

Espectroscopia



Bases de Datos & Software

BIO-RAD

Tabla de Contenido

Bases de Datos & Software para Espectroscopia	1
Bases de Datos Espectrales	2
Bases de Datos (Infrarrojo): ATR-IR	2
ATR de Polímeros Básicos	ATR de Polímeros
ATR de Medicamentos Controlados & de Prescripción	ATR de Disolventes
ATR de Compuestos Inorgánicos	ATR de Esteroides, Andrógenos, Progestinas & Estrógenos
ATR de Compuestos Organometálicos	
Bases de Datos IR (Infrarrojo): Polímeros & Compuestos Relacionados	2
Acrilatos & Metacrilatos	Polímeros Industriales Hummel, v.1
Adhesivos & Sellantes	Polímeros Industriales Hummel, v.2
Adhesivos & Sellantes (Subconjunto A)	Polímeros Industriales Hummel, v.3
Monómeros Básicos & Polímeros v.1 (Inalterado)	Polímeros Hummel/Sadtler
Monómeros Básicos & Polímeros v.2 (Inalterado)	Monómeros & Polímeros (Integral)
Compuestos para Revestimientos	Monómeros & Polímeros v.1 (Modificado)
Pirrolizados Controlados de Polímeros	Monómeros & Polímeros v.2 (Modificado)
Materiales para Usinas de Energía Eléctrica	Plastificantes
Resinas Epoxi, Agentes de Cura & Aditivos	Aditivos de Polímeros
Retardantes de Llama (Pirorretardantes)	Compuestos Poliméricos
Polímeros Definidos Hummel	Materiales de Protección
Polímeros Definidos Hummel, Colección Básica	Gomas químicas
Polímeros Industriales Hummel, v.1-3	Reactivos para Procesamiento de Polímeros Sadtler/Scholl
Bases de Datos (Infrarrojo): Compuestos Orgánicos Puros	5
Alcoholes y Fenoles	Merck/Sadtler
Aldehídos	Ácidos Nucleicos, Nucleósido & Nucleótidos
Aminoácidos & Péptidos	Organometálicos, Inorgánicos, Silanos, Boranos, & Compuestos Deuterados
Anhídridos & Lactonas	Compuestos de Fósforo
Ácidos Carboxílicos	Base de Datos de Referencia Q-Sadtler
Padrones de Infrarrojo en Fase Condensada (Integral)	Base de Datos de Referencia IR (Seleccionados)
Colorantes, Alcinos & Aso derivados	Padrones Seleccionados
Ésteres	Compuestos Seleccionados en Fase Vapor
Materiales Explosivos	Disolventes (Individuales)
Gases & Vapores	Disolventes en Fase Vapor
Hidrocarburos	Bases de Datos de Partida
Hidrocarburos & Compuestos Halógenos	Base de Datos de Esteroides
Reactivos Industriales, FT-IR de Compuestos Orgánicos Puros	Azúcares & Carbohidratos
Reactivos Industriales, FT-IR de Compuestos Orgánicos Básicos	Compuestos de Azufre
Intermediarios (Individuales)	Padrones Universitarios
Cetonas	Padrones IR em Fase Vapor (Integral)
Bases de Datos (Infrarrojo): Compuestos Industriales	8
Surfactantes Básicos (Inalterado)	Compuestos Químicos do Petróleo
Gorduras, Ceras, & Derivados	Poliolios
Surfactantes Hummel	Disolventes (Calidad Industrial)
Intermediarios (Calidad Industrial)	Surfactantes (Integral)
Lubrificantes	Surfactantes v.1 (Modificado)
Aditivos de Lubrificantes	Surfactantes v.2 (Modificado)
Bases de Datos (Infrarrojo): Ciencia Forense	9
Tintas Automovilísticas (<i>Automobile Paint Chips</i>)	Aromatizantes & Fragancias (<i>IR en Fase Vapor</i>)
Compuestos Bioquímicos	Aditivos de Alimentos
Ciencia Forense Canadiense	Laboratorio de Criminalística del Estado da Geórgia
Drogas de Abuso más Comunes (Ácido/Base)	Excipientes Farmacéuticos
Colorantes	Fármacos
Colorantes, Pigmentos & Manchas	Drogas Manipuladas & de Prescripción (Ácido/Base)
Fibras & Compuestos Textiles	Esteroides
Fibras por Microscopia	Esteroides, Andrógenos, Progestinas & Estrógenos
Aromatizantes, Fragancias & Aceites	
Bases de Datos (Infrarrojo): Aplicaciones Ambientales	11
Base de Datos HAZMAT	Contaminantes prioritarios
Pesticidas & Reactivos de Uso Agrícola	Sadtler EPA en Fase Vapor
Contaminantes (IR em Fase Vapor)	Reactivos para Tratamiento de Aguas

Bases de Datos (Infrarrojo): Inorgánicos & Organometálicos	11
Compuestos Inorgánicos	Minerales & Arcillas
Compuestos Inorgánicos (Subconjunto A)	Compuestos Organometálicos
Bases de Datos Raman	12
Raman de Monómeros Básicos & Polímeros (Inalterado)	Raman de compuestos Inorgánicos
Base de Datos NIR (Infrarrojo Cercano)	12
Colección de Espectros NIR (Infrarrojo Cercano) de Compuestos Orgánicos Comunes	
Bases de Datos de NMR (Resonancia Nuclear Magnética)	12
Base de Datos de NMR de Metabolitos	
¹³ CNMR de Monómeros & Polímeros	
Bases de Datos Adicionales	12
Licencia Anual para las Bases de Datos HaveltAll®	13
HaveltAll IR	HaveltAll XNMR
HaveltAll Raman	HaveltAll MS
HaveltAll NMR	HaveltAll UV-Vis
Software KnowItAll®	14
Ediciones del Software KnowItAll®	15
Edición KnowItAll IR/NIR	Edición KnowItAll Enterprise
Edición KnowItAll Spectroscopy	Edición KnowItAll Raman
Edición KnowItAll Analytical	Edición KnowItAll UV-Vis
Recursos del Software KnowItAll®	16
SearchIt™	Analyzelt Polymer IR
Spectral Mixture Analysis	Analyzelt MVP
Overlap Density Heatmaps	ProcessIt™ NMR
DrawIt™	AssignIt™ NMR
ReportIt™	PredictIt™ NMR
Database Building Option	ProcessIt MS
Analyzelt™ IR	IUPAC NameIt™ & DrawIt
Analyzelt Raman	Infometrix' Pirouette® Software
Tabla Comparativa de los Recursos de las Ediciones KnowItAll®	20
Formato de los Archivos KnowItAll®	21
Soluciones KnowItAll Enterprise®	22
KnowItAll SpecFinder™	
KnowItAll Enterprise Server	
KnowItAll AnyWare™	
Informaciones Adicionales	23
Informaciones sobre el Licenciamiento	
Política de Soporte & Actualización	
Opciones de Entrenamiento	
Recomendaciones para el uso del Sistema KnowItAll	

www.knowitall.com/literature

Bases de Datos & Software para Espectroscopia

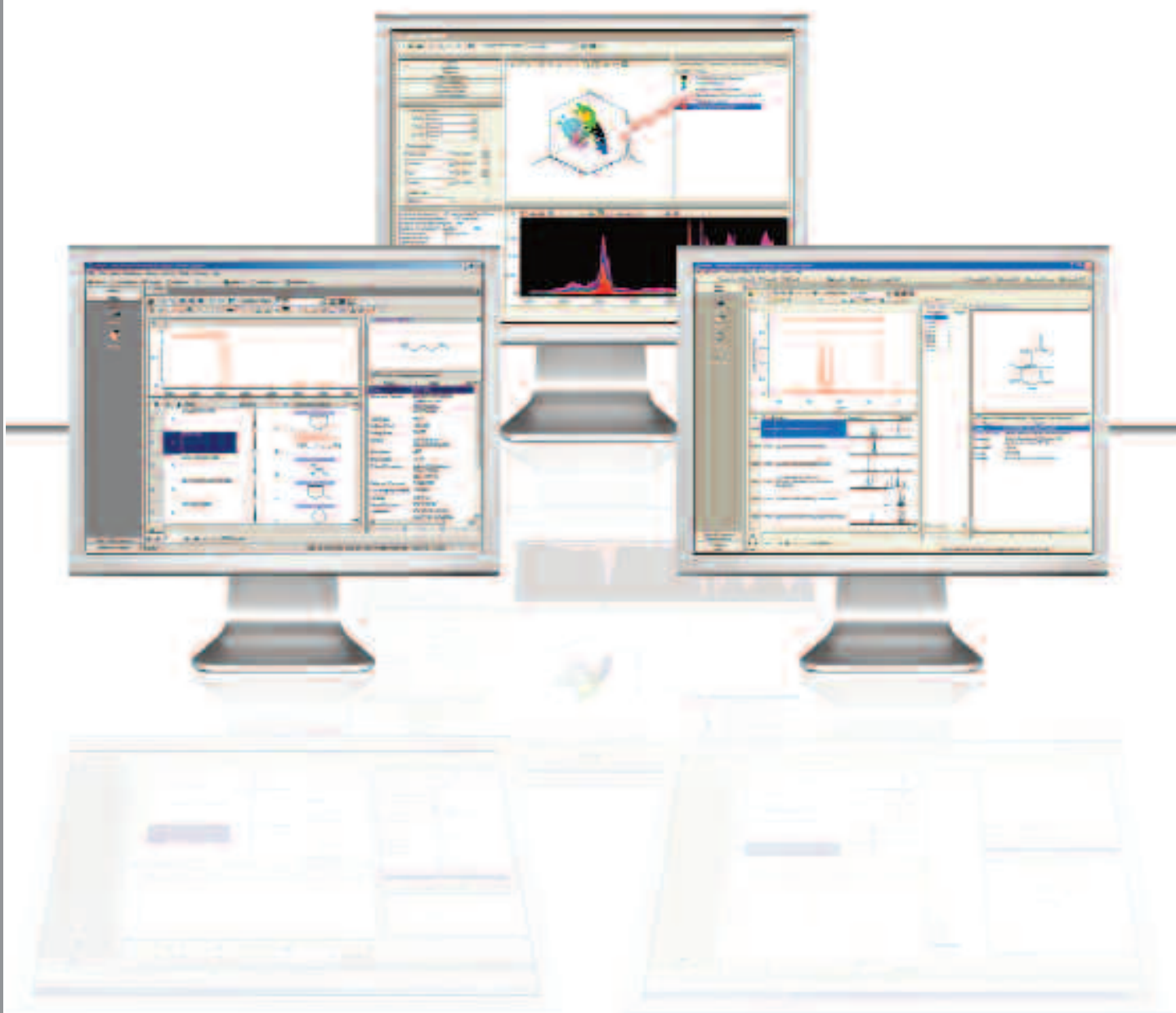
La División de Informática de la Bio-Rad se ha especializado en bancos de datos y soluciones de software para la comunidad científica.

Bases de Datos Espectrales – Más de 1,3 Millones de Espectros, Incluyendo los Datos Sadtler

La Bio-Rad es la principal productora y editora de bancos de datos espectrales rigurosamente examinados, con una colección que posee datos IR, Raman, NIR, NMR, MS e UV-Vis, abarcando una amplia gama de compuestos puros y productos comerciales.

