来自光谱数据的行业领导者



KnowItAll 分析版

适用于加快红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见光谱图分析的解决方案

功能强大的软件。优质数据。值得信赖的结果

WILEY

无论您的实验室使用一种还是多种技术，KnowItAll 光谱版软件都能为您提供合适的解决方案！

Wiley公司的 KnowItAll分析版软件提供用于<50>识别、分析和管理光谱数据的解决方案。

该款软件提供供应商中立的运营环境，支持多个仪器供应商的文件格式和技术，以此简化您的实验室工作流程和工作方式。

将功能强大的工具集成到 **易于使用的单一界面中**，无需再使用多个软件包。我们不断在软件中添加智能光谱功能，其中还包括其他软件包中没有的专利工具。

KnowItAll 结合了世界上最大的光谱参照数据库*—包括著名的 Sadtler™ 资料库和可信赖合作伙伴的光谱库，为化学家们提供最先进的技术，使其能够做出 快速、精准的光谱分析！



辅助功能，如键盘访问菜单、图标的音频解说和工具提示。

提供英语、日语、汉语、法语和德语版本

主要功能

基本光谱分析
高级光谱搜索/混合物分析功能
数据库构建/管理
结构图和报告 (ChemWindow)
光谱处理
提供全面的 KnowItAll 红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见光谱库订阅服务*

获得额外的特定技术工具，如：红外/拉曼官能团分析、质谱反向和自适应搜索（正在申请专利）、自动质谱去卷积/分析、核磁共振预测等！另外还有 12000 个额外的红外光谱。

数据类型

红外、质谱、近红外、核磁共振、拉曼、紫外可见光谱图
色谱图
结构

KnowItAll 和 ChemWindow 是Wiley公司在一些司法管辖区的商标。

*需要订阅 KnowItAll 光谱库

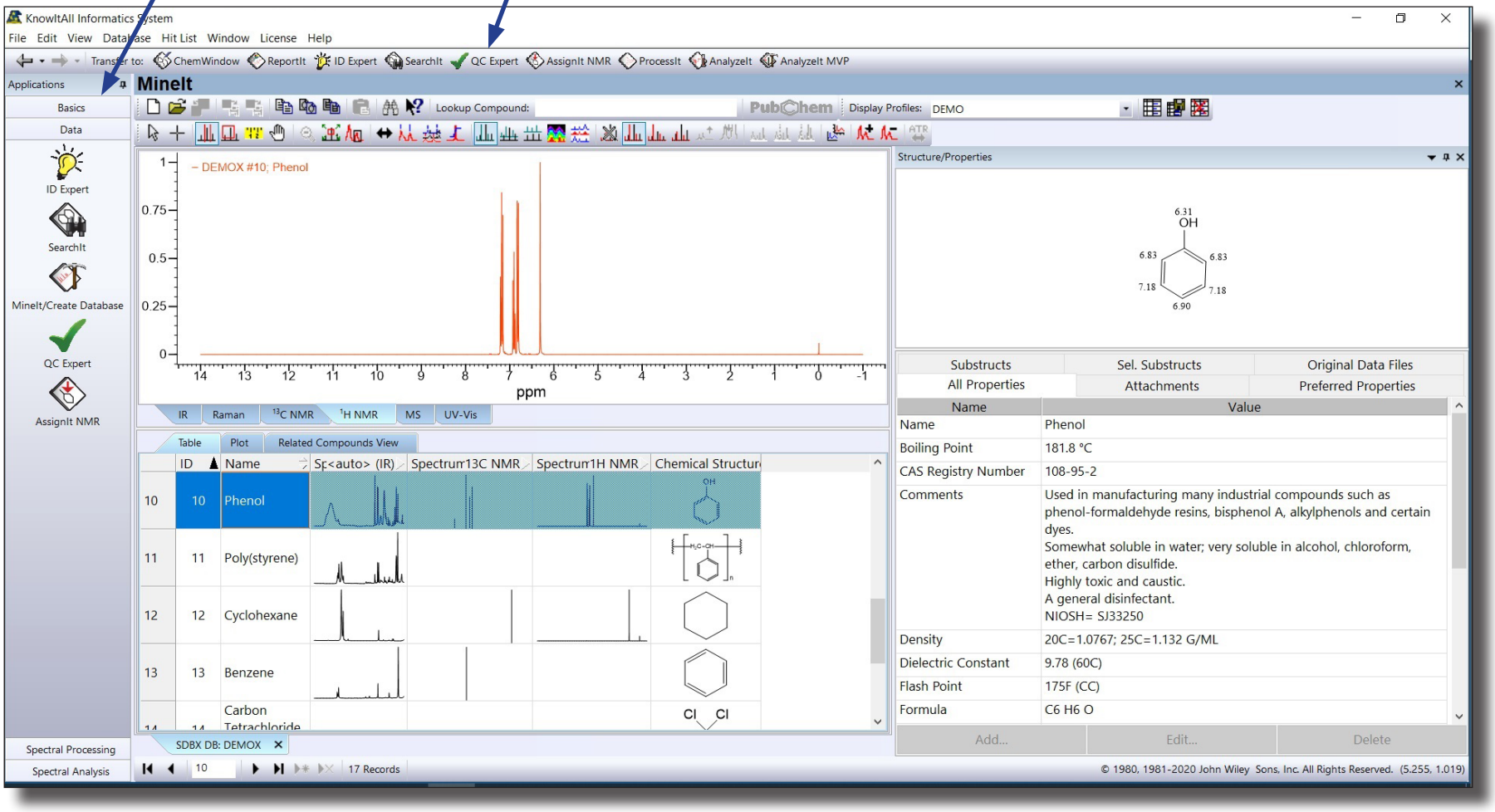
通过将您所需的所有工具和数据整合到同一个系统中，您将能够更高效地从数据中提取有价值的知识！

