

光谱分析



谱图库和解析软件

BIO-RAD

www.knowitall.com/chinese

光谱库和解析软件.....1

KnowItAll 软件版本.....2

KnowItAll 红外版	KnowItAll 拉曼版
KnowItAll 分析化学版	KnowItAll 紫外-可见版
KnowItAll 光谱版	

KnowItAll 软件功能.....6

Database Building Option	Analyzelt Polymer IR
Analyzelt™ IR	Analyzelt MVP
Analyzelt Raman	IUPAC NameIt™ & DrawIt

KnowItAll 文件格式.....7

KnowItAll 版本功能对比表.....8

KnowItAll 企业解决方案.....9

KnowItAll SpecFinder™	KnowItAll AnyWare™
KnowItAll Enterprise Server	

光谱库.....10

光谱库: ATR-IR.....10

基本聚合物衰减全反射 (ATR)	类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类衰减全反射 (ATR)
聚合物衰减全反射 (ATR)	无机物衰减全反射 (ATR)
溶剂衰减全反射 (ATR)	有机金属化合物衰减全反射 (ATR)
管制药和处方药衰减全反射 (ATR)	

红外谱库: 聚合物和相关化合物.....10

丙烯酸酯和甲基丙烯酸酯	Hummel 工业聚合物第 1 卷
粘合剂和密封剂	Hummel 工业聚合物第 2 卷
粘合剂和密封剂 (子集 A)	Hummel 工业聚合物第 3 卷
基本单体和聚合物第 1 卷 (未改性)	Hummel/Sadtler 聚合物
基本单体和聚合物第 2 卷 (未改性)	单体和聚合物 (全集)
涂料化学品	单体和聚合物第 1 卷 (改性)
聚合物的受控热解物	单体和聚合物第 2 卷 (改性)
电厂材料	增塑剂
环氧树脂类、固化剂和添加剂	聚合物添加剂
阻燃剂	聚合物
Hummel 定义聚合物	防护剂
Hummel 定义聚合物 (基本集)	橡胶化学品
Hummel 工业聚合物第 1-3 卷	Sadtler/Scholl 聚合物加工助剂

红外谱库: 纯有机化合物.....12

醇和酚	Merck/Sadtler
醛	核酸、核苷及核苷酸
氨基酸和肽	有机金属化合物、无机物、硅烷、硼烷和氙化合物
酞和内酯	磷化合物
羧酸	Q-Sadtler 参考谱
凝聚相红外标准物 (综合)	精选红外参考谱
染料、炔烃和偶氮化合物	精选标准物
酯	精选蒸汽相
易爆物	溶剂 (未混合)
气体和蒸汽	溶剂 (蒸汽相)
烃	起步谱库
烃和卤代烃	类固醇类谱库
工业化学品, 傅立叶变换红外纯有机化合物	糖类和碳水化合物
工业化学品, 傅立叶变换红外基本有机化合物	硫化物
中间体 (未混合)	大学标准谱库
酮	蒸汽相红外标准物 (综合)

目录

红外数据库：工业化合物 15

基本表面活性剂（未改性）	石油化学品
油脂、石蜡及衍生物	多元醇
Hummel 表面活性剂	溶剂（工业级）
中间体（工业级）	表面活性剂（综合）
润滑剂	表面活性剂第 1 卷（改性）
润滑添加剂	表面活性剂第 2 卷（改性）

红外谱库：刑侦科技 16

汽车漆片	香料和香精（红外蒸汽相）
生化药品	食品添加剂
加拿大刑侦库	佐治亚州犯罪实验室库
常见滥用药物（酸/碱）	药用辅料
染料	药品
染料、颜料和着色剂	制剂和处方药（酸/碱）
纤维和纺织化学品	类固醇类
纤维（显微镜）	类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类
香料、香精和油脂	

红外谱库：环保应用 18

HAZMAT 数据库	重点污染物
杀虫剂与农用化学品	Sadtler EPA 化合物(蒸汽相)
污染物（红外蒸汽相）	水处理化学品

红外谱库：无机物和有机金属化合物 19

无机物	矿物和粘土
无机物（子集 A）	有机金属化合物

拉曼谱库 20

基本单体和聚合物拉曼库（未改性）	无机物拉曼库
------------------	--------

近红外谱库 20

常见有机化合物的近红外谱库

核磁共振谱库 20

代谢物核磁共振	单体和聚合物的碳- ¹³ 核磁共振光谱图库
---------	----------------------------------

其他谱库 20

HaveltAll® 谱库年度使用权 21

HaveltAll 红外	HaveltAll 非碳氢核磁
HaveltAll 拉曼	HaveltAll 质谱
HaveltAll 核磁	HaveltAll 紫外-可见

其他信息 22

使用权信息
支持和升级项目
培训选项
KnowItAll 对电脑系统配置建议

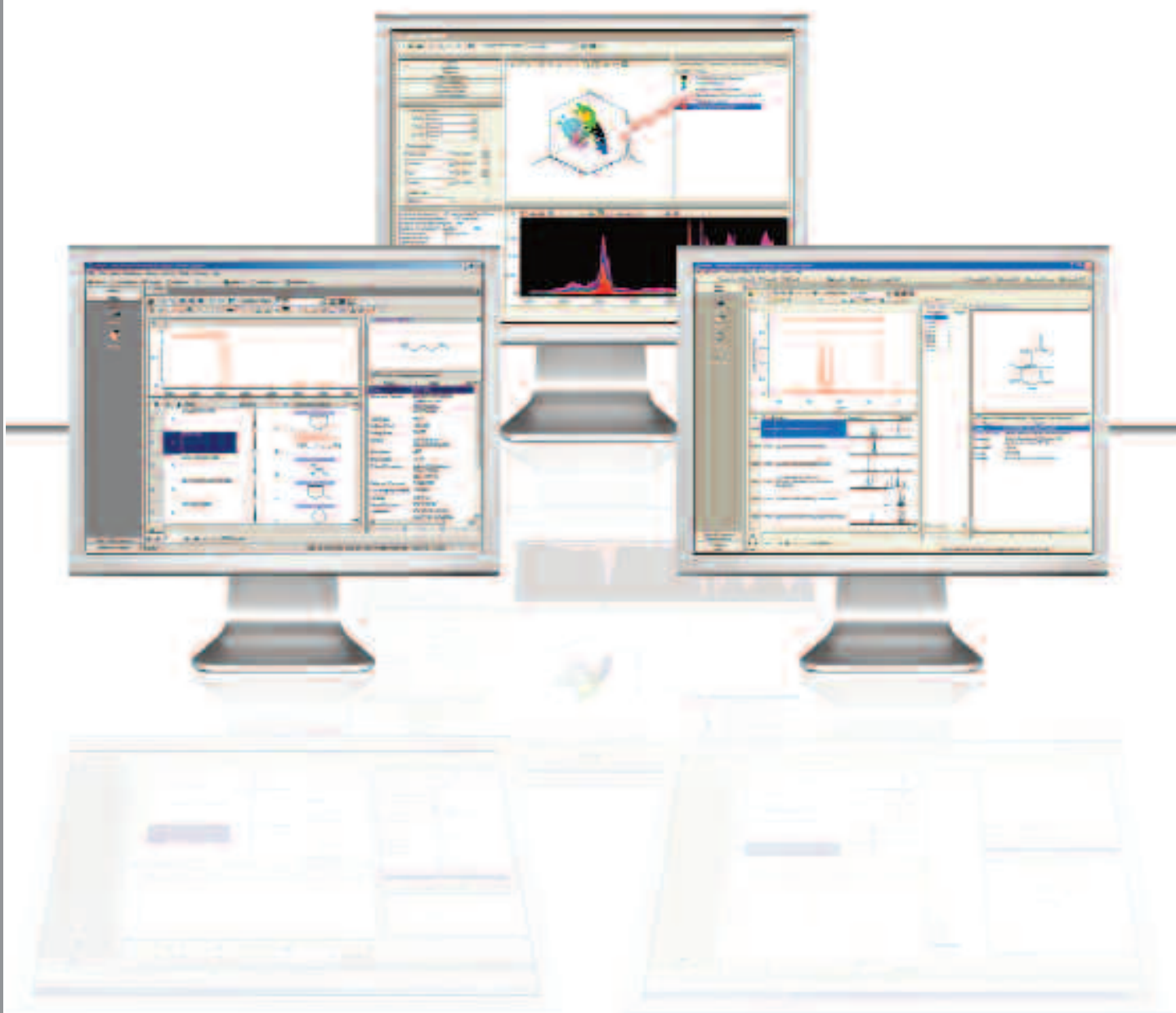
Bio-Rad Informatics Division 专门为学术界提供谱库和解析软件。