Software KnowItAll®

La Bio-Rad también se ha especializado en software para desktop y en soluciones empresariales para auxiliar los científicos a gerenciar y analizar *múltiplos* tipos de datos espectrales y datos químicos en *múltiplos* formatos de archivos e instrumentos.



La Bio-Rad ofrece cerca de 1,3 millones de espectros IR, NMR, MS, UV-Vis, Raman e NIR de alta calidad (incluso los datos Sadtler). Las colecciones de espectros abarcan compuestos puros y una gama muy grande de compuestos comerciales. Son ideales para la interpretación, identificación, verificación y clasificación de espectros. Elija usar bases de datos individuales o licencias anuales HavelItAll.

Bases de Datos IR (Infrarrojo): ATR - IR

 Contiene estructuras

ATR de Polímeros Básicos

Código del Producto 448500 500 espectros

Colección de espectros FT-IR de referencia de monómeros, polímeros y precursores disponibles comercialmente.

ATR de Medicamentos Controlados & de Prescripción

Código del Producto 447900 1.160 espectros

Este banco de datos contiene espectros ATR-IR de medicamentos controlados y de prescripción obligatoria, como esteroides que pueden ser de interés para los laboratorios forenses o para cualquier científico que haga el análisis de muestras de medicamentos.

ATR de Compuestos Inorgánicos

Código del Producto 448600 260 espectros

Banco de datos ATR con espectros de compuestos inorgánicos. Los espectros son representativos de varios aniones e iones poliatómicos comunes en materiales inorgánicos y son clasificados de acuerdo con el anión o con el ión poliatómico, siguiendo los grupos de la tabla periódica.

ATR de Compuestos Organometálicos

Código del Producto 448700 170 espectros

Base de datos ATR compilados específicamente para científicos interesados en la química organometálica. Las muestras fueron solicitadas de acuerdo con los intereses industriales y a instituciones académicas y de investigación, en la tentativa de seleccionar compuestos de intereses comunes.

ATR de Polímeros

Código del Producto 410700 2.390 espectros

Colección de espectros FT-IR de referencia de monómeros, polímeros y precursores disponibles comercialmente. Contiene espectros usados en películas fotográficas, revestimientos, acabamientos y laminados.

ATR de Disolventes

Código del Producto 436100 620 espectros

Base de datos que contiene espectros ATR FT-IR de referencia de disolventes comunes, utilizando la técnica padrón de reflectancia total atenuada.

ATR de Esteroides, Andrógenos, Progestágenos & Estrógenos

Código del Producto 447800 300 espectros

El banco de datos, elaborado por la Investigación Espectral Forense (*Forensic Spectral Research*), contiene esteroides, andrógenos, progestágenos y estrógenos útiles a la ciencia forense, fármacos, medicamentos y otras aplicaciones.

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Polímeros & Compuestos Relacionados

 Contiene estructuras

Acrilatos & Metacrilatos

Código del Producto 447600 470 espectros

Esta base de datos contiene espectros de compuestos acrílicos e metacrílicos. Incluye varios compuestos poliméricos e monoméricos que son usados en muchos productos comunes.

Adhesivos & Selladores


Código del Producto 433000 2.070 espectros

Esta colección encierra una vasta gama de resinas sintéticas básicas y elastómeras, además de productos comerciales finales curados y no curados. Los productos típicos son compuestos por gomas adhesivas, adhesivos de contacto, adhesivos para pegamiento caliente, adhesivos de silicones, adhesivos sensibles a la presión, cementos y selladores.

Adhesivos & Selladores (Subconjunto A)

Código del Producto 423000 520 espectros

La base de datos contiene adhesivos y selladores en once clasificaciones, generalmente establecidas a partir de adhesivos industriales. La colección incluye resinas sintéticas básicas, elastómeros, materiales no curados y productos comerciales finales curados.

Base de Datos de Monómeros & Polímeros Básicos v.1 (Inalterado)  Código del Producto 421900 1.490 espectros

Colección de productos seleccionados, que proporcionan una buena base para solucionar problemas analíticos que envuelvan polímeros y plásticos. Esta colección incluye muchos compuestos clásicos, lo que la hace particularmente útil como referencia.

Base de Datos de Monómeros & Polímeros Básicos v.2 (Inalterado)  Código del Producto 422500 850 espectros

Colección de productos seleccionados, que proporcionan una buena base para solucionar problemas analíticos que envuelvan polímeros y plásticos. Esta base de datos ofrece espectros adicionales y puede ser usada junto con el volumen 1 para crear una colección más amplia de compuestos poliméricos básicos.

Compuestos para Revestimientos Código del Producto 421300 720 espectros

Colección concebida para ofrecer una conveniente y práctica fuente de referencia de información para los químicos y tecnólogos en la industria de revestimientos. La base de datos se divide en dos partes: Parte I - Resinas y Parte II - Monómeros, Precursores y Aditivos. Los compuestos son agrupados por la clasificación de los revestimientos y organizados dentro de cada grupo por la clase química correspondiente.

Pirolizados Controlados de Polímeros Código del Producto 434000 2.970 espectros

Esta base de datos contiene espectros de polímeros que sufrieron pirólisis a una cierta temperatura constante. Fue proyectada para auxiliar en la identificación de los principales tipos de polímeros.

Materiales para Usinas de Energía Eléctrica Código del Producto 427000 1.070 espectros

Esta base de datos contiene espectros de productos comerciales, como precintas, elastómeros, polímeros, lubricantes y materiales correlatos utilizados en plantas industriales.

Resinas Epoxi, Agentes de Cura & Aditivos Código del Producto 436300 700 espectros

Base de datos de espectros FT-IR de materias primas utilizadas en la producción de materiales termoestables, tales como materiales compuestos, placas de circuito impreso empaquetamiento electrónico, así como de materiales usados en tintas, selladores, adhesivos, y una amplia gama de revestimientos de superficie.

Retardantes de Llama (Pirorretardantes) Código del Producto 420400 590 espectros

Base de datos en infrarrojo, con espectros de retardantes de llama reactivos y no reactivos disponibles comercialmente.

Polímeros Definidos Hummel  Código del Producto 465500 2.330 espectros

Base de datos de *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. El *Atlas de Polímeros y Análisis de Plásticos* del Profesor Dieter O. Hummel, Volumen 1, Lista 1, es muy conocido y usado en todo el mundo. Contiene espectros de polímeros, copolímeros y aditivos de polímeros, siendo que puede ser usado para control de calidad, caracterización, o elucidación de estructuras.

Polímeros Definidos Hummel, Colección Básica  Código del Producto 465600 1.040 espectros

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Este es un subconjunto del banco de datos Polímeros Definidos Hummel que trae polímeros, copolímeros y aditivos de polímeros.

Polímeros Industriales Hummel, v.1-3  Código del Producto 465100 5.000 espectros

Base de datos de *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Una coleção de espectros FT-IR de polímeros revisados individualmente pelo Professor Dieter O. Hummel. Estes compostos são largamente usados na indústria e foram coletados diretamente dos fabricantes ou de laboratórios de pesquisa responsáveis por seus desenvolvimentos.

Polímeros Industriales Hummel v.1  Código del Producto 465200 1.910 espectros

Base de datos de *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Colección de polímeros naturales y construidos sintéticamente, fibras naturales y sintéticas, elastómeros, resinas variadas como las resinas naturales, resinas de impregnación y fundición, tintas de dispersión, moldeado e impresión, aceites, grasas, ceras, alquitrán, compuestos inorgánicos, adhesivos, masas para calafatear, cementos, coloides protectores, agentes de cura, iniciadores e activadores, aceleradores y modificadores.

Bases de Datos Espectrales

Polímeros Industriales Hummel v.2

Código del Producto 465300 1.560 espectros

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Una de las mayores colecciones de monómeros usados en procesos de polimerización disponibles comercialmente en el mundo. Incluye las siguientes clases de monómeros: monómeros de vinilo, pirolizados, alcoholes, fenoles, ácidos carboxílicos y sus sales, ésteres, anhídridos, amidas, hidrazidas, uretanos, cianatos, fulminatos, heterocíclicos, aminoácidos y ácidos tiocarboxílicos, sulfonamidas, disolventes técnicos, y mucho más.

Polímeros Industriales Hummel v.3

Código del Producto 465400 1.520 espectros

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Esta base de datos mejorada de FT-IR de aditivos de polímeros y auxiliares del Profesor Hummel, provee una fuente de referencia muy amplia para químicos de polímeros y tecnólogos. Incluye las siguientes clases: antioxidantes, estabilizadores (incluyendo el estabilizador de PVC), estabilizador de luz, agentes colorantes, agentes de clarificación, cargas (rellenos), plastificantes, elastificantes, extensores, agentes de procesamiento, auxiliares textiles, agentes de vulcanización y auxiliares de gomas.

Polímeros Hummel/Sadtler

Código del Producto 422200 1.920 espectros

Esta base de datos es el producto del esfuerzo de cooperación entre el profesor Dieter Hummel, de la Universidad de Cologne y la Bio-Rad. Incluye una amplia gama de polímeros, copolímeros y aditivos de polímeros.

Monómeros & Polímeros (Integral)

Código del Producto 321900 11.270 espectros

La mayor colección, comercialmente disponible en el mundo, de espectros de infrarrojo de monómeros, polímeros, catalizadores, agentes de cura, antioxidantes, estabilizantes, modificadores y otros aditivos usados en procesos de polimerización. Los polímeros incluyen hidrocarburos alifáticos, poliésteres, poliamidas, polímeros sulfonados, silicones, resinas epoxi, polímeros de vinilo y de vinilideno, derivados de la celulosa y polímeros metacrílicos, polímeros de vinilo heterocíclicos y grasas polimerizadas. Incluye, también, varios monómeros.

Monómeros & Polímeros v.1 (Modificado)

Código del Producto 422000 1.790 espectros

Esta colección contiene productos comerciales, incluyendo aditivos seleccionados para dar una base amplia para la solución de problemas analíticos de polímeros y plásticos. Las clasificaciones de los productos incluyen polietilenos, polipropilenos, poliestirenos, polibutadienos, poliéteres, poliacrílicos, poliésteres y polivinilpiridinas. Incluye muchos compuestos clásicos, lo que hace con que se vuelva particularmente útil como referencia. (Los compuestos fueron seleccionados y analizados por Richard A. Nyquist.). Los espectros están organizados en cuarenta y nueve clases de productos químicos y fueron puestos en orden creciente de complejidad química dentro de cada clase.

Monómeros & Polímeros v.2 (Modificado)

Código del Producto 422300 1.700 espectros

La Bio-Rad compiló una colección de monómeros, polímeros y precursores. Las aplicaciones analíticas incluyen la identificación, control de calidad, estudios de deterioración, selección de materiales, además de otras aplicaciones como enseñanza en clases. Este banco de datos contiene espectros de productos comerciales y da una base amplia para la solución de problemas analíticos en el área del análisis de polímeros y plásticos. Las clasificaciones de los productos incluyen polietilenos, polipropilenos, poliestirenos, polibutadienos, poliéteres, poliacrílicos, poliésteres y polivinilpiridinas. (Los compuestos fueron escogidos y revisados por Richard A. Nyquist.). En esta base de datos son presentadas cuarenta y seis clases de monómeros y polímeros.

