.

Zwischenprodukte (industrielle Qualität)

Produktcode 432900

830 Spektren

IR-Datenbank mit Spektren kommerziell verfügbarer Chemikalien, die als Ausgangsstoffe für die gewünschten Endprodukte verwendet werden, darunter Säuren, Alkohole, Aldehyde, Amine, Ketone, Nitrile, Sulfide und aromatische Kohlenwasserstoffe. Diese Verbindungen werden unter anderem zur Herstellung von Medikamenten, Tensiden, Färbemitteln, Weichmachern und anderen speziellen Chemikalien verwendet.

Schmiermittel

Produktcode 421700

880 Spektren

Diese Datenbank enthält Infrarotspektren kommerziell verfügbarer Verbindungen, die in einer Reihe von Anwendungen aus den Bereichen Industrie und Automobilbau eingesetzt werden. Hierzu zählen Fette, Hydraulikflüssigkeiten, Schnittöle, Motoröle und metallische Seifen. Enthalten sind auf Petroleum basierende Produkte und synthetische Schmiermittel, wie z. B. Chlorofluorokohlenwasserstoffe (CFCs), dibasische carboxyliche Säureester, Schmierpolymere, Phosphatester und Silikone.

Schmieradditive

Produktcode 425500

1.570 Spektren

Eine Sammlung von Additiven, die in Motorölen, Getriebe- und Hydraulikflüssigkeiten, Getriebeölen, Industrieölen, Metallbearbeitungs- und Prozessölen zum Einsatz kommen. Diese werden in den Bereichen Automobilbau, Schiffbau, Luftfahrt und Erdölverarbeitung sowie in anderen Branchen verwendet, in denen Maschinen eingesetzt werden. Die Spektren wurden mit noch mehr Sorgfalt als gewöhnlich erstellt, um die Natur der Verbindungen zu kompensieren.

Petroleumchemikalien

Produktcode 420800

320 Spektren

Diese Spektren stammen von Verbindungen aus kommerziell verfügbaren Petroleumprodukten, von denen viele bei der Modifikation und Verbesserung von Dieseln, Kraftstoffölen, Schmiermitteln und anderen Produkten verwendet werden. Einige der mehr als 20 Klassen in dieser Datenbank umfassen Antisäuremittel, Antidetontantien, Antioxidantien, Katalysatoren, Detergentien, Klebehemmer, Klebelösemittel, Zündsteuerungsverbindungen, Rostschutz, Viskositätsverbesserer etc.

Polyole

Produktcode 422600

270 Spektren

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren kommerziell verfügbarer Polyole. Hierzu zählen Polyole, Polyglycole, Glycerine, Kohlenhydrate, Stärken, Mono-, Di- und Polysaccharide, die als Schmiermittel verwendet werden, Präpolymere und Zwischenprodukte bei der Herstellung von Medikamenten und zahlreichen industriellen Produkten.

Lösungsmittel (industrielle Qualität)

Produktcode 432700

910 Spektren

Diese Datenbank bietet eine bequeme und praktische Referenz zur Unterstützung der Identifikation und Analyse gängiger industrieller Lösungsmittel. Die Lösungsmittel sind in vier Hauptgruppen unterteilt: Kohlenwasserstoffe, Verbindungen mit nur einer Art von charakteristischer Atom- oder funktioneller Gruppe, Verbindungen mit mehreren charakteristischen Atom- oder funktionellen Gruppen sowie deuterierte Verbindungen.

Tenside (umfassend)

Produktcode 323500

10.000 Spektren

Die größte kommerziell verfügbare Sammlung von Infrarotspektren zu Reinigungsmitteln, Emulgatoren, Schaumlösern, Weichmachern, Sequestriermitteln, Seifen, Bildnern und Formulierungsprodukten.

Tenside v. 1 (modifiziert)

Produktcode 423500

1.790 Spektren

Sammlung von IR-Spektren, die zur Unterstützung der Behebung von Analyseproblemen im Bereich der Tensidanalyse ausgewählt wurden. Die analytischen Anwendungen umfassen die Identifikation, Qualitätskontrolle, Denaturierungsstudien, Produktauswahl sowie In-Situ-Untersuchung der Nützlichkeit sowie andere Anwendungen, wie z. B. den akademischen Unterricht. Die Sammlung umfasst kommerziell verfügbare Produkte, wie z. B. Seifen, Emulgatoren, Geliermittel, Korrosionsstopper, Gleitmittel, Verdickungsmittel, optische Bleichmittel, Schmiermittel, Schaumlöser, Sequestriermittel, Weichmacher etc.

Tenside v. 2 (modifiziert)

Produktcode 425200

1 700 Spektren

Sammlung von IR-Spektren, die zur Unterstützung der Behebung von Analyseproblemen im Bereich der Tensidanalyse ausgewählt wurden. Die Produkte werden als Reinigungsmittel, Seifen, Emulgatoren, Gelmittel, Korrosionsstopper, Gleitmittel, Verdickungsmittel, optische Bleichmittel, Schmiermittel etc. eingesetzt.

IR-Datenbanken: Forensische Wissenschaften

 Enthält Strukturen

Automobil-Lackspäne

Produktcode 460300

1.990 Spektren

Diese Sammlung ist vor allem für den Einsatz bei Farbvergleichen und/oder chemischen Vergleichen vorgesehen. Alle Lackspäne in der Datenbank wurden aus realen Produktionslosen erstellt. Zu den Lacktypen zählen Acryl-Lösungslacke, Acryl-Dispersionslacke, Acryl-Decklacke, Polyester-Decklacke, Urethan-Decklacke, Grundierung/Acryl-Klarlacke, nicht-wasserlösliche Dispersions-Decklacke (NAD), wasserbasierende Decklacke etc.

Biochemikalien

Produktcode 447200

590 Spektren

Diese Datenbank enthält Infrarotspektren zu einer Vielzahl von Biochemikalien, darunter Peptide, Aminosäuren, Kohlenhydrate, Nukleinsäuren, Zucker, Lipide, Steroide, Terpene, Alkaloide, Glykoside, Carotenoide, Flavonoide etc.

Kanadische Forensik

Produktcode 421200

3.490 Spektren

Diese Datenbank enthält Spektren legaler und illegaler Drogen, Drogenvorgängerstoffe und Reagenzien für deren Herstellung sowie anderer Substanzen, die in der forensischen Analyse vorkommen. Es wurden auch einige gängige Labor- und Haushaltsreagenzien aufgenommen. Diese Datenbank wurde vom Department of National Health and Welfare of the Government of Canada erstellt.

Häufig missbrauchte Drogen (Säure/Base)

Produktcode 421400

580 Spektren

Diese Sammlung enthält Spektraldaten zu häufig missbrauchten Drogen. Die enthaltenen Verbindungen sind vor allem Marken-Medikamente in Dosierungsformen, einige in unverpackter Stückelung und einige als Betäubungsmittel. Bei einigen Mischungen in dieser Sammlung handelt es sich um Straßendrogen, d. h. um Mischungen aus Betäubungsmitteln, die illegal zusammengestellt wurden.

Farbstoffe

Produktcode 421600

520 Spektren

Diese Färbemittelsammlung bietet eine bequeme und praktische Quelle für Referenzinformationen für Chemiker und Techniker in der Färb- oder Farbenbranche. Die Farbstoffe werden in Klassen auf Basis der nach Colour Index (C.I.) festgelegten Nutzung gegliedert.