光谱库 - 超过 130 万张谱图, 包括 Sadtler 数据

Bio-Rad 是领先的、已经过全方位验证的光谱库的出版商, 其红外、拉曼、近红外、核磁共振、质谱以及紫外-可见光数据涵盖广泛纯化合物和其它化学产品。

KnowItAll® 软件

Bio-Rad 专长于光谱数据管理及分析软件解决方案, 可兼容各种类型仪器及厂商的光谱文件。



KnowItAll 软件版本

KnowItAll[®]
Informatics System

Bio-Rad 的获奖产品 KnowItAll 提供集所有光谱解析技术于一身，为用户提供一个全面、简单的软件平台。

Bio-Rad 提供以下 KnowItAll 版本，用于不同的光谱分析。另请参阅第 8 页的“KnowItAll 版本功能对比表”以了解更多信息。

KnowItAll 红外版

产品号 879100

分析法：红外、近红外

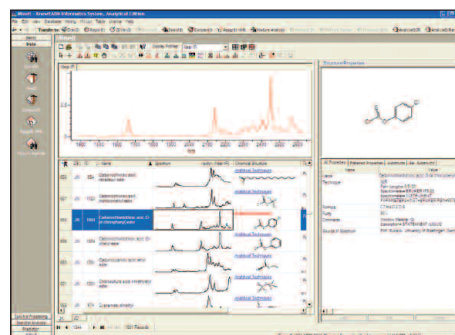
此软件包提供了一个红外和近红外光谱解析的软件平台。

配有的程序：

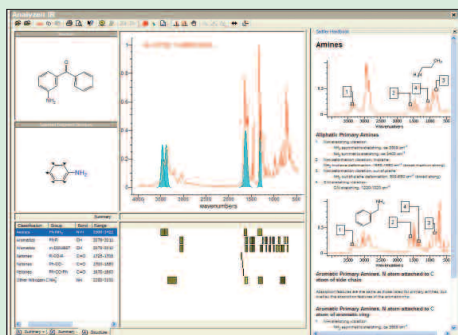
- **SearchIt** - 检索红外和近红外光谱、谱峰、化学结构和特性
- **Minelt** - 显示光谱、结构和属性
- **Mixture Analysis** - 分解红外或近红外混合物光谱组分
- **Refinelt IR** - 处理红外和近红外光谱图（包括基线校正、归一、差谱等）
- **Overlap Density Heatmap** - 直观数据挖掘和分析
- **DrawIt** - 绘制二维化学结构
- **ReportIt** - 使用光谱、结构、属性创建报告
- **CompareIt** - 数据绘图和直观显示
- **Batch Property Calculation** - 成批计算属性

可选功能：

- **AnalyzeIt IR** - 红外官能团分析
- **AnalyzeIt Polymer IR** - 聚合物红外官能团分析
- **Database Building** - 用户自建库。此过程也可采用批处理方式进行
- **IUPAC NameIt/DrawIt** - 根据化学结构生成 IUPAC 名称或根据 IUPAC 名称生成化学结构
- **AnalyzeIt MVP** - 多元因子分析以深入了解数据中隐藏的模式



有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/iredition



AnalyzeIt™ IR - 红外官能团分析

产品号 851200

AnalyzeIt IR 可用于帮助解析红外光谱的谱带。只要载入一个光谱并点击需要了解的谱峰，即可生成一组在该位置可能出现的官能团。AnalyzeIt 还会建议开始解析的最佳谱峰。它有 200 多个官能团和数百个解析频率。此程序还允许与化学结构碎片关联。现在，用户可以链接到 *Sadtler Handbook of Reference Spectra - IR* 中的每个官能团，以了解更多对照信息。用户还可以自建官能团谱带库。

有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/analyzeitir

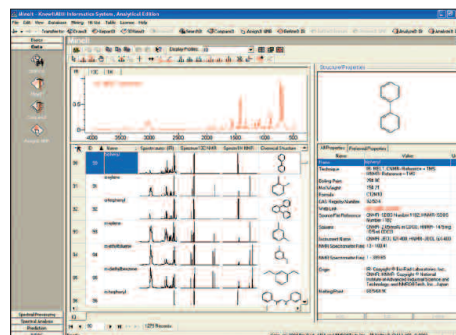
(IR/NIR、Analytical 和 Spectroscopy Edition 中的可选功能)

分析法：红外、拉曼、近红外、核磁共振、质谱、紫外-可见光、色谱

KnowItAll 分析化学版为各种分析技术（包括红外、拉曼、近红外、核磁共振、质谱、紫外-可见光、色谱）提供一个综合软件环境。

配有的程序：

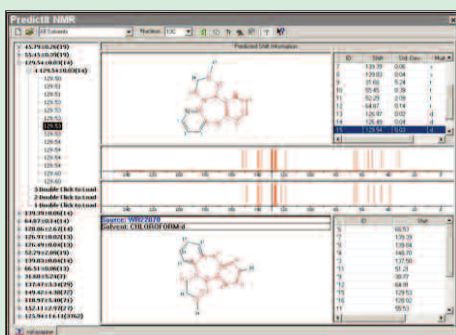
- **SearchIt** - 检索光谱、谱峰、化学结构和属性
- **Mixture Analysis** - 分解混合物光谱的组成成分
- **Minelt with Database Building** - 使用红外、拉曼、近红外、核磁共振、质谱、紫外-可见光谱、结构和属性构建集多种分析方法的数据库，包括光谱批量处理
- **AssignIt NMR** - 为核磁共振标峰
- **ProcessIt NMR** - 批量或单一地将自由感应衰减信号处理成光谱图
- **PredictIt NMR** - 根据输入的化学结构和现有的谱库预测核磁共振光谱图
- **Refinelt IR** - 处理红外和近红外光谱（包括基线校正、归一、谱减等）
- **Refinelt Raman** - 处理拉曼光谱（包括基线校正、归一、谱减等）
- **ProcessIt MS** - 质谱和质谱联用处理
- **Overlap Density Heatmap** - 对一组光谱进行直观数据挖掘
- **DrawIt** - 绘制二维结构
- **3D ViewIt** - 输入并直观显示三维化学结构
- **ReportIt** - 使用光谱、结构、属性及其他创建报告
- **CompareIt** - 数据绘图和直观显示
- **Batch Property Calculation** - 成批计算属性



可选功能：

- **AnalyzeIt IR** - 红外官能团分析
- **AnalyzeIt Raman** - 拉曼官能团分析
- **AnalyzeIt Polymer IR** - 聚合物红外官能团分析
- **IUPAC NameIt/DrawIt** - 根据结构生成 IUPAC 名称或根据 IUPAC 名称生成结构
- **AnalyzeIt MVP** - 多元因子分析以深入了解数据中的隐藏模式

有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/analyticaledition



PredictIt™ NMR - 核磁共振谱预测

可为碳-¹³、氢-¹ 和许多其他原子核预测核磁共振谱。用户输入化学结构，预测自动运行。KnowItAll 利用有使用权的谱库分子碎片数据计算结果，分子碎片结构由中心原子的“n”键原子定义各层环境。

有关更多详情或查看演示视频，请访问
www.knowitall.com/predictitnmr

(Analytical Edition 中附带)

分析法：红外、拉曼、近红外、质谱、紫外-可见光、色谱

KnowItAll 光谱版为红外、拉曼、近红外、质谱、紫外-可见光谱图和色谱法提供一个全面集成的软件环境。

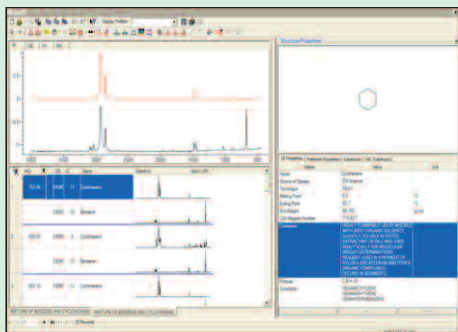
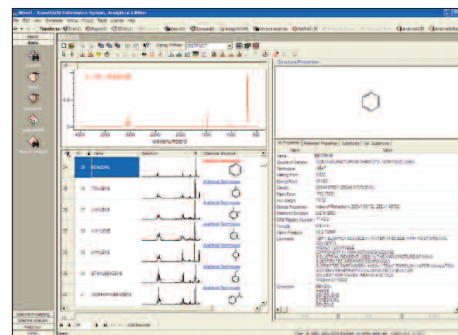
配有程序：

- **SearchIt** - 检索光谱图、谱峰、化学结构和属性
- **Mixture Analysis** - 分解混合物光谱的组成成分
- **MinIt with Database Building** - 使用红外、拉曼、近红外、质谱、紫外-可见光谱、化学结构和属性构建多分析法用户库。包括光谱图批量处理
- **RefineIt IR** - 处理红外和近红外光谱（包括基线校正、归一、谱减等）
- **RefineIt Raman** - 处理拉曼光谱（包括基线校正、归一、谱减等）
- **ProcessIt MS** - 质谱和质谱联用处理
- **Overlap Density Heatmap** - 对光谱数据进行直观数据挖掘和分析
- **DrawIt** - 绘制二维化学结构
- **ReportIt** - 使用光谱、化学结构、属性及其他创建报告
- **CompareIt** - 数据绘图和直观显示
- **Batch Property Calculation** - 成批计算属性