Plastificantes

Código del Producto 433700 1.480 espectros

Esta base de datos contiene una amplia gama de plastificantes disponibles comercialmente, que son usados en el tratamiento y composición de polímeros. Una relación parcial, de las clases de los compuestos que aparecen en la colección, incluye formoles, hidrocarburos, lactamas, melitatos, nitrilas, fenoxis y poliésteres; que se derivan de ácidos como el abiótico, adípico, benzóico, caprílico, cítrico, fumárico, isoftálico, láurico, maleico, oleico, palmítico, ftálico, sebácico, esteárico, succínico y tartárico; y derivados de compuestos, que incluyen las bifenilas, resinas epóxi, éteres, etilendiamina, glicerol, glicol y parafina.

Aditivos de Polímeros

Código del Producto 424800 1.740 espectros

La Bio-Rad compiló una colección de referencia de espectros infrarrojo de los aditivos de polímeros para fornecer una fuente conveniente y práctica de referencia y de información para químicos de polímeros e tecnólogos.

Compuestos Poliméricos

Código del Producto 439900 470 espectros

Esta base de datos contiene polímeros básicos generalmente encontrados en la industria y en la academia. Incluye la construcción de polímeros, elastómeros, resinas diversas, alquitranes, compuestos inorgánicos, agentes de cura, iniciadores y activadores, aceleradores y modificadores.

Materiales de Protección

Código del Producto 447500 770 espectros

Esta base de datos infrarrojo de aditivos de polímeros incluye revestimientos, inhibidores, estabilizadores, antioxidantes, agentes antiestáticos y conservantes.

Compuestos Químicos de Gomas

Código del Producto 424300

580 espectros

La base de datos contiene los espectros de infrarrojo de productos químicos de gomas, agrupados por función principal. Incluye una amplia gama de clases de productos químicos empleados en la industria de gomas, incluyendo aceleradores, activadores, retardantes, vulcanizadores, antioxidantes, plastificantes y estabilizadores.

Reactivos para procesamiento de polímeros Sadtler/Scholl

Código del Producto 423200

1.150 espectros

La colección incluye reactivos para el procesamiento de polímeros, como plastificantes, cargas inorgánicas y pigmentos, pigmentos orgánicos, estabilizadores de UV, agentes blanqueadores fluorescentes, antioxidantes, estabilizantes, agentes antiestáticos, biocidas, retardadores de llama, aceleradores, agentes de cura y activadores, adyuvantes de procesamiento y disolventes. El banco de datos surgió, por primera vez, como el volumen tres del *Atlas de Polímeros Hummel/ Scholl*, basado en datos inicialmente elaborados por el Dr. Friedrich Scholl.

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Compuestos Orgánicos Puros

 Contiene estructuras

Alcoholes & Fenoles

Código del Producto 438100

1.920 espectros

Esta base de datos contém espectros de álcoois e compostos fenólicos usados como solventes e na síntese de outros compostos.

Aldehídos

Código del Producto 438200

690 espectros

Esta base de datos de aldeídos fornece acesso a compostos essenciais para as indústrias de perfumes e flavorizantes, bem como para a fabricação de intermediários de fármacos e aditivos plásticos.

Aminoácidos & Péptidos

Código del Producto 438300

790 espectros

Esta base de datos contiene espectros de aminoácidos, péptidos y compuestos con unidades de aminoácido. Esta colección de sustancias con importancia biológica permite que los usuarios pesquisen compuestos que contengan esos blocs de construcciones esenciales.

Anhídridos & Lactonas

Código del Producto 438400

320 espectros

Base de datos de espectros infrarrojos compilada para presentar compuestos que tienen estos compuestos orgánicos.

Ácidos Carboxílicos

Código del Producto 438500

1.520 espectros

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos ácidos ampliamente utilizados en la síntesis de otros compuestos.

Padrones de Infrarrojo en Fase Condensada (*Integral*)

Código del Producto 320100

75.570 espectros

Integral banco de datos de espectros infrarrojos de referencia para compuestos orgánicos. Incluye espectros de compuestos alifáticos, aromáticos, alicíclicos y compuestos heterocíclicos simples y espectros de numerosos materiales de mayor complejidad. Incluyen, también, varias series de compuestos homólogos, desde los más simples hasta los muy complejos, permitiendo estudios espectroscópicos de tendencias que envuelvan homólogos.

Colorantes, Alcinos & Azoderivados

Código del Producto 438600

940 espectros

Esta base de datos contiene espectros de colorantes, alcinos y azoderivados. Proporciona una referencia de compuestos colorantes puros para la industria de colorantes o de tintas.

Ésteres

Código del Producto 438700

1.800 espectros

Este banco de datos contiene espectros infrarrojos de ésteres. Los compuestos son largamente utilizados en la industria de perfumería, pero sus aplicaciones son muy amplias y difundidas.

Materiales Explosivos

Código del Producto 438800

720 espectros

Este banco de datos contiene compuestos que pueden ser considerados explosivos o componentes de explosivos. El banco de datos incluye compuestos mencionados en la "Tabla de materiales explosivos 2002", producida por el Escritorio del Alcohol, Tabaco y Armas de Fuego. También incluye explosivos de asida (azotito), mezcla explosiva de nitratos, picratos explosivos, peróxidos y percloratos.

Bases de Datos Espectrales

Gases & Vapores **Código del Producto 420500** **150 espectros**

Los espectros en esta base de datos incluyen los gases permanentes, así como los vapores de líquidos volátiles que son frecuentemente encontrados en laboratorios y en plantas de procesamiento. Muchos de los compuestos incluso son útiles como referencias en análisis de contaminantes atmosféricos relacionados a la legislación y a los padrones actuales de calidad del aire, incluyendo el *National Ambient Air Quality Standards Act* y el *Occupational Safety and Health Standards Act*. El banco de datos contiene las siguientes clases de productos químicos: hidrocarburos, aldehídos, freones, compuestos de nitrógeno y compuestos de azufre.

Hidrocarburos **Código del Producto 439000** **1.060 espectros**

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de hidrocarburos y ofrece una referencia adecuada para los científicos.

Hidrocarburos e Hidrocarburos Halogenados **Código del Producto 439100** **1.880 espectros**

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de hidrocarburos e hidrocarburos halogenados.

Reactivos Industriales, FT-IR de Compuestos Orgánicos Puros **Código del Producto 465800** **20.310 espectros**

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. Colección espectral FT-IR de compuestos orgánicos usados como productos químicos industriales.

Reactivos Industriales, FT-IR de Compuestos Orgánicos Básicos **Código del Producto 465900** **1.000 espectros**

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. La colección contiene espectros de compuestos orgánicos comunes elegidos a dedo a partir de la colección de espectros FT-IR de Compuestos Orgánicos de la *Chemical Concept*.

Intermediarios (Individuales) **Código del Producto 422900** **490 espectros**

Este banco de datos contiene espectros infrarrojos de los productos químicos que son intermediarios en la fabricación de otros productos finales organizados en diecisiete clases principales de compuestos. Incluye ácidos, alcoholes, aldehídos, aminas, nitrilos, sulfuros, cetonas, hidrocarburos aromáticos etc.

Cetonas **Código del Producto 439200** **1.810 espectros**

Este banco de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos cetónicos que pueden ser usados para la identificación, clasificación y comprobación de estos materiales.

Merck/Sadtler **Código del Producto 424500** **2,940 espectros**

Este banco de datos fue elaborado a partir de la colección de espectros FT-IR utilizados en el Atlas Merck de FT-IR de sustancias puras del programa Merck-Schuchardt.

Ácidos Nucleicos, Nucleósidos & Nucleótidos **Código del Producto 439300** **1.450 espectros**

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos nucleicos. Esta colección de compuestos puede ser usada para la identificación, clasificación y comprobación de estos materiales y fue ha sido compilada por los que están pesquisando procesos moleculares.

Organometálicos, Inorgánicos, Silanos, Boranos & Compuestos Deuterados **Código del Producto 439400** **1.140 espectros**

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos fue compilada especialmente para presentar compuestos que poseen boro, silicio y deuterio, así como compuestos organometálicos e inorgánicos

Compuestos de Fósforo **Código del Producto 439500** **1.110 espectros**

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos de fósforo y puede ser usada para la identificación, clasificación y comprobación de estos materiales.

Base de Datos de Referencia Q-Sadtler Código del Producto 426000 10.000 espectros

Base de datos amplia de productos orgánicos puros comúnmente encontrados tanto en laboratorios académicos como industriales, cubriendo una amplia gama de clases de productos químicos proveniente de fuentes comercialmente disponibles. Es comúnmente usada en química orgánica y en otros cursos universitarios para establecer la identidad química a través de la comparación de los grupos funcionales. Esta base de datos también puede ser usada como referencia en laboratorios industriales para identificar compuestos orgánicos utilizando espectroscopia de infrarrojo.

Base de Datos de Referencia de IR (Seleccionados) Código del Producto 400000 2.500 espectros

Esta base de datos contiene espectros de productos químicos orgánicos puros, que pueden ser usados para identificar y clasificar muestras puras y, también, pueden servir como referencia cuando colecciones más completas no estén disponibles.

Padrones Seleccionados Código del Producto 420200 2.490 espectros

Esta base de datos contiene espectros una amplia gama de compuestos puros, desde los más simples a los más complejos. Fue proyectada para ser una pequeña y conveniente colección de espectros infrarrojos de compuestos orgánicos, para ser usada en situaciones donde colecciones más completas no estén disponibles.

Compuestos Seleccionados en Fase Vapor Código del Producto 422800 500 espectros

Base de datos IR con espectros en fase vapor para complementar los datos de Nyquist descritos en *The Interpretation of Vapor Phase Infrared Spectra - Group Frequency Data*. Provee una colección básica de compuestos analizados usando la técnica de fase de vapor

Disolventes (Individuales) Código del Producto 436000 630 espectros

Esta base de datos contiene espectros FT-IR de referencia para los disolventes más comunes, para auxiliar en la identificación y análisis de estos disolventes. Es una colección amplia, que puede ser usada en todos los laboratorios de investigación.

Disolventes en Fase Vapor Código del Producto 436200 620 espectros

Banco de datos que contiene espectros FT-IR de referencia de disolventes comunes. Los espectroscopistas que identifican compuestos en estado de vapor usando separaciones por cromatografía en fase gaseosa encontrarán este banco de datos muy útil, pues presenta espectros de alta calidad para la evaluación e interpretación de espectros infrarrojo en fase vapor.

Bases de Datos de Partida Código del Producto 405000 11.800 espectros

La base de datos de partida Sadtler es una colección de espectros de infrarrojo de referencia, que incluye reactivos químicos orgánicos y monómeros y compuestos poliméricos con nombres comerciales.

Base de Datos de Esteroides Código del Producto 439600 860 espectros

Esta base de datos de espectros infrarrojos fue elaborada en especial para presentar compuestos que tienen compuestos esteroides.

Azúcares & Carbohidratos Código del Producto 439700 570 espectros

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de azúcares y de carbohidratos y es útil para la identificación, clasificación y comprobación de esos materiales. Hidratos de carbono poseen una vasta gama de azúcares, almidones y fibras.

Compuestos de Azufre Código del Producto 439800 1.090 espectros

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos de azufre y es útil para la identificación, clasificación y comprobación de esos materiales.

Padrones Universitarios Código del Producto 420100 300 espectros

Esta base de datos provee una pequeña y útil colección de espectros infrarrojos de compuestos orgánicos relevantes para los cursos universitarios introductorios a la química orgánica y para los cursos complementares de laboratorio de química orgánica experimental y análisis orgánico cualitativo. Están organizados por clase de productos químicos.

