

# IR/Raman スペクトル検索ソフトウェア Spectral ID<sup>®</sup>

Spectral ID は、IR、NIR、Raman、Mass スペクトルの統合的なスペクトル検索ソフトウェアです。使い易く高速であり、多くのベンダーの市販ライブラリーに対応しています。Spectral ID には MS、IR、Raman、UV-Vis、Fluorescence、NIR のプライベートライブラリーを構築し、検索できる機能もあります。

Spectral ID を活用することにより、非常に簡便に、高速かつ正確なスペクトルマッチングが行えます。

## データのインポート

Spectral ID は多くのライブラリーをサポートしているだけでなく、ほとんどの分析機器のデータファイルフォーマットを読みとることができます。SmartConvert テクニックを使って、Spectral ID は百種類以上のファイルフォーマットから未知スペクトルをロードできます。データファイルを分析装置のソフトウェアからエクスポートする必要はありません。File / Open メニューからファイルを開くか、Spectral ID に生のデータファイルをドラッグアンドドロップすると、自動変換され Spectral ID にロードされます。

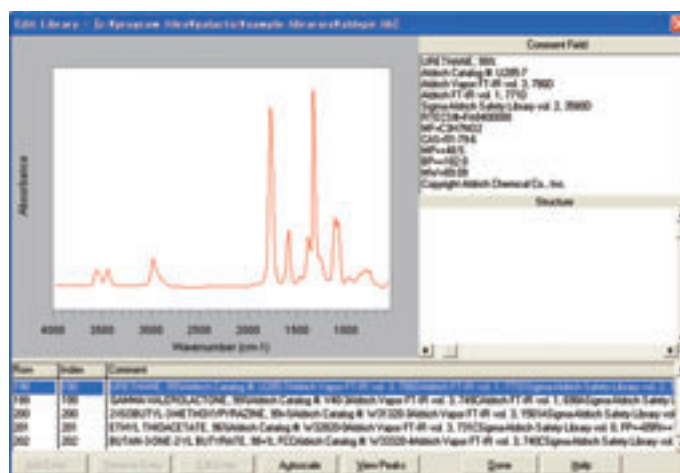


## 使いやすさ

新規の未知スペクトルが開かれると、Spectral ID は検索条件(横軸の単位)に一致するスペクトルライブラリーだけを選択します。また、Spectral ID の QuickAdd 機能により、1 回のマウスクリックだけで新規のスペクトルをプライベートライブラリーに追加することができます。

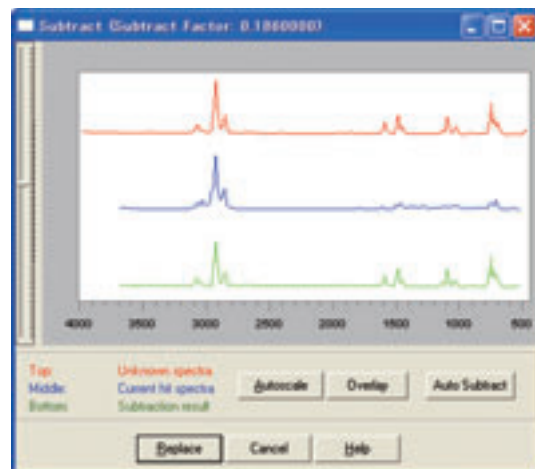
## ネットワーク

Spectral ID は強力なデスクトップのスペクトル検索のアプリケーションであることはもちろんですが、ネットワーク上でスペクトルライブラリーを効率的に共有することで真価を発揮します。オプション製品の Spectral ID Server (1 サーバーと 5 クライアント) のインストールでネットワーク上の Spectral ID ユーザーに市販のライブラリー (契約したライセンス数に応じて) とプライベートライブラリーへのアクセスを与えることができます。スペクトルライブラリーが Windows XP、2000、Vista にインストールされると、検索データを追跡、更新、設定などのタスクはすべて一台の中央化されたサーバー上で管理されます。サーバーベースのライブラリーの作成、編集、検索はクライアント側の権限に依存します。



## 多様性

Spectral ID®は強力な検索アルゴリズムと分光スペクトルとマスマスペクトルの両方にフィルター操作を提供します。溶剤や nujol などの既知スペクトルや特定領域を検索対象から除外する機能、ベースライン補正のプリプロセスはもちろん、分光スペクトル用のフルスペクトル（ユークリッド距離、絶対差、最小二乗、相関、一次微分相関など）とマスマスペクトル用のピークマッチングアルゴリズム（ドット積、複合ドット積、リバース、フォワードなど）があります。検索領域の選択とデータのプリプロセスは検索の実行性には全く影響を与えず、Spectral ID はどんな場合でも高速で検索します。多彩な計算オプションに加えて、自動引き算機能により混合物の未知スペクトルから既知スペクトルを引き算し、残差スペクトルを再検索できます。



## 検索機能

強力なテキスト検索機能で、キーワード、化合物名、CAS 番号、その他の情報でライブラリー検索のクエリーを作成できます。テキスト検索は AND/OR 検索もしくはフリーテキスト検索が可能です。全てのライブラリー形式（例えば IR と MS）を横断できるので、選択した全てのライブラリーから条件に一致したスペクトルを検索できます。フルスペクトル、ピーク、さらにテキスト検索を組み合わせることにより、様々な検索条件で高度な検索が可能です。

◇必要なシステム構成 ・ Windows 2000/XP/Vista ・ 24MB 以上の RAM ・ 113MB 以上の空き容量

## IR/Raman スペクトル検索ソフトウェア

# Spectral ID

製品番号 Z407488-1EA

希望納入価格 ¥185,700

### サポートするおもなベンダーと主要な FT-IR/Raman ライブラリー（カッコ内はスペクトル数）

- **Sigma-Aldrich**  
Collection of FT-IR Spectral Library, Edition II (18,454)  
Raman Condensed Phase Spectral Library (14,033)
- **Thermo Nicolet**  
Coating Technology Library (2,507)
- **Chemical Concept**  
Hummel Defined Polymers (2,900)  
Hummel Industrial Polymers, Vol. 1-3(1,915 / 1,570 / 1,520)  
Hummel Surfactant Library (1,020)

※価格や詳細はお問い合わせください。

・本カタログに掲載の製品及び情報は2009年8月1日現在の内容であり、取扱いの品目、製品情報、価格等は予告なく変更される場合がございます。最新の情報は、弊社Webサイト ([sigma-aldrich.com/japan](http://sigma-aldrich.com/japan)) をご覧ください。  
・掲載価格は希望納入価格（税別）です。詳細は販売代理店様へご確認ください。  
・弊社の試薬は試験研究用のみを目的として販売しております。医薬品、家庭用その他試験研究以外の用途には使用できません。

# SIGMA-ALDRICH®

## シグマ アルドリッチ ジャパン株式会社

〒140-0002 東京都品川区東品川2-2-24  
天王洲セントラルタワー4F

<http://www.sigma-aldrich.com/japan>

Spectral ID・各種スペクトルデータベースに関してご不明の点は、下記へお気軽にお問い合わせください。

株式会社デジタルデータマネジメントジャパン  
〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル  
Tel: 03(5641)1771 Fax: 03(5641)1772  
e-mail: tech@ddmcorp.com

SAJ1144 2009.8

SIGMA-ALDRICH®