Farbstoffe, Pigmente und Beizmittel

Produktcode 431600

2.550 Spektren

Diese Färbemittelsammlung bietet eine bequeme und praktische Quelle für Referenzinformationen für Chemiker und Techniker in der Färbbranche.

Faser- und Textilchemikalien

Produktcode 420300

480 Spektren

Diese Sammlung enthält natürliche und synthetische Fasern aus nationalen und internationalen Quellen. Zu den natürlichen Fasern zählen: Seide, Wolle, Baumwolle, Kapok, Flachs, Jute, Hanf, Sisal, Raffia und Asbest. Zu den synthetischen Fasern zählen alle generischen Klassifikationen laut Textile Fiber Products Identification Act (mit Ausnahme der metallischen Klasse). Die Klassen umfassen Acetat, Acryl, Nylon, Nytril, Polyester, Rayon, Triacetat, Vinyl und Vinyon. Zu den Textilchemikalien zählen Schaumlöser, Reinigungsmittel, Bleichmittel, Antistatika, Conditioner, Weichmacher und andere Mittel.

Fasern nach Mikroskop

Produktcode 436400

450 Spektren

Diese Datenbank enthält hochwertige Referenzspektren zu kommerziell verfügbaren synthetischen Fasern gemessen vom FT-IR-Instrument und Mikroskop. Die Spektren wurden mit Faser- und Garnproben erstellt. Für zwei oder mehrere Komponenten in einem Garn werden mehrere Spektren bereitgestellt.

Aromen, Düfte und Öle

Produktcode 436500

870 Spektren

Diese Datenbank bietet Wissenschaftlern eine repräsentative Sammlung organischer Verbindungen, die in der Herstellung von Aromen und Düften, Naturproduktölen, synthetisierten Duftstoffen, Terpenen und einigen Fixativen verwendet werden. Die Datenbank enthält Infrarotspektren von Verbindungen, die von der Flavor and Extracts Manufacturers' Association of the United States freigegeben wurden.

Spektraldatenbanken

Aromen und Düfte (IR-Dampfphase)

Produktcode 447400

490 Spektren

IR-Datenbank mit Dampfphasenspektren reiner organischer Verbindungen, die bei der Herstellung von Aromen, Düften und synthetischen Verbindungen verwendet werden.

Lebensmittelzusätze

Produktcode 467100

990 Spektren

IR-Datenbank mit Spektren von Zugaben, die Lebensmitteln direkt beigegeben werden und die von der FDA entweder als Lebensmittelzusätze freigegeben oder als GRAS bestätigt wurden.

Georgia State Crime Lab

Produktcode 460400

1.910 Spektren

Sammlung von Infrarot-Referenzspektren kontrollierter Substanzen sowie von Verbindungen, die mit hoher Wahrscheinlichkeit in Routineanalysen auftreten und die für die instrumentelle Analyse von Drogen in der Division of Forensic Sciences, Georgia State Crime Laboratory, Atlanta, Georgia von Bedeutung sind.

Pharmazeutische Hilfstoffe

Produktcode 447100

880 Spektren

Diese Datenbank wurde für jene entwickelt, die pharmazeutische Rezepturen mithilfe von Infrarotspektroskopie studieren. Sie enthält Spektren von Materialien, die in der Entwicklung, Herstellung, Kontrolle und Regulierung pharmazeutischer Produkte verwendet werden. Diese Verbindungen sind ggf. als Bindemittel, Füllstoffe, Verdünnungen, Flussverbesserer, Süßstoffe, Beschichtungen, Konservierungsstoffe, Dispergiermittel, Aromen, Suspensionsmittel, Komprimierungshilfen etc. eingestuft.

Arzneimittel

Produktcode 443100

560 Spektren

Umfassende Sammlung von Medikamenten, Arzneien und pharmazeutischen Produkten, die häufig im Bereich der medizinischen und pharmazeutischen Forschung und Drogenanalyse zu finden sind. Die Verbindungen wurden aus folgenden Quellen zusammengestellt: *Modern Drug Encyclopedia*, *The U.S. Pharmacopoeia*, *The British Pharmacopoeia*, *The International Pharmacopoeia*, *New and Non-Official Drugs* und *National Formulary*. Die Klassen umfassen Narkosemittel, antimikrobielle Wirkstoffe, Antibiotika, Antikoagulationsstoffe, antivirale Stoffe, kardiovaskuläre Stoffe, Diuretika, Enzyme, Östrogene, Hormone, Entspannungsmittel, Sedativa, Stimulantien, Beruhigungsmittel und Vitamine.

Bereitete und verschreibungspflichtige Medikamente (Säure/Base)

Produktcode 445700

880 Spektren

Diese Sammlung enthält die Spektren von Markenmedikamenten (bereitet und verschreibungspflichtig) aus der Quelle *Physician's Desk Reference to Pharmaceutical Specialties and Biologicals* und bietet eine schnelle Methode zur Charakterisierung von Medikamenten.

Steroide

Produktcode 420900

250 Spektren

Diese Datenbank enthält FT-IR-Spektren zu den wichtigen Verbindungsklassen für die Steroidforschung.

Steroide, Androgene, Gestagene und Östrogene

Produktcode 447700

300 Spektren

Die von Forensic Spectral Research erstellte Datenbank enthält Steroide, Androgene, Gestagene und Östrogene, die für forensische, pharmazeutische, medizinische und andere Anwendungen von Nutzen sind.

IR-Datenbanken: Umweltsanwendungen

 Enthält Strukturen

HAZMAT-Datenbank

Produktcode 438900

410 Spektren

Diese Datenbank enthält die Infrarotspektren gefährlicher Verbindungen. Diese Sammlung ausgewählter Substanzen kann zur Identifikation, Klassifizierung und Überprüfung dieser Materialien verwendet werden.

Pestizide und landwirtschaftliche Chemikalien

Produktcode 436600

1.020 Spektren

Umfassende Auswahl chemischer Materialien, die in allen Bereichen der Landwirtschaft verwendet werden. Die Materialien in dieser Datenbank können auch als Industrieabfälle angesehen werden. Diese Verbindungen, von denen die meisten Pestizide sind, stammen aus einer Vielzahl von Quellen. Alle Chemikalien sind kommerziell verfügbar. Diese Datenbank enthält jedoch auch hochreine Pestizid-Referenzstandards, die Bio-Rad von der U.S. Environmental Protection Agency zur Verfügung gestellt wurden. In den meisten Fällen stehen die Verbindungen für die aktiven Bestandteile kommerzieller Produkte, obwohl einige vollständige Rezepturen ebenfalls aufgenommen wurden. Umfang: Akarizide, Bakterizide, Nematizide, Wachstumsregulatoren, Hormone, Konservierungsstoffe, Nährstoffe, Fungizide, Herbizide, Insektizide, Abwehr- und Lockstoffe, Mitizide, Rodentizide und landwirtschaftliche Chemikalien.

Schadstoffe (IR-Dampfphase)

Produktcode 447300

910 Spektren

Diese Datenbank stellt eine zentrale Referenz für jene dar, die Umwelt-, physiologische oder berufliche Schadstoffe sowie toxische Substanzen analysieren, überwachen, kontrollieren oder studieren. Sie enthält Dampfphasenspektren, die vergleichbar sind mit jenen, die man mithilfe einer GC/FT-IR-Analyse erhalten kann, wenn die Spektren in einer beheizten optischen Zelle oberhalb der Umgebungstemperatur gemessen werden.