Padrões de IV em Fase Vapor (Integral) Código del Producto 320300 9.190 espectros

La colección incluye espectros IR en fase vapor de compuestos orgánicos puros comunes y es útil en la identificación de compuestos desconocidos por GC-IR, TGA-IR, u otros métodos de análisis en fase vapor. Los compuestos son extremadamente concernientes para la identificación de contaminantes y toxicológicos.

Bases de Datos Espectrales

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Compuestos Industriales

Surfactantes Básicos (Inalterado) Código del Producto 436700 850 espectros

Esta colección proporciona a los científicos que trabajan con agentes de superficie activa, un banco de datos de referencia de compuestos representativos. Contiene espectros de FT-IR de compuestos aniónicos, catiónicos y no aniónicos.

Grasas, Ceras & Derivados Código del Producto 432500 1.800 espectros

Entre los compuestos de este banco de datos se incluyen aceites y grasas de origen animal, ceras, también de origen animal (bruta y refinada), ácidos grasos (excepto triglicéridos), amidas y aminas grasas, materiales no saponificables, otros derivados grasos, aceites y grasas del mar, ceras minerales (bruta y refinada), ceras minerales modificadas, ceras vegetales modificadas, ceras sintéticas, jabones, aceites y grasas vegetales y ceras vegetales (bruta y refinada).

Surfactantes Hummel Código del Producto 465700 1.030 espectros

Base de datos de la Chemical Concepts, una División de la Wiley. Este banco de datos contiene espectros surfactantes compilados por el Profesor Dieter O. Hummel. Con la finalidad de presentar una base comprensible de datos de compuestos, para aquellos que utilizan surfactantes, fueron usados muestras de investigación y surfactantes industriales para crear estos datos.

Intermediarios (Calidad Industrial) Código del Producto 432900 830 espectros

Base de datos IR con espectros de sustancias químicas disponibles comercialmente y utilizadas como precursoras para productos finales, incluyendo ácidos alcoholes, aldehídos, aminas, cetonas, nitrilos, sulfuros e hidrocarburos aromáticos. Estos compuestos son utilizados en la fabricación de productos manufacturados, como fármacos, surfactantes, colorantes, plastificantes y otras especialidades químicas.

Lubrificantes Código del Producto 421700 880 espectros

Este banco de datos contiene espectros infrarrojos de compuestos disponibles comercialmente y usados en una gran variedad de aplicaciones industriales y automotor que ejecutan esas funciones, tal como grasas, fluidos hidráulicos, aceites para corte, aceites de motor y jabones metálicos. Están incluidos, también, los productos que se originan del petróleo y lubricantes sintéticos, como los clorofluorcarbonos (CFCs), ésteres de ácidos carboxílicos dibásicos, polímeros lubricantes, ésteres de fosfato y siliconas.

Aditivos de Lubrificantes Código del Producto 425500 1.570 espectros

Una colección de aditivos utilizados en aceites de motor, transmisión y fluidos hidráulicos, aceites de transmisión, aceites industriales, aceites para el trabajo con metales y aceites de proceso. Son utilizados en los sectores automotores, naval, aeronáutico i en las industrias de petróleo, así como en toda industria que hace uso de maquinaria. Los espectros fueron corridos de manera a compensar la naturaleza de los compuestos.

Compuestos Químicos del Petróleo Código del Producto 420800 320 espectros

Estos espectros fueron elegidos a partir de compuestos que se derivan del petróleo, disponibles comercialmente, muchos de los cuales son usados para modificar y mejorar gasolinas, aceites combustibles, lubricantes y otros productos. Algunas de las más de 20 clases representadas en este banco de datos incluyen antiácidos, antidetonantes, antioxidantes, catalizadores, dispersantes, gomas inhibidoras, gomas disolventes, compuestos de control de ignición, preventivo para el herrumbre, beneficiadores de viscosidad etc.

Poliolés Código del Producto 422600 270 espectros

Esta base de datos contiene espectros infrarrojos de poliols disponibles comercialmente. Incluye los poliols, poliglicoles, glicerolés, carbohidratos, almidones, mono-, di- y polisacáridos usados como lubricantes, ante polímeros e intermediarios en la fabricación de reactivos y muchos otros productos industriales.

Disolventes (Calidad Industrial) Código del Producto 432700 910 espectros

Esta base de datos ofrece una práctica y conveniente referencia que ayuda en la identificación y análisis de disolventes industriales comunes. Los disolventes son clasificados en cuatro grandes grupos: hidrocarburos, compuestos con un solo tipo de átomo o grupo funcional característico, compuestos con más de un tipo de átomos o grupo funcional característico y compuestos deuterados.

Surfactantes (Integral) Código del Producto 323500 0.000 espectros

La mayor colección disponible comercialmente de espectros infrarrojo de detergentes, emulsionantes, antiespumantes, emolientes, agentes quelante, jabones, desenvolvimiento y formulación de productos.

Surfactantes v. 1 (Modificado)

Código del Producto 423500

1.790 espectros

Colección de espectros IR seleccionados para auxiliar en la resolución de problemas analíticos en el área del análisis de surfactantes. Las aplicaciones analíticas incluyen la identificación, control de calidad, estudios de descomposición, selección de producto, estudio *in situ* de su utilidad en especial, además de otros usos como la enseñanza académica. La colección está constituida por productos comercialmente disponibles como jabones, emulsionantes, agentes quelante, inhibidores de corrosión, agentes de lubricación de superficies, agentes espesantes, blanqueadores ópticos, lubricantes, antiespumantes, agentes secuestradores, suavizantes etc.

Surfactantes v. 2 (Modificado)

Código del Producto 425200

1.700 espectros

Esta colección de espectros de IR fue seleccionada para auxiliar en la resolución de problemas analíticos en el área del análisis de surfactantes. Estos productos son utilizados como detergentes, jabones, emulsionantes, agentes quelante, inhibidores de corrosión, agentes de lubricación de superficies, agentes espesantes, blanqueadores ópticos, lubricantes etc

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Ciencia Forense

 Contiene estructuras

Tintas Automovilísticas (Automobile Paint Chips)

Código del Producto 460300

1.990 espectros

Esta colección se destina, principalmente, para uso en comparaciones químicas y/o de color. Todas las informaciones sobre los colores, en la base de datos, fueron conseguidas a partir de una producción real de lotes de tintas. Los tipos de tintas que fueron incluidas son: disolución de barniz acrílico, barniz de dispersión acrílica, esmalte acrílico, esmalte de poliéster, esmalte de uretano, esmalte acrílico para capas de base/revestimiento acrílico transparente, esmalte de dispersión no acuosa, esmalte a base de agua etc.

Compuestos Bioquímicos

Código del Producto 447200

590 espectros

Este banco de datos contiene espectros infrarrojos de una variedad de productos bioquímicos como péptidos, aminoácidos, carbohidratos, ácidos nucleicos, azúcares, lípidos esteroides, terpenos, alcaloides, glucósidos, carotenoides, flavonoides etc.

Ciencia Forense Canadiense

Código del Producto 421200

3.490 espectros

Esta base de datos contiene espectros de drogas lícitas e ilícitas, precursores de drogas y de los reactivos usados para prepararlas, así como de otras sustancias encontradas en el análisis forense. Algunos reactivos comunes de laboratorio y productos domésticos también fueron incluidos. Este banco de datos fue producido por el Departamento Nacional de Salud y Bien Estar Social del Gobierno de Canadá

Drogas de Abuso más Común (Ácido/Base)

Código del Producto 421400

580 espectros

Esta colección contiene datos espectrales de drogas que son frecuentemente de uso abusivo. Los compuestos representados son predominantemente medicamentos de marca en las dosis recomendadas, otros medicamentos están a granel y otros son narcóticos. Algunas mezclas en esta colección son drogas de la calle, o sea, mezclas de drogas que hayan sido ilegalmente preparadas

Colorantes

Código del Producto 421600

520 espectros

Esta colección de colorantes, pigmentos y manchas otorga una fuente de información de referencia conveniente y práctica para químicos y tecnólogos en la industria de colorantes o de color. Los colorantes son agrupados en clases, basadas en el uso establecido por el Colour Index (C.I.).

Colorantes, Pigmentos & Manchas

Código del Producto 431600

2.550 espectros

Esta colección de colorantes, pigmentos y manchas proporciona una fuente de información de referencia conveniente y práctica para químicos y tecnólogos de la industria de colorantes.

Fibras & Compuestos Textiles

Código del Producto 420300

480 espectros

La colección contiene fibras naturales y sintéticas a partir de fuentes nacionales y extranjeras. Entre las fibras naturales representadas están: seda, lana, algodón, ceiba, lino, yute, cáñamo, sisal, rafia y asbesto. Las fibras sintéticas incluyen todas las clasificaciones generales definidas en la Ley de Identificación de Productos de Fibra Textil (Textile Fiber Products Identification Act), excepto de la clase metálica. Las clases incluyen acetato, acrílico, nylon, nitrilo, rayón, triacetato, vinilo y vinylon. Los productos químicos textiles incluyen antiespumantes, detergentes, blanqueadores, antiestáticos, acondicionadores, productos para acabamiento, suavizantes y otros agentes.

Bases de Datos Espectrales

Fibras por Microscopia

Código del Producto 436400

450 espectros

Este banco de datos contiene espectros de referencia de alta calidad de fibras sintéticas disponibles en el mercado, medidas por el instrumento FT-IR y a través de microscopio. Los espectros fueron medidos en muestras de fibras e hilos, proporcionando espectros múltiples para cada dos o más componentes por hilo.

Aromatizantes, Fragancias & Aceites

Código del Producto 436500

870 espectros

Proporciona a los científicos una colección representativa de compuestos orgánicos utilizados en la fabricación de aromas y fragancias, aceites de productos naturales, compuestos de fragancia sintetizadas, terpenos y algunos fijadores. El banco de datos incluye espectros de infrarrojo de los compuestos que son aprobados por la Asociación de los Fabricantes de Aromas y Extractos de los Estados Unidos.

Aromatizantes & Fragancias (IR em Fase Vapor)

Código del Producto 447400

490 espectros

Base de datos con espectros de IR en fase vapor de compuestos orgánicos puros utilizados en la fabricación de aromas, fragancias y compuestos sintéticos.

Aditivos de Alimentos

Código del Producto 467100

990 espectros

Base de datos de IR con espectros de ingredientes adicionados directamente a los alimentos que el FDA aprobó ya sea como aditivos alimentares o relacionados o confirmados por el FDA como "generalmente reconocidos como seguros" (*Generally Recognized as Safe – GRAS*).

Laboratorio de Criminalística del Estado de Georgia

Código del Producto 460400

1.910 espectros

Colección de espectros infrarrojos de referencia de sustancias controladas, así como de compuestos susceptibles de ser encontrados en análisis de rutina y usados para análisis instrumental de drogas preparadas en la División de Ciencias Forenses del Laboratorio de Criminalística del Estado de Georgia, Atlanta, Georgia.

Excipientes Farmacéuticos

Código del Producto 447100

880 espectros

Esta base de datos fue preparada para aquellos que estudian formulaciones farmacéuticas utilizando espectroscopia de infrarrojo y contiene espectros de los materiales utilizados en el desenvolvimiento, producción, control y regulación de preparaciones farmacéuticas. Estos compuestos pueden ser clasificados como aglutinantes, cargas, disolventes, mejoradores de flujo, edulcorantes, revestimientos, conservantes, agentes dispersantes, aromatizantes, agentes de suspensión, auxiliares de compresión etc.

