

Spectroscopie



Bases de données et logiciels

BIO-RAD

Sommaire

Bases de données et logiciels de spectroscopie..... 1

Bases de données spectrales 2

Bases de données IR : ATR-IR..... 2

ATR de polymères de base	ATR de polymères
ATR de drogues contrôlées et de prescription	ATR par solvants
ATR de inorganiques	ATR de stéroïdes, androgènes, progestines & œstrogènes
ATR de organométalliques	

Bases de données IR : Polymères et composés apparentés 2

Acrylates & méthacrylates	Polymères industriels de Hummel, v. 1
Adhésifs & produits de scellement	Polymères industriels de Hummel, v. 2
Adhésifs & produits de scellement (sous-ensemble A)	Polymères industriels de Hummel, v. 3
Monomères et polymères de base v.1 (non modifiés)	Polymères Hummel/Sadtler
Monomères et polymères de base v.2 (non modifiés)	Monomères et polymères (complète)
Enduits	Monomères et polymères v. 1 (modifiée)
Pyrolysats contrôlés de polymères	Monomères et polymères v. 2 (modifiée)
Matériaux d'unités de production électrique	Plastifiants
Résines époxy, produits de durcissement et additifs	Additifs de polymères
Retardateurs de flamme	Polymères
Polymères définis par Hummel	Matériaux de protection
Polymères définis par Hummel, collection de base	Caoutchoucs
Polymères industriels de Hummel, v. 1-3	Produits chimiques de traitement des polymères Sadtler/Scholl

Bases de données IR : composés organiques purs..... 5

Alcools et phénols	Merck/Sadtler
Aldéhydes	Acides nucléiques, nucléosides & nucléotides
Acides aminés et peptides	Organométalliques, inorganiques, silanes, boranes et composés du deutérium
Anhydrides et lactones	Composés du phosphore
Acides carboxyliques	Base de données de référence Sadtler-Q
Standards IR en phase condensée (complète)	Base de données de spectres IR de référence sélectionnés
Teintures, alcynes et composés azoïques	Standards de premier choix
Esters	Phase vapeur de premier choix (non mélangés)
Matériaux explosifs	Solvants (non mélangés)
Gaz et vapeurs	Solvants en phase vapeur
Hydrocarbures	Bases de données d'initiateurs
Hydrocarbures et hydrocarbures halogénés	Base de données de stéroïdes
Produits chimiques industriels, FT-IR de composés organiques purs	Sucres & hydrocarbures
Produits chimiques industriels, FT-IR de composés organiques de base	Composés du soufre
Intermédiaires (non mélangés)	Standards universitaires
Cétones	Standards IR en phase vapeur (complète)

Bases de données IR : composés industriels 7

Tensioactifs de base (non modifiés)	Produits chimiques pétroliers
Graisses, cires et dérivés	Polyols
Tensioactifs de Hummel	Solvants (qualité industrielle)
Intermédiaires (qualité industrielle)	Tensioactifs (complète)
Lubrifiants	Tensioactifs v. 1 (modifiés)
Additifs de lubrifiants	Tensioactifs v. 2 (modifiés)

Bases de données IR : sciences médico-légales 9

Écaillés de peinture automobile	Saveurs et senteurs (IR phase vapeur)
Produits biochimiques	Additifs alimentaires
Médico-légal Canada	Laboratoire de criminologie de l'État de Géorgie
Drogues communément consommées (acides/bases)	Excipients pharmaceutiques
Teintures	Produits pharmaceutiques
Teintures, pigments & taches	Médicaments de préparation et de prescription (acides/bases)
Fibres & composés chimiques de textiles	Stéroïdes
Fibres par microscopie	Stéroïdes, androgènes, progestines & œstrogènes
Saveurs, senteurs & huiles	

Bases de données : applications environnementales 10

Bases de données HAZMAT	Polluants prioritaires
Pesticides et produits chimiques agricoles	EPA Sadtler en phase vapeur
Polluants (IR phase vapeur)	Produits chimiques de traitement des eaux

Bases de données IR : inorganiques et organométalliques	11
Inorganiques	Minéraux & argiles
Inorganiques (Sous-ensemble A)	Organométalliques
Bases de données Raman	12
Raman : monomères et polymères de base (non modifiés)	Raman : inorganiques
Bases de données proche IR	12
Proche infrarouge : collection de composés organiques courants	
Base de données RMN	12
Base de données RMN de métabolites	
¹³ C RMN de monomères et polymères	
Base de données supplémentaires	12
Licences annuelles pour les bases de données HavelItAll®	13
HavelItAll IR	HavelItAll XNMR
HavelItAll Raman	HavelItAll MS
HavelItAll NMR	HavelItAll UV-Vis
Logiciel KnowItAll®	14
Éditions logicielles de KnowItAll	15
KnowItAll IR/NIR Edition	KnowItAll Enterprise Edition
KnowItAll Spectroscopy Edition	KnowItAll Raman Edition
KnowItAll Analytical Edition	KnowItAll UV-Vis Edition
Fonctions logicielles KnowItAll	16
SearchIt™	Analyzelt Polymer IR
Analyse de mélanges de spectres	Analyzelt MVP
Overlap Density Heatmap	ProcessIt™ NMR
DrawIt™	AssignIt™ NMR
ReportIt™	PredictIt™ NMR
Option création de bases de données	ProcessIt MS
Analyzelt™ IR	IUPAC NameIt™ & DrawIt
Analyzelt Raman	Logiciel Pirouette® d'Infometrix'
Tableau comparatif des éditions de KnowItAll	20
Formats de fichiers KnowItAll	21
Solutions KnowItAll pour l'entreprise	22
KnowItAll SpecFinder™	
KnowItAll Enterprise Server	
KnowItAll AnyWare™	
Informations supplémentaires	23
Informations sur les licences	
Politique d'assistance et de mises-à-jour	
Options de formation	
Recommandations Système KnowItAll	

www.knowitall.com/literature

Bases de données et logiciels de spectroscopie

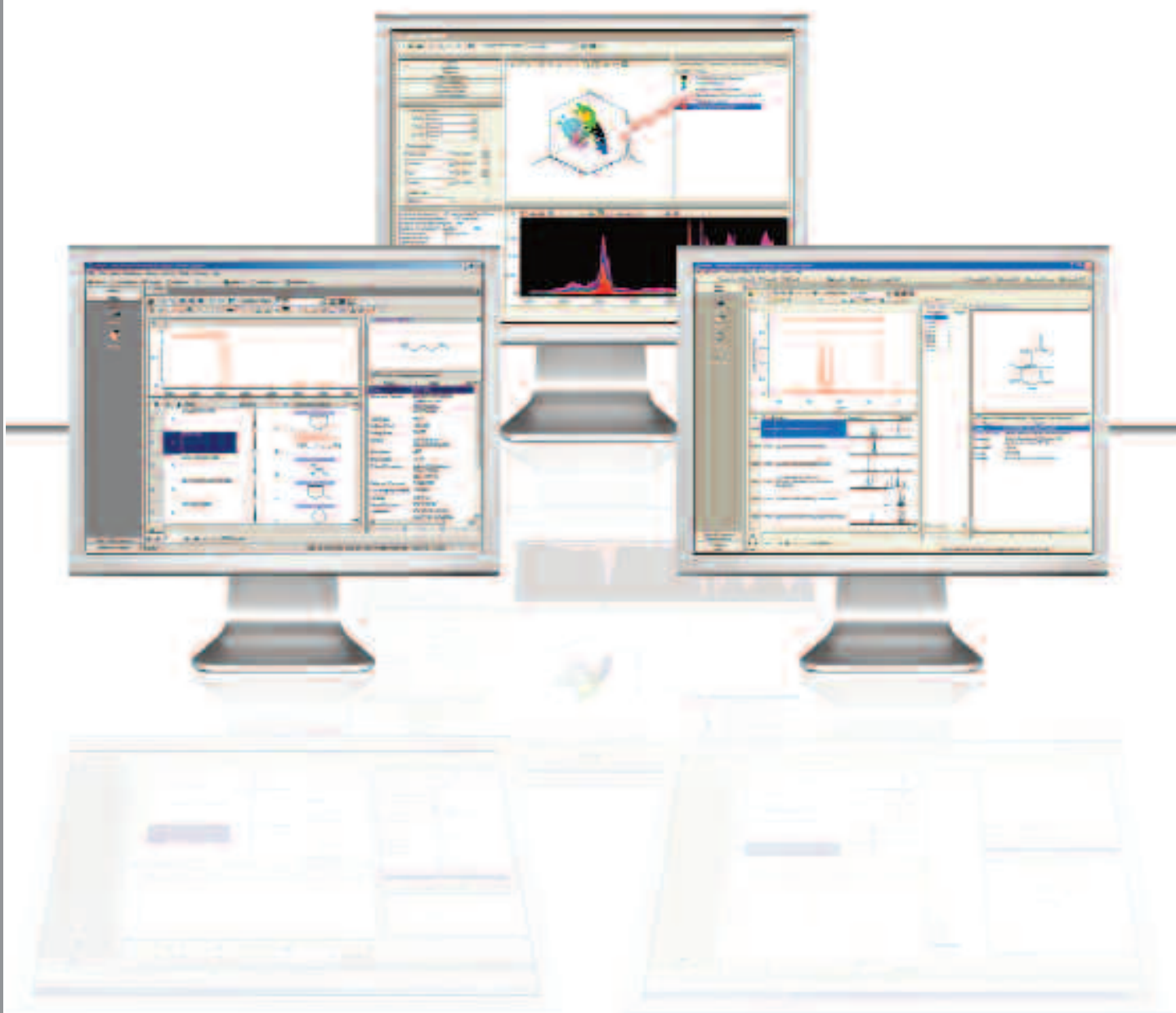
La division informatique de Bio-Rad est spécialisée dans les bases de données et les solutions logicielles pour la communauté scientifique.

Bases de données spectrales – plus de 1,3 million de spectres, données Sadtler incluses

Bio-Rad est le leader de la production et la publication de bases de données spectrales totalement vérifiées, avec une collection qui comprend des données IR, Raman, NIR, RMN, MS, et UV-Vis de composés purs et d'une large gamme de produits commerciaux.

Logiciel KnowItAll®

Bio-Rad se spécialise dans les solutions logicielles individuelles et d'entreprise pour aider les scientifiques à gérer et analyser des types *multiples* de données chimiques et spectrales dans des formats *multiples* de fichiers et d'instruments.