Vorrangige Schadstoffe

Produktcode 447000

470 Spektren

Diese Datenbank ist eine bequeme und praktische Referenz für Forschung, Industrie und alle anderen Bereiche, die sich mit der Analyse, Überwachung, Kontrolle und Untersuchung von Umwelt-, physiologischen oder beruflichen Schadstoffen und toxischen Substanzen befassen. Diese Verbindungen werden in der „EPA Priority Pollutants List“, der „Occupational Safety and Health Administration (OSHA) Category 1 List of Carcinogenic Substances“ und in einer branchenüblichen Liste gefährlicher Verbindungen aufgeführt, die für den nationalen Transport von Belang ist. Eine weitere Nennung erfolgt in der „EPA Priority Pollutant List“. Die Datenbank umfasst Verbindungen, die durch zwei Arten von Spektren dargestellt werden (Infrarot-Festkörperphase und Infrarot-Dampfphase).

EPA-Dampfphase nach Sadtler

Produktcode 461000

3.240 Spektren

Zweck dieser Datenbank ist die Bereitstellung von Referenzspektren zur Umweltverschmutzung und toxikologischer Identifikation. Diese Spektren wurden speziell für diese Datenbank erstellt. Die Sammlung umfasst IR-Dampfphasenspektren gängiger, reiner organischer Verbindungen und unterstützt die Identifikation unbekannter Verbindungen mit GC-IR, TGA-IR oder mit anderen Dampfphasen-Analysemethoden.

Chemikalien zur Wasseraufbereitung

Produktcode 421000

290 Spektren

Sammlung von Infrarotspektren zu kommerziell verfügbaren Materialien zur Wasseraufbereitung, wie z. B. Kesselzusätze und Kühlwasserzusätze. Einschließlich Biozide, Geliermittel, Koagulantien und Flockungsmittel.

IR- Datenbanken: Anorganische Stoffe und Organometalle

 Enthält Strukturen

Anorganische Stoffe

Produktcode 435900

1.100 Spektren

IR-Datenbank mit Infrarotspektren anorganischer Verbindungen. Die Spektren sind repräsentativ für zahlreiche Anionen und polyatomare Ionen anorganischer Materialien und werden nach Anionen oder polyatomaren Ionen gemäß der Gruppen im Periodensystem gegliedert. Diese Sammlung enthält die Spektren „klassischer“ anorganischer Stoffe, wie z. B. Ammoniumsulfat, Ammoniumnitrat, Zirconiumsulfat und Koordinationsverbindungen verschiedener Metalle mit anorganischen und organischen Liganden. Die Klassen in dieser Sammlung umfassen anorganische Verbindungen, anorganische Koordinationsverbindungen, Metallcarbonylverbindungen und Borane.

Anorganische Stoffe (Untermenge A)

Produktcode 445900

240 Spektren

IR-Datenbank anorganischer Verbindungen. Die Spektren sind repräsentativ für zahlreiche Anionen und polyatomare Ionen anorganischer Verbindungen und werden nach Anionen oder polyatomaren Ionen gemäß der Gruppen im Periodensystem gegliedert.

Mineralien und Tonarten

Produktcode 420600

420 Spektren

IR-Datenbank mit Spektren von Mineralien und Tonarten. Die Spektren sind nach der zunehmenden Komplexität der Mineralien gegliedert.

Organometalle

Produktcode 420700

350 Spektren

IR-Datenbank, die speziell für Wissenschaftler zusammengestellt wurde, die sich für organometallische Chemie interessieren. Die Proben stammen aus Industrieunternehmen und akademischen oder Forschungsinstituten und wurden gesammelt, um einen Querschnitt interessanter Verbindungen zu bilden. Diese Datenbank besteht aus Spektren von Stoffen, die eine direkte Kohlenstoff-Metall-Bindung aufweisen oder bei der das Metallatom über ein einziges Heteroatom an das Kohlenstoffatom gebunden ist.

Raman-Datenbanken

 Enthält Strukturen

Raman der Basismonomere und Polymere (*nicht modifiziert*) Produktcode 470100 1.680 Spektren

Diese Datenbank bietet Wissenschaftlern eine zentrale Quelle für zuverlässige Polymerdaten. Die Monomer- und Polymerverbindungen in dieser Sammlung wurden ausgewählt, um einfache Verbindungen repräsentativer funktioneller Gruppen für Identifikation und Klassifizierung zusammenzustellen. Die Datenbank enthält Referenzspektren, die nicht mit Additiven modifiziert wurden, obwohl sie ggf. Copolymere oder Terpolymere sind.

Raman anorganischer Stoffe Produktcode 470200 1.630 Spektren

Die anorganischen Verbindungen in dieser Sammlung wurden ausgewählt, um repräsentative Materialien für Identifikation und Klassifizierung zusammenzustellen. Die analytischen Anwendungen dieser Datenbank umfassen die Identifikation, Qualitätskontrolle, Qualitätsverlust, Molekülstrukturaufklärung, sowie andere Anwendungen, wie z. B. Prozesskontrolle.

Nah-IR-Datenbank

 Enthält Strukturen

Nah-Infrarot-Spektralsammlung gängiger organischer Verbindungen Produktcode 466000 3.800 Spektren

Datenbank von Chemical Concepts. Ein Geschäftsbereich von Wiley. Die Sammlung umfasst gängige organische Verbindungen. Die Spektren wurden mit der Nah-Infrarot-Technik aufgenommen. Es sind zwei Spektren je Struktur vorhanden.

NMR-Datenbanken

NMR-Metabolitendatenbank Produktcode 878600 1.050 Spektren

Eine Sammlung von ^1H - und ^{13}C NMR-Spektren von Metaboliten zur Identifikation potenzieller Biomarker metabolomischer Experimente. Die Daten wurden vom Biological Magnetic Resonance (BMRB) Labor der University of Wisconsin, Madison zur Verfügung gestellt. Die Sammlung umfasst Links zu den PubChem-, KEGG- und ChEBI-Datenbanken sowie eine Anzeige der KEGG-Pfade.

^{13}C NMR von Monomeren und Polymeren Produktcode 872300 740 Spektren

Bio-Rad stellt eine Datenbank zur Verfügung, die von Polymerchemikern und Spektroskopikern verwendet werden kann, die Monomere, Polymere und Harze mithilfe der ^{13}C NMR-Technik studieren. Es werden zahlreiche Polymer- und Monomerklassifizierungen dargestellt.

Weitere Datenbanken

Bio-Rad bietet die gesamte Reihe der Wiley-Massenspektrometersdatenbanken an:

- Wiley Registry® 9. Edition
- Massenspektrometers- und GC-Daten von Medikamenten, Giften, Pestiziden, Schadstoffen und deren Metaboliten
- Massenspektrometers von Designerdrogen
- Massenspektrometers pharmazeutischer und agrochemischer Produkte
- Massenspektrometers von Androgenen, Östrogenen und anderen Steroiden
- Massenspektrometers organischer Verbindungen
- Massenspektrometers von Geochemikalien, Petrochemikalien und Biomarkern
- FFNSC 1.3 – Aromen und Düfte natürlicher und synthetischer Verbindungen

Bio-Rad bietet eine weitere Protonen-NMR-Datenbank von Wiley an:

- Wiley ^1H NMR-Spektrometers organischer Verbindungen – 104.489 Spektren

HaveltAll®-Jahreslizenz für Datenbanken

Die Bio-Rad HaveltAll-Spektraldatenbanken ermöglichen den Anwendern das Durchsuchen aller Bio-Rad-Spektralsammlungen nach verschiedenen Spectraltechniken. HaveltAll-Sammlungen basieren auf einer Jahreslizenz. Sie können über die KnowItAll Informatics System-Software oder über das Internet abgerufen werden.