可选功能：

- **AnalyzeIt IR** - 红外官能团分析
- **AnalyzeIt Raman** - 拉曼官能团分析
- **AnalyzeIt Polymer IR** - 聚合物红外官能团分析
- **IUPAC NameIt/DrawIt** - 根据结构生成 IUPAC 名称或根据 IUPAC 名称生成结构
- **AnalyzeIt MVP** - 多元因子分析以深入了解数据的隐藏模式

有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/spectroscopyedition



Mixture Analysis - 分解混合物光谱成组分

此应用程序通过光谱来解析混合物的成分。可将一个混合物样品的光谱与用户自建或有使用权的谱库进行比较,最后会生成一系列合成光谱,每个均附随组成光谱及差谱(实际混合物的光谱和合成光谱图之差)。合成光谱按照其与查询谱的相近程度排列。

有关更多详情或查看演示视频,请访问
www.knowitall.com/mixtureanalysis

(所有版本均附带: IR/NIR、Analytical、Spectroscopy、Raman、UV-Vis)

KnowItAll 拉曼版

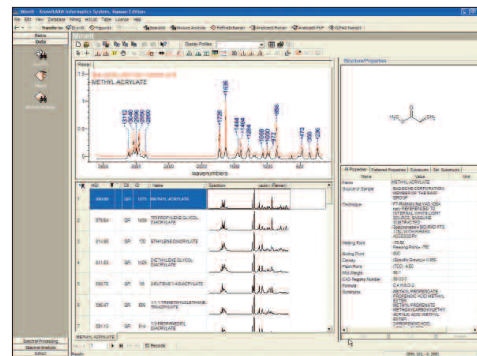
产品号 890700

分析法：拉曼

KnowItAll 拉曼版为拉曼光谱解析提供一个软件环境。

配有程序：

- **SearchIt** - 检索拉曼光谱、谱峰、化学结构和属性
- **Minelt** - 显示光谱图、结构和属性
- **Mixture Analysis** - 分解拉曼混合物光谱的组成成分
- **Refinelt Raman** - 处理拉曼光谱（包括基线校正、归一、谱减等）
- **Overlap Density Heatmap** - 对一组光谱库进行直观挖掘和分析
- **DrawIt** - 绘制二维化学结构
- **ReportIt** - 使用光谱、化学结构、属性及其他创建报告
- **CompareIt** - 数据绘图和直观显示
- **Batch Property Calculation** - 成批计算属性



可选功能：

- **Analyzelt Raman** - 拉曼官能团分析
- **Database Building** - 用拉曼光谱、化学结构和属性自建用户库。此过程也可采用批量处理方式进行
- **IUPAC NameIt/DrawIt** - 根据结构生成 IUPAC 名称或根据 IUPAC 名称生成结构
- **Analyzelt MVP** - 执行多元因子分析以深入了解一组数据的隐藏模式

有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/ramanedition

KnowItAll 紫外-可见版

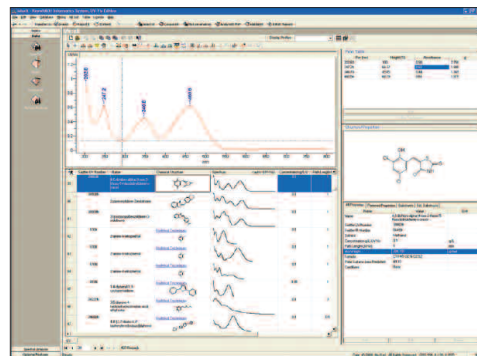
产品号 876500

分析法：紫外 - 可见光

KnowItAll 紫外-可见版为紫外-可见光谱提供一个软件平台。

配有有用程序：

- **SearchIt** - 检索紫外-可见光谱、谱峰、化学结构和属性
- **Minelt with Database Building** - 使用紫外-可见光谱、结构和属性创建用户数据库
- **Mixture Analysis** - 分解混合物紫外-可见光谱的组成成分
- **Overlap Density Heatmap** - 对一组光谱数据进行直观挖掘和分析
- **DrawIt** - 绘制二维化学结构
- **ReportIt** - 使用光谱、化学结构、属性及其他创建报告
- **CompareIt** - 数据绘图和直观显示
- **Batch Property Calculation** - 成批计算属性



可选功能：

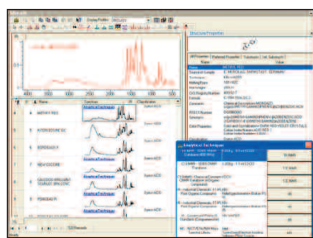
- **IUPAC NameIt/DrawIt** - 根据结构生成 IUPAC 名称或根据 IUPAC 名称生成结构
- **Analyzelt MVP** - 执行多元因子分析以深入了解数据集的隐藏模式

有关更多详情或查看演示视频，请访问 www.knowitall.com/uv-visedition

可选的应用程序

Database Building Option – 使用光谱、化学结构和属性创建数据库

产品号 850100



研究人员可使用 KnowItAll 的 Minelt Database Building 自建包含多种分析法† (红外、拉曼、近红外、核磁共振、质谱、紫外-可见光、色谱)、化学结构和其它数据的可搜索谱库。

有关更多详情或查看演示视频, 请访问 www.knowitall.com/databasebuilding

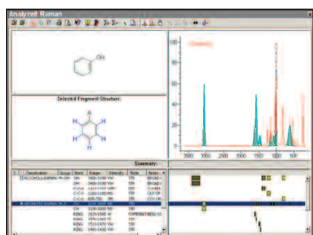
(Spectroscopy、Analytical 和 UV-Vis 版附带, 其他 KnowItAll 版可选装)

AnalyzeIt™ IR – 官能团分析

产品号 851200

AnalyzeIt™ Raman – 官能团分析

产品号 894200

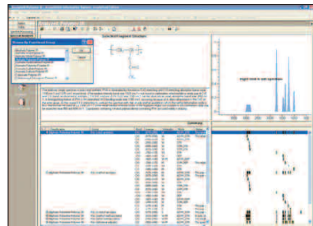


AnalyzeIt IR 或 Raman 可用于解析红外或拉曼光谱的谱带。只要载入一个光谱并点击需要了解的谱峰, 即可生成一组在该位置可能出现的官能团。AnalyzeIt 还会建议开始解析的最佳谱峰。此应用程序还允许谱带与某个化学结构关联。用户还可以自建官能团谱带库。

有关更多详情或查看演示视频, 请访问 www.knowitall.com/analyzeitir 或 www.knowitall.com/analyzeitraman

AnalyzeIt Polymer IR – 聚合物分析

产品号 854700

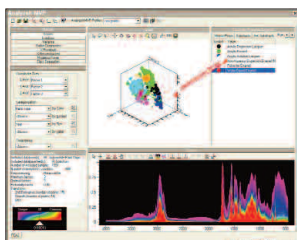


商用聚合物检索鉴别、归类和解析颇有难度。一条重要信息是光谱图与化学结构的关联信息, 它们不能只通过光谱检索获得。AnalyzeIt Polymer IR (附带一个聚合物光谱与化学结构的关联知识库) 是一个协助这一过程的应用程序。用户还可以自建官能团谱带库。

有关更多详情或查看演示视频, 请访问 www.knowitall.com/analyzeitpolymerir

AnalyzeIt MVP – 多元因子分析

产品号 850800



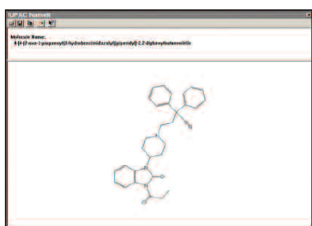
AnalyzeIt MVP 采用了 Infometrix 的化学统计学工具对光谱、色谱或数字数据进行主因子分析 (通过著名的 Pirouette® 软件)†, 使用户可以:

- 对用户数据中的隐藏模式和关系有深入的了解
- 探索数据间的关联, 以回答重要的研发或生产问题
- 保存结果以供日后参考、汇报或调查

有关更多详情或查看演示视频, 请访问 www.knowitall.com/analyzeitmvp

IUPAC NameIt™ & DrawIt – 通过结构获得 IUPAC 系统名称或通过 IUPAC 系统名称获得结构

产品号 854400



有了 KnowItAll 的 IUPAC NameIt 和 IUPAC DrawIt 选件, 即可使用 IUPAC 的系统规则轻松地命名或创建化学结构。只要输入一个化学结构或名称, 即可根据国际公认的标准命名规则生成相应的名称或化学结构, 无须记忆。用这种方法生成名称和化学结构不仅节省时间, 还可确保实验室内部的沟通和数据挖掘准确且规范化。

有关更多详情或查看演示视频, 请访问 www.knowitall.com/iupac

KnowItAll 可导入、处理多种仪器光谱信号和多种文件格式。支持的格式取决于用户的 KnowItAll 版本。

红外

Sadtler IRF (*.irf)	一般性 XY 数据 (*.*)	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)

拉曼

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)
一般性 XY 数据 (*.*)	JEOL JCAMP (*.wsf)	Thermo/Nicolet (*.spa)