Bio-Rad offre plus de 1,3 million de spectres de haute qualité IR, RMN, MS, UV-Vis, Raman, et NIR (données Sadtler incluses). Les collections comprennent des composés purs et une large gamme de produits commerciaux. Elles constituent un outil idéal pour l'interprétation, l'identification, la vérification et le classement des spectres. Choisissez parmi les bases de données individuelles ou bien les licences annuelles HavelItAll.

Bases de données IR : ATR-IR

 Contient des structures

ATR de polymères de base Code produit 448500 **500 spectres**

Une sélection de composés destinée à procurer une large base pour la résolution des problèmes d'analyse des polymères et plastiques.

ATR de drogues contrôlées et de prescription Code produit 447900 **1.160 spectres**

Cette base de données contient des spectres IR-ATR de drogues contrôlées et de prescription ainsi que des stéroïdes. Elle présente un intérêt pour les laboratoires médico-légaux et les chercheurs effectuant des analyses d'échantillons de drogue.

ATR de inorganiques Code produit 448600 **260 spectres**

Base de données ATR de spectres de composés inorganiques, représentatifs d'un grand nombre d'anions et d'ions polyatomiques communs aux matériaux inorganiques.

ATR de organométalliques Code produit 448700 **170 spectres**

Base de données ATR assemblée spécifiquement pour les scientifiques s'intéressant à la chimie des organométalliques

ATR de polymères Code produit 410700 **2.390 spectres**

Collection de spectres de référence FT-IR de monomères, polymères et précurseurs. Contient des spectres utilisés dans les films, enduits, produits de finition et laminés.

ATR de solvants Code produit 436100 **620 spectres**

La base de données comprend des spectres ATR FT-IR de référence de solvants courants produits avec les techniques de réflectance totale atténuée.

ATR de stéroïdes, androgènes, progestines et œstrogènes Code produit 447800 **300 spectres**

La base de données, préparée par Forensic Spectral Research, contient des stéroïdes, des androgènes, des progestines et des œstrogènes utiles pour les applications médico-légales, pharmaceutiques et autres.

Bases de données IR : Polymères et apparentés

 Contient des structures

Acrylates & méthacrylates Code produit 447600 **470 spectres**

Cette base de données contient des spectres de composés acryliques et méthacryliques. Elle comprend des polymères et monomères qui entrent dans la composition de nombreux produits courants.

Adhésifs & agents de scellement Code produit 433000 **2.070 spectres**

Cette collection comprend une large gamme de résines synthétiques de base et d'élastomères, plus des produits finaux commerciaux durcis et non durcis. Les produits typiques sont composés d'adhésifs en caoutchouc, d'adhésifs de contacts, d'adhésifs à chaud, d'adhésifs en silicone, d'adhésifs sensibles à la pression, de ciments, et d'agents de scellement.

Adhésifs et agents de scellement (*Sous-ensemble A*) Code produit 423000 **520 spectres**

La base de données contient des adhésifs et colles de 11 classes généralement établies par l'industrie des adhésifs. La collection inclut des résines synthétiques de base, des élastomères, des matériaux non durcis, et des produits finaux durcis.

Monomères & polymères de base v. 1 (*non modifiés*) Code produit 421900 **1.490 spectres**

Une sélection de composés destinée à procurer une large base pour la résolution des problèmes d'analyse des polymères et plastiques. Cette collection comprend de nombreux composés classiques, ce qui lui confère une grande utilité en tant que référence.

Monomères & polymères de base v. 2 (non modifiés) **Code produit 422500****850 spectres**

Une sélection de composés destinée à procurer une large base pour la résolution des problèmes d'analyse des polymères et plastiques. Cette base de données fournit des spectres supplémentaires au volume 1. Ils composent ensemble une collection complète de monomères et polymères de base.

Enduits**Code produit 421300****720 spectres**

Collection conçue pour fournir aux chimistes et technologistes de l'industrie des enduits une source d'informations de référence pratique et utile. La base de données comprend deux sections : Partie I – résines et Partie II – monomères, précurseurs et additifs. Elle est structurée selon la classification des enduits et les composés sont organisés par classe chimique à l'intérieur de chaque groupe.

Pyrolyzates contrôlés de polymères**Code produit 434000****2.970 spectres**

Cette base de données contient les spectres de polymères pyrolysés à une température spécifique constante. Elle a été conçue pour aider à identifier les principaux types de polymères.

Matériaux d'unité de production électrique**Code produit 427000****1.070 spectres**

Cette base de données contient des spectres de produits commerciaux tels que les produits d'étanchéité, élastomères, polymères, lubrifiants et matériaux associés utilisés dans les unités de production.

Résines époxy, agents durcisseurs & additifs**Code produit 436300****700 spectres**

Base de données de spectres FT-IR de matériaux bruts utilisés dans la production des matériaux thermoformés tels que les composites, les cartes de circuits imprimés et le packaging électronique ainsi que des matériaux utilisés dans les peintures, les produits d'étanchéité, les adhésifs, et une large gamme d'enduits de surface.

Retardateurs de flamme**Code produit 420400****590 spectres**

Base de données de spectres IR de produits retardateurs non-réactifs et réactifs du commerce.

Polymères définis par Hummel **Code produit 465500****2.330 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley, l' « Atlas of Polymer and Plastics Analysis, Volume 1, Band 1: Defined » du professeur Dieter O. Hummel est bien connu et utilisé dans le monde entier. Il contient des spectres de polymères, copolymères et d'additifs de polymères. On peut les utiliser pour le contrôle de qualité, la caractérisation ou l'élucidation des structures.

Polymères définis par Hummel, collection de base **Code produit 465600****1.040 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Il s'agit d'un sous-ensemble de la base de données précédente. Elle contient des polymères, copolymères et des additifs de polymères.

Polymères industriels de Hummel, v. 1-3 **Code produit 465100****5.000 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Une collection de spectres FT-IR de polymères revus individuellement par le professeur Dieter O. Hummel. Ces composés sont activement utilisés dans l'industrie. Ils proviennent directement des fabricants ou des laboratoires de recherche responsables de leur développement.

Polymères industriels de Hummel, v. 1 **Code produit 465200****1.910 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Cette collection de polymères naturels et synthétiques utilisés dans la construction, les fibres naturelles et synthétiques, les élastomères, des résines diverses telles que les résines naturelles, les résines de peinture et de finition, les résines d'imprégnation et de moulage, les encres de dispersion, de modelage et d'impression, les huiles, graisses, cires, goudrons, composés inorganiques, adhésifs, mastics, ciments, colloïdes protecteurs, agents durcisseurs, initiateurs et activateurs, accélérateurs et modificateurs.

Polymères industriels de Hummel, v. 2 **Code produit 465300****1.560 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Une des plus grandes collections au monde de monomères du commerce utilisés dans les processus de polymérisation. Elle comprend les classes de monomères suivantes : monomères de vinyles, pyrolysats, alcools, phénols, acides carboxyliques et leurs sels, esters, anhydrides, amides, hydrazides, uréthanes, cyanates, fulminates, hétérocycles, acides aminés et thiocarboxyliques, sulfonamides, solvants techniques et autres.

Bases de données spectrales

Polymères industriels de Hummel, v. 3 **Code produit 465400** **1.520 spectres**

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. La base de données FT-IR augmentée d'additifs et auxiliaires de polymères du professeur Hummel fournit une source complète de données de référence pour les chimistes et technologistes des polymères. Elle comprend les classes suivantes : antioxydants, stabilisants (y compris les stabilisants de PVC), stabilisants légers, agents colorants, agents de brillance, de remplissage, plastifiants, élastifiants, étirants, agents de fabrication, auxiliaires de textiles, agents de vulcanisation et auxiliaires de caoutchouc.

Polymères de Hummel/Sadtler **Code produit 422200** **1.920 spectres**

Cette base de données est le produit d'un effort de coopération entre le Professeur Dieter Hummel de l'Université de Cologne et Bio-Rad. Elle comprend une large gamme de polymères, copolymères et additifs de polymères.

Monomères & polymères (complète) **Code produit 321900** **11.270 spectres**

La plus grande collection au monde de spectres infrarouges de composés commerciaux de monomères, polymères, catalyseurs, agents de durcissement, antioxydants, stabilisants, modificateurs et d'autres additifs utilisés dans les processus de polymérisation. Les polymères comprennent les hydrocarbures aliphatiques, polyesters, polyamides, polymères sulfonates, silicones, résines époxy, polymères de vinyle et vinylidène, dérivés de cellulose et polymères méthacryliques, polymères de vinyle hétérocycliques et graisses polymérisées. Elle comprend également des monomères.

Monomères & polymères v. 1 (Modifiés) **Code produit 422000** **1.790 spectres**

Cette sélection de spectres de produits commerciaux, y compris des additifs, est destinée à procurer une large base pour la résolution des problèmes d'analyse de polymères et solvants. Les classes de produit comprennent des polyéthylènes, polypropylènes, polystyrènes, polybutadiènes, polyéthers, polyacryliques, polyesters et polyvinylpyridines. Elle comprend de nombreux composés classiques, ce qui la rend particulièrement utile comme référence. (Les composés ont été sélectionnés et revus par Richard A. Nyquist.) Les spectres sont ordonnés en quarante-neuf classes chimiques. Ils sont disposés par ordre de complexité chimique croissante à l'intérieur de chaque classe.

Monomères & polymères v. 2 (Modifiés) **Code produit 422300** **1.700 spectres**

Bio-Rad a composé une collection de monomères, polymères et précurseurs. Les applications analytiques comprennent l'identification, le contrôle de qualité, les études de dégradation, la sélection de matériaux et d'autres applications comme l'enseignement. Cette base de données comprend des spectres de produits commerciaux. Les composés (sélectionnés et revus par Richard A. Nyquist) composent une base étendue pour la résolution de problèmes d'analyse des polymères et plastiques. Les classes de produits comprennent les polyéthylènes, polypropylènes, polystyrènes, polybutadiènes, polyéthers, polyacryliques, polyesters et polyvinylpyridines. Quarante six classes de monomères et polymères sont présentes dans la base de données.

Plastifiants **Code produit 433700** **1.480 spectres**

Cette base de données contient une large gamme de plastifiants du commerce utilisés dans la fabrication et la composition des polymères. La liste des classes de composés de la collection comprend notamment des formals, hydrocarbures, lactames, mellitates, nitriles, phénols et polyesters ; des dérivés d'acides : abiéique, adipique, benzoïque, caprylique, citrique, fumarique, isophthalique, laurique, maléique, oléique, palmitique, phthalique, sébacique, stéarique, succinique et tartarique ; des dérivés de composés comprenant des biphenyls, résines epoxy, éthers, éthylènediamine, glycérol, glycol et paraffine.