Fármacos

Código del Producto 443100

560 espectros

Amplia colección de drogas, medicamentos y preparaciones farmacéuticas frecuentemente encontradas en pesquisas médicas y farmacéuticas y en análisis de drogas. Estos compuestos fueron seleccionados a partir de la: *Modern Drug Encyclopedia*, *The U.S. Pharmacopoeia*, *The British Pharmacopoeia*, *The International Pharmacopoeia*, *New and Non-Officail Drugs* y del *National Formulary*. Las clases incluyen anestésicos, antimicrobianos, antibióticos, anticoagulantes, antiviruses, agentes cardiovasculares, diuréticos, enzimas, estrógenos, hormonas, relajantes, sedantes, estimulantes, calmantes y vitaminas.

Drogas Preparadas & de Prescripción (Ácido/Base)

Código del Producto 445700

880 espectros

Esta colección contiene espectros de drogas de nombre comercial preparadas o prescriptibles, seleccionadas a partir del *Physician's Desk Reference to Pharmaceutical Specialties and Biologicals*, para propiciar un método rápido de caracterización de drogas.

Esteroides

Código del Producto 420900

250 espectros

Este banco de datos contiene espectros FT-IR representando importantes clases de compuestos para a pesquisa de esteroides.

Esteroides, Andrógenos, Progestágenos & Estrógenos

Código del Producto 447700

300 espectros

El banco de datos, elaborado por Investigaciones Forenses Espectrales, contiene esteroides, andrógenos, progestágenos y estrógenos útiles en la ciencia forense, en fármacos, medicamentos y otras aplicaciones.

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Aplicaciones Ambientales

 Contiene estructuras

Base de Datos HAZMAT

Código del Producto 438900 410 espectros

Base de datos que contiene espectros infrarrojos de compuestos peligrosos. Esta colección de sustancias seleccionadas puede ser usada para la identificación, clasificación y verificación de esos materiales.

Pesticidas & Reactivos de Uso Agrícola

Código del Producto 436600 1.020 espectros

Amplia selección de materiales químicos utilizados en todas las etapas de la agricultura. Los materiales de este banco de datos también pueden ser considerados residuos industriales. Estos compuestos, que en su mayoría son pesticidas, provienen de distintas fuentes. Todos los productos están disponibles comercialmente, pero este banco de datos también trae padrones de pesticidas de referencia de alta pureza, proveídos a la Bio-Rad por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (US-EPA). En su mayoría, los compuestos representan el principio activo de las formulaciones comerciales, a pesar que algunas formulaciones completas también están incluidas. Fueron incluidas en la base de datos: acaricidas, bactericidas, nematocidas, reguladores de crecimiento, hormonas, conservantes, nutrientes, fungicidas, insecticidas, repelentes y atractivos, acaricidas y otros productos químicos agrícolas.

Contaminantes (IR en Fase Vapor)

Código del Producto 447300 910 espectros

Esta base de datos espectrales provee una referencia para los que analizan, acompañan, controlan, o estudian sustancias contaminantes, tóxicas, ambientales, fisiológicas u ocupacionales. Contiene espectros en fase vapor, que son representativos de los que serían conseguidos usando análisis GC/FT-IR, a donde los espectros son medidos arriba de la temperatura ambiente en una celda óptica calentada.

Contaminantes Prioritarios

Código del Producto 447000 470 espectros

Esta base de datos es una referencia espectral práctica para la investigación, industria y para todos los que trabajan en análisis de acompañamiento y control, o en estudios ambientales y fisiológicos de contaminantes ocupacionales y sustancias tóxicas. Estos compuestos han aparecido en la "EPA Priority Pollutants List", en la *Occupational Safety and Health Administration (OSHA) Category 1 List of Carcinogenic Substances* y en una lista de compuestos peligrosos comunes en la industria (que aparece también en la "EPA Priority Pollutants List"), y que requieren cuidados durante el transporte interestadual. El banco de datos incluye compuestos que son representados por dos tipos de espectros: los infrarrojos en fase condensada y los infrarrojos en fase vapor.

Sadtler EPA en Fase Vapor

Código del Producto 461000 3.240 espectros

El objetivo de esta base de datos es proveer espectros de referencia pertinentes a la contaminación e identificación toxicológica. Incluye espectros IR en fase vapor de compuestos orgánicos puros comunes y es útil en la identificación de compuestos desconocidos por GC-IR, TGA-IR, u otros métodos de análisis en fase vapor.

Reactivos para Tratamiento de Aguas

Código del Producto 421000 290 espectros

Colección de espectros infrarrojos de materiales disponibles en el mercado y utilizados en procesos de tratamientos de agua, tal como aditivos para calderas y aditivos de resfriamiento del agua. Incluye biocidas, agentes quelantes, coagulantes y agentes floculantes.

Bases de Datos IR (Infrarrojo): Inorgánicos y Organometálicos

 Contiene estructuras

Compuestos Inorgánicos

Código del Producto 435900 1.100 espectros

Banco de datos IR con espectros de compuestos inorgánicos. Los espectros son representativos de varios aniones e iones poliatómicos comunes en materiales inorgánicos y son clasificados de acuerdo con el anión o con el ión poliatómico, siguiendo los grupos en la tabla periódica. Esta colección contiene los espectros de compuestos inorgánicos "clásicos", como sulfato de amonio, nitrato de amonio, sulfato de zirconio, y compuestos de coordinación de varios metales como ligandos orgánicos e inorgánicos. Las clases representadas en esta colección incluyen compuestos inorgánicos, compuestos de coordinación inorgánicos, compuestos de coordinación orgánicos, compuestos carbonilos de metales y boranos.

Compuestos Inorgánicos (Subconjunto A)

Código del Producto 445900 240 espectros

Banco de datos IR con espectros de compuestos inorgánicos. Los espectros son representativos de varios aniones e iones poliatómicos comunes en materiales inorgánicos y son clasificados de acuerdo con el anión o con el ión poliatómico, siguiendo los grupos de la tabla periódica.

Minerales & Arcillas

Código del Producto 420600 420 espectros

Banco de datos IR con espectros de minerales y arcillas. Los espectros son clasificados de acuerdo con el orden creciente de complejidad del mineral.

Bases de Datos Espectrales

Compuestos Organometálicos

Código del Producto 420700

350 espectros

Base de datos IR compilados específicamente para científicos interesados en la química organometálica. Las muestras fueron solicitadas de acuerdo con los intereses industriales y a instituciones académicas y de investigación, en la tentativa de seleccionar compuestos de intereses comunes. Esta base de datos está compuesta por espectros que poseen ligaciones directas carbono-metal y de compuestos en los cuales el átomo metálico está ligado al carbono por un solo heteroátomo.

Bases de Datos Raman

 Contiene estructuras

Raman de Monómeros Básicos & Polímeros (*Inalterado*)

Código del Producto 470100

1.680 espectros

Esta base de datos provee para los científicos una fuente central de datos poliméricos confiables. Los compuestos monómeros y polímeros de esta colección fueron seleccionados de manera tal a proveer compuestos simples con grupos funcionales representativos para identificación y clasificación. El banco de datos contiene espectros de referencia que no han sido modificados con aditivos, a pesar de que puedan ser copolímeros o polímeros terciarios.

Raman de Compuestos Inorgánicos

Código del Producto 470200

1.630 espectros

Los compuestos inorgánicos incluidos en esta colección fueron seleccionados para proveer materiales representativos para identificación y clasificación. Las aplicaciones analíticas de esta base de datos incluyen la identificación, control de calidad, estudios de deterioro, selección de materiales, elucidación de estructuras moleculares, además de otras aplicaciones como control de procesos.

Bases de Datos NIR (Infrarrojo Cercano)

 Contiene estructuras

Colección de Espectros NIR (Infrarrojo Cercano) de Compuestos Orgánicos Comunes

Código del Producto 466000

3.800 espectros

Base de datos de la *Chemical Concepts*, una División de la Wiley. La colección contiene compuestos orgánicos comunes. Los espectros fueron analizados usando la técnica de infrarrojo cercano. Hay dos espectros por estructura.

Bases de Datos de NMR (Resonancia Nuclear Magnética)

Base de Datos de NMR de Metabolitos

Código del Producto 878600

1.050 espectros

Colección de espectros ^1H e ^{13}C NMR de metabolitos para la identificación de biomarcadores en potencial, en experiencias metabólicas. Los datos fueron colocados a disposición por el Laboratorio de Resonancia Magnética Biológica (RMB) de la Universidad de Wisconsin, Madison. Incluye conexiones para el PucChem, para el *Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG)* y para los bancos de datos *Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI)* y *KEGG Pathway*.

^{13}C NMR de Monómeros & Polímeros

Código del Producto 872300

740 espectros

La Bio-Rad ofrece un banco de datos que puede ser usado por químicos de polímeros y espectroscopistas que estudien monómeros, polímeros y resinas utilizando la técnica ^{13}C NMR. Están representadas numerosas clasificaciones de polímeros y monómeros.

Bases de Datos Adicionales

La Bio-Rad ofrece la línea completa de las Bases de Datos de Espectros de Masa de la Wiley:

- Wiley Registry® 9ª Edición
- Espectros de Masa & GC (Cromatografía a gas) de Drogas, Venenos, Pesticidas, Contaminantes & sus Metabolitos
- Espectros de Masa de Proyectos de Drogas (*Designer Drugs*) o Fármacos
- Espectros de Masa de Fármacos y Agroquímicos
- Espectros de Masa de Andrógenos, Estrógenos & Otros Esteroides
- Espectros de Masa de Compuestos Orgánicos
- Espectros de Masa de Geoquímicos, Petroquímicos & Biomarcadores
- FFNSC 1,3 – Aromas & Fragancias de Compuestos Naturales y Sintéticos

La Bio-Rad ofrece una base de datos adicional de ^1H NMR de la Wiley:

- Espectros de ^1H NMR de Compuestos Orgánicos de la Wiley - 104.489 espectros

Las bases de Datos HavelItAll de la Bio-Rad permiten que sus usuarios investiguen las colecciones enteras de espectros de la Bio-Rad, a través de técnica. Las colecciones HavelItAll son basadas en una licencia anual. Son accesibles a través del software del Sistema de Informática KnowItAll o vía Internet.

HavelItAll IR

Código del Producto 891000

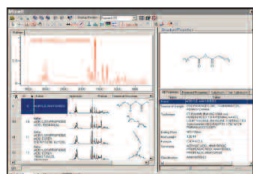


Colección de espectros infrarrojos, con alrededor de 230.000 espectros de compuestos orgánicos puros y comerciales. Esta base de datos es extremadamente útil cuando se intenta identificar o clasificar espectros desconocidos. En caso de necesidad de entre en polímeros, compuestos orgánicos puros, inorgánicos, organometálicos, compuestos industriales, o áreas de aplicación como farmacéutica, forense, ciencia de los materiales y universidades, los usuarios pueden estar seguros de que esta colección satisfará sus necesidades. Búsquedas por espectros, picos, nombres, estructuras, subestructuras y campos de propiedad, como técnicas, masa molecular, número de registro CAS etc.