近红外

Sadtler IRF (*.irf)	一般性 XY 数据 (*.*)	Mattson (*.ras, *.abs)
Bomem (*.a01)	GuidedWave (*.*)	PE Spectrum (*.sp)
Bruker (*.*)	Horiba MDW (*.mdw)	Shimadzu (*.irs, *.smf)
Digilab (*.dt)	JASCO (*.jws, *.j1d)	Spectacle/Shimadzu (*.irs)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	Thermo/Nicolet (*.spx)

核磁共振 (仅处理过的光谱)

Bruker Aspect (*.*)	JEOL Alice (*.als)	MestRe-C (*.mrc)
Bruker TopSpin (*.1r, *.fid)	JEOL Delta NMR files (*.jdf)	NUTS (*.*)
Bruker UXNMR/XWinNMR 1D (*.1r, *.fid)	JEOL DA-5000 (*.dat)	Sparky NMR (*.ucsf, *.sf)
Bruker UXNMR/XWinNMR 2D (*.2r)	JEOL GX/GSX/EX-90 NMR files (*.gxd, *.gxp)	Spectacle (*.nmr)
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)
一般性 XY 数据 (*.*)		

质谱

Agilent / HP ChemStation (*.d; data.ms)	一般性 XY 数据 (*.*)	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)	Netzsch (*.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 SXS (*.dat)	MASPEC (*.mss)	Shimadzu QP-5000 (*.r)	
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir)	Mass Evolution (*.spe)		

紫外 - 可见

Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir)	JCAMP (*.dx, *.jdx)	PG Instruments (*.spd)	Spectacle (*.uvd)
一般性 XY 数据 (*.*)	JASCO (*.jws)	Shimadzu (*.spc)	

气相色谱

ANDI Chromatography (*.cdf)	一般性 XY 数据 (*.*)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir)	MS ChemStation (*.ms)

化学结构文件格式

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

数据文件格式

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

KnowItAll 版本功能对比表

● - 本版附带 ○ - 选装

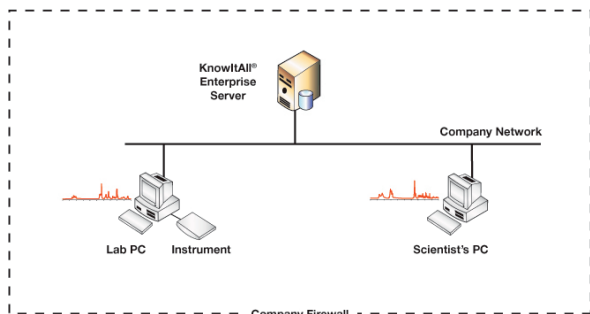
部件	说明	IR/NIR 版	Spec 版	Analytical 版	Raman 版	UV-Vis 版
Data Toolbox						
SearchIt™	数据搜索（全光谱、化学结构、谱峰、属性等）	●	●	●	●	●
Minelt™	数据库显示和挖掘	●	●	●	●	●
Database Building	自建库		●	●		●
Overlap Density Heatmap	重叠密度热谱	●	●	●	●	●
CompareIt™	数据绘制和直观显示	●	●	●		●
AssignIt™	标峰			●		
Mixture Analysis	混合物分析	●	●	●	●	●
Batch Property Calculation	成批计算属性	●	●	●		●
Pirouette® Model Support	Pirouette 模型支持	●	●	●	●	●
Spectral Processing Toolbox						
Refinelt™ IR	红外光谱处理	●	●	●		
Refinelt™ Raman	拉曼光谱处理		●	●	●	
ProcessIt™ NMR	核磁共振光谱处理			●		
ProcessIt™ MS	质谱和质谱联用处理		●	●		
Additional MS File Imports Filters	其他质谱文件导入过滤器		●	●		
Spectral Analysis Toolbox						
Analyzelt™ IR	红外光谱官能团分析					
Analyzelt™ Raman	拉曼光谱官能团分析					
Analyzelt™ MVP	化学计量分析					
Validatelt™	模型验证	●	●	●		●
Analyzelt™ Polymer IR	聚合物红外光谱官能团分析			○		
Prediction Toolbox						
PredictIt™ NMR	核磁共振化学位移预测			●		
Basics Toolbox						
DrawIt™	二维化学结构绘制	●	●	●	●	●
ReportIt™	定制报告	●	●	●	●	●
3D ViewIt™	直观显示三维化学结构		●	●		●
Browselt™	网络门户, 包含对 KnowItAll 用户有用的链接	●	●	●	●	●
IUPAC Toolbox						
IUPAC DrawIt™	将 IUPAC 名称转换为化学结构					
IUPAC Namelt™	将化学结构转换为 IUPAC 系统名称					
Other Options						
Spectral Database	可选择 100 多个光谱数据库或者 HaveItAll 年度许可授权					
KnowItAll® Enterprise Server	集中光谱和化学信息服务器					
Infometrix Pirouette® 软件	其他化学计量工具					
Upgrade Plan	KnowItAll 用户的支持和更新					

提高实验室的效率：集中收集本机构产生的所有光谱图和色谱

鉴于日益增长的数据信息共享需求，实施整个企业范围内的数据管理系统变得日益重要。Bio-Rad Laboratories 提供全面的解决方案，集中、保护和充分利用一个实验室或整个机构内的数据资源。有关这个方案的更多详情，请访问 www.knowitall.com/enterprise

SpecFinder™ - 查找您的数据

产品号 886200

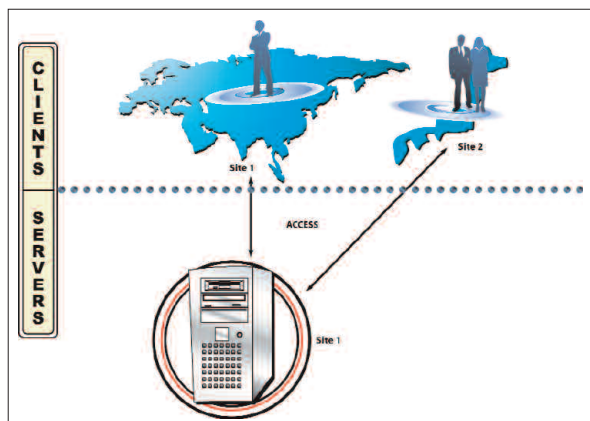


SpecFinder 是一个安全、可扩展、易于部署和维护的独特企业级分析化学索引方案。管理层和员工可用它即刻找到存储在个人计算机、仪器计算机和网络硬盘上的光谱、色谱甚至化学结构。

指定用户可使用跨平台的网络浏览器接口 (KnowItAll AnyWare) 或者 Microsoft Windows 版软件接口 (KnowItAll 信息系统) 搜索存储在 KnowItAll Enterprise Server 上的 SpecFinder 索引。

KnowItAll Enterprise Server - 存储您的数据

产品号 878000

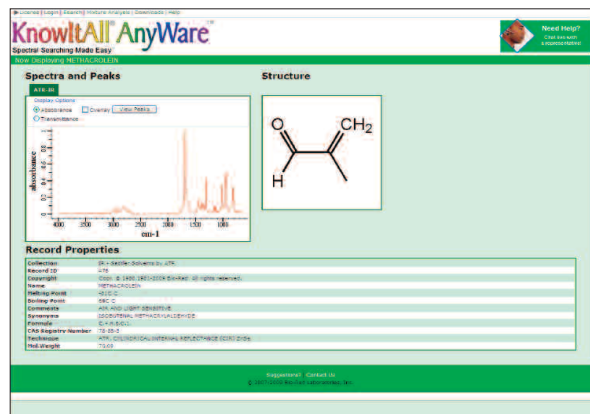


KnowItAll Enterprise Server 是一种在本机构中创建企业级分析数据储藏库的技术平台。该系统快速、可靠、安全且可扩展，无需过多的支持和维护；可通过一个统一的平台使用本机构的所有光谱图和色谱。

指定用户可使用跨平台的网络浏览器接口 (KnowItAll AnyWare) 或者 Microsoft Windows 版软件接口 (KnowItAll 信息系统) 搜索存储在 KnowItAll Enterprise Server 上的数据库。

KnowItAll AnyWare™ - 搜索您的数据

产品号 877400



KnowItAll AnyWare 是用于搜索存储在 KnowItAll Enterprise Server 上的光谱、结构和相关化学属性网络浏览器接口。无需安装软件，使部署毫不费力。如在防火墙内部署了 KnowItAll Enterprise Server，即可安全地使用数据。KnowItAll AnyWare 可与包括 Internet Explorer、Firefox、Safari 或 Chrome 在内的任意网络浏览器配合使用。

Bio-Rad 提供 130 多万张含 Sadtler 谱图的高质量红外, 拉曼, 近红外, 核磁共振, 质谱以及紫外可见光谱库。这些库含有纯化化合物和广泛的商用产品。它们适用于未知物谱图的解析, 鉴定, 检定和归类。用户可选择独立的谱库或者购买 HavelAll 年度使用权。