Additifs de polymères **Code produit 424800** **1.740 spectres**

Bio-Rad a réuni une collection de référence de spectres infrarouges d'additifs de polymères pour procurer aux chimistes et technologistes des polymères une source pratique et adaptée d'informations.

Composés polymères **Code produit 439900** **470 spectres**

Cette base de données contient des polymères de base courants dans l'industrie comme dans le monde académique. Ceci comprend des polymères pour la construction, des élastomères, résines diverses, goudrons, composés inorganiques, agents durcisseurs, initiateurs et activateurs, accélérateurs et modificateurs.

Matériaux de protection **Code produit 447500** **770 spectres**

Base de données de spectres IR d'additifs de polymères comprenant les enduits, inhibiteurs, stabilisants, antioxydants, agents antistatiques et conservateurs.

Caoutchoucs **Code produit 424300** **580 spectres**

Cette base de données comprend les spectres infrarouges de caoutchoucs groupés par fonction principale. Elle comprend une large gamme de classes chimiques utilisées dans l'industrie des classes chimiques utilisées dans l'industrie du caoutchouc, y compris des composés accélérateurs, activateurs, retardants, vulcanisants, antioxydants, plastifiants, collants et stabilisants.

Composés de transformation des polymères Sadtler/Scholl Code produit 423200 1.150 spectres

La collection comprend des réactifs de transformation des polymères comme les plastifiants, agents de remplissage et pigments inorganiques, pigments organiques, stabilisants UV, fluorescents, agents blanchissants, antioxydants, stabilisants, agents antistatiques, biocides, retardateurs de flamme, accélérateurs, agents durcisseurs et activateurs, assistants de traitement et solvants. La base de données est apparue initialement en tant que « Volume Three of the Hummel/Scholl Polymer Atlas », basé sur les données originelles préparées par Dr. Friedrich Scholl.

Bases de données IR : Composés organiques purs Contient des structures

Alcools & phénols Code produit 438100 1.920 spectres

Cette base de données contient des spectres d'alcools et phénols utilisés comme solvants dans la synthèse d'autres composés.

Aldéhydes Code produit 438200 690 spectres

Cette base de données d'aldéhydes donne accès à des composés essentiels pour les industries des parfums et des saveurs ainsi que pour la fabrication d'intermédiaires pharmaceutiques et d'additifs des plastiques.

Acides aminés & peptides Code produit 438300 790 spectres

Cette base de données contient des spectres d'acides aminés, de peptides, de composés dont l'acide aminé est l'unité de base. Cette collection de substances d'importance biologique rend possible aux utilisateurs la recherche de composés comprenant ces blocs structurels essentiels.

Anhydrides & lactones Code produit 438400 320 spectres

Base de données de spectres infrarouges de composés organiques appartenant aux classes mentionnées dans le titre.

Acides carboxyliques Code produit 438500 1.520 spectres

Cette base de données contient les spectres infrarouges de composés acides largement utilisés dans la synthèse d'autres composés.

Standards IR en phase condensée (Complète) Code produit 320100 75.570 spectres

Bases de données complète de spectres infrarouges de référence de composés organiques. Elle comprend des spectres de la plupart des composés simples aliphatiques, aromatiques, alicycliques et hétérocyclique, ainsi que de nombreux matériaux complexes. Sont également incluses de nombreuses séries de composés homologues, des très simples aux très complexes, ce qui permet les études spectroscopiques de tendances mettant en jeu les homologues.

Teintures (dyes), alcynes, & composés azoïques Code produit 438600 940 spectres

Cette base de données contient les spectres de teintures, alcynes et composés azoïques. Elle fournit une référence de composé pur de teintures pour l'industrie des teintures et des colorants.

Esters Code produit 438700 1.800 spectres

Cette base de données contient des spectres infrarouges d'esters. Les composés sont largement utilisés dans l'industrie des parfums, mais leur application est largement répandue.

Matériaux explosifs Code produit 438800 720 spectres

Cette base de données comprend des composés que l'on peut considérer comme explosifs ou composants d'explosifs. Elle contient des composés mentionnés dans la liste "2002 List of Explosive Materials" du "Bureau of Alcohol, Tobacco, and Firearms". Elle comprend également des explosifs azides, des mélanges explosifs de nitrates, des picrates explosifs, peroxydes et perchlorates.

Gaz & vapeurs Code produit 420500 150 spectres

Cette base de données comprend les spectres de gaz permanents ainsi que des vapeurs de liquides volatiles fréquents au laboratoire et dans les unités de traitement. Beaucoup des composés de cette collection présentent un intérêt en rapport avec l'analyse des contaminants dans la législation actuelle sur la qualité de l'air, notamment les standards « National Ambient Air Quality Standards Act » et « Occupational Safety and Health Standards Act ». La base de données comprend les classes chimiques suivantes : hydrocarbures, aldéhydes, fréons, composés azotés et composés soufrés.

Bases de données spectrales

Hydrocarbures Code produit 439000 1.060 spectres

Cette base de données comprend des spectres infrarouges d'hydrocarbures, procurant ainsi aux chercheurs une référence pratique.

Hydrocarbures et hydrocarbures halogénés Code produit 439100 1.880 spectres

Cette base de données comprend des spectres infrarouges d'hydrocarbures et d'hydrocarbures halogénés.

Produits chimiques industriels, FT-IR d'organiques purs Code produit 465800 20.310 spectres

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Collection FT-IR de composés organiques utilisés comme produits chimiques industriels.

Produits chimiques industriels, FT-IR d'organiques de base Code produit 465900 1.000 spectres

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. La collection comprend des spectres de composés organiques courants sélectionnés parmi ceux de la collection FT-IR de composés organiques de Chemical Concepts.

Composés intermédiaires (non mélangés) Code produit 422900 490 spectres

Cette base de données comprend les spectres infrarouges de composés intermédiaires dans la fabrication de produits finis. Ils sont ordonnés en dix-sept classes chimiques principales : acides, alcools, aldéhydes, amines, nitriles, sulfites, cétones, hydrocarbures aromatiques, etc.

Cétones Code produit 439200 1.810 spectres

Cette base de données comprend des spectres infrarouges de cétones utilisables pour l'identification, la classification et le contrôle de ces composés.

Merck/Sadtler Code produit 424500 2.940 spectres

Les spectres FT-IR de cette base de données proviennent de l'Atlas FT-IR de Substances Pures (programme Merck-Schuchardt).

Acides nucléiques, nucléosides et nucléotides Code produit 439300 1.450 spectres

Cette base de données, élaborée pour la recherche sur les processus moléculaires, comprend des spectres infrarouges de composés nucléiques pour l'identification, la classification et la vérification de tels matériaux.

Composés organométalliques, inorganiques, silanes, boranes & composés du deutérium Code produit 439400 1.140 spectres

Cette base de données de spectres infrarouges présente une sélection spécifique de composés du bore, du silicium et du deutérium ainsi que des organométalliques et des composés inorganiques.

Composés du phosphore Code produit 439500 1.110 spectres

Cette base de données comprend des spectres infrarouges de composés du phosphore utiles pour l'identification, la classification et la vérification de ces matériaux.

Base de données de référence Q – Sadtler Code produit 426000 10.000 spectres

Base de données complète de spectres de composés organiques purs fréquents dans les laboratoires académiques et industriels. La collection couvre une large gamme de classes chimiques de provenance commerciale. On l'utilise fréquemment en chimie organique et autres cours académiques pour établir l'identité chimique des composés par la comparaison des groupes fonctionnels. On peut également l'utiliser dans les laboratoires industriels comme référence pour l'identification des composés organiques par spectroscopie infrarouge.

Spectres IR sélectionnés de référence Code produit 400000 2.500 spectres

Cette base de données contient des composés organiques purs que l'on peut utiliser pour identifier et classer les échantillons purs. Elle peut servir de référence lorsqu'on ne dispose pas de collections plus complètes.

Standards de choix

Code produit 420200

2.490 spectres

Cette base de données couvre une large gamme de spectres de composés organiques purs simples et complexes. Elle a été conçue pour procurer une collection réduite et pratique de spectres infrarouges à ceux qui ne disposent pas de collections plus complètes.

Phase vapeur de choix

Code produit 422800

500 spectres

Base de données IR de spectres en phase vapeur pour accompagner « The Interpretation of Vapor Phase Infrared Spectra - Group Frequency Data » de Nyquist.

Solvants (non mélangés)

Code produit 436000

630 spectres

Cette base de données comprend des spectres FT-IR de référence de solvants courants pour faciliter l'identification et l'analyse des solvants. Complète, la collection est utile dans tout laboratoire de recherche.

Solvants en phase vapeur

Code produit 436200

620 spectres

La base de données comprend des spectres FT-IR de référence de solvants courants. Les spectroscopistes qui identifient des composés en phase vapeur issus de séparations par chromatographie gazeuse trouveront cette base de données particulièrement utile pour l'évaluation et l'interprétation de tels spectres.

Base de données de démarrage

Code produit 405000

11.800 spectres

La base de données de démarrage de Sadtler est une collection de spectres infrarouges de référence comprenant des composés chimiques organiques et des monomères et polymères commerciaux.

Base de données de stéroïdes

Code produit 439600

860 spectres

La base de données comprend spécifiquement des spectres infrarouges de composés stéroïdiens.

Sucres et hydrocarbures

Code produit 439700

570 spectres

Cette base de données comprend les spectres infrarouges d'une large gamme d'hydrocarbures, sucres, amidons et fibres. Elle sert à l'identification, la classification et la vérification de composés de ces classes.

Composés du soufre

Code produit 439800

1.090 spectres

Cette base de données comprend les spectres infrarouges de composés du soufre utile à l'identification, la classification et la vérification des composés de cette classe.

Standards universitaires

Code produit 420100

300 spectres

Cette collection de spectres infrarouges de composés organiques est réduite mais pratique et adaptée aux cours d'introduction à la chimie organique du premier cycle universitaire ainsi qu'aux cours de laboratoire complémentaires en chimie organique expérimentale et en analyse quantitative organique. Ils sont ordonnés par classe chimique.

Standards IR en phase vapeur (complète)

Code produit 320300

9.190 spectres

La collection comprend des spectres en phase vapeur de composés organiques purs. Elle est utile pour l'identification de composés inconnus par GC-IR, TGA-IR ou autres méthodes d'analyse en phase vapeur. Les composés sont particulièrement pertinents pour l'identification de pollution et toxicologique.

Bases de données IR : composés industriels

Tensioactifs de base (non modifiés)

Code produit 436700

850 spectres

Cette collection fournit une base de données de référence aux scientifiques travaillant sur les agents tensioactifs. Elle comprend des spectres FT-IR de composés représentatifs anioniques, cationiques et non ioniques.