KnowItAll 在设计时充分考虑操作的方便性，用户无需离开主界面或打开另一个程序，即可将信息从一个工具轻松传送至另一个工具，从一个任务转移至下一个任务。使用逻辑分组的“工具箱”来执行多项任务。

因为其所有的工具都位于一个单一而集成的环境中，所以使用这个系统一定会节省时间，改进工作流程，并提高从数据中得出结论的能力。

将功能强大的工具集成到一个简单易用的界面中。定制工具箱

可以在不同任务之间无缝切换：搜索数据、处理数据、管理数据、绘制结构等等！



包含哪些内容?

所包含的工具与应用的截屏

数据工具箱

ID Expert™	一键式“首过”光谱识别工具
SearchIt™	高级数据库搜索
MineIt™	光谱数据库构建和数据挖掘
QC Expert™	QC 光谱对比
AssignIt™ NMR	向数据库中添加任务

光谱分析工具箱

AnalyzeIt™	官能团分析 – 红外、拉曼、红外聚合物、气相红外合成大麻素
PredictIt™ NMR	核磁共振光谱化学位移预测

光谱处理工具箱

ProcessIt™	红外、质谱、核磁共振、拉曼和质谱光谱处理
MS Expert™	将GC-MS去卷积与自动参考数据库搜索功能相结合，以完成成分分析

基本工具箱

ChemWindow	二维结构图
ReportIt™	发布专业报告，包含结构图、光谱图、色谱图等
BrowseIt™	链接至 KnowItAll 培训资源和产品新闻的门户网站

光谱数据库*

KnowItAll 数据库	订阅世界上最大的红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见光谱集

*需要订阅 KnowItAll 光谱库

认识 KnowItAll 工具
深入

- 数据工具箱
- 光谱分析工具箱
- 光谱处理工具箱
- 基本工具箱

数据工具箱

KnowItAll ID Expert™

首通光谱识别工具

识别未知光谱时，很难弄清从何处入手。Wiley的 KnowItAll ID Expert 为新手和专家提供完美切入点。科学家们在识别未知光谱时，可以与参考光谱进行比对，从而快速得出可靠的答案。

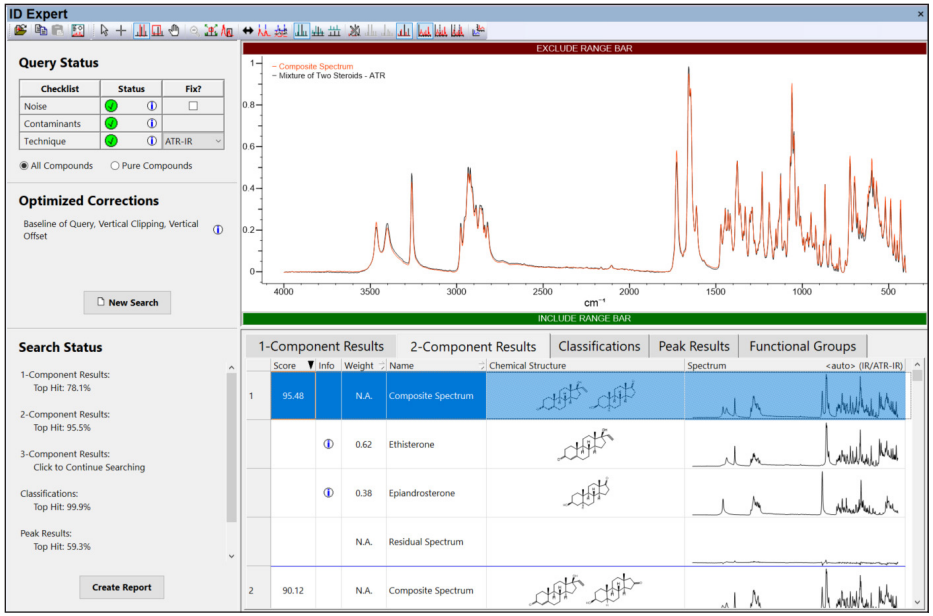
KnowItAll ID Expert 内置的光谱智能功能和Wiley的优质KnowItAll 光谱库*（全球最大的光谱库）结合在一起使用，使其成为一款快速的首通分析工具。