红外谱库: ATR-IR

 内容结构

基本聚合物衰减全反射 (ATR) 产品号 448500 500 张光谱

商品聚合物的衰减全反射 (ATR) 红外参考光谱图集。

聚合物衰减全反射 (ATR) 产品号 410700 2,390 张光谱

商品单体、聚合物及半成品的衰减全反射 (ATR) 参考光谱图集。包括膜、涂料、末道漆及压层所用的光谱图。

溶剂衰减全反射 (ATR)  产品号 436100 620 张光谱

此库包含常见溶剂使用标准衰减全反射技术的傅立叶变换红外光谱。

管制药和处方药衰减全反射 (ATR)  产品号 447900 1,160 张光谱

此库包含管制药、处方药以及对刑侦实验室有价值的类固醇或其它药物分析的衰减全反射红外 (ATR-IR) 光谱图。

**类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类
衰减全反射 (ATR)** 

产品号 447800 300 张光谱

此库由 Forensic Spectral Research 编写, 包含用于刑侦、制药、医疗和其他领域的类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类。

无机物衰减全反射 (ATR) 产品号 448600 260 张光谱

包含无机化合物的衰减全反射光谱。此光谱集为无机材料中常见的许多代表性阴离子和多原子离子。

有机金属化合物衰减全反射 (ATR)  产品号 448700 170 张光谱

这是专门为有机金属化学人员所编写的衰减全反射谱库。样品是来自专业研究机构的, 以期达到一批精选典型。

红外谱库: 聚合物和相关化合物

 内容结构

丙烯酸酯和甲基丙烯酸酯 产品号 447600 470 张光谱

此谱库包含丙烯酸酯类化合物及甲基丙烯酸酯类化合物。含许多常见产品中的聚合物和单体化合物。

粘合剂和密封剂 产品号 433000 2,070 张光谱


此集包含很多基本合成树脂和合成橡胶, 以及固化和未固化的商用产品。典型产品包括橡胶粘合剂、接触型胶粘剂、热熔胶、硅胶、压敏胶、接合剂和密封剂。

粘合剂和密封剂 (子集 A) 产品号 423000 520 张光谱

此库包含粘合剂行业广泛使用的十一个类别的粘合剂和密封剂。包括基本合成树脂、合成橡胶、未固化材料以及固化商用产品。

基本单体和聚合物数据库第 1 卷 (未改性)  产品号 421900 1,490 张光谱

此产品选集为聚合物和塑料的分析提供广泛应用。此集合包括许多经典化合物, 因此可当作标准参考库。

基本单体和聚合物数据库第 2 卷 (未改性)  产品号 422500 850 张光谱

此产品选集为聚合物和塑料的分析提供广泛应用。此库提供了更多光谱图, 可与第 1 卷配合使用, 以组成一个全面的基本聚合物参考集。

涂料化学品

产品号 421300

720 张光谱

此集为涂料业化学技术提供一个方便实用的参考。该库分为两部分：第一部分树脂，第二部分单体、前体和添加剂。它按涂料分类来分组，每组又以化学品类别来细分。

聚合物的受控热解物

产品号 434000

2,970 张光谱

此库包含聚合物在指定的恒定温度下裂解的光谱，旨在帮助鉴别主要的聚合物类型。

电厂材料

产品号 427000

1,070 张光谱

此库包含工厂使用的密封剂、合成橡胶、聚合物、润滑剂和相关材料商品的光谱。

环氧树脂类、固化剂和添加剂

产品号 436300

700 张光谱

这是一个傅立叶变换红外光谱库。它包含热固材料生产过程中使用的原材料，如：复合材料、印制电路板和电子电路组装，以及油漆、密封剂、粘合剂和各种表面涂料所用的材料。

阻燃剂

产品号 420400

590 张光谱

含商用惰性和活性阻燃剂的红外光谱库。

Hummel 定义聚合物

产品号 465500

2,330 张光谱

Wiley Chemical Concepts 的谱库。Dieter O. Hummel 教授的 Atlas of Polymer and Plastics Analysis, Volume 1, Band 1: Defined 是非常著名并在全球通用的图谱收藏。它包含聚合物、共聚物和聚合物添加剂的光谱图，可用于质量控制、定性或结构解析。

Hummel 定义聚合物 (基本集)

产品号 465600

1,040 张光谱

Wiley Chemical Concepts 的谱库。这是“Hummel 定义的聚合物”谱库的一个子集，包含聚合物、共聚物和聚合物添加剂。

Hummel 工业聚合物第 1-3 卷

产品号 465100

5,000 张光谱

Wiley Chemical Concepts 的谱库。由 Dieter O. Hummel 教授单独审核的聚合物傅立叶变换红外光谱图集。这些化合物在工业上普遍使用，均从研发它们的制造厂或研究实验室直接收集。

Hummel 工业聚合物第 1 卷

产品号 465200

1,910 张光谱

Wiley Chemical Concepts 的谱库。有天然及合成建筑材料聚合物、天然及合成纤维、合成橡胶、各种树脂（如：天然树脂、漆用树脂、浸渍树脂、充填树脂）、分散剂、成型印刷油墨、油脂，脂肪、石蜡、焦油、无机化合物、粘合剂、灰泥、水泥、保护胶体、固化剂、引发剂、活化剂，促进剂以及改性剂。

Hummel 工业聚合物第 2 卷

产品号 465300

1,560 张光谱

Wiley Chemical Concepts 的谱库。是全球最大的用于聚合过程的商品单体集。包括以下几类单体：乙烯单体、裂解物、醇、酚、羧酸、羧酸盐、酯、酐、酰胺、酰肼、尿烷、氰酸盐、雷酸盐、杂环、氨基酸、硫代羧酸、磺酰胺、工业溶剂以及其他产品。

Hummel 工业聚合物第 3 卷

产品号 465400

1,520 张光谱

Wiley Chemical Concepts 谱库。有 Hummel 教授的强化聚合物添加剂和辅助剂傅立叶变换红外谱库。它为聚合物工作者提供了一个全面的参考。它包含以下几类：抗氧化剂、稳定剂（包括 PVC 稳定剂）、光稳定剂、着色剂、增亮剂、填充剂、增塑剂、弹性剂、补充剂、加工剂、纺织助剂、硫化剂以及橡胶助剂。

Hummel/Sadtler 聚合物

产品号 422200

1,920 张光谱

本数据库是科隆大学 Dieter Hummel 教授与 Bio-Rad 的合作成果。它广泛地包含聚合物、共聚物和聚合物添加剂。

单体和聚合物 (全集)

产品号 321900

11,270 张光谱

这是全球最大的用于聚合过程的单体、聚合物、催化剂、固化剂、抗氧化剂、稳定剂、改性剂和其他添加剂的商供红外图集。聚合物包括脂族羟、聚酯、聚酰胺、磺化聚合物、硅酮、环氧树脂类、乙烯聚合物、亚乙烯聚合物、纤维素衍生物、甲基丙烯酸酯聚合物、杂环乙烯聚合物以及聚合脂。它还包括许多单体。

单体和聚合物第 1 卷 (改性)

产品号 422000

1,790 张光谱

此集包含商品, 其中包括精选的添加剂, 为解决聚合物和塑料分析提供广泛的基础。产品类别包括聚乙烯、聚丙烯、聚苯乙烯、聚丁二烯、聚酯、聚丙烯酸物、聚酯和聚乙烯基吡啶。它含有许多标准化合物, 使其作为对照基准。(这些化合物由 Richard A. Nyquist 选定并审核)。光谱按照化学品的复杂度高低分为四十九类。

单体和聚合物第 2 卷 (改性)

产品号 422300

1,700 张光谱

此集含单体、聚合物及前体服务于从事化合物识别、质量控制、劣化研究、材料选择或课堂教学的人员。它包含商品光谱, 为解决聚合物和塑料分析方面提供广泛的基础。产品类别包括聚乙烯、聚丙烯、聚苯乙烯、聚丁二烯、聚酯、聚丙烯酸物、聚酯和聚乙烯基吡啶。(这些化合物由 Richard A. Nyquist 选定并审核), 包括四十六类单体和聚合物。

增塑剂

产品号 433700

1,480 张光谱

此库包含用于聚合物加工及合成的多种商供增塑剂。化合物类别有: 福尔马林、烃、乳胶、苯六甲酸酯、腈、苯氧基、聚酯、酸衍生物 (如: 松香酸、己二酸、苯甲酸、辛酸、柠檬酸、富马酸、间苯二酸、月桂酸、马来酸、油酸、棕榈酸、酞酸、癸二酸、硬脂酸、琥珀酸和酒石酸), 以及联二苯、环氧树脂类、醚类、乙二胺、甘油、甘醇和石蜡等化合物的衍生物。