Bases de données spectrales

Graisses, cires et produits dérivés

Code produit 432500

1.800 spectres

Les composés de cette base de données comprend des spectres IR de graisses, huiles, cires animales (brutes et raffinées), acides gras, esters d'acides gras (triglycérides exclus), amides gras, amines gras, matières insaponifiables, autres dérivés gras, de graisses et huiles marines, cires minérales (brutes et raffinées), cires minérales modifiées, cires végétales modifiées, cires synthétiques, savons, graisses, huiles et cires végétales (brutes et raffinées).

Tensioactifs de Hummel

Code produit 465700

1.030 spectres

Bases de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. Cette base de données comprend des spectres de tensioactifs réunis par le professeur Dieter O. Hummel. On a utilisé des échantillons de recherche et des tensioactifs industriels pour offrir une base de données complète à ceux qui travaillent sur les tensioactifs.

Produits intermédiaires (qualité industrielle)

Code produit 432900

830 spectres

Base de données de spectres IR de composés chimiques du commerce utilisés comme précurseurs de produits finis, notamment des acides, alcools, aldéhydes, amines, cétones, nitriles, sulfides et hydrocarbures aromatiques. Ces composés sont utilisés dans la fabrication de produits pharmaceutiques, tensioactifs, teintures, plastifiants et autres produits chimiques de spécialité.

Produits lubrifiants

Code produit 421700

880 spectres

Cette base de données contient les spectres infrarouges de composés du commerce utilisés dans une grande variété d'applications industrielles et automobiles telles que les graisses, fluides hydrauliques, huiles de coupage, huiles moteurs et savons métalliques. Elle comprend des produits d'origine pétrolière et des lubrifiants synthétiques comme les chlorofluorocarbures (CFC), les esters d'acides carboxyliques dibasiques, les polymères lubrifiants, les esters de phosphate et les silicones.

Additifs de lubrifiants

Code produit 425500

1.570 spectres

Une collection d'additifs utilisés dans les huiles moteurs, fluides de transmission et hydrauliques, huiles de boîte de vitesse, huiles industrielles, huiles de travail des métaux et huiles de traitement. Ces produits sont utilisés dans les industries automobile, marine, aéronautique et pétrolière ainsi que dans toute industrie utilisant des machines. Les spectres ont été produits de façon plus lourde qu'à l'ordinaire pour compenser la nature des composés.

Produits chimiques pétroliers

Code produit 420800

320 spectres

Ces spectres proviennent de composés choisis parmi des produits pétroliers du commerce. Beaucoup d'entre eux sont utilisés dans la modification et l'amélioration des carburants, combustibles liquides, lubrifiants et autres produits. Parmi les plus de 20 classes représentées ici, on trouve les antiacides, antidétonants, antioxydants, catalyseurs, dispersants, inhibiteurs de formation de gommages, solvants de gommages, composés de contrôle d'inflammation, antirouilles, améliorateurs de viscosité, etc.

Polyols

Code produit 422600

270 spectres

Cette base de données comprend les spectres infrarouges de polyols du commerce : polyols, polyglycols, glycérols, hydrocarbures, amidons, mono-, di- et polysaccharides utilisés comme lubrifiants, précurseurs de polymères et intermédiaires dans la fabrication de médicaments et de nombreux produits industriels.

Solvants (qualité industrielle)

Code produit 432700

910 spectres

Cette base de données fournit une référence pratique et utile pour faciliter l'identification et l'analyse des solvants industriels courants. Les solvants sont classés en quatre groupes principaux : hydrocarbures ; composés ne comprenant qu'un seul type d'atome ou de groupe fonctionnel caractéristique ; composés comprenant plus d'un type d'atome ou de groupe fonctionnel caractéristique ; composés deutérés.

Tensioactifs (Complète)

Code produit 323500

10.000 spectres

La plus vaste base de données commercialement disponible de spectres infrarouges de détergents, émulsifiants, antimoussants, adoucissants, agents séquestrants, savons, produits de fabrication et de formulation.

Tensioactifs v.1 (modifiés)

Code produit 423500

1.790 spectres

Collection de spectres IR sélectionnés pour faciliter la résolution de problèmes analytiques dans le domaine de l'analyse des tensioactifs. Les applications analytiques comprennent l'identification, le contrôle de qualité, les études de décomposition, la sélection des produits, l'étude in-situ de leur utilité propre ainsi que d'autres usages tels que l'enseignement universitaire. La collection consiste en produits du commerce tels que les savons, émulsifiants, agents chélateurs, inhibiteurs de corrosion, agents de glissement, épaississants, blanchissants optiques, lubrifiants, antimousses, agents séquestrants, adoucissants, etc.

Tensioactifs v.2 (modifiés)

Code produit 425200

1.700 spectres

Cette collection de spectres IR a été sélectionnée pour apporter une aide à la résolution de problèmes dans l'analyse des tensioactifs. Elle comprend des détergents, savons, émulsifiants, agents chélateurs, inhibiteurs de corrosion, agents de glissement, épaississants, blanchissants optiques, lubrifiants, etc.

Bases de données IR : sciences médico-légales

 Contient des structures

Écaillés de peinture automobile

Code produit 460300

1.990 spectres

Cette collection est destinée en premier lieu à la comparaison des couleurs et/ou des classes chimiques. Toutes les écaillés colorées de la base de données ont été préparées à partir de lots de production de peinture. Les types de peinture comprennent les laques acryliques en solution, laques acryliques en dispersion, vernis acryliques, vernis polyesters, vernis uréthanes, vernis acrylique protecteur/transparent, vernis non en dispersion aqueuse, vernis aqueux, etc.

Composés biochimiques

Code produit 447200

590 spectres

Cette base de données contient les spectres infrarouges d'une gamme de composés biochimiques comprenant des peptides, acides aminés, hydrocarbures, acides nucléiques, sucres, lipides, stéroïdes, terpènes, alcaloïdes, glycosides, caroténoïdes, flavonoïdes, etc.

Médico-légale du Canada

Code produit 421200

3.490 spectres

Cette base de données comprend les spectres de drogues légales et illégales, de précurseurs de drogues et de réactifs utilisés dans leur préparation, ainsi que d'autres substances rencontrées dans les analyses médico-légales. Elle comprend également certains réactifs courants de laboratoire et de maison. La collection Provient du Département de la Santé et de l'Aide Sociale du gouvernement du Canada.

Drogues courantes d'usage abusif (acide/base)

Code produit 421400

580 spectres

Cette collection comprend les données spectrales de drogues fréquemment détournées de leur usage. Les composés représentés sont principalement des drogues de marque sous forme dosée, de drogues fournies en gros et de narcotiques. Certains des mélanges de cette collection sont des drogues de rue, c'est-à-dire des mélanges de narcotiques préparés illégalement.

Teintures

Code produit 421600

520 spectres

Cette collection de teintures fournit une source de référence pratique et utile aux chimistes et technologistes de l'industrie des teintures et couleurs. Les teintures sont groupées en classes basées sur l'usage établi du Colour Index (C.I.)

Teintures, pigments et souillures

Code produit 431600

2.550 spectres

Cette collection de teintures, pigments et souillures fournit une source de données de référence pratique et utile pour les chimistes et technologistes de l'industrie des teintures.

Composés chimiques de fibres et textiles

Code produit 420300

480 spectres

Cette collection comprend des fibres naturelles et synthétiques d'origine locale et étrangère, notamment les fibres naturelles suivantes : soie, laine, coton, Kapok, lin, jute, chanvre, sisal, raphia et asbestes. Les fibres synthétiques comprennent toutes les classifications génériques définies dans le « Textile Fiber Products Identification Act » à l'exception de la classe métallique. On trouvera notamment les acétates, acryliques, nylons, nitriles, polyesters, rayonnées, triacétates, vinyles et vinylons. Les composés chimiques des textiles comprennent les agents antimoussants, détergents, blanchissants, antistatiques, conditionneurs, finisseurs, adoucissants et autres.

Fibres au microscope

Code produit 436400

450 spectres

Cette base de données comprend des spectres de référence de haute qualité de fibres synthétiques du commerce mesurés en microscopie FT-IR. Les spectres ont été collectés à partir d'échantillons de fibres et fils. Des spectres multiples sont fournis pour les fils comprenant deux composants ou plus.

Bases de données spectrales

Saveurs, senteurs & huiles

Code produit 436500

870 spectres

Fournit aux scientifiques une collection représentative de composés organiques utilisés dans la manufacture des saveurs et senteurs, huiles de substances naturelles, composés odorants synthétiques, terpènes ainsi que des fixatifs. La base de données comprend les spectres infrarouges de composés approuvés par l'association des producteurs de saveurs et extraits des Etats-Unis.

Saveurs & senteurs (IR en phase vapeur)

Code produit 447400

490 spectres

IBase de données de spectres en phase vapeur de composés organiques pur utilisés dans la production des saveurs, senteurs et composés de synthèse.

Additifs alimentaires

Code produit 467100

990 spectres

Base de données infrarouges de spectres d'ingrédients directement ajoutés aux produits alimentaires, approuvés ou listés ou reconnus sans danger (GRAS) par la FDA..

Laboratoire de criminologie de l'État de Géorgie

Code produit 460400

1.910 spectres

Collection composée par la division des sciences médico-légales du laboratoire de criminologie de l'État de Géorgie. Elle comprend les spectres infrarouges de référence de substances contrôlées et de produits susceptibles d'être fréquemment rencontrés dans les analyses de routine et utilisés pour l'analyse instrumentale des drogues.

Excipients pharmaceutiques

Code produit 447100

880 spectres

Cette base de données a été composée pour les études de formulation pharmaceutique par spectroscopie infrarouge. Elle comprend des spectres de matériaux utilisés dans le développement, la production, le contrôle et la régulation des préparations pharmaceutiques : liants, diluants, agents de remplissage, agents d'amélioration de l'écoulement, adoucissants, enduits, conservateurs, agents de dispersion, saveurs, agents de suspension, de compaction, etc.

Composés pharmaceutiques

Code produit 443100

560 spectres

Collection complète de drogues, composés médicinaux et préparations médicinaux et préparations pharmaceutiques fréquemment rencontrées dans la recherche médicale et pharmaceutique et l'analyse des médicaments. Les composés ont été sélectionnés à partir de « Modern Drug Encyclopedia », « The U.S. Pharmacopoeia », « The British Pharmacopoeia », « The International Pharmacopoeia », « New and Non-Official Drugs » et le « National Formulary ». Les classes comprennent les anesthésiques, antimicrobiens, antibiotiques, anticoagulants, antiviraux, agents cardiovasculaires, diurétiques, enzymes, sédatifs, stimulants, tranquillisants et vitamines.