HaveltAll IR

Produktcode 891000

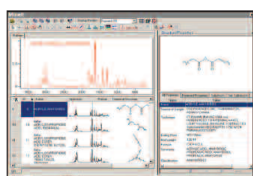


Infrarot-Spektralsammlung von nahezu 230.000 Spektren reiner organischer und kommerzieller Verbindungen. Diese Datenbank ist vor allem für die Identifikation und Klassifizierung unbekannter Spektren von Nutzen. Gleich, ob es um den Zugriff auf Polymere, reine organische Stoffe, anorganische Verbindungen, Organometalle oder industrielle Verbindungen mit Anwendungsbereichen, wie Pharmazie, Forensik, Materialwissenschaften und akademische Forschung geht – die Anwender können sicher sein, dass diese Sammlung ihre Anforderungen erfüllt. Sie können nach Spektren, Peaks, Name, Struktur, Substruktur und Eigenschaften (z. B. Aufnahmetechnik, Molekulargewicht, CAS-Registrierungsnummer etc.) suchen.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitallir.

HaveltAll Raman

Produktcode 894000

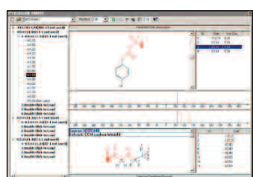


Hochwertige Raman-Daten, die sich auf Monomere, Polymere, organische und anorganische Verbindungen konzentrieren. Die Anwender können eigene Spektren importieren und eine Referenzdatenbank mit 6.225 Spektren durchsuchen. Sie können nach Spektren, Peaks, Name, Struktur, Substruktur und Eigenschaften (z. B. Aufnahmetechnik, Molekulargewicht, CAS-Registrierungsnummer etc.) suchen.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitallraman.

HaveltAll NMR

Produktcode 892000

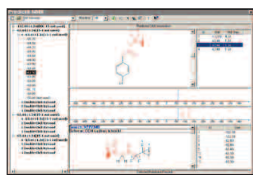


Zugriff auf mehr als 438.000 ¹³C NMR- und über 56.000 ¹H NMR-Referenzspektren für zuverlässige NMR-Vorhersagen. Mit KnowItAll PredictIt NMR können nicht nur die Spektraldaten zur Erstellung von Vorhersagen abgerufen werden, sondern die Anwender können auch auf alle verfügbaren Informationen zum Referenzspektrum zugreifen, darunter Bezugsquelle, Lösungsmittel, Herstellungsbedingungen, Aufnahmegerät und Moleküleigenschaften.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitallnrmr.

HaveltAll XNMR

Produktcode 896000

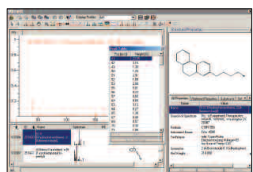


Zugriff auf mehr als 71.000 XNMR-Referenzspektren für zuverlässige Vorhersagen. Die Sammlung umfasst ¹⁹F NMR, ³¹P NMR, ¹⁵N NMR, ¹¹B NMR, ¹⁷O NMR, ²⁹Si NMR und andere Kerne. Mit KnowItAll PredictIt NMR können nicht nur die Spektraldaten zur Erstellung von Prognosen abgerufen werden, sondern die Anwender können auch auf alle verfügbaren Informationen zum Referenzspektrum zugreifen, darunter Bezugsquelle, Lösungsmittel, Herstellungsbedingungen, Aufnahmegerät und Moleküleigenschaften.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitallxnrmr.

HaveltAll MS

Produktcode 893000

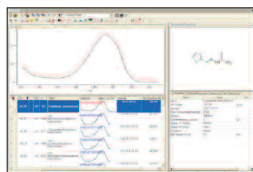


Diese Sammlung von Spektral- und zugehörigen Informationen enthält Daten des National Institute of Standards and Technology (NIST), die mit der Unterstützung erfahrener Berater der Environmental Protection Agency (EPA) und des National Institutes of Health (NIH) zusammengestellt wurden. Sie können nach Peaks, Name, Struktur, Substruktur und Eigenschaften (z. B. Aufnahmetechnik, Molekulargewicht, CAS-Registrierungsnummer etc.) suchen.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitallms.

HaveltAll UV-Vis

Produktcode 876300



Diese Datenbank ist vor allem für die Identifikation und Klassifizierung unbekannter UV-Vis-Spektren von Nutzen. Zu den Anwendungen zählen Pharmazie, Forensik, Umwelt- und Materialwissenschaften, Polymeranwendungen und viele andere. Sie können nach Spektren, Peaks, Name, Struktur, Substruktur und Eigenschaften (z. B. Formel, Molekulargewicht, Lösungsmittel, Konzentration und Zelllänge) suchen. Die Peak-Tabellen enthalten die Position des Peaks, seine Höhe, die Absorption und den Extinktionskoeffizienten.

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/haveitalluv-vis.

KnowItAll[®] Informatics System

Das preisgekrönte Bio-Rad KnowItAll Informatics System bietet vollständig integrierte Softwarelösungen mit mehreren Spektroskopie-Tools – in einer einzigen Oberfläche:

- Spektralverarbeitung, Suche, Analyse und Vorhersage
- Ergebnisberichte
- Datenbankerstellung und -verwaltung
- Chemometrische Tools
- Verwaltung chemischer Strukturen

Echte Integration

Direkte Datenübertragung von einer Anwendung zur anderen.

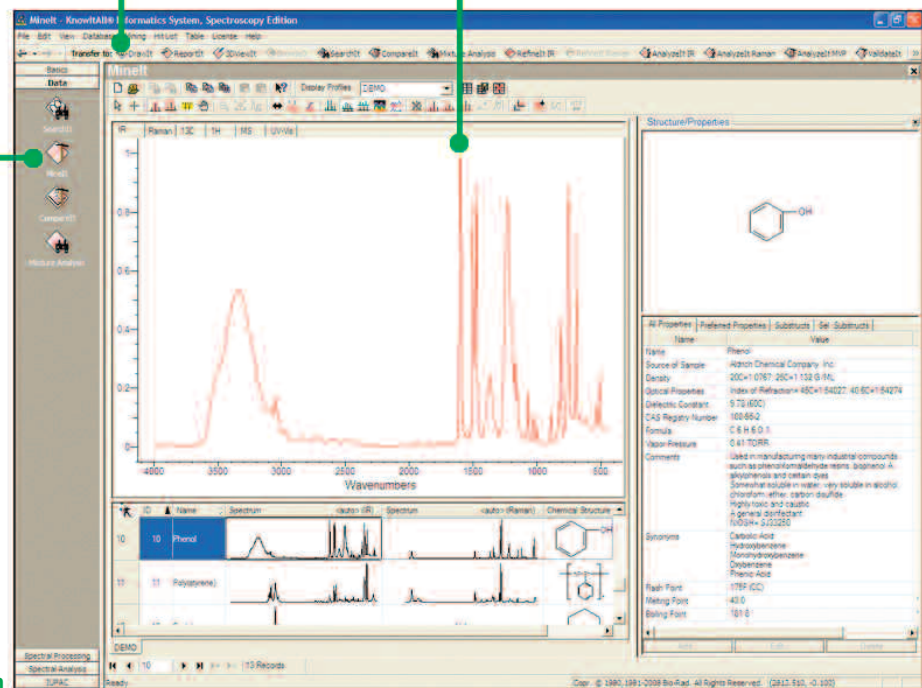
Integrierte Informatik

Suchen, Verwalten und Analysieren spektroskopischer und chemischer Informationen.