聚合物添加剂

产品号 424800

1,740 张光谱

Bio-Rad 编写了一份聚合物添加剂红外光谱集, 为从事聚合物的化学人员提供一个方便实用的参考库。

聚合物

产品号 439900

470 张光谱

此库包含常见的基本聚合物。包括建筑聚合物、合成橡胶、各种树脂、焦油、无机化合物、固化剂、引发剂和活化剂、促进剂和改性剂。

防护剂

产品号 447500

770 张光谱

此聚合物添加剂红外谱库包含涂料、抑止剂、稳定剂、抗氧化剂、抗静电剂以及防腐剂。

橡胶化学品

产品号 424300

580 张光谱

此库包含橡胶添加剂的红外光谱, 按主要功能分组。它含有橡胶行业使用的各种化学类别, 包括促进剂、活化剂、阻滞剂、硫化剂、抗氧化剂、增塑剂、增粘剂和稳定剂。

Sadtler/Scholl 聚合物加工助剂

产品号 423200

1,150 张光谱

此集含聚合物加工试剂, 如: 增塑剂、无机填充剂、无机颜料、有机颜料、紫外稳定剂、荧光增白剂、抗氧化剂、稳定剂、抗静电剂、杀菌剂、阻燃剂、促进剂、固化剂、活化剂、加工助剂和溶剂。此库原先为 Hummel/Scholl Polymer Atlas 的第三卷, 原始数据由 Friedrich Scholl 博士编写。

红外谱库: 纯有机化合物

 内容结构

醇和酚

产品号 438100

1,920 张光谱

此库包含醇和酚类的光谱图, 这些醇和酚或作为溶剂使用, 或在合成其他化合物时使用。

醛

产品号 438200

690 张光谱

此醛类化合物谱库是香水和香料行业使用的基本化合物, 以及医药合成中间体和塑料添加剂。

氨基酸和肽

产品号 438300

790 张光谱

此库包含氨基酸、肽以及氨基酸化合物。用户从这个重要的生物物质集合里搜索包含以上基本组成单元的化合物。

酞和内酯

产品号 438400

320 张光谱

此库提供含酞和内酯类有机化合物的红外光谱库。

羧酸

产品号 438500

1,520 张光谱

此库包含酸类红外光谱，这些化合物广泛用于有机合成。

凝聚相红外标准物 (综合)

产品号 320100

75,570 张光谱

有机化合物的综合红外对照光谱数据库。它包含大多数简单的脂肪族化合物、芳香族化合物、脂环族化合物、杂环化合物以及无数复合材料的光谱图。还包括从非常简单到非常复杂的同系物系列，它们支持同系物光谱趋势的研究。

染料、炔烃和偶氮化合物

产品号 438600

940 张光谱

此库包含染料、炔烃和偶氮化合物的光谱。它为染料或色彩行业提供一个参考基准。

酯

产品号 438700

1,800 张光谱

此集合包含酯类红外光谱。这些化合物在香水行业和其它应用领域应用非常广泛。

易爆物

产品号 438800

720 张光谱

此库包含爆炸物或爆炸物组成成分。它含有 Bureau of Alcohol, Tobacco, and Firearms 出版的“2002 List of Explosive Materials”中的化合物。它还包含叠氮炸药、硝酸盐炸药混合物、苦酸盐炸药、过氧化物以及高氯酸盐。

气体和蒸汽

产品号 420500

150 张光谱

此库中的光谱包括永久性气体以及实验室和加工厂常见的挥发性液体的蒸汽。其中许多化合物涉及当前空气质量标准法规（包括 National Ambient Air Quality Standards Act 和 Occupational Safety and Health Standards Act）对大气污染分析非常有用。它包含以下几类化学品：烃、乙醚、氟利昂、氮化物以及硫化物。

烃

产品号 439000

1,060 张光谱

此库包含烃化合物的红外光谱，为研究人员提供了一个方便的参考。

烃和卤代烃

产品号 439100

1,880 张光谱

此集包含烃和卤代烃类化合物的红外光谱。

工业化学品，傅立叶变换红外纯有机化合物

产品号 465800

20,310 张光谱

Wiley Chemical Concepts 提供的有机化合物傅立叶变换红外光谱图。这些化合物在工业化学中使用。

工业化学品，傅立叶变换红外基本有机化合物

产品号 465900

1,000 张光谱

Wiley Chemical Concepts 提供的谱库。包含从 Chemical Concepts 的“FT-IR 有机化合物”集中手工挑选的常见有机化合物。

中间体 (未混合)

产品号 422900

490 张光谱

此库包含一些特定化学品，这些化学品是生产其他产品过程中的中间体，分为 17 大类。包括酸、乙醇、乙醚、胺、腈、硫化物、酮、芳烃等。

光谱数据库

酮  产品号 439200 1,810 张光谱

此库包含酮类化合物，可用于对酮类化合物进行鉴别、归类和检定。

Merck/Sadtler  产品号 424500 2,940 张光谱

此库根据 Merck-Schuchardt 设计的 Merck FT-IR Atlas (《默克傅立叶变换红外图册》) 一书中纯物质傅立叶变换红外光谱图编写。

核酸、核苷及核苷酸  产品号 439300 1,450 张光谱

此库包含核酸化合物的红外光谱。为研究分子变换过程的人员使用，可用于对这些材料进行鉴别、归类和检定。

有机金属化合物、无机物、硅烷、硼烷和氖化合物  产品号 439400 1,140 张光谱

此红外光谱库专门针对硼、硅酮和氖的化合物以及有机金属化合物和无机物编写。

磷化合物  产品号 439500 1,110 张光谱

此库包含磷化合物，可用于对磷化合物进行鉴别、归类和检定。

Q-Sadtler 参考谱  产品号 426000 10,000 张光谱

这是学术实验室和工业实验室常见的纯有机物综合谱库，包括广泛的各类商供化学品。它可以用于有机化学及其他大学课程，通过比较官能团来鉴别化学品。此库还可作为工业实验室的参考基准，用红外光光谱鉴别有机化合物。

精选红外参考谱库  产品号 400000 2,500 张光谱

此库包含纯有机化学物，可用于对纯样本进行识别和归类，它简单、实用。

精选标准物  产品号 420200 2,490 张光谱

此库包含的光谱代表各种有机化合物。它提供一个方便的小型有机化合物红外光谱图集。

精选蒸汽相  产品号 422800 500 张光谱

这是蒸汽相光谱图红外数据库，附录 Nyquist 的 The Interpretation of Vapor Phase Infrared Spectra - Group Frequency Data。它提供了一个分析蒸汽的基本化合物集。

溶剂 (未混合)  产品号 436000 630 张光谱

此库包含常见溶剂的傅立叶变换红外参考光谱，用于鉴别和分析这些化合物。

溶剂 (蒸汽相)  产品号 436200 620 张光谱

此库包含常见溶剂的傅立叶变换红外光谱。它对采用气相色谱分离法鉴别气态化合物的光谱工作非常有用。

起步谱库

产品号 405000

11,800 张光谱

Sadtler 起步库是一个包括有机化学品和专利单体及聚合物的红外光谱图集。

类固醇类谱库

产品号 439600

860 张光谱

此库包含代表性类固醇类化合物的傅立叶变换红外光谱。

糖类和碳水化合物

产品号 439700

570 张光谱

此库含糖类和碳水化合物的红外光谱，可用于对此类样品的鉴别、归类和检定。碳水化合物包含各种糖类、淀粉和纤维。

硫化物

产品号 439800

1,090 张光谱

此库包含硫化物的红外光谱，可用于对此样品的鉴别、归类和检定。

大学标准谱库

产品号 420100

300 张光谱

此库提供了一个方便小型有机化合物红外光谱图集，这些化合物对大学有机化学基础课程，有机化学实验和定性分析的辅助实验课有帮助。它们以化合物的类别分组。

蒸汽相红外标准物 (综合)

产品号 320300

9,190 张光谱

本集包含常见纯有机化合物的红外蒸汽光谱，以通过气相色谱红外、热重红外或其他蒸汽相分析法鉴别未知的化合物。这些化合物对污染和毒性鉴定至关重要。

红外谱库：工业化合物**基本表面活性剂 (未改性)**

产品号 436700

850 张光谱

此集为研究表面活性剂的科研人员提供了一个有代表性的参考谱库。它包含阴离子化合物、阳离子化合物以及非离子化合物的傅立叶变换红外光谱图。

油脂、石蜡及衍生物

产品号 432500

1,800 张光谱

此库中的化合物包括动物油脂、动物蜡（原蜡和提炼蜡）、脂肪酸、脂肪酸酯（非甘油三酯）、脂肪酰胺、脂肪胺、不皂化物、其他脂肪衍生物、海洋动物油脂、矿物蜡（原蜡和提炼蜡）、改性矿物蜡、改性植物蜡、合成蜡、皂、植物油脂以及植物蜡（原蜡和提炼蜡）。

Hummel 表面活性剂

产品号 465700

1,030 张光谱

Wiley Chemical Concepts 表面活性剂由 Dieter O. Hummel 博士编写，它向使用表面活性剂的人员提供一个全面的谱库，带有工业表面活性剂样品数据。

中间体 (工业级)

产品号 432900

830 张光谱

商供中间体红外光谱，及化学品制备中的前体，包括酸、醇、乙醛、胺、酮、腈、硫化物以及芳烃。这些化合物用于制造药品、表面活性剂、染料、增塑剂和其他专用化学品。

润滑剂

产品号 421700

880 张光谱

此库包含在各种工业和汽车应用中使用的润滑剂的红外光谱。这些化合物在制作润滑脂、液压油、冷却液、机油和金属皂中应用。此库包括石油制品及合成润滑剂，如：氯氟甲烷(CFC)、二价羧酸酯、润滑聚合物、磷酸酯和硅酮。