工作原理

- 用户只需打开未知光谱，KnowItAll ID Expert 将自动执行一系列基本分析，例如单一和多元搜索、峰值搜索以及官能团分析（如果是红外/拉曼），然后将结果汇总并完整地概括说明所有可能性。
- 如果未知光谱或参考光谱存在问题，ID Expert 的光谱智能功能可以识别和修复其中一些问题。
- 用户识别未知光谱后，可一键生成 PDF 报告。

包括优化校正专利技术，以确保获得最佳搜索结果。

还包括快速分类工具，适用于使用Wiley最新的红外策划药模型的策划药红外光谱。



*需要订阅 KnowItAll 光谱库

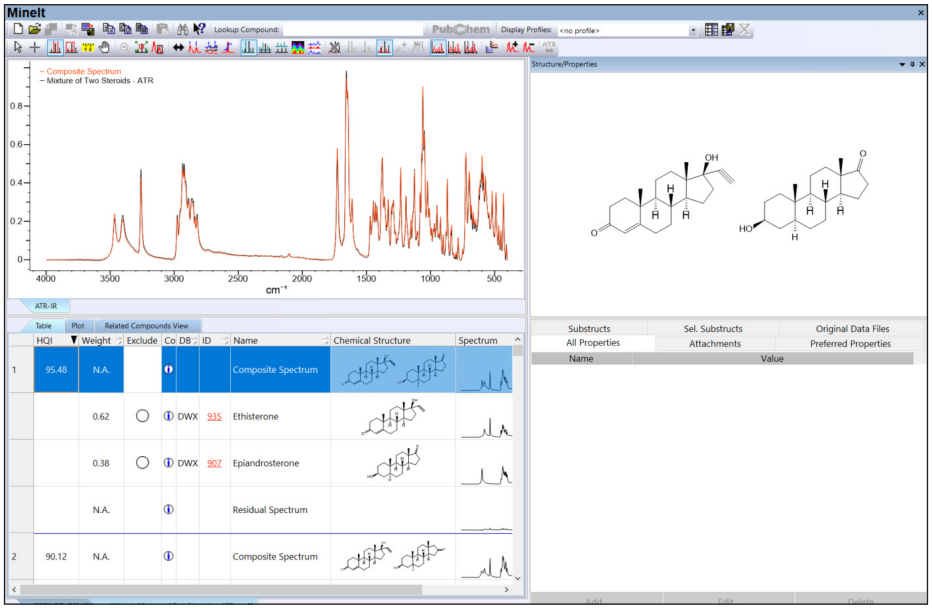
SearchIt™

用于高级光谱数据库搜索

Wiley提供了最强大的光谱数据搜索工具，创建这些工具使用的技术是与Wiley用于分析其庞大数据集相同的技术。凭借快速的搜索速度、强大的算法和专利技术，Wiley能够提供给您值得信赖的结果。

主要功能

- 导入样品光谱，并在用户生成的数据库或无所不包的Wiley公司 KnowItAll 光谱参考库中搜索红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见图谱*
- 搜索可完全自定义并由功能强大的算法驱动
- 优化的搜索速度和性能
- 可按名称、结构、子结构、特性、光谱（全波段光谱或选定范围）以及峰值的任意组合进行搜索
- 在您的搜索中包含或排除区域
- 对多种成分进行混合分析
- 包含或排除混合物中的已知成分以缩小结果范围
- 手动选择峰值或使用自动选取峰值功能
- 算法包括欧几里得距离、一阶和二阶导数欧几里得距离、相关性和基线校正；对于质谱：点积(余弦)，Wiley点积(余弦)，合成物 P1 和 P3
- 同时使用不同技术对光谱执行多技术搜索，进行正交验证以获得更可靠的分析
- 包括优化校正专利技术，以确保获得最佳搜索结果
- 包括质谱自适应搜索（专利申请中）和逆谱库搜索
- 使用各种视图轻松对比光谱：叠加、偏移、堆叠、蝶形、减法等。
- 支持多种仪器供应商的文件格式（可在 www.knowitall.com/formats 查看完整列表）