Vielseitige Tools

Interpretieren von Spektren mit verschiedenen Software-Tools.

Desktop- und Unternehmenslösungen



Funktionsweise der KnowItAll-Schnittstelle

KnowItAll-Oberfläche wurde so gestaltet, dass der Anwender Informationen von einem Tool zum anderen übertragen und von einer Aufgabe zur nächsten wechseln kann, ohne das Hauptmodul verlassen oder ein anderes Programm öffnen zu müssen.

Mehrere Aufgaben werden mithilfe logisch gruppierter Tools ausgeführt. Da alle Tools in einer einzigen, integrierten Umgebung enthalten sind, spart die Verwendung dieses Systems Zeit und verbessert den Workflow.

Durch die Kombination von Tools und Daten in einem System ergibt sich eine höhere Flexibilität bei der Extraktion von Wissen aus Daten.

Bio-Rad bietet die folgenden spezialisierten „Editionen“ seines KnowItAll-Systems für verschiedene spektroskopische Techniken an. Weiter Informationen unter „KnowItAll-Edition-Funktionsvergleich“ auf Seite 20.

KnowItAll IR/NIR-Edition

Produktcode 879100



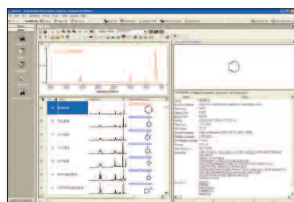
Techniken: IR, NIR

Die KnowItAll IR/NIR-Edition bietet eine vollständig integrierte Softwareumgebung für IR und NIR mit Datenverwaltung (*optional*), Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Außerdem erhalten Sie jetzt auch einzigartige Tools für die Analyse, wie z. B. Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalysen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/iredition.

KnowItAll-Spektroskopie-Edition

Produktcode 876400



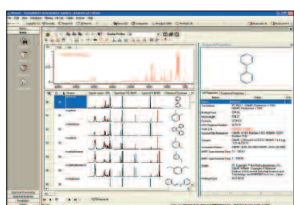
Techniken: IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis, Chromatografie

Die KnowItAll-Spektroskopie-Edition bietet eine vollständig integrierte Softwareumgebung für IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis und Chromatografie mit Datenverwaltung, Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Sie erhalten nun auch einzigartige Tools zur Analyse: Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalyse.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/spectroscopyedition.

KnowItAll-Analyse-Edition

Produktcode 890200



Techniken: IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis, Chromatografie

Die KnowItAll-Analyse-Edition bietet die erste vollständig integrierte Softwareumgebung für analytische Techniken, einschließlich IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis und Chromatografie, einschließlich der Verwaltung von Multi-Technik-Datenbanken, Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Sie erhalten nun auch einzigartige Tools zur Analyse: Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalyse. Enthält weitere Massenspektroms-Importfilter

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/analyticaledition.

KnowItAll-Enterprise-Edition

Produktcode 879400



Techniken: IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis, Chromatografie

Die preisgekrönte KnowItAll-Enterprise-Edition bietet die erste vollständig integrierte Softwareumgebung für analytische Techniken, einschließlich IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis und Chromatografie, einschließlich der Verwaltung von Multi-Technik-Datenbanken, Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Sie erhalten nun auch einzigartige Tools zur Analyse: Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalyse.

KnowItAll-Raman-Edition

Produktcode 890700



Technik: Raman

Die KnowItAll-Raman-Edition bietet eine vollständig integrierte Softwareumgebung für Raman-Spektroskopie mit Datenverwaltung (*optional*), Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Sie erhalten nun auch einzigartige Tools zur Analyse: Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalyse.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/ramanedition.

KnowItAll-UV-Vis-Edition

Produktcode 876500



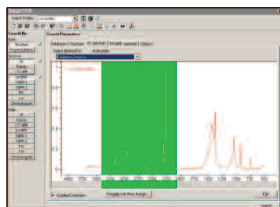
Technik: UV-Vis

Die KnowItAll-UV-Vis-Edition bietet eine vollständig integrierte Softwareumgebung für UV-Vis mit Datenverwaltung, Spektrumssuche, Verarbeitung, Strukturzeichnung und Tools zur Berichterstellung. Sie erhalten nun auch einzigartige Tools zur Analyse: Overlay Density Heatmaps und spektrale Mischungsanalyse.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/uv-visedition.

Enthaltene Anwendungen und Funktionen

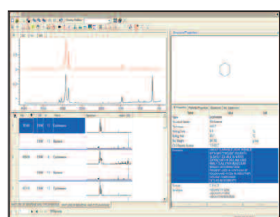
SearchIt™ – Datenbanksuche (gesamtes Spektrum, Struktur, Peaks, Eigenschaften etc.)



Die SearchIt-Anwendung ermöglicht das Importieren und Durchsuchen von Strukturen und/oder Spektren in lizenzierten Referenzdatenbanken sowie in benutzerdefinierten KnowItAll-Datenbanken. Die Suche ist vollständig anpassbar und basiert auf modernen Algorithmen. Die Suche kann nach Struktur, Substruktur, Name, Eigenschaften, Spektren oder beliebigen Kombinationen erfolgen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/searchit.

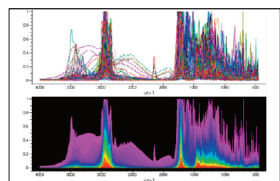
Spektrale Mischungsanalyse – Analyse der experimentellen Spektraldaten von Mischungen



Diese Anwendung entfaltet die Komponenten einer Mischung durch Analyse eines Spektrums. Dies ermöglicht den Vergleich eines Probenspektrums mit den KnowItAll-Datenbanken mit benutzerdefinierten Spektren sowie mit lizenzierten KnowItAll-Referenzdatenbanken. Auf diese Weise ergibt sich eine Reihe von Kompositspektren, die aus den Komponentenspektren bestehen und mit dem Residualspektrum (die Differenz zwischen Eingangsspektrum der Mischung und dem Kompositspektrum) gemeinsam das Kompositspektrum bilden. Die Kompositspektren werden je nach Ähnlichkeit mit dem Abfragespektrum sortiert.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/mixtureanalysis.

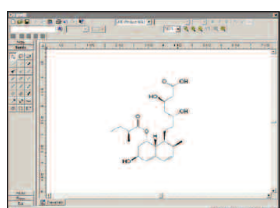
Overlap Density Heatmaps – visuelles Data Mining und Analyse



Bio-Rad hat eine bahnbrechende Technologie für visuelles Data Mining und Analysen eingeführt, um die Ähnlichkeiten und Abweichungen bei großen Mengen von Spektral-, Chromatografie und anderen grafischen Daten zu bewerten.[†] Diese patentierte Technologie namens Overlap Density (OD) Heatmaps (überlappende Dichtezuordnungen) ermöglicht Wissenschaftlern die Visualisierung gemeinsamer Merkmale der sich überlappenden Objekte (z. B. Spektren oder Chromatogramme) nach Farbcodierungen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/odhm.

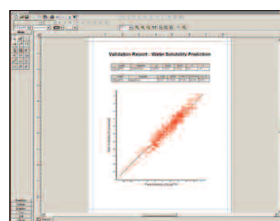
DrawIt™ (ChemWindow®) – 2D-Strukturzeichnung (mit stereochemischer Erkennung)



Mit DrawIt können Anwender alle chemischen Strukturen mit nur wenigen Klicks und Ziehbewegungen zeichnen. Diese Anwendung verfügt über alle Tools zum Zeichnen von Ringen, Bindungen, Atomen, Ketten, Pfeilen und chemischen Symbolen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/drawit.