Médicament de préparation et prescription (acide/base)

Code produit 445700

880 spectres

Cette collection comprend les spectres de médicaments en nom commercial de préparation et de prescription sélectionnés à partir du « Physician's Desk Reference to Pharmaceutical Specialties and Biologicals », afin de fournir une méthode rapide de caractérisation des médicaments.

Stéroïdes

Code produit 420900

250 spectres

Cette base de données comprend les spectres FT-IR de classes importantes de composés pour la recherche sur des stéroïdes.

Stéroïdes, androgènes, progestines & œstrogènes

Code produit 447700

300 spectres

Cette base de données, préparée par Forensic Spectral Research, contient des stéroïdes, des androgènes, des progestines e des œstrogènes utiles pour les applications pharmaceutiques, médicales et autres.

Bases de données IR : applications environnementales

 Contient des structures

Base de données HAZMAT

Code produit 438900

410 spectres

Cette base de données contient les spectres infrarouges de composés dangereux. On peut utiliser la collection de substances sélectionnées aux fins d'identification, de classification et de vérification de ces matériaux.

Pesticides et composés chimiques agricoles

Code produit 436600

1.020 spectres

Sélection complète de matériaux chimiques utilisés dans toutes les phases de l'agriculture, pouvant également être considérés comme des déchets industriels. Ces composés, dont un grand nombre de pesticides, proviennent de diverses sources. Tous sont disponibles commercialement, mais la base de données comprend également des standards de référence de haute pureté de pesticides fournis à Bio-Rad par l'agence US de protection de l'environnement. Dans la plupart des cas, le composé représente le principe actif des formulations commerciales, bien que certaines formulations complètes soient également disponibles. Elle comprend les classes suivantes : acaricides, bactéricides, nématicides, régulateurs de croissance, hormones, conservateurs, éléments nutritifs, fongicides, herbicides, insecticides, répulsifs et attractifs, agents de destruction de mites et de rongeurs ainsi que d'autres produits chimiques agricoles.

Polluants (IR en phase vapeur)

Code produit 447300

910 spectres

Cette base de données fournit une référence spectrale pour les personnes qui analysent, suivent, contrôlent ou étudient les polluants et substances toxiques environnementaux, physiologiques ou d'activité. Elle comprend les spectres en phase vapeur représentatifs de ceux que l'on obtient lors d'analyses GC/FT-IR dans lesquelles les spectres sont mesurés au-dessus de la température ambiante dans une cellule optique chauffée.

Polluants prioritaires

Code produit 447000

470 spectres

Cette base de données est une référence pratique et utile pour la recherche, l'industrie et tous les acteurs engagés dans l'analyse, le suivi, le contrôle et l'étude des substances toxiques et polluants environnementaux, physiologiques ou d'activité. Ces composés sont présents dans les listes suivantes : « EPA Priority Pollutants List », « Occupational Safety and Health Administration (OSHA) Category 1 List of Carcinogenic Substances », ainsi qu'une liste de composés dangereux communs dans l'industrie, préoccupants pendant les transports inter-États, et présents dans « EPA Priority Pollutants List ». La base de données comprend des composés représentés par deux types de spectres : infrarouge en phase condensée, et infrarouge en phase vapeur.

EPA phase vapeur de Sadtler

Code produit 461000

3.240 spectres

L'objectif de cette base de données est de fournir des spectres de référence pertinents pour l'identification de la pollution et des toxiques. Elle comprend les spectres IR en phase vapeur de composés organiques purs courants. Elle est utile pour l'identification de composés inconnus par GC-IR, TGA-IR et d'autres méthodes d'analyse en phase vapeur.

Produits chimiques de traitement des eaux

Code produit 421000

290 spectres

Collection de spectres infrarouges de produits disponibles dans le commerce utilisés dans le traitement des eaux : additifs d'eaux de bouilleurs et de refroidisseurs. Elle comprend les biocides, des agents chélateurs, de coagulation et de floculation.

Bases de données IR : inorganiques et organométalliques

Contient des structures

Inorganiques

Code produit 435900

1.100 spectres

Base de données IR de spectres de composés inorganiques, représentatifs d'un grand nombre d'anions et d'ions polyatomiques communs aux matériaux inorganiques. Ils sont classés selon les anions ou ions polyatomiques suivant les groupes du tableau périodique des éléments. La collection comprend les spectres de composés inorganiques classiques tels que les sulfates d'ammonium, nitrates d'ammonium, sulfate de zirconium et les composés de coordination de divers métaux avec des ligands organiques et organiques. Les classes représentées comprennent les composés inorganiques, inorganiques de coordination, organiques de coordination, métal carbonyles et boranes.

Inorganiques (sous-ensemble A)

Code produit 445900

240 spectres

Base de données de composés inorganiques. Les spectres sont représentatifs de nombreux anions et ions polyatomiques communs aux matériaux inorganiques. Ils sont classés selon l'anion ou l'ion polyatomique du tableau périodique des éléments.

Minéraux et argiles

Code produit 420600

420 spectres

Base de données IR de minéraux et argiles. Les spectres sont classés selon un ordre croissant de complexité du minéral.

Organométalliques

Code produit 420700

350 spectres

Base de données IR assemblée spécifiquement pour les scientifiques s'intéressant à la chimie des organométalliques. Les échantillons ont été collectés auprès d'industriels ainsi que des institutions académiques et laboratoires de recherche dans le but d'effectuer une sélection transversale de composés intéressants. La base de données comprend des spectres de composés disposant d'une liaison directe carbone-métal, ainsi que de composés dans lesquels l'atome métallique est lié au carbone par un hétéroatome unique.

Bases de données spectrales

Raman Databases

 Contient des structures

Raman de monomères et polymères de base *(non modifiés)* Code produit 470100 1.680 spectres

Cette base de données fournit aux scientifiques une source centrale de données fiable sur les polymères. Les monomères et polymères de cette collection ont été sélectionnés pour procurer des composés simples représentatifs des groupes fonctionnels aux fins de classification et d'identification. La base de données comprend des spectres de référence de composés qui n'ont pas été modifiés par des additifs, bien qu'il puisse s'agir de copolymères ou tripolymères.

Raman d'inorganiques Code produit 470200 1.630 spectres

Les composés inorganiques de cette collection ont été sélectionnés pour fournir un matériau représentatif pour l'identification et la classification. Les applications analytiques de cette base de données comprennent l'identification, le contrôle de qualité, les études de détérioration, la sélection des matériaux, l'élucidation de la structure moléculaire et d'autres comme le contrôle de traitement.

Bases de données proche IR

 Contient des structures

Collection de spectres en proche IR de composés organiques communs

Code produit 466000 3.800 spectres

Base de données de Chemical Concepts, une division de Wiley. La collection contient des composés organiques communs. Les spectres ont été analysés en proche infrarouge. Il y a deux spectres par structure.

Bases de données RMN

Base de données RMN de métabolites Code produit 878600 1.050 spectres

Une collection de spectres RMN ^1H et ^{13}C de métabolites pour identifier les bio-marqueurs potentiels dans les études de métabolomique. Les données proviennent du laboratoire de résonance magnétique biologique (BMRB) de l'université de Wisconsin, Madison. Elle comprend des liens vers les bases de données PubChem, KEGG et ChEBI, ainsi que l'affichage des chemins métaboliques de KEGG.

RMN ^{13}C de monomères & polymères Code produit 872300 740 spectres

Bio-Rad propose cette base de données aux chimistes des polymères et aux spectroscopistes qui étudient en RMN du ^{13}C les monomères, les polymères et les résines. Beaucoup de classes de monomères et polymères sont représentées.

Bases de données supplémentaires

L'offre de Bio-Rad comprend la gamme complète de bases de données de spectroscopie de masse de Wiley :

- 9e édition du Wiley Registry®
- Données de spectroscopie de masse et GC de médicaments, pesticides, polluants et leurs métabolites
- MSpectres de masse de composés pour la conception pharmaceutique
- Spectres de masse de produits pharmaceutiques et agrochimiques
- Spectres de masse d'androgènes, d'œstrogènes et autres stéroïdes
- Spectres de masse de composés organiques
- Spectres de masse de composés géochimiques, pétrochimiques et de bio-marqueurs
- FFNSC 1.3 – Saveurs et senteurs de composés naturels et synthétiques

Bio-Rad propose une base de données supplémentaire de Wiley en RMN du proton :

- Wiley : spectres ^1H NMR de composés organiques – 104.489 spectres

Licence annuelle des bases de données HaveltAll®

Les bases de données spectrales HaveltAll de Bio-Rad permettent aux utilisateurs d'effectuer des recherches sur la totalité des collections de spectres par technique. Les collections HaveltAll, accessibles par le système informatique KnowItAll ou par Internet, sont basées sur une licence annuelle.

HaveltAll IR

Code produit 891000

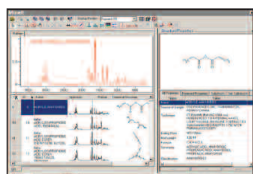


Une collection de près de 230.000 spectres Infrarouge de composés organiques purs et commerciale. Cette base de données est extrêmement utile pour l'identification ou la classification de spectres inconnus. Cette collection répondra aux attentes des utilisateurs des spectres de polymères, composés organiques purs, inorganiques, organométalliques ou industriels dans des applications comme les produits pharmaceutiques, le médico-légal, les sciences des matériaux ou le secteur académique. Les recherches s'effectuent par spectre, pic, nom, structure, sous-structure ou propriété telle que la technique, le poids moléculaire, le numéro d'identification CAS, etc.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitallir

HaveltAll Raman

Code produit 894000

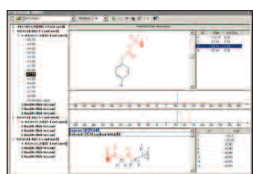


Données Raman de haute qualité centrées sur les composés monomères, polymères, organiques et inorganiques. Les utilisateurs peuvent importer leurs propres spectres et lancer une recherche sur une base de données de 6.225 spectres. Recherche par spectre, pic, nom, structure, sous-structure et champ de propriété telle que la technique, le poids moléculaire, le numéro de registre CAS, etc.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitallraman

HaveltAll NMR

Code produit 892000

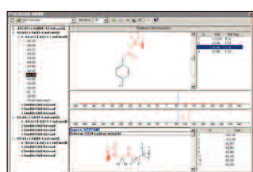


Effectuez des prédictions RMN fiables à partir de plus de 438.000 spectres de référence en RMN du ^{13}C et 56.000 en RMN du ^1H . Avec le module PredictIt RMN de KnowItAll, vous accédez aux spectres de référence utilisés pour réaliser les prédictions avec la totalité de leurs propriétés comme l'origine de l'échantillon, le solvant, les conditions de production, l'instrument utilisé et des propriétés de la molécule.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitallnrm

HaveltAll XNMR

Code produit 896000

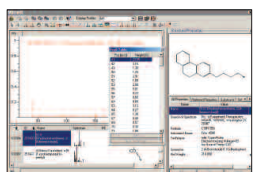


Effectuez des prédictions fiables avec plus de 71.000 spectres XMRN de référence. La base de données comprend la RMN de ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N , ^{11}B , ^{17}O , ^{29}Si et d'autres noyaux. Depuis le module PredictIt RMN de KnowItAll, vous pouvez accéder aux spectres de référence utilisés pour réaliser les prédictions avec la totalité des informations telles que l'origine des échantillons, les solvants, les conditions de production, les instruments utilisés et les propriétés des molécules.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitallxnmr

HaveltAll MS

Code produit 893000

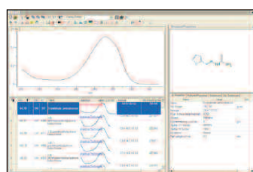


Cette collection de spectres et les informations qu'y rapportent comprennent des données du National Institute of Standards and Technology (NIST) avec l'assistance de conseillers experts de l'Environmental Protection Agency (EPA) et du National Institutes of Health (NIH). Les recherches par pic, nom, structure, sous-structure et champ de propriétés telles que la technique, le poids moléculaire, le numéro de registre CAS, etc. La base de données comprend également les synonymes chimiques.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitallms

HaveltAll UV-Vis

Code produit 876300



Cette base de données est extrêmement utile pour l'identification ou la classification de spectres UV-Vis inconnus dans des applications pharmaceutiques, médico-légales, environnementales, de sciences des matériaux, des polymères et bien d'autres. On peut effectuer des recherches par spectre, pic, nom, structure, sous-structure et champ de propriétés telles que la formule, le poids moléculaire, le solvant, la concentration, et l'emplacement. Les tables de pics contiennent la position du pic, sa hauteur, le coefficient d'absorption et d'extinction.

Connectez-vous sur www.knowitall.com/haveitalluv-vis

KnowItAll[®] Informatics System

Le système informatique primé KnowItAll de Bio-Rad offre une solution informatique totalement intégrée qui fournit de multiples outils pour la spectroscopie, tous regroupés sous la même interface :

- Le traitement des spectres, la recherche, l'analyse et la prédiction
- La création de rapports de résultats
- La construction et la gestion des bases de données
- Des outils de chimiométrie
- L'incorporation de structures chimiques

Réelle Intégration

Transfère immédiat des données entre les applications.

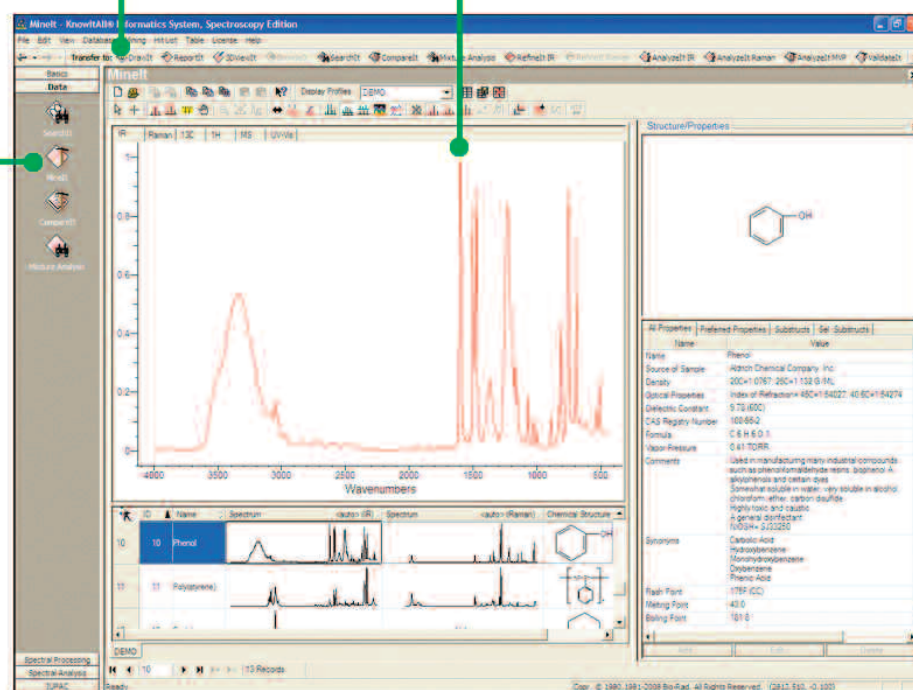
Informatique intégrée

Interrogation, gestion et analyse des données spectroscopiques et chimiques.

Boîtes-à-outils multi-usages

Evaluation des spectres avec une suite d'outils logiciels.

Solutions de bureau et d'entreprise



Fonctionnement de l'interface de KnowItAll

L'interface de KnowItAll a été conçue de façon à permettre à l'utilisateur de transférer des informations d'un outil à l'autre et de se déplacer d'une tâche à une autre sans avoir à quitter l'interface principale ou bien ouvrir un autre programme.

Des boîtes-à-outils logiquement organisées permettent d'accomplir de multiples tâches. Du fait de l'intégration des outils dans un environnement intégré unique, l'utilisation du système se traduit par l'amélioration constante de la productivité et de l'organisation du travail.

Au final, la combinaison des outils et des données en un système unique offre une plus grande capacité d'extraire de la connaissance à partir des données.

Bio-Rad offre des éditions spécialisées de KnowItAll pour diverses techniques spectroscopiques. Voir le tableau de comparaison des fonctionnalités des éditions de KnowItAll en page 20 pour plus de détails.

KnowItAll IR/NIR Edition

Code produit 879100



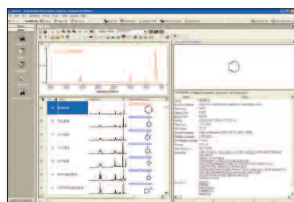
Techniques: IR, NIR

L'édition KnowItAll IR/NIR offre un environnement totalement intégré pour spectrométrie IR et NIR : gestion des données (optionnel), recherches spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports. Désormais, elle comprend les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ».

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/iredition

KnowItAll Spectroscopy Edition

Code produit 876400



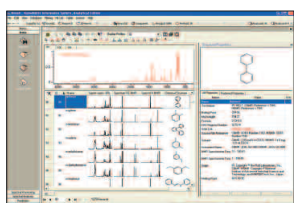
Techniques : IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis, chromatographie

KnowItAll édition spectroscopie offre un environnement totalement intégré pour spectroscopie IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis et chromatographie : gestion des données, recherches spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports. Désormais, elle comprend les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ».

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/spectroscopyedition

KnowItAll Analytical Edition

Code produit 890200



Techniques : IR, Raman, NIR, RMN, MS, UV-Vis, chromatographie

KnowItAll édition analytique offre le premier environnement totalement intégré pour IR, Raman, NIR, RMN, MS, UV-Vis et chromatographie : gestion de bases de données multi-techniques, recherches spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports, ainsi que les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ». Filtres de spectrométrie de masse supplémentaires.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/analyticaedition

KnowItAll Enterprise Edition

Code produit 879400



Techniques : IR, Raman, NIR, RMN, MS, UV-Vis, chromatographie

KnowItAll édition entreprise, plusieurs fois primée, offre le premier environnement totalement intégré pour IR, Raman, NIR, RMN, MS, UV-Vis et chromatographie : gestion de bases de données multi-techniques, recherche spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports, ainsi que les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ».

KnowItAll Raman Edition

Code produit 890000



Technique : Raman

KnowItAll édition Raman offre un environnement totalement intégré pour la spectroscopie Raman : gestion de bases de données (optionnel), recherches spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports, ainsi que les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ».

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/ramanedition

KnowItAll UV-Vis Edition

Code produit 876500



Technique : UV-Vis

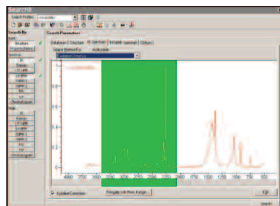
L'édition UV-Vis de KnowItAll offre un environnement totalement intégré pour UV-Vis : gestion de bases de données (optionnel), recherches spectrales, traitement des spectres, dessin de structures et création de rapports, ainsi que les outils d'analyse exclusifs « Cartographie thermique de densité de superposition » et « Analyse des mélanges spectraux ».

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/uv-visedition

Fonctionnalités logicielles de KnowItAll

Applications et fonctionnalités incluses

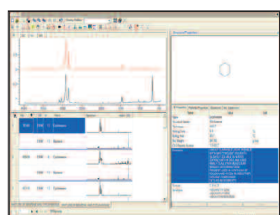
SearchIt™ – Recherche dans les bases de données *(spectre entier, structure, pic, propriété, etc.)*



L'application SearchIt permet d'importer des spectres ou structures pour effectuer des recherches dans des bases de données sous licence, ou bien créées avec KnowItAll par l'utilisateur. Les recherches sont totalement personnalisables et utilisent des algorithmes de haute qualité. On peut effectuer des recherches par structure, sous-structure, nom, propriétés, spectres, ou toute combinaison de ces critères. .