Visite la página www.knowitall.com/haveitallir

HavelItAll Raman

Código del Producto 894000

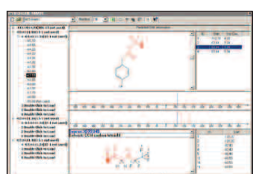


Datos Raman de alta calidad enfocados en monómeros, polímeros, materiales orgánicos e inorgánicos. Los usuarios pueden importar sus propios espectros y hacer investigaciones en un banco de referencia que contiene 6.225 espectros. Es posible hacer la busca de espectros por picos, nombre, estructura, subestructura y propiedades como técnicas y masa molecular, número de Registro en el CAS etc.

Visite la página www.knowitall.com/haveitallraman

HavelItAll NMR

Código del Producto 892000

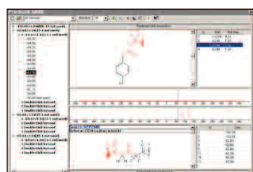


Acceso a más de 438.000 espectros ^{13}C NMR y más de 56.000 espectros de ^1H NMR de referencia para previsiones de NMR confiables. Con la herramienta PredictIt NMR del KnowItAll, no solo se pueden recuperar los datos espectrales usados para construir previsiones, como también es posible entre en todas las informaciones disponibles relacionadas al espectro de referencia, como el origen de la muestra, disolventes, condiciones de producción, equipamientos y propiedades de la molécula.

Visite la página www.knowitall.com/haveitallnmr

HavelItAll XNMR

Código del Producto 896000

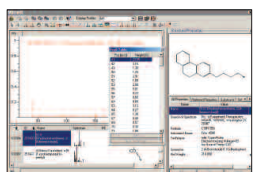


Acceso a más de 71.000 espectros XNMR de referencia para previsiones confiables. Esta base de datos incluye espectros ^{19}F NMR, ^{31}P NMR, ^{15}N NMR, ^{11}B NMR, ^{17}O NMR, ^{29}Si NMR y otros núcleos. Con la herramienta PredictIt NMR del KnowItAll, no solo se pueden recuperar los datos espectrales usados para construir previsiones, como también es posible entre en todas las informaciones disponibles relacionadas al espectro de referencia, como el origen de la muestra, disolventes, condiciones de producción, equipamientos y propiedades de la molécula.

Visite la página www.knowitall.com/haveitallxnmr

HavelItAll MS

Código del Producto 893000

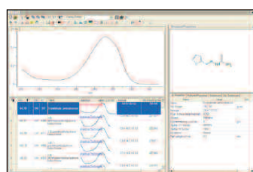


Esta colección de espectros e informaciones relacionadas, incluye datos del Instituto Nacional de Padrones y Tecnología (NIST) con la asistencia de consultores especializados de la Agencia de Protección Ambiental (EPA) y los Institutos Nacionales de de Salud (NIH) de los Estados Unidos. Es posible hacer la busca de espectros por pico, nombre, estructura, subestructura y propiedades como técnicas y masa molecular, número de Registro en el CAS etc. El banco de datos también incluye sinónimos químicos.

Visite la página www.knowitall.com/haveitallms

HavelItAll UV-Vis

Código del Producto 876300



Esta base de datos de referencia es extremadamente útil cuando se intenta identificar y clasificar espectros de UV-Vis desconocidos. Las aplicaciones incluyen fármacos, sustancias de interés forense, sustancias de interés para el medio ambiente, ciencias de los materiales, polímeros y muchos otros. Es posible hacer la busca de espectros por pico, nombre, estructura, subestructura y propiedades como fórmula, masa molar, disolvente, concentración y la largura de la ligación. Las tablas de picos contienen la posición y la altura del pico, la absorción y el coeficiente de extinción.

Visite la página www.knowitall.com/haveitalluv-vis

KnowItAll® Informatics System

El premiado Sistema de Informática KnowItAll de la Bio-Rad ofrece soluciones de software totalmente integradas, con varias herramientas para espectroscopia – todo dentro de una única interfaz de usuario – incluyendo:

- **Procesamiento de Espectros, Busca, Análisis & Previsión**
- **Relatorías de Resultados**
- **Construcción & Gestión de Bases de Datos**
- **Herramientas de Quimiometría**
- **Incorporación de Estructuras Químicas**

Integración Real.

Transferencia instantánea de datos de un aplicativo para otro.

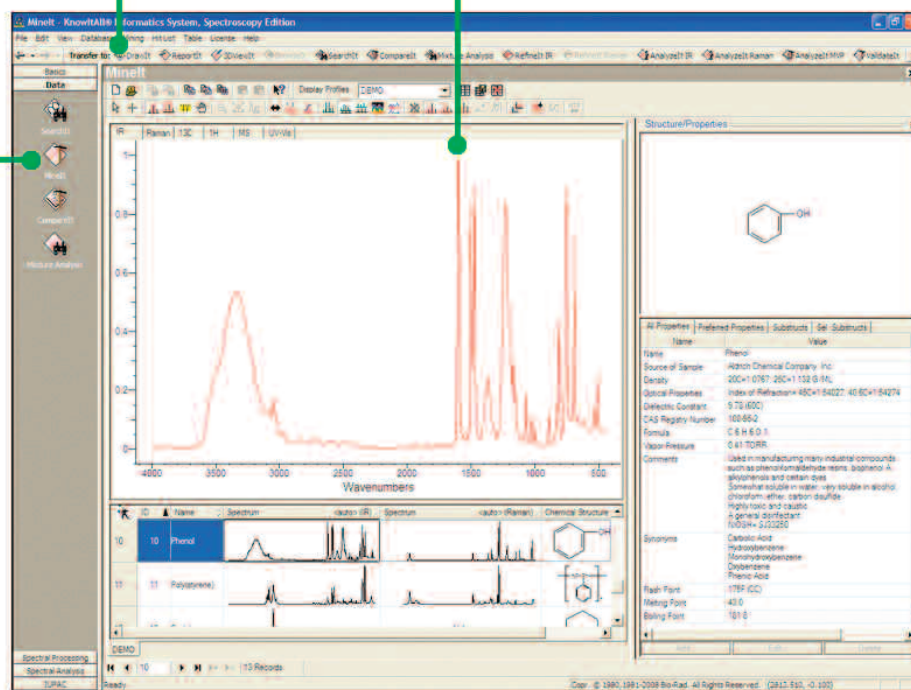
Informática Integrada.

Investigación, gestión y análisis de informaciones espectroscópicas y químicas.

Caja de Herramientas Versátil.

Evaluación de espectros con una suite de herramientas de software.

Desktop & Soluciones Empresariales.



Como Funciona la Interfaz KnowItAll

La interfaz KnowItAll está proyectada para que el usuario pueda transferir informaciones de una herramienta para otra y moverse de una tarea para la próxima, sin tener que dejar la interfaz principal o abrir otro programa.

Tareas múltiples son realizadas utilizando “cajas de herramientas” lógicamente agrupadas. Como todas las herramientas están localizadas en un único ambiente integrado, utilizar este sistema irá, invariablemente, economizar tiempo y optimizar el flujo de trabajo.

Finalmente, combinando herramientas y datos en un único sistema, el resultado final es una mayor capacidad para extraer conocimiento de los datos.

La Bio-Rad ofrece las siguientes “ediciones” especializadas de su sistema KnowItAll para varias técnicas espectroscópicas. Para obtener más detalles, consulte la “*Tabla Comparativa de las Características de las Ediciones KnowItAll*”.

Edição KnowItAll IR/NIR

Código del Producto 879100



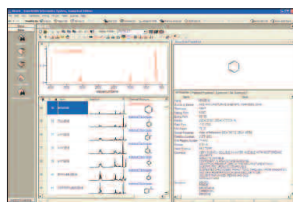
Técnicas: IR, NIR (Infrarrojo, Infrarrojo Cercano)

La edición KnowItAll IR/NIR ofrece un ambiente de software totalmente integrado para el IR y el NIR con gestión de datos (opcional), investigación espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y herramientas para reportarías. Ahora, con herramientas exclusivas para análisis, tal como Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas.

Para más detalles y para ver los videos de demostración, entre en www.knowitall.com/iredition

Edição KnowItAll Spectroscopy

Código del Producto 876400



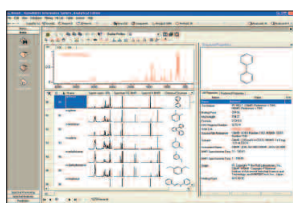
Técnicas: IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis, Cromatografía

La Edición KnowItAll Spectroscopy ofrece un ambiente de software totalmente integrado para el IR, Raman, NIR, MS, UV-Vis y Cromatografía, incluyendo herramientas para gestión de datos, busca espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y reportarías. Ahora, con herramientas exclusivas para análisis, tal como Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas.

Para más detalles y para ver los videos de demostración, entre en www.knowitall.com/spectroscopyedition

Edição KnowItAll Analytical

Código del Producto 890200



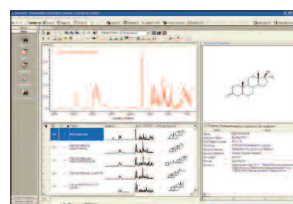
Técnicas: IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis, Cromatografía

La Edición KnowItAll Analytical ofrece el primer ambiente de software totalmente integrado para técnicas analíticas, incluyendo IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis y Cromatografía, e incluye herramientas para gestión de banco de datos de múltiples técnicas, investigación espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y reportarías. Ahora, incluye también herramientas exclusivas para análisis: Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas. Incluye, aún, filtros adicionales para espectros de masa.

Para más detalles y para ver los videos de demostración, entre en www.knowitall.com/analyticaledition

Edição KnowItAll Enterprise

Código del Producto 879400



Técnicas: IV, Raman, IV-Próximo, RMN, MS, UV-Vis, Cromatografía

La premiada Edición KnowItAll Enterprise ofrece el primer ambiente de software totalmente integrado para técnicas analíticas, IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis y Cromatografía, e incluye herramientas para gestión de banco de datos de múltiples técnicas, investigación espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y reportarías. Ahora, incluye también herramientas exclusivas para análisis: Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas.

Edição KnowItAll Raman

Código del Producto 890700



Técnica: Raman

La Edición KnowItAll Raman ofrece un ambiente de software totalmente integrado para espectroscopía Raman, con herramientas para gestión de datos (opcional), busca espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y reportarías. Ahora, incluye también herramientas exclusivas para análisis: Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas.

Para más detalles y para ver los videos de demostración, entre en www.knowitall.com/ramanedition

Edição KnowItAll UV-Vis

Código del Producto 876500



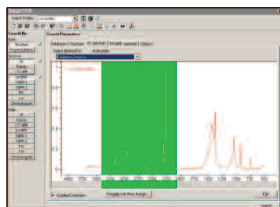
Técnica: UV-Vis

La Edición KnowItAll UV-Vis ofrece un ambiente de software totalmente integrado para UV-Vis, incluyendo herramientas para gestión de datos (opcional), investigación espectral, procesamiento, dibujo de estructuras y reportarías. Ahora, incluye también herramientas exclusivas para análisis: Overlap Density Heatmaps (*Sobreposición de Mapas de Densidad de Calor*) y Análisis Espectral de Mezclas.