ReportIt™ – Tools zur individuellen Veröffentlichung



Mit ReportIt können Anwender Standardberichte, Präsentationen und Publikationen erstellen. Die Berichte lassen sich mithilfe unserer vordefinierten oder individuellen Vorlagen einfach gestalten.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/reportit.

Optionale Anwendungen und Funktionen

Option zur Datenbankerstellung – Erstellen von Datenbanken mit Spektren, Strukturen und Eigenschaften

Produktcode 85000



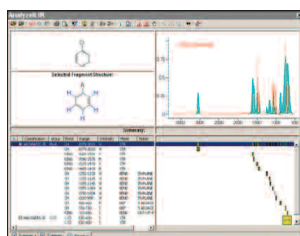
Chemiker und Spektroskopiker erstellen in ihren Unternehmen Tag für Tag wertvolle Daten. Mit der KnowItAll Minelt Database Building-Option können Forscher diese Ressourcen speichern und durchsuchbare Datenbanken erstellen, die mehrere analytische Techniken† (IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis, Chromatografie), chemische Strukturen und alphanumerische Daten enthalten.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/databasebuilding.

(Enthalten in den Spektroskopie-, Analyse-, Unternehmens- und UV-Vis-Editionen, optional in allen anderen KnowItAll-Editionen.)

Analyzelt™ IR – Funktionsgruppenanalyse

Produktcode 851200

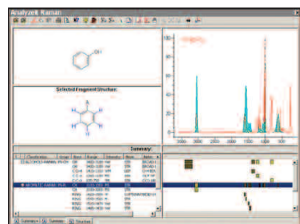


Analyzelt IR kann zur Interpretation der Bänder in einem Infrarotspektrum verwendet werden. Laden Sie einfach ein Spektrum, und klicken Sie auf einen Peak, um eine Liste aller an dieser Stelle möglichen funktionellen Gruppen zu erstellen. Analyzelt schlägt außerdem den besten Peak zum Beginnen der Interpretation vor. Das Programm enthält mehr als 200 Funktionsgruppen und Hunderte von Interpretationsfrequenzen. Die Anwendung zeigt außerdem erwartete IR-Bänder von einer Struktur ausgehend. Anwender können auch ihre eigenen Datenbanken mit funktionellen Gruppen erstellen, die in die Interpretation einfließen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/analyzeitir.

Analyzelt Raman – Funktionsgruppenanalyse

Produktcode 894200

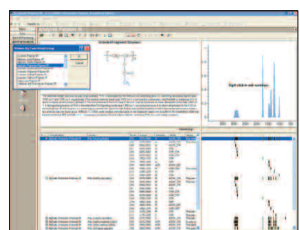


Analyzelt Raman kann zur Unterstützung der Interpretation von Bändern in einem Raman-Spektrum verwendet werden. Laden Sie einfach ein Spektrum, und klicken Sie auf einen Peak, um eine Liste aller an dieser Stelle möglichen funktionellen Gruppen zu erstellen. Analyzelt schlägt außerdem den besten Peak zum Beginnen der Interpretation vor. Das Programm enthält mehr als 200 Funktionsgruppen und Hunderte von Interpretationsfrequenzen. Die Anwendung zeigt außerdem erwartete Raman-Bänder von einer Struktur ausgehend. Anwender können auch ihre eigenen Datenbanken mit funktionellen Gruppen erstellen, die in die Interpretation einfließen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/analyzeitraman.

Analyzelt Polymer IR – Polymeranalyse

Produktcode 854700

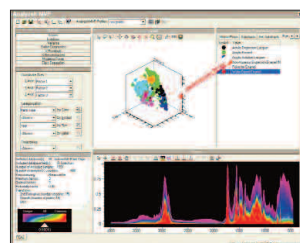


Die Identifikation, Klassifizierung und Interpretation kommerzieller Polymere ist eine Herausforderung. Ein wichtiger Bestandteil der gewünschten Informationen sind die Informationen zur Korrelation von Spektrum und Struktur, die nicht durch eine Spektrumssuche allein ermittelt werden können. Analyzelt PolymerPolymer IR ist –in Verbindung mit einer Knowledge Base von Polymerspektrums-Struktur-Korrelationen–eine Anwendung, die speziell zur Unterstützung dieses Verfahrens entwickelt wurde. Anwender können auch ihre eigenen Datenbanken mit funktionellen Gruppen erstellen, die in die Interpretation einfließen.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/analyzeitpolymerir.

Analyzelt MVP – Multivariable Datenverarbeitung

Produktcode 850800



Analyzelt MVP, mit Infometrix Chemometrie-Technologie für die Hauptkomponentenanalyse (aus der bekannten Pirouette® Software) spektroskopischer, chromatografischer oder numerischer Daten,† bietet dem Anwender folgende Möglichkeiten:

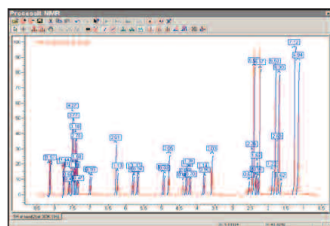
- Erhalten von Einblicken in verborgene Muster und Beziehungen in den Anwenderdaten
- Nutzen von Datenkorrelationen zur Beantwortung kritischer Forschungs-, Entwicklungs- oder Produktionsfragen
- Speichern von Ergebnissen für anschließende Referenz, Berichterstellung oder Nachforschung

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/analyzeitmvp.

Optionale Anwendungen und Funktionen

ProcessIt™ NMR – NMR-Spektrumverarbeitung

Produktcode 892600



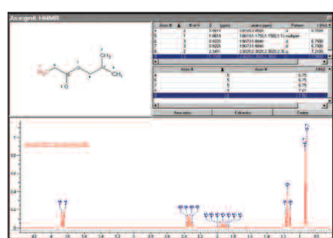
Mit dieser Funktion können Anwender NMR-Signale oder Spektren aus verschiedenen Formaten importieren und verarbeiten. Diese Anwendung ermöglicht die Ausführung einer mehrstufigen Verarbeitung entweder schrittweise oder durch Verwendung von Makros zur gleichzeitigen Ausführung mehrerer Prozessschritte.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/processitnmr.

(Enthalten in den Analyse- und Unternehmens-Editionen.)

AssignIt™ NMR – Fügt Zuordnungen in NMR-Datenbanken ein

Produktcode 892700

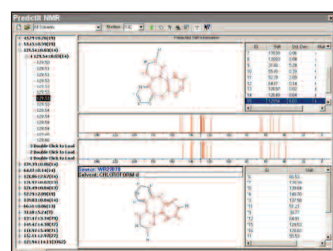


Mit diesem Tool können Zuordnungen und andere Informationen in Strukturen in ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N , ^{17}O , ^{11}B und ^{29}Si KnowItAll NMR-Datenbanken eingefügt werden. AssignIt ermöglicht die schnelle Informationseingabe, z. B. Zuordnungen von Peak-Positionen, Intensitäten, Kopplungskonstanten, Multiplizitäten und Links zur relevanten chemischen oder vorgeschlagenen Struktur.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/assignit.

(Enthalten in den Analyse- und Unternehmens-Editionen.)