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/searchit

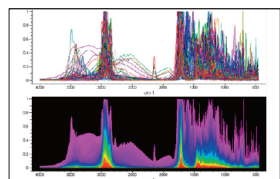
Spectral Mixture Analysis – Analyse des spectres expérimentaux de mélanges



L'application effectue la déconvolution des composants d'un mélange par l'analyse du spectre. Elle permet, dans KnowItAll, la comparaison du spectre d'un échantillon avec ceux des bases de données de l'utilisateur ou celles de référence sous licence. Le résultat est une série de spectres composites, accompagnés chacun des spectres individuels dont il résulte ainsi que du spectre résiduel (la différence entre le spectre de requête du mélange et le spectre composite retourné). Les spectres composites sont classés selon leur ressemblance avec le spectre soumis.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/mixtureanalysis

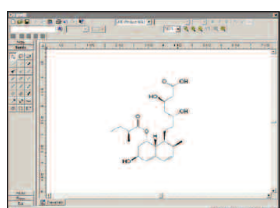
Overlap Density Heatmaps – Investigation et analyse visuelle de données



Bio-Rad a lancé une technologie novatrice d'investigation et d'analyse visuelle des données afin de mettre en évidence les similarités et dissemblances dans des données massives de spectres, chromatogrammes ou autres données graphiques[†]. Cette technologie (brevet en cours), appelée cartographie thermique de densité de superposition, permet aux scientifiques de visualiser par codage de couleur les caractéristiques communes ou dissemblables des objets superposés.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/odhm

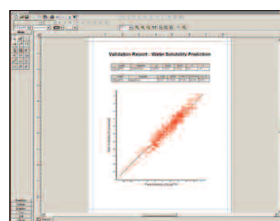
DrawIt™ (ChemWindow®) – Dessin 2D de structures *(avec reconnaissance stéréochimique)*



Avec DrawIt, les utilisateurs dessinent n'importe quelle structure chimique en quelques clics et mouvements de souris. Comprend tous les outils nécessaires pour dessiner cycles, liaisons, atomes, chaînes, flèches et symboles chimiques.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/drawit

ReportIt™ – Edition de rapports personnalisés



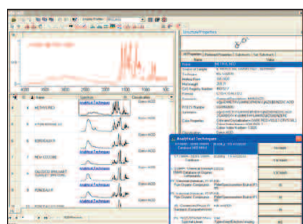
ReportIt permet de créer des rapports standards, des présentations ou des publications. Les rapports sont aisément mis en page grâce aux modèles prédéfinis ou personnalisés.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/reportit

Applications et fonctionnalités optionnelles

Database Building Option – Créez des bases de données de spectres, structures et propriétés

Code produit 850100



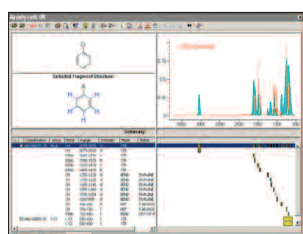
Les chimistes et spectroscopistes produisent chaque jour des données importantes dans leur établissement. Avec l'option Création de bases de données, les chercheurs peuvent capturer ces ressources et bâtir des bases de données interrogeables multi-techniques† (IR, Raman, NIR, RMN, MS, UV-Vis, chromatographie) comprenant structures chimiques et données alpha-numériques.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/databasebuilding

(Option incluse dans les éditions Spectroscopy, Analytical, Enterprise, et UV-Vis, optionnelle dans les autres éditions de KnowItAll)

Analyzelt™ IR – Analyse des groupes fonctionnels

Code produit 851200

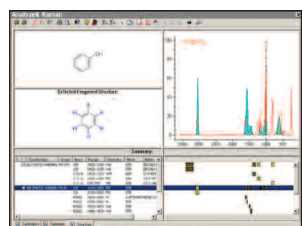


Analyzelt IR facilite l'interprétation des bandes de spectres infrarouges. Charger un spectre, cliquer sur un pic particulier : cela suffit pour générer une liste des groupes fonctionnels pouvant occuper cette position. Analyzelt suggère également le pic le plus judicieux pour commencer l'interprétation. L'application propose plus de 200 groupes fonctionnels et des centaines de fréquences d'interprétation. Elle permet également la corrélation à partir d'une structure. Les utilisateurs peuvent également créer leur propre base de connaissances des groupes fonctionnels qui peuvent être utilisés dans l'interprétation.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/analyzeitir

Analyzelt Raman – Analyse des groupes fonctionnels

Code produit 894200

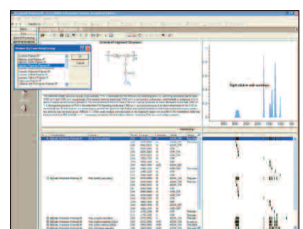


Analyzelt Raman facilite l'interprétation des bandes des spectres Raman. Charger un spectre, cliquer sur un pic particulier : cela suffit pour générer une liste des groupes fonctionnels pouvant occuper cette position. Analyzelt suggère également le pic le plus judicieux pour commencer l'interprétation. L'application propose plus de 200 groupes fonctionnels et des centaines de fréquences d'interprétation. Elle permet également la corrélation à partir d'une structure. Les utilisateurs peuvent également créer leur propre base de connaissances des groupes fonctionnels qui peuvent être utilisés dans l'interprétation.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/analyzeitraman

Analyzelt Polymer IR – Analyse des polymères

Code produit 854700

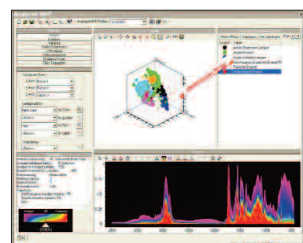


L'identification, la classification et l'interprétation des polymères commerciaux pose un défi. La corrélation entre spectre et structure, à laquelle on ne peut accéder par une simple recherche spectrale, est une des informations clé recherchée. Analyzelt Polymer IR – couplée à une base de connaissance des corrélations spectres-structures – est une application développée spécialement à cet effet. Les utilisateurs peuvent également créer leur propre base de connaissances des groupes fonctionnels qui peuvent être utilisés dans l'interprétation.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/analyzeitpolymerir

Analyzelt MVP – Traitement multivarié

Code produit 850800



Analyzelt MVP, qui incorpore la technologie du logiciel renommé de chimiométrie Pirouette® d'Infometrix pour l'analyse en composantes principales des données spectroscopiques, chromatographiques ou numériques,† offre à l'utilisateur les fonctions suivantes :

- Identifier des motifs et des interrelations cachées au sein des données expérimentales
- Explorer les corrélations entre les données pour répondre à des questions critiques de recherche, développement ou production
- Stocker les résultats pour référence, publication ou recherche ultérieure

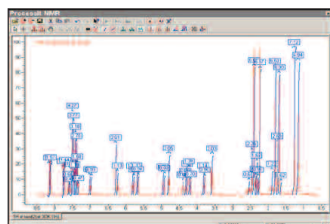
Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/analyzeitmvp

Fonctionnalités logicielles de KnowItAll

Applications et fonctionnalités optionnelles

ProcessIt™ NMR – Traitement des spectres RMN

Code produit 892600



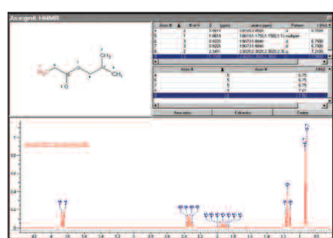
Cette fonctionnalité permet à l'utilisateur d'importer et de traiter des signaux ou des spectres RMN sous différents formats. On peut réaliser des traitements multi-étapes de spectres soit par étapes successives, soit en appliquant une macro-fonction permettant le traitement par lot.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/processitnmr

(Compris dans les éditions Analytical et Enterprise)

AssignIt™ NMR – Attribuer les spectres des bases de données RMN

Code produit 892700

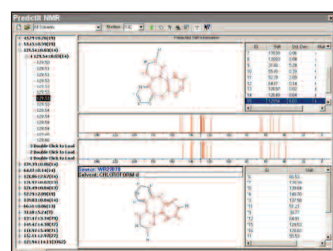


Grâce à cette fonctionnalité, on peut saisir rapidement les caractéristiques d'attribution des pics (déplacement, intensité, multiplicité, couplage) aux atomes des structures dans les bases de données de RMN du ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N , ^{17}O , ^{11}B , et ^{29}Si de KnowItAll.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/assignit

(Compris dans les éditions Analytical et Enterprise)

PredictIt™ NMR – Prédiction des spectres RMN

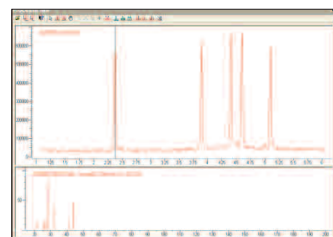


L'application PredictIt NMR permet la prédiction, basée sur les données, des spectres de RMN de ^1H , ^{13}C , et de bien d'autres noyaux. Les prédictions s'effectuent automatiquement lorsque l'utilisateur charge une structure dans l'application. KnowItAll examine les bases de données sous licence et de l'utilisateur qui disposent de structures attribuées dans la technique considérée. Celles-ci sont décomposées en sous-structures définies en couches de degré « n ». Une couche de degré « n » considère toutes les sous-structures présentant la même séquence atomique à une distance de « n » liaisons depuis l'atome sur lequel porte la prédiction.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/predictitnmr

(Compris dans les éditions Analytical et Enterprise)

ProcessIt MS – Traitement MS et MS couplée à des méthodes séparatives



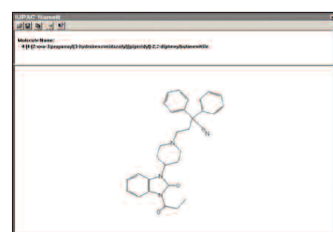
L'application ProcessIt MS permet d'importer et d'ouvrir des spectres GC/MS et LC/MS, de visualiser et sélectionner les scans MS qu'ils contiennent. Les utilisateurs peuvent ajouter les scans MS sélectionnés aux bases de données qu'ils ont constituées et sur lesquelles ils peuvent lancer des recherches. Cette application permet également de réaliser des moyennes et des soustractions spectrales.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/processitms

(Compris dans les éditions Spectroscopy, Analytical et Enterprise)

IUPAC NameIt™ & DrawIt – Attribution systématique de noms IUPAC aux structures & vice-versa

Code produit 854400



Les options IUPAC NameIt et IUPAC DrawIt de KnowItAll offrent la possibilité de nommer aisément des structures à partir des règles IUPAC, ou de générer une structure à partir du nom IUPAC. On saisit un nom ou on dessine une structure, on clique sur un bouton : le nom ou la structure correspondante sont automatiquement générés selon les règles du standard international. Outre le gain de temps, cette fonction assure la précision et la standardisation des données au sein du laboratoire.

Plus de détails et films de démo sur www.knowitall.com/iupac

Applications et fonctionnalités optionnelles

Logiciel Pirouette® d'Infometrix – Outils de chimiométrie pour la classification, l'exploration des données et plus

Les méthodes d'analyse multivariée, de classification et d'exploration des données, d'analyse des mélanges, de modélisation et de prédiction sont mises en œuvre dans le logiciel de chimiométrie d'Infometrix. L'interface, simple d'utilisation mais puissante, facilite l'interaction avec les données brutes ou traitées. L'importation des données s'effectue sans difficulté en raison de la prise en compte de nombreux instruments courants et formats d'échanges de fichiers. On peut créer des dizaines de sous-ensembles ou plus à partir d'un fichier de données unique. L'utilisateur peut ainsi expérimenter des scénarios d'hypothèses très différents sans avoir à collecter de données supplémentaires.