Para más detalles y para ver los videos de demostración, entre en www.knowitall.com/uv-visedition

Aplicativos y Recursos Inclusos

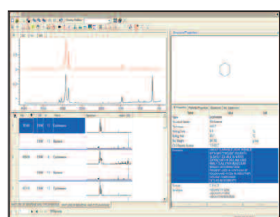
SearchIt™ - Busca en Base de Datos *(espectro integral, estructura, pico, propiedad etc.)*



El aplicativo SearchIt permite importar estructuras y/o espectros por comparación con datos de referencia autorizados, así como compararlos con las bases de datos criadas por el propio usuario. Las investigaciones pueden ser totalmente customizadas y editadas y son conducidas por algoritmos avanzados (*state-of-the art*). Las búsquedas pueden ser realizadas por estructura, subestructura, nombre, propiedades, espectros o por cualquier combinación de factores.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/searchit

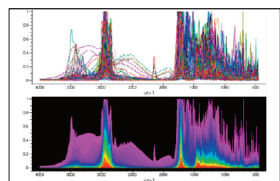
Spectral Mixture Analysis - Análisis Experimental de Datos Espectrales de Mezclas



Este aplicativo descompone y separa los componentes de una mezcla por medio del análisis de un espectro. Permite la comparación entre el espectro de la muestra contra las bases de datos KnowItAll criadas por el usuario, así como contra cualquier base de datos de referencia KnowItAll licenciada. El resultado es una serie de espectros combinados, cada uno de ellos acompañado por espectros de los componentes individuales que componen el espectro compuesto, bien como el espectro residual (diferencia entre el espectro de consulta de la mezcla real y del espectro combinado). Los espectros combinados son clasificados por la manera como ellos se parecen con el espectro de consulta.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/mixtureanalysis

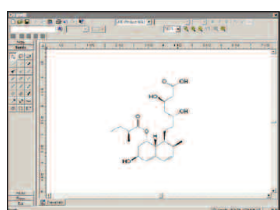
Overlap Density Heatmaps - Busca Visual de Datos y Análisis



La Bio-Rad introdujo una tecnología revolucionaria para la busca visual de datos y análisis, que permite evaluar semejanzas y diferencias en grandes cantidades de datos espectrales, cromatográficos o de otros datos gráficos.† Esta tecnología, llamada Overlap Density (OD) Heatmaps (Patente Pendiente) permite a los científicos visualizar las características comunes de objetos sobrepuestos (como espectros o cromatogramas) a través de código de colores.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/odhm

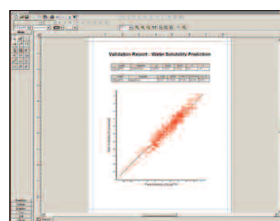
DrawIt™ (ChemWindow®) - Dibujo de Estructuras 2D *(incluye reconocimiento estereoquímico)*



Con el DrawIt, los usuarios pueden dibujar cualquier estructura química con apenas algunos clic y arrastres. Posee todas las herramientas que los usuarios precisan para dibujar anillos, ligaciones, átomos, cadenas, flechas y símbolos químicos.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/drawit

ReportIt™ - Herramienta de Publicación Customizada

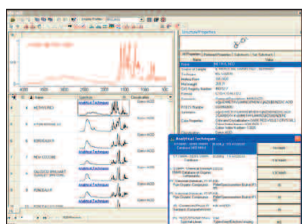


Con ReportIt los usuarios pueden crear reportajes estándares, presentaciones y publicaciones. Las reportajes son fáciles de exportar utilizando uno de nuestros modelos pre definidos o un modelo customizado.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/reportit

Aplicativos y Recursos Opcionales

Database Building Option - Crée bancos de datos con Espectros, Estructuras & Propiedades Código del Producto 850100

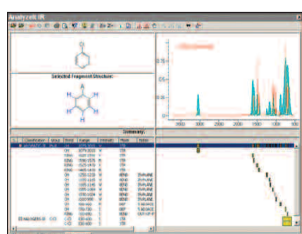


Químicos y espectroscopistas producen datos valiosos todos los días dentro de sus organizaciones. Con la herramienta Minelt del KnowItAll destinada para la construcción de bases de datos, los científicos pueden retener estas fuentes de datos y construir bases de datos investigables que incluyen múltiples técnicas analíticas† (IR, Raman, NIR, NMR, MS, UV-Vis, Cromatografía), estructuras químicas y datos alfanuméricos.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/databasebuilding

(Incluido en las ediciones Spectroscopy, Analytical, Enterprise, e UV-Vis, mas opcional en otras ediciones do KnowItAll)

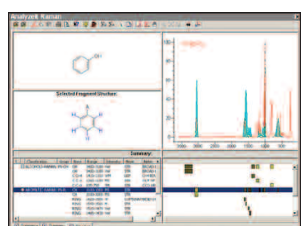
AnalyzeIt™ IR - Análisis de Grupos Funcionales Código del Producto 851200



El AnalyzeIt IR puede ser usado para ayudar a interpretar bandas en un espectro infrarrojo. Basta cargar un espectro y hacer un clic en un pico de interés para crear una lista de todos los grupos funcionales posibles para esa posición. El AnalyzeIt también sugiere el mejor pico para iniciar la interpretación. Posee cerca de 200 grupos funcionales y centenas de frecuencias de interpretación. El aplicativo también permite correlación a partir de una estructura.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/analyzeitir

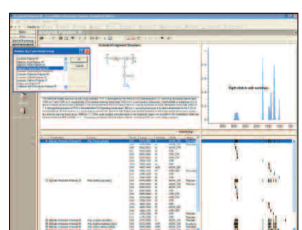
AnalyzeIt Raman - Análise de Grupos Funcionais Código del Producto 894200



El AnalyzeIt Raman puede ser usado para ayudar a interpretar las bandas en un espectro Raman. Basta cargar el espectro y hacer un clic en un pico de interés para crear una lista de todos los grupos funcionales posibles para esa posición. El AnalyzeIt también sugiere el mejor pico para iniciar la interpretación. Posee cerca de 200 grupos funcionales y centenas de frecuencias de interpretación. El aplicativo también permite correlación a partir de una estructura.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/analyzeitraman

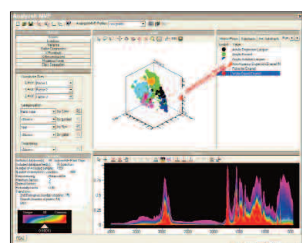
AnalyzeIt Polymer IR - Análise de Polímeros Código del Producto 854700



La identificación, clasificación e interpretación de los polímeros comerciales es un desafío. Una pieza clave de la información que se desea es la correlación entre el espectro y la estructura, información disponible a partir de la investigación, apenas, de la busca espectral. El AnalyzeIt Polymer IR, en conjunto con el conocimiento de correlaciones espectrales entre polímero y estructura, es un aplicativo desarrollado específicamente para auxiliar en este proceso.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/analyzeitpolymerir

AnalyzeIt MVP - Processamento Multivariado Código del Producto 850800



El AnalyzeIt MVP, que incorpora la tecnología de la quimiometría Infometrix para análisis de componentes principales (del conocido software Pirouette®) espectroscopía, cromatografía en fase gaseosa, o de datos numéricos†, le permite al usuario:

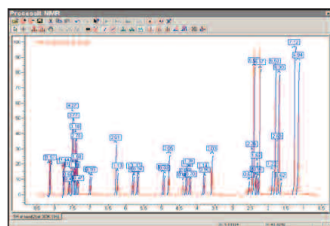
- Entender mejor los padrones y afinidades ocultas en los datos de los usuarios
- Explorar las correlaciones de datos para responder preguntas críticas referentes a la investigación, desenvolvimiento o procesos de producción,
- Almacenar resultados para referencias posteriores, relatorías o investigaciones.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/analyzeitmvp

Aplicativos y Recursos Opcionales

ProcessIt™ NMR - Procesamiento de Espectros de Resonancia Nuclear Magnética

Código del Producto 892600



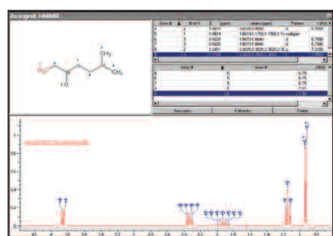
Este recurso permite que usuarios importen y procesen señales o espectros de Resonancia Nuclear Magnética a partir de varios formatos. Con esta aplicación, se puede ejecutar procesamientos de múltiples etapas, tanto paso a paso como por lotes (batch) utilizando una capacidad macro.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/processitnmr

(Incluido en las Ediciones Analytical y Enterprise)

AssignIt™ NMR - Adicione atribuciones a los Bancos de Datos NMR

Código del Producto 892700

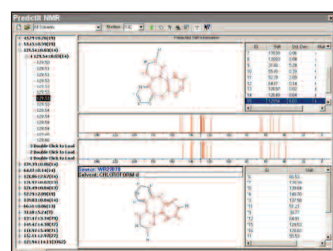


Con esta herramienta, adicione atribuciones y otras informaciones a las estructuras de las bases de datos NMR ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N , ^{17}O , ^{11}B , y ^{29}Si del KnowItAll. El AssignIt permite el acceso rápido a la información, con atribuciones de los desplazamientos de los picos, intensidades, constantes de acoplamiento, multiplicidades y conexiones para una estructura química relevante o para una estructura propuesta.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/assignit

(Incluido en las Ediciones Analytical y Enterprise)

PredictIt™ NMR - Predicción de Espectros de Resonancia Nuclear Magnética (NMR)

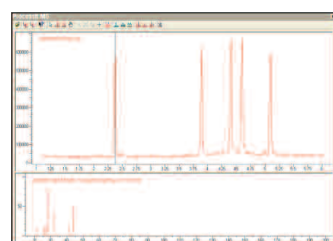


Con el aplicativo PredictIt NMR, predicciones espectrales de NMR para ^{13}C , ^1H y muchos otros núcleos pueden ser echas usando las bases de datos NMR. Predicciones ocurren automáticamente cuando el usuario abre una estructura en el aplicativo. Para hacer predicciones, el KnowItAll examina todas las bases de datos de subestructuras licenciadas que poseen ^1H , ^{13}C , u otros descocamientos a ellas atribuidas. Las subestructuras son definidas por el número de camadas que representan átomos dentro de "n" ligaciones del átomo central.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/predictitnmr

(Incluido en las Ediciones Analytical y Enterprise)

ProcessIt MS - Procesamiento de MS & de MS con Guión



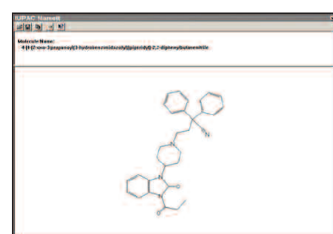
El aplicativo ProcessIt MS puede ser usado para importar y abrir archivos CG/MS y LC/MS y visualizar y seleccionar barraduras MS dentro de ellos. Barraduras MS seleccionadas pueden ser adicionadas a las bases de datos del usuario y pueden ser investigadas posteriormente. Además, este aplicativo permite a los usuarios ejecutar medias espectrales, hacer sustracciones de espectros y visualizar cromatogramas de iones seleccionados (SIC).

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/processitms

(Incluido en las Ediciones Spectroscopy, Analytical y Enterprise)

IUPAC NameIt™ & DrawIt - Fornece Nombres IUPAC a partir de Estructuras

Código del Producto 854400



Con las opciones KnowItAll IUPACNameIt y IUPAC DrawIt, puede nombrar o crear estructuras sin esfuerzo usando las reglas sistemáticas de la IUPAC. Basta introducir una estructura o un nombre, hacer un clic en un botón, y generar el nombre correspondiente o la estructura basada en normas internacionalmente aceptadas como reglas padrones de nomenclatura – sin tener que memorizarlas. Generar nombres y estructuras de esa manera no solo ahorra tiempo, como también garantiza la exactitud y estandarización de la comunicación y gestión de datos dentro de un laboratorio.