PredictIt™ NMR – NMR-Spektrumsvorhersage

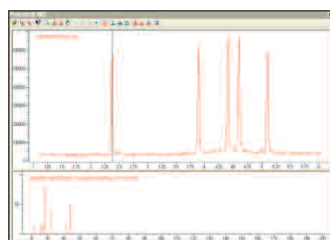


Mit der PredictIt NMR-Anwendung können datenbankbasierende NMR-Spektrumsvorhersagen für ^{13}C , ^1H und viele andere Kerne durchgeführt werden. Die Vorhersagen werden automatisch erstellt, wenn ein Anwender im Programm eine Struktur öffnet. Zur Erstellung von Vorhersagen durchsucht KnowItAll alle lizenzierten Datenbanken nach Substrukturen, denen ^1H , ^{13}C oder andere Shift-Zuordnungen zugewiesen wurden. Die Substrukturen werden nach der Shell-Methode klassifiziert, wobei als "Shell" die maximale Anzahl an Bindungen bezeichnet wird, die jedes Atom vom Zentralatom entfernt sein darf.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/predictitnmr.

(Enthalten in den Analyse- und Unternehmens-Editionen.)

ProcessIt MS – MS- und multidimensionale MS-Datenverarbeitung



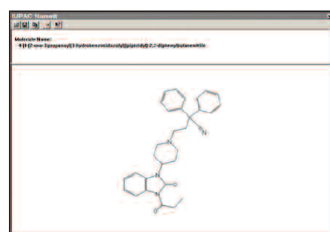
Die Anwendung ProcessIt MS kann zum Importieren und Öffnen von GC/MS- und LC/MS-Dateien und zum Anzeigen und Auswählen von MS-Scans darin verwendet werden. Ausgewählte MS-Scans können der Benutzerdatenbank hinzugefügt und durchsucht werden. Darüber hinaus ermöglicht diese Anwendung den Anwendern die Ausführung von spektralen Durchschnittsberechnungen und Subtraktionen sowie die Anzeige ausgewählter Ionenchromatogramme (SICs).

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/processitms.

(Enthalten in den Spektroskopie-, Analyse- und Unternehmens-Editionen.)

IUPAC NameIt™ & DrawIt – systematische IUPAC-Namen aus Strukturen und umgekehrt

Produktcode 854400



Mit den Optionen KnowItAll IUPAC NameIt und IUPAC DrawIt lassen sich Strukturen mithilfe systematischer IUPAC-Regeln mühelos benennen oder erstellen. Geben Sie einfach eine Struktur oder einen Namen ein, klicken Sie auf eine Schaltfläche und erzeugen Sie den entsprechenden Namen oder die Struktur auf Basis der international akzeptierten Standardnomenklaturregeln, — ohne sich diese merken zu müssen. Die Erzeugung von Namen und Strukturen auf diese Weise spart nicht nur Zeit, sondern sorgt auch für Genauigkeit und Standardisierung von Kommunikation und Data Mining im Labor.

Weitere Informationen und Demofilme finden Sie unter www.knowitall.com/iupac.

Optionale Anwendungen und Funktionen

Infometrix' Pirouette® Software – chemometrische Tools für Klassifizierung, Datenauswertung und mehr

Prognose, Klassifizierung, Datenauswertung und multivariable Regressionsmethoden wurden in diese Chemometrie-Software von Infometrix integriert. Nun ist auch eine Mischungsanalyse hinzugekommen. Eine einfach zu verwendende, aber dennoch sehr leistungsfähige Schnittstelle vereinfacht die Interaktion mit Roh- und verarbeiteten Daten. Die Unterstützung zahlreicher gängiger Instrument- und Datenaustauschformate vereinfacht den Datenimport. Tausende von Untergruppen können aus einer einzigen Datendatei erstellt werden, sodass der Anwender viele verschiedene „Was-wäre-wenn“-Szenarien durchspielen kann, ohne weitere Daten sammeln zu müssen.

Weitere Informationen finden Sie unter www.knowitall.com/pirouette.

KnowItAll-Edition – Funktionsvergleich

● – Enthalten in Edition – optional

Komponente	Beschreibung	IR/NIR Edition	Spec Edition	Analyse-Edition	Unternehmens-Edition	Raman-Edition	UV-Vis-Edition
Daten-Tools							
SearchIt™	Datenbanksuche (gesamtes Spektrum, Struktur, Peaks, Eigenschaft etc.)	●	●	●	●	●	●
Minelt™	Datenbankdarstellung und Mining	●	●	●	●	●	●
Datenbankerstellung	Erstellen von Mehrfachtechnik-Datenbanken mit Spektren und Strukturen. Implementiert als Teil von Minelt.		●	●			●
Overlap Density Heatmap	Patentierte Technologie für visuelles Data Mining und Analysen	●	●	●	●	●	●
CompareIt™	Daten-Plotten und Visualisierung	●	●	●	●		●
AssignIt™	Hinzufügen von Zuordnungen zu NMR-Datenbanken für ¹ H, ¹³ C und andere Kerne			●	●		
Mischungsanalyse	Analysieren experimenteller Spektraldaten von Mischungen	●	●	●	●	●	●
Eigenschaftsberechnung im Stapelbetrieb	Berechnen der Eigenschaften für ganze Datenbanken	●	●	●	●		●
Unterstützung des Pirouette® Modells	Verwenden von Modellen, die mit der Infometrix Pirouette-Software erstellt wurden	●	●	●	●	●	●
Tools zur Spektralverarbeitung							
RefineIt™ IR	IR-Spektralverarbeitung	●	●	●	●		
RefineIt™ Raman	Raman-Spektralverarbeitung		●	●	●	●	
ProcessIt™ NMR	NMR-Spektralverarbeitung			●	●		
ProcessIt™ MS	MS- und multidimensionale MS-Verarbeitung		●	●	●		
Weitere Importfilter für MS-Dateien			●	●			
Tools zur Spektralanalyse							
AnalyzIt™ IR	IR-Spektrums-Struktur-Korrelation						
AnalyzIt™ Raman	Raman-Spektrums-Struktur-Korrelation						
AnalyzIt™ MVP	Multivariable Verarbeitung für chemometrische und Hauptkomponentenanalyse						
ValidatIt™	Validierung statistischer Modelle	●	●	●	●		●
AnalyzIt™ Polymer IR	IR Spektrum-Struktur-Korrelation für Polymere						
Prognose-Tools							
PredictIt™ NMR	Chemische NMR-Shift-Vorhersagen			●	●		
Basis-Tools							
DrawIt™	2D-Strukturzeichnung	●	●	●	●	●	●
ReportIt™	Tools für individuelle Berichte und Veröffentlichung	●	●	●	●	●	●
3D ViewIt™	Visualisierung von 3D-Strukturen		●	●	●		●
BrowseIt™	Web-Portal mit nützlichen Links für KnowItAll-Anwender	●	●	●	●	●	●
IUPAC-Tools							
IUPAC DrawIt™	Konvertieren von IUPAC-Namen in Strukturen						
IUPAC NameIt™	Konvertieren von Strukturen in systematische IUPAC-Namen						
Weitere Optionen							
Spektraldatenbanken	Sie können zwischen 100 Spektraldatenbanken und HavelItAll-Jahreslizenzen wählen						
KnowItAll®-Unternehmensserver	Zentralisierung von Spektral- und chemischen Informationen						
Infometrix Pirouette®-Software	Weitere chemometrische Tools						
Erweiterungsplan	Support- und Upgrade-Plan für KnowItAll-Anwender						

KnowItAll unterstützt Wissenschaftler bei der Handhabung unterschiedlicher Spektral-/chemischer Daten und mehrerer Datei- und Instrumentenformate. Die unterstützten Formate variieren je nach der lizenzierten KnowItAll-Edition.