润滑添加剂

产品号 425500

1,570 张光谱

此库为用于发动机油、变速箱液、液压油、齿轮油、工业用油、金属加工和加工油的添加剂红外谱图。它应用于汽车、船舶、航空和石油业，以及使用机械的任何行业。鉴于这些化合物的性质，这些光谱图的分析量比正常情况下大。

石油化学类

产品号 420800

320 张光谱

这些光谱从商供石油产品中选取，用于汽油、燃油、润滑剂和其他产品的改性和改良。此数据库中有 20 多个类，其中包括抗酸剂、抗爆剂、抗氧化剂、催化剂、分散剂、胶质抑制剂、胶溶剂、阻燃化合物、防锈剂、粘度改良剂等。

多元醇

产品号 422600

270 张光谱

此库包含商供多元醇类红外光谱。它包含作为润滑剂、预聚合物和中间体（用于制药）和许多其他工业产品制造领域的多元醇类、聚乙二醇、甘油、碳水化合物、淀粉、单糖、二糖和多糖。

溶剂 (工业级)

产品号 432700

910 张光谱

此库提供一个方便实用的参考基准，以帮助鉴别和分析常见的工业溶剂。这些溶剂分成四大部分：烃，只有一种特征原子或官能团的化合物，有多种特征原子或官能团的化合物，以及氘类化合物。

表面活性剂 (综合)

产品号 323500

10,000 张光谱

这是个最大的商供洗涤剂、乳化剂、消泡剂、软化剂、多价螯合剂、肥皂、增效剂和配方产品的红外光谱图集。

表面活性剂第 1 卷 (改性)

产品号 423500

1,790 张光谱

协助解决表面活性剂分析问题的精选红外光谱集 1。适用于分析鉴别、质量控制、解析研究、产品选择、特定应用以及教学等。此集包含肥皂、乳化剂、螯合剂、防蚀剂、增滑剂、增稠剂、光漂白剂、润滑剂、消泡剂、多价螯合剂、软化剂等商供产品。

表面活性剂第 2 卷 (改性)

产品号 425200

1,700 张光谱

协助解决表面活性剂分析问题的精选红外光谱集 2，这些产品在洗涤剂、肥皂、乳化剂、螯合剂、防蚀剂、增滑剂、增稠剂、光漂白剂和润滑剂等有应用。

红外谱库：刑侦科技

 内容结构

汽车漆片

产品号 460300

1,990 张光谱

此集用于进行颜色比对和/或化学比对。数据库中的所有色卡均来自实际生产中的喷漆批次。所含的漆料类型有丙烯酸溶液漆、丙烯酸分散漆、丙烯酸磁漆、聚酯磁漆、尿烷磁漆、底漆/丙烯酸清磁漆、非水分散体涂料 (NAD)、水基涂料等。

生化药品

产品号 447200

590 张光谱

此库包含各种生化药品，如：肽、氨基酸、碳水化合物、核酸、糖类、类脂类、类固醇类、萜烯、生物碱、甙、类胡萝卜素、类黄酮等

加拿大刑侦库

产品号 421200

3,490 张光谱

此库包含合法药物、非法药物、药物前体、用于制药的试剂，以及刑侦分析中常见的其它物质的光谱。此外，还包括某些常见的实验室和家用试剂。此数据库由加拿大政府 Department of National Health and Welfare（国家卫生福利部）编制。

常见滥用药物（酸/碱）

产品号 421400

580 张光谱

此集包含常被滥用药物的光谱图数据。其代表性的化合物多为按剂量提供的专利药，还有一些普通药和麻醉品。本集中有些混合物是街头药品，即非法制备的麻醉品。

染料

产品号 421600

520 张光谱

此染料集为染料或色彩行业专业人员提供了一个方便实用的参考信息源。染料按照 Colour Index（颜色索引，C. I.）法归类。

染料、颜料和着色剂

产品号 431600

2,550 张光谱

此染料、颜料和着色剂集为从事染料业的人员提供了一个方便实用的参考信息。

纤维和纺织化学品

产品号 420300

480 张光谱

本集包含天然和合成纤维。所含的部分天然纤维包括：丝、羊毛、棉、木棉、亚麻、黄麻、大麻纤维、剑麻、酒椰叶纤维和石棉。合成纤维包括 Textile Fiber Products Identification Act（除了金属类）中定义的所有通用类别。这些类别包括醋酸纤维素、丙烯酸、尼龙、聚偏氯乙烯、聚酯、人造纤维、三乙酸酯、乙烯基和维尼纶。纺织品包括消泡剂、洗涤剂、漂白剂、抗静电剂、调节剂、整理剂、软化剂以及其他试剂。

纤维（显微镜）

产品号 436400

450 张光谱

此库包含由傅立叶变换红外光谱仪和显微镜测量的商供合成纤维的高质参考光谱。此图集针对纤维和纱线样本测量，如果一条纱线有两种或更多成分，则会提供多个光谱。

香料、香精和油脂

产品号 436500

870 张光谱

此库为科研人员提供了一个有代表性的样品集，这些有机化合物用于制造香料和香精、天然物油、合成香水、萜烯和某些定香料。此库包含美国 Flavor and Extracts Manufacturers' Association（香料及萃取物制造商协会）认可的红外光谱图。

香料和香精（红外蒸汽相）

产品号 447400

490 张光谱

含用于制造香料、香水的纯有机化合物的蒸汽相红外光谱图。

食品添加剂

产品号 467100

990 张光谱

含直接添加到食物中的成分的红外谱图，这些成分经过 FDA 认可或者被 GRAS（公认安全）认可。

佐治亚州犯罪实验室库

产品号 460400

1,910 张光谱

此库为管制物质和一些常规分析中遇到的化合物以及佐治亚州亚特兰大 Georgia State Crime Laboratory (佐治亚州犯罪实验室) Division of Forensic Sciences (刑侦科学处) 制备的药物的红外参考谱。

药用辅料

产品号 447100

880 张光谱

此库为使用红外光谱学研究药品配方的人员编写, 它包含用于研发、生产、控制和监管药品制备的材料的光谱图。这些化合物可分为粘合剂、填充剂、稀释剂、助流剂、甜味剂、包衣、防腐剂、分散剂、香料、悬浮剂、助压剂等类别。

药品

产品号 443100

560 张光谱

此库含医疗和药品研究以及药物分析中常见的药物、药品和药物制剂。这些化合物选择自: Modern Drug Encyclopedia, The U.S. Pharmacopoeia, The British Pharmacopoeia, The International Pharmacopoeia, New and Non-Official Drugs 和 National Formulary。其类别包括麻醉剂、杀菌剂、抗生素、抗凝剂、抗病毒剂、心血管药物、利尿剂、酶、雌激素类、激素、松弛剂、镇静剂、兴奋剂、安定剂和维生素。

药剂和处方药 (酸/碱)

产品号 445700

880 张光谱

此集包含从 Physician's Desk Reference to Pharmaceutical Specialties and Biologicals 中选取的专利制剂和处方药的光谱图, 提供一种快速描述药物特征的方法。

类固醇类

产品号 420900

250 张光谱

此库包含有代表性的用于类固醇类研究中的重要化合物类别的傅立叶变换红外光谱。

类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类

产品号 447700

300 张光谱

此库由 Forensic Spectral Research 编写, 包含用于刑侦、制药、医疗和其他应用领域的类固醇类、雄激素类、黄体酮类和雌激素类。

红外谱库: 环保应用

 内容结构

HAZMAT 数据库

产品号 438900

410 张光谱

此库包含危险化合物的红外光谱图。这个精选物质集可用于对以上产品进行鉴别、归类和检定。

杀虫剂与农用化学品

产品号 436600

1,020 张光谱

这是在所有农产品生产阶段使用的化合物的综合精选集。此库中的有些物质还会被视为工业废弃物。这些化合物(其中大部分为杀虫剂)来源广泛。所用化学品均为商品, 不过此库也包含美国 Environmental Protection Agency (环保署) 向 Bio-Rad 提供的高纯度杀虫剂对照标准物。在大多数情况下, 这些化合物代表商用配方的活性成分, 也有一些完整配方。包括: 杀螨剂、杀菌剂、杀线虫剂、生长调节剂、激素、防腐剂、营养素、杀真菌剂、除草剂、杀虫剂、驱虫剂、诱虫剂、灭鼠剂和其他农用化学品。

污染物 (红外蒸汽相)

产品号 447300

910 张光谱

此数据库向分析、监测、控制或研究环境、生理或职业污染物和有毒物质的人员提供了一个光谱图参考。它包含的蒸汽相光谱图由气相色谱/傅立叶变换红外分析技术在高于环境温度的加热光学池中测得。

重点污染物

产品号 447000

470 张光谱

此库为从事分析、监测、控制或研究环境、生理或职业污染物和有毒物质的研究人员提供了一个方便实用的光谱图对照。这些化合物由列入“EPA Priority Pollutants List”、“Occupational Safety and Health Administration (OSHA) Category 1 List of Carcinogenic Substances”以及工业上常见的、州际运输时需关注的和“EPA Priority Pollutant List”中列出的有害化合物。此库包含的化合物有两类光谱图：即红外凝聚相和红外蒸汽相。