Para más detalles y para ver los videos de demostraciones, entre en www.knowitall.com/iupac

Aplicativos y Recursos Opcionales

Software Pirouette Infometrix® - Herramientas de Quimiometría para Clasificación, Exploración de datos & Más

Predicción, clasificación, exploración de datos y métodos de regresión multivariada, pueden ser conseguidos con el uso de este software de quimiometría de la Infometrix, que ahora incluye también el análisis de mezclas. Es fácil de usar y posee una interfaz muy poderosa, facilitando la interacción entre datos brutos y procesados. Por dar soporte para muchos instrumentos, el cambio de archivos por importación de datos se hace mucho más simple. Millares de subconjuntos pueden ser criados a partir de un único archivo de datos, permitiendo al usuario ejercer distintos escenarios "que-se" (*what-if*) sin la necesidad de coleccionar datos adicionales.

Para más detalles, entre en visit www.knowitall.com/pirouette

Tabla Comparativa de los Recursos de las Ediciones KnowItAll

● - Incluido

○ - Opcional

Componente	Descripción	Edición IR/NIR	Edición Spec	Edición Analytical	Edición Enterprise	Edición Raman	Edición UV-Vis
Caja de Herramientas de Datos							
SearchIt™	Busca en la Base de Datos (espectros, estructuras, picos, propiedades etc)	●	●	●	●	●	●
Minelt™	Banco de datos de exhibición y búsquedas	●	●	●	●	●	●
Database Building	Construcción de Bases de Datos multitécnicas† con espectros y estructuras; destaque en el Minelt		●	●			●
Overlap Density Heatmap	Tecnología de patente pendiente para gestión de datos y análisis visual	●	●	●	●	●	●
CompareIt™	Plotage de datos y visualización	●	●	●	●		●
AssignIt™	Adicionar atribuciones a las bases de datos de RMN de ¹ H, ¹³ C, y otros núcleos			●	●		
Mixture Analysis	Analizar datos experimentales espectrales de mezclas	●	●	●	●	●	●
Batch Property Calculation	Cálculo de propiedades para bancos de datos enteros	●	●	●	●		●
Pirouette® Model Support	Uso de modelos construidos en el software Pirouette, de la Infometrix	●	●	●	●	●	●
Caja de Herramientas de Procesamiento Espectral							
RefineIt™ IR	Procesamiento de espectros IR	●	●	●	●		
RefineIt™ Raman	Procesamiento de espectros Raman		●	●	●	●	
ProcessIt™ NMR	Procesamiento de espectros NMR			●	●		
ProcessIt™ MS	Procesamiento de espectros MS y MS con guión		●	●	●		
Filtros de Importación de archivos adicionales de MS			●	●			
Caja de Herramientas de Análisis Espectral							
AnalyzeIt™ IR	Correlación de espectros IR/estructuras						
AnalyzeIt™ Raman	Correlación de espectros Raman/ estructuras						
AnalyzeIt™ MVP	Procesamiento multivariado para quimiometría y análisis de componentes principales						
ValidateIt™	Modelo de validación estadística	●	●	●	●		●
AnalyzeIt™ Polymer IR	Correlación de espectros IR/ estructuras para polímeros						
Caja de Herramientas de Previsión							
PredictIt™ NMR	Predicción de desplazamientos químicos en espectros NMR			●	●		
Caja de Herramientas Básicas							
DrawIt™	Dibujos de estructuras em 2D	●	●	●	●	●	●
ReportIt™	Relatorías personalizadas y herramientas de publicación	●	●	●	●	●	●
3D ViewIt™	Visualización de estructuras 3D		●	●	●		●
BrowseIt™	Portal Web con links útiles para os usuarios KnowItAll	●	●	●	●	●	●
Caja de Herramientas IUPAC							
IUPAC DrawIt™	Convierte el nombre IUPAC para la estructura						
IUPAC NameIt™	Convierte la estructura para el nombre sistemático IUPAC						
Otras Opciones							
Spectral Databases	Elija entre más de 100 bases de datos espectrales o las licencias anuales HavelItAll						
KnowItAll® Enterprise Server	Centralice las informaciones espectrales y químicas						
Infometrix Pirouette® Software	Herramientas de quimiometría adicionales						
Upgrade Plan	Soporte y plano de actualización para usuarios KnowItAll						

Formato de los Archivos KnowItAll

El KnowItAll ayuda a los científicos a trabajar con distintos tipos de datos espectrales/químicos y múltiples formatos de archivos e instrumentos. Los formatos soportados dependen de la edición del KnowItAll licenciada.

Infrarrojo - IR

Sadtler IRF (*.irf)	Data Genéricos XY (*.*)	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)
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)
Data Genéricos XY (*.*)	JEOL JCAMP (*.wsf)	Thermo/Nicolet (*.spa)

IV-Cercano - NIR

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

Resonancia Nuclear Magnética - NMR *(solamente espectros procesados)*

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)
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)
Data Genéricos XY (*.*)		

Espectros de Masa - MS

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

UV-Vis

Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	PG Instruments (*.spd)
Data Genéricos XY (*.*)	JASCO (*.jws)	Spectacle/Shimadzu (*.irs)

Cromatografía Gaseosa - GC

ANDI Chromatography (*.cdf)	Data Genéricos XY (*.*)	Spectacle/Shimadzu (*.irs)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)	MS ChemStation (*.ms)	

Formatos de Archivos de Estructuras

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)		

Formatos de Archivos de Datos

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

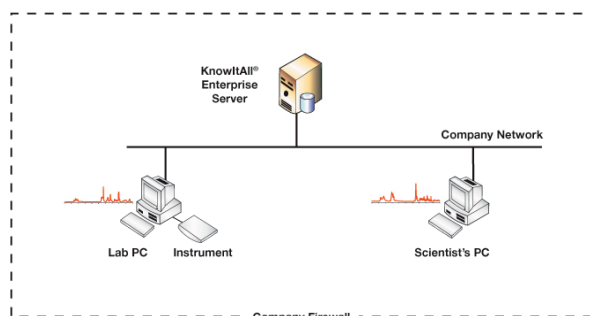
Soluciones KnowItAll Enterprise

Aumente la Productividad de su Laboratorio: Centralice el Acceso a Todos los Espectros & Cromatogramas Producidos por su Organización

Implementar un sistema de gestión de datos en una empresa como un todo, se ha vuelto cada vez más importante, debido al gran volumen de datos que están siendo producidos y al aumento de la necesidad de compartir informaciones. Los laboratorios de la Bio-Rad ofrecen soluciones completas para centralizar, proteger y entre en las fuentes de datos adentro de un único laboratorio o en toda la organización.

SpecFinder™ - Encuentre sus Datos

Código del Producto 886200

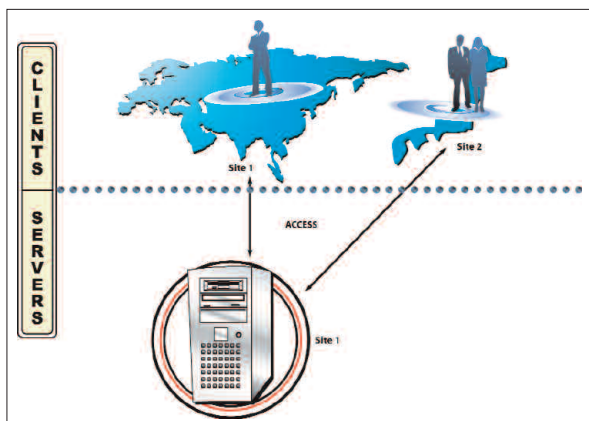


SpecFinder es una solución única, segura, accesible y de fácil implantación y manutención, para la amplia indexación en química analítica en la empresa como un todo. Permite que los administradores y empleados encuentren instantáneamente espectros, cromatogramas y hasta mismo estructuras químicas localizadas en cualquier lugar en sus computadores personales, computadores de los instrumentos y unidades de red. Empleados autorizados pueden buscar el índice SpecFinder almacenado en el Servidor KnowItAll Enterprise usando una plataforma de interfaz independiente de su navegador web (KnowItAll AnyWare) o la interfaz de software para el Microsoft Windows (KnowItAll Informatics System).

Para más detalles, entre en www.knowitall.com/specfinder

KnowItAll Enterprise Server - Almacene sus datos

Código del Producto 878000

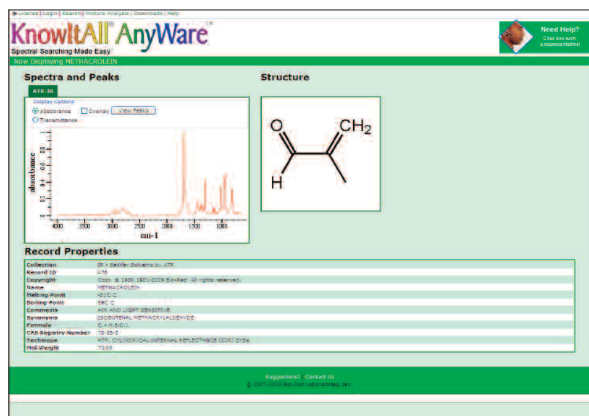


El KnowItAll Enterprise Server es una plataforma de tecnología para la creación de un sistema de almacenamiento de los datos analíticos de toda una empresa. El sistema es rápido, confiable, seguro y accesible, requiere soporte y manutención mínimos, y permitirá el acceso a todos los espectros y cromatogramas de su empresa a través de una plataforma unificada. Empleados autorizados pueden investigar bancos de datos almacenados en el servidor KnowItAll Enterprise usando un navegador independiente de la plataforma (KnowItAll AnyWare) o la interfaz de software para el Microsoft Windows (KnowItAll Informatics System).

Para más detalles, entre en www.knowitall.com/enterpriseserver

KnowItAll AnyWare™ - Busque sus Datos

Código del Producto 877400



El KnowItAll AnyWare es una interfaz de navegador para investigar espectros, estructuras y propiedades químicas almacenadas en el KnowItAll Enterprise Server. No es necesaria la instalación de software, lo que torna fácil su implantación. Con el servidor KnowItAll Enterprise operando atrás del firewall, el acceso a los datos es protegido y es seguro. El KnowItAll AnyWare puede ser usado con cualquier navegador web, incluyendo Internet Explorer, Firefox, Safari o Chrome.

Para más detalles, entre en www.knowitall.com/anyware

Informaciones sobre las Licencias

La Bio-Rad facilita el licenciamiento de sus softwares y bancos de datos. Las bases de datos espectrales individuales son licenciadas a través de dispositivos (*dongles*) USB y el software puede ser licenciado vía Internet o usando el *dongle* USB

Política de Soporte & Actualización

Para más detalles, entre en www.knowitall.com/supportpolicy

Opciones de Entrenamiento

Si necesita de más informaciones, además de los recursos otorgados (sistema de ayuda on-line, Manual del Usuario KnowItAll en PDF, Films de demostración - demo movies), tendremos el mayor gusto en poder discutir las opciones para un entrenamiento complementar.

Por favor, accese www.knowitall.com/training

Requisitos computacionales para uso del Sistema KnowItAll

Encuentre las recomendaciones del sistema más reciente en 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
Europa, Middle East, Africa
India
Japón, Taiwan, Corea
Estados Unidos
Otros lugares

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