Plus de détails sur www.knowitall.com/pirouette

Tableau comparatif des éditions de KnowItAll

● - Inclus dans l'édition - Optionnel

Composant	Description	IR/NIR Edition	Spec Edition	Analytical Edition	Enterprise Edition	Raman Edition	UV-Vis Edition
Groupe données							
SearchIt™	Recherche dans les bases de données (spectre entier, pic, propriété, etc.)	●	●	●	●	●	●
Minelt™	Affichage et exploration des bases de données	●	●	●	●	●	●
Database Building	Création de bases de données multi-techniques † de spectres et structures ; fonctionnalité de Minelt		●	●			●
Overlap Density Heatmap	Cartographie thermique de densité de superposition » pour l'analyse visuelle des données	●	●	●	●	●	●
CompareIt™	Visualisation en graphique des données	●	●	●	●		●
AssignIt™	Attribution des pics des spectres RMN de ¹ H, ¹³ C, et autres noyaux			●	●		
Analyse de mélanges	Analyse des données spectrales expérimentales de mélanges	●	●	●	●	●	●
Calcul de propriétés par lot	Calcul de propriétés sur l'ensemble de la base de données	●	●	●	●		●
Prise en compte des modèles Pirouette®	Utilisation des modèles construits avec le logiciel Pirouette	●	●	●	●	●	●
Groupe traitement des spectres							
RefineIt™ IR	Traitement des spectres IR	●	●	●	●		
RefineIt™ Raman	Traitement des spectres Raman		●	●	●	●	
ProcessIt™ NMR	Traitement des spectres RMN			●	●		
ProcessIt™ MS	Traitement des spectres MS & MS par séparation		●	●	●		
Filtres d'importation MS supplémentaires	Filtres d'importation MS supplémentaires		●	●			
Groupe analyse spectrale							
AnalyzeIt™ IR	Corrélation spectre IR/structure						
AnalyzeIt™ Raman	Corrélation spectre Raman/structure						
AnalyzeIt™ MVP	Traitement multivarié pour la chimiométrie et l'analyse en composantes principales						
ValidateIt™	Validation statistique de modèles	●	●	●	●		●
AnalyzeIt™ Polymer IR	Corrélation spectre IR/structure des polymères						
Groupe prédiction							
PredictIt™ NMR	Prédiction de déplacements chimiques en RMN			●	●		
Groupe outils de base							
DrawIt™	Dessin 2-D de structures	●	●	●	●	●	●
ReportIt™	Outils pde création et publication de rapports personnalisés	●	●	●	●	●	●
3D ViewIt™	Visualisation des structures 3-D		●	●	●		●
BrowseIt™	Portail web offrant des liens utiles aux utilisateurs de KnowItAll	●	●	●	●	●	●
Groupe IUPAC							
IUPAC DrawIt™	Convertit des noms IUPAC en structures						
IUPAC NameIt™	Convertit des structures en nom IUPAC						
Autres options							
Bases de données spectrales	Choisissez parmi plus de 100 bases de données ou parmi les licences annuelles HavelItAll						
Serveur d'entreprise KnowItAll®	Serveur pour la centralisation des données spectrales et chimiques						
Logiciel Pirouette® d'Infometrix	Outils de chimiométrie supplémentaires						
Plan de mises-à-jour	Plan de mise à jour et d'assistance pour les utilisateurs de KnowItAll						

Formats de fichiers pris en compte dans KnowItAll

KnowItAll permet aux scientifiques de travailler avec des types de spectres et données multiples et de nombreux types d'instruments et formats de fichiers. Les formats disponibles dépendent de l'édition de KnowItAll sous licence.

IR

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

Raman

Sadtler IR (*.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 IR (*.irs, *.smf)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JEOL (*.wsf)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uud)
Données XY génériques (*.*)	JEOL JCAMP (*.wsf)	Thermo/Nicolet (*.spa)

NIR

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

NMR (spectres traités uniquement)

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 (2rr)	JEOL GX/GSX/EX-90 NMR (*.gxd, *.gxp)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uud)
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)
Données XY génériques (*.*)		

MS

Agilent / HP ChemStation (*.d; data.ms)	Données XY génériques (*.*)	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 SSX (*.dat)	MASPEC (*.mss)	Shimadzu QP-5000 (*.r)	
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	Mass Evolution (*.spe)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uud)	

UV-Vis

Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	PG Instruments (*.spd)
Données XY génériques (*.*)	JASCO (*.jws)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uud)

GC

ANDI Chromatography (*.cdf)	Données XY génériques (*.*)	Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uud)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	MS ChemStation (*.ms)	

Formats de fichiers de structures

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

Formats de fichiers de données

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

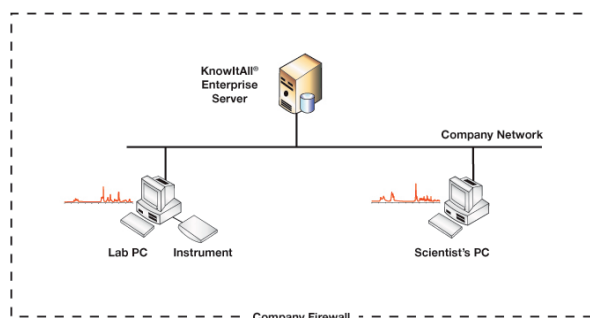
Solutions KnowItAll pour l'entreprise

Maximisez la productivité de vos laboratoires : centralisez l'accès à l'ensemble des spectres et chromatogrammes produits dans votre entreprise

Mettre en place un système de gestion des données à l'échelle de l'entreprise devient primordial dans l'environnement actuel, en raison du volume croissant des données produites et de la nécessité de les mettre à disposition de l'ensemble des acteurs. Bio-Rad Laboratories vous propose des solutions complètes pour centraliser, sécuriser et donner accès aux données du laboratoire isolé à l'ensemble de l'organisation.

SpecFinder™ – Trouvez vos données

Code produit 886200



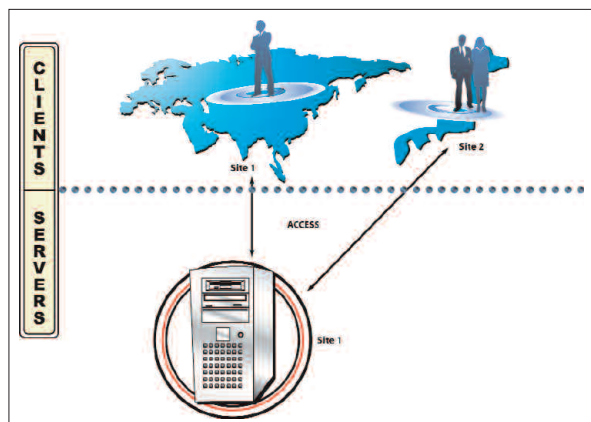
SpecFinder est une solution unique d'indexation de données de chimie analytique à l'échelle de l'entreprise. Elle est sûre, extensible, facile à déployer et à maintenir. Elle permet aux responsables et aux utilisateurs de trouver immédiatement les spectres, les chromatogrammes et même les structures chimiques, quel que soit leur emplacement sur les ordinateurs individuels, instruments ou disques réseaux.

Les employés autorisés peuvent effectuer des recherches sur l'index SpecFinder localisé sur le serveur d'entreprise KnowItAll en utilisant soit une interface de navigateur web compatible avec toute plateforme (KnowItAll AnyWare), soit l'interface pour Microsoft Windows (KnowItAll Informatics System).

Plus de détails sur www.knowitall.com/specfinder

KnowItAll Enterprise Server – Stockez vos données

Code produit 878000



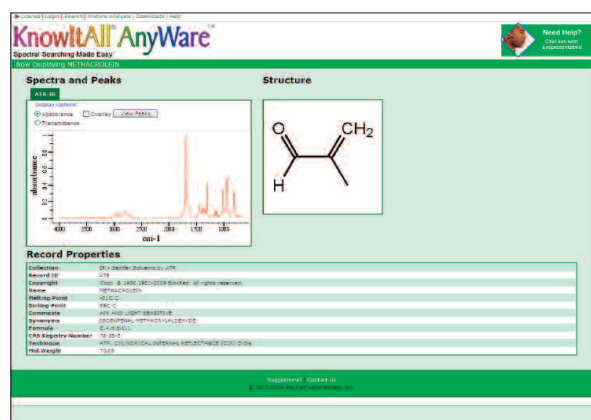
Le serveur d'entreprise KnowItAll est une plateforme technologique destinée à la création à l'échelle de l'entreprise d'une unité de stockage pour les données analytiques. Le système est rapide, fiable, sûr et extensible. Il requiert une assistance et une maintenance minimales et vous permet d'avoir accès à l'ensemble des spectres et chromatogrammes de votre établissement via une seule plateforme unifiée.

Les employés autorisés peuvent effectuer des recherches dans les bases de données localisées sur le serveur d'entreprise KnowItAll en utilisant soit une interface de navigateur web compatible avec toute plateforme (KnowItAll AnyWare), soit l'interface pour Microsoft Windows (KnowItAll Informatics System).

Plus de détails sur www.knowitall.com/enterpriseserver

KnowItAll AnyWare™ – Cherchez dans vos données

Code produit 877400



KnowItAll AnyWare dispose d'une interface de navigateur web pour rechercher des spectres, structures et propriétés chimiques associées stockées dans KnowItAll Enterprise Server. Aucune installation de logiciel n'est nécessaire, ce qui rend le déploiement particulièrement facile. Avec un serveur d'entreprise KnowItAll déployé derrière votre pare-feu, l'accès aux données devient sûr et sans danger. On peut utiliser KnowItAll anyware avec n'importe quel navigateur web, y compris Internet Explorer, Firefox, Safari ou Chrome.

Plus de détails sur www.knowitall.com/anyware

Informations sur les licences

Bio-Rad simplifie la procédure de licence de ses logiciels et bases de données. Les autorisations de licence des bases de données spectrales s'effectuent par des dongles USB. Les logiciels peuvent être placés sous licence par Internet ou par dongle USB.

Politique d'assistance et de mise à jour

Veillez visiter www.knowitall.com/supportpolicy

Options de formations

Si vous souhaitez obtenir une formation au-delà des ressources fournies (système d'aide en ligne, manuel PDF de l'utilisateur de KnowItAll, films de démonstration), nous serons heureux de vous présenter les options à votre disposition. Veuillez visiter www.knowitall.com/training

KnowItAll : configuration recommandée

Vous trouverez les dernières recommandations de configuration sur www.knowitall.com/minimum_system

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



**Bio-Rad
Laboratories, Inc.**

Informatics Division
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