Sadtler EPA 化合物（蒸汽相）

产品号 461000

3,240 张光谱

此库旨在提供污染和毒理研究的参考光谱。它包含常见纯有机化合物的红外蒸汽相光谱图，有助于通过气相色谱红外、热重红外或其他蒸汽相分析法来识别未知化合物。

水处理化学品

产品号 421000

290 张光谱

含水处理过程的商供材料，如锅炉水添加剂和冷却水添加剂的红外光谱图。包括杀菌剂、螯合剂、凝结剂和絮凝剂。

红外谱库：无机物和有机金属化合物

内容结构

无机物

产品号 435900

1,100 张光谱

此库包含无机化合物光谱。所选样品代表无机材料中常见的阴离子和多原子离子，并根据周期表上的阴离子和多原子离子归类。此集包含硫酸铵、硝酸铵、硫酸钙等“典型”无机化合物的光谱图，以及带无机和有机配体的各种金属配位化合物的光谱图。此集中包含的类别有：无机化合物、无机配位化合物、有机配位化合物、金属羰基化合物和硼烷。

无机物（子集 A）

产品号 445900

240 张光谱

这是无机化合物的红外谱库。代表无机物中常见的阴离子和多原子离子，并根据周期表上的阴离子和多原子离子属来归类。

矿物和粘土

产品号 420600

420 张光谱

此集包含矿物和粘土光谱图的红外图谱。由矿物的复杂度高低来归类。

有机金属化合物

产品号 420700

350 张光谱

此库专门为有机金属化学人员编写。样品来自专业研究机构，以期达到精选典型。此库样品特征为拥有直接碳-金属键，以及金属原子通过一个杂原子与碳键结合的化合物。

拉曼谱库

 内容结构

基本单体和聚合物拉曼库 (未改性)

产品号 470100

1,680 张光谱

此库向专业人员提供了一个综合可靠的聚合物拉曼参考。选择纳入此集中有单体和聚合物，以提供有代表性的用于鉴别和归类的简单官能团化合物。此库包含的参考光谱图，虽然可能是共聚物或三聚物，但是并未添加任何添加剂来改性。

无机物拉曼库

产品号 470200

1,630 张光谱

选择纳入此集的无机化合物是可用于鉴别和归类的代表性物质。此库的分析应用包括鉴别、质量控制、劣化研究、材料选择、分子结构解析以及过程控制等。

近红外谱库

 内容结构

常见有机化合物的近红外谱库

产品号 466000

3,800 张光谱

由 Wiley Chemical Concepts 提供。此集包含常见的有机化合物，用于近红外分析技术。每个化学结构有两个光谱。

核磁共振谱库

代谢物核磁共振数据库

产品号 878600

1,050 张光谱

这是代谢物的氢¹和碳¹³核磁共振光谱图集，用以鉴别代谢中潜在的生物标志物。数据从威斯康辛大学麦迪逊生物核磁共振实验室 (BMRB) 获取。包括与 PubChem、KEGG 和 ChEBI 数据库的关联，以及 KEGG 通路显示。

单体和聚合物的碳-¹³ 核磁共振光谱库

产品号 872300

740 张光谱

由 Bio-Rad 提供，用于碳¹³核磁共振法研究单体、聚合物和树脂的聚合物。此库包含了很多聚合物和单体类。

其他谱库

Bio-Rad 提供全套 Wiley 质谱数据库：

- Wiley Registry® 第 9 版
- 药品、毒药、杀虫剂、污染物及其代谢物的质谱和气相色谱数据
- 策划药质谱图
- 药品和农用化学品质谱图
- 雄激素类、雌激素类和其他类固醇类质谱图
- 有机化合物质谱图
- 地质化学品、石油化学品和生物标志物质谱图
- FFNSC 1.3 - 天然与合成化合物的香料和香水

Bio-Rad 提供来自 Wiley 的另一部分核磁共振数据库：

- Wiley 有机化合物氢¹核磁共振光谱图 - 104,489 张光谱图

Bio-Rad 的 HaveltAll 光谱库让用户按光谱技术分类搜索全部光谱集。HaveltAll 集为用户提供的是年度使用权。这种产品通过 KnowItAll 软件或互联网使用。

HaveltAll 红外

产品号 891000

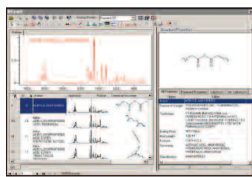


包含近259,000张纯有机化合物和商品的红外光谱。此库在对未知光谱的鉴别和归类特别有用。在制药、刑侦、材料研究和学术等应用领域有广泛应用。无论研究聚合物、纯有机物、无机物、有机金属化合物还是工业化合物，此集都可满足用户的需求。可根据光谱、谱峰、名称、化学结构碎片以及分子量和CAS注册编号等属性进行搜索。

请访问 www.knowitall.com/haveitallir

HaveltAll 拉曼

产品号 894000

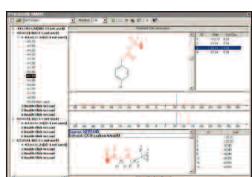


这是一集专注于单体、聚合物、有机化合物和无机化合物的高质谱库。用户可导入自己的光谱在包含6,225张光谱的库里搜索。可根据光谱、谱峰、名称、化学结构碎片以及分子量和CAS注册编号等属性搜索。

请访问 www.knowitall.com/haveitallraman

HaveltAll 核磁

产品号 892000

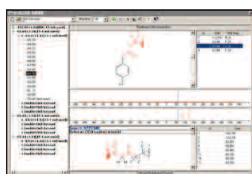


用户可访问438,000多个碳¹³核磁共振参考光谱和56,000多个氢¹核磁共振参考光谱，众多的谱图可以预测核磁共振。还可以使用与参考谱图相关的信息，如：样本来源、溶剂、制样条件、设备以及分子特性。

请访问 www.knowitall.com/haveitallnmr

HaveltAll 核磁

产品号 896000

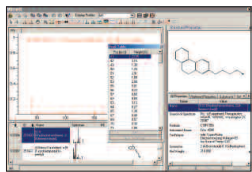


用户可访问71,000多个X核磁共振光谱和进行预测。它包含氟¹⁹核磁共振、磷³¹核磁共振、氮¹⁵核磁共振、硼¹¹核磁共振、氧¹⁷核磁共振、硅²⁹核磁共振以及其他原子核磁共振谱。用户不但可以检索，还可以使用与参考谱图相关的信息，如：样本来源、溶剂、制样条件、设备以及分子特性。

请访问 www.knowitall.com/haveitallxnmr

HaveltAll 质谱

产品号 893000



此光谱库和相关信息集包含在 Environmental Protection Agency (EPA) 和 National Institutes of Health (NIH) 的专家顾问的协助下，从 National Institute of Standards and Technology (NIST) 获取。用户可根据谱峰、名称、分子结构碎片、分子量和CAS注册编号等属性字段进行搜索。此数据库还包括化学品的俗名。

请访问 www.knowitall.com/haveitallms

HaveltAll 紫外-可见

产品号 876300



此谱图库在对未知物紫外-可见光谱鉴别和归类时特别有用。应用领域包括制药、刑侦、环保、材料科学、聚合物以及其他领域。用户可根据光谱、谱峰、名称、分子结构碎片、分子量、溶剂、浓度和路径长度等属性字段进行搜索。谱峰表包含峰的位置、峰的高度、吸收与消光系数。

请访问 www.knowitall.com/haveitalluv-vis

其他信息

使用权信息

Bio-Rad 的软件和谱库使用权十分简单。单独的光谱库通过 USB 加密狗授权，软件可通过互联网或者 USB 加密狗授权。

支持和升级项目

请访问 www.knowitall.com/supportpolicy

培训选项

除了在线帮助系统、KnowItAll 用户手册 PDF 或演示视频之外，我们很乐意与您探讨其他培训方案。请登录 www.knowitall.com/training

KnowItAll 对电脑系统配置建议

访问 www.knowitall.com/system_recommendations 查看最新的系统配置建议。

www.knowitall.com/chinese



**Bio-Rad
Laboratories, Inc.**

Informatics Division
www.knowitall.com

中国
欧洲、中东、非洲
印度
日本、台湾和韩国
美国
全球其他地区

电话: +86 010 5939 0088 x381 • 电子邮件: informatics.china@bio-rad.com
电话: +44 20 8328 2555 • 电子邮件: informatics.europe@bio-rad.com
电话: +91 125 4029300 • 电子邮件: informatics.india@bio-rad.com
电话: +81 3 (6361) 7080 • 电子邮件: informatics_jp@bio-rad.com
电话: +1 267 322 6931 • 1 888 5 BIO-RAD (888-524-6723) • 电子邮件: informatics.usa@bio-rad.com
电话: +1 267 322 6931 • 电子邮件: informatics.worldwide@bio-rad.com