IR

Sadtler IRF (*.irf)	Generische XY-Dateien (*.*)	Mattson (*.ras, *.abs)
Bomem (*.a01)	Horiba MDW (*.mdw)	PE Spectrum (*.sp)
Bruker (*.*)	JASCO (*.jws, *.j1d)	Shimadzu (*.irs, *.smf)
Digilab (*.dt)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JEOL (*.wsf)	Thermo/Nicolet (*.spa)

Raman

Sadtler IRF (*.irf)	Horiba MDW (*.mdw)	Mattson (*.ras, *.abs)
Bomem (*.a01)	Horiba NGS (*.ngs)	PE Spectrum (*.sp)
Bruker (*.*)	JASCO (*.jws, *.j1d)	Renishaw WiREF (*.wxd)
Digilab (*.dt)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	Shimadzu (*.irs, *.smf)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JEOL (*.wsf)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
Generische XY (*.*)	JEOL JCAMP (*.wsf)	Thermo/Nicolet (*.spa)

NIR

Sadtler IRF (*.irf)	Generische XY-Dateien (*.*)	Mattson (*.ras, *.abs)
Bomem (*.a01)	GuidedWave (*.*)	PE Spectrum (*.sp)
Bruker (*.*)	Horiba MDW (*.mdw)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
Digilab-Dateien (*.dt)	JASCO (*.jws, *.j1d)	Thermo/Nicolet (*.spa)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	

NMR *(nur verarbeitete Spektren)*

Bruker Aspect (*.*)	JEOL Alice (*.als)	MestRe-C (*.mrc)
Bruker TopSpin (*.1r, *.fid)	JEOL Delta NMR (*.jdf)	NUTS (*.*)
Bruker UXNMR/XWinNMR 1D (*.1r, *.fid)	JEOL DA-5000 (*.dat)	Sparky NMR (*.ucsf, *.sf)
Bruker UXNMR/XWinNMR 2D (*.2r)	JEOL GX/GSX/EX-90 NMR (*.gxd, *.gxp)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
Bruker WinNMR (*.1r, *.fid)	JEOL Mario (*.hed)	Varian 1D NMR (phasefile, data, *.fid)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	Varian 2D NMR (phasefile)
Generische XY-Dateien (*.*)		

MS

Agilent / HP ChemStation (*.d; data.ms)	Generische XY-Dateien (*.*)	Mass Evolution EZScan v4 (*.hrd)	Teknivent Vector/2 (*.tkf)
Agilent / HP ChemStation (NT) (.msd, .ms)	Hitachi (*.mch)	MassLib JCAMP (*.mlj)	Teknivent Vector/1 (*.raw)
ANDI Mass Spec (*.cdf)	Hitachi M-4100 (ms1.mat)	MatLab (*.mlt)	Teknivent Vector/2 (*.v2s)
Anelva AGS-7000 (*.par)	Hitachi MS Filer (*.msf)	MSS (*.mss)	Text (*.txt)
Anelva AGS-7000 (DOS) (*.par)	HP RTE Chemstation (*.ms)	MS ChemStation (*.ms)	ThermoQuest Xcalibur (*.raw)
Automass (*.spa)	JEOL Compliment (*.hed)	Nermag SIDAR (*.spe)	Varian Saturn (*.ms)
Balzers QuadStar (*.scb)	JEOL DA-5000 (*.dat)	Netsch (*.ntz)	VG 11-250 (*.dat)
EPA (*.ep)	JEOL DA-6000 (*.dat)	netCDF (*.cdf)	VG JCAMP (*.jdx)
Extrel Merlin (*.ms)	JEOL GCmate (*.lrp)	Palisade PAL (*.pal)	VG LabBase (*.hdr)
Finnigan GCQ (*.ms)	JEOL JCAMP (*.jsp)	PE TurboMass (*.raw;_func, *.dat)	VG MassLab (*.raw;_func, *.dat)
Finnigan Incos (*.mi)	JEOL Mario (*.hed)	PE QMass-910 (*.mss)	VG MassLynx (*.raw;_func, *.dat)
Finnigan Ion Trap (*.dat)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	Shrader Systems/Windows (*.lrp)	VG MassLynx Processed (*.raw;_func, *.dat)
Finnigan ITS-40 (*.ms)	Kratos DS90 (*.rn)	Shrader System (*.lrp)	VG ThermoLab (*.lgh)
Finnigan Magnum (*.ms)	Kratos Mach3 (*.run)	Shimadzu PAC200 (*.x)	VG ThermoLab (*.ps)
Finnigan SXX (*.dat)	MASPEC (*.mss)	Shimadzu QP-5000 (*.r)	
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	Mass Evolution (*.spe)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)	

UV-Vis

Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	PG Instruments (*.spd)
Generische XY-Dateien (*.*)	JASCO (*.jws)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)

GC

ANDI Chromatography (*.cdf)	Generische XY-Dateien (*.*)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	MS ChemStation (*.ms)	

Struktur-Dateiformate

ChemDraw (*.cdx)	Hampden (*.hsf)	MDL MOL (*.mol)	Smiles-Strukturdateien (*.smi)
ChemWindow (*.cwg)	InChI-Strukturdateien (*.txt)	MDL RXN (*.rxn)	XYZ-Strukturdateien (*.xyz)
DrawIt (*.dsf)	JCAMP (*.dx, *.jdx)		

Datendateiformate

MDL SDF (*.sdf)	Infometrix (*.dat)
-----------------	--------------------

Lizenzierungsinformationen

Bio-Rad macht die Lizenzierung von Software und Datenbanken ganz einfach. Individuelle Spektraldatenbanken werden per USB-Dongles lizenziert, und die Software wird über das Internet oder einen USB-Dongle lizenziert.

Support- und Upgrade-Richtlinien

Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/supportpolicy.

Schulungsoptionen

Wenn Sie weitere Schulungen benötigen, die über die bereitgestellten Ressourcen (Online-Hilfe, KnowItAll-Handbuch als PDF, Demofilme) hinausgehen, sprechen wir gern mit Ihnen über weitere Schulungsoptionen. Besuchen Sie die Website unter www.knowitall.com/training.

KnowItAll-Systemempfehlungen

Aktuelle Systemempfehlungen zu Betriebssystem, Speicherplatz, RAM-Anforderungen und Prozessor finden Sie unter www.knowitall.com/minimum_system.

www.knowitall.com/getquote
www.knowitall.com/literature
www.knowitall.com/contactus

BIO-RAD

**Bio-Rad
Laboratories, Inc.**

Informatikabteilung
www.knowitall.com

China
Europe, Middle East, Africa
India
Japan, Taiwan, Korea
USA
All Other Countries

Phone: +86 010 5939 0088 x381 • Email: informatics.china@bio-rad.com
Phone: +44 20 8328 2555 • Email: informatics.europe@bio-rad.com
Phone: +91 124 4029300 • Email: informatics.india@bio-rad.com
Phone: +81 3 (6361) 7080 • Email: informatics.jp@bio-rad.com
Phone: +1 267 322 6931 • Toll Free: +1 888 5 BIO-RAD (888-524-6723) • Email: informatics.usa@bio-rad.com
Phone: +1 267 322 6931 • Email: informatics.worldwide@bio-rad.com