分析版软件还包括这些额外的数据库：

- 红外 – 萨特勒聚合物，胡默尔 – Wiley （1907 张光谱图）
- 红外 – 萨特勒标准（有机和高分子化合物子集）– Wiley（9996 张光谱图）
- 衰减全反射红外 – 萨特勒溶剂 – Wiley（629 张光谱图）
- <322>微塑料分类数据库 – </322>分析版软件现包含该数据库，可以快捷和实惠地对红外/衰减全反射红外光谱微塑料进行分类。如需识别微塑料样品，我们建议用户订阅完整的 KnowItAll 红外光谱库。

*需要订阅 KnowItAll 光谱库

强大的光谱搜索工具使 KnowItAll 脱颖而出

Wiley致力于让光谱分析更上一层楼！我们不断在我们的产品组合中加入新的光谱智能工具，以提高分析速度。下面我们来仔细了解一下 **KnowItAll's SearchIt** 的一些独特而强大的解决方案，正是这些解决方案使Wiley成为了光谱信息学的领导者！

混合分析:这一行业领先的技术不仅适用于红外和拉曼光谱，现在也适用于质谱！KnowItAll 最强大的功能之一就是进行混合分析。在对照参考数据库搜索一个未知光谱时，您可以选择搜索多种成分。结果得到一系列复合光谱，每个复合光谱都随附组成复合光谱的各个光谱以及残差光谱（查询的光谱与复合光谱之间的差）。然后根据它们与查询光谱的相似程度对复合光谱进行排序。

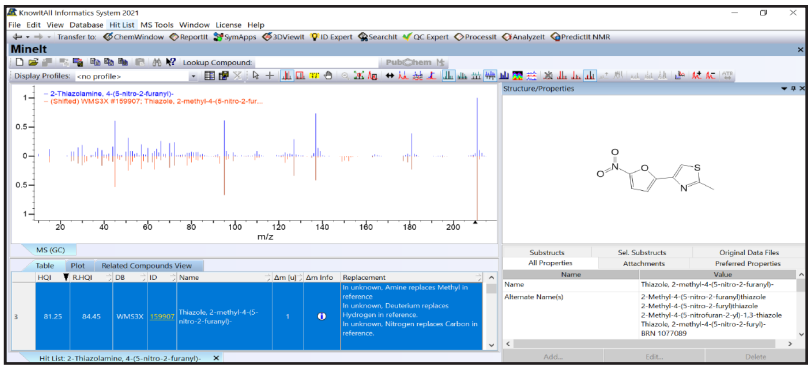
优化校正专利技术:搜索并不只是一个非常简单直接的过程。如果您的查询光谱和/或库参考光谱有问题该怎么办？若有问题，即使库中存在符合条件的记录，也可能永远无法找到完全匹配的结果。 Wiley公司提供一个独特的专利解决方案来解决这个复杂的问题，让您获得最佳结果。

Wiley的优化校正功能 (Optimized Corrections) 是一种内置于 ID Expert 和 SearchIt 应用程序的光谱智能解决方案。它在搜索中对所有查询和参考光谱执行一套在计算上非常复杂的校正，以便找到查询和每个参考光谱之间的最佳匹配结果。搜索中自动执行多次校正，以弥补因不同仪器和配件的差异以及其他因素（包括人为错误）造成的光谱之间的差异。校正包括：基线校正、剪切、水平位移、垂直位移、强度失真以及衰减全反射校正。

多技术"同步"光谱搜索 KnowItAll 是全球第一个能够同时采用多种分析技术从一个或多个数据库中搜索光谱的搜索系统。例如，在一个数据库中查询核磁共振光谱，同时在另一个数据库中查询质谱，以便从各个数据库中找到通过化学结构相互关联的最相关的匹配记录。

正在申请专利的质谱自适应搜索技术:将未知质谱与参考质谱进行匹配时，该技术会发现与未知质谱相似但具有额外或缺失选择性片段的质谱匹配。然后，在可能的情况下，它会指出可能导致这些差异的原因。在没有完全匹配的情况下，该功能能够让我们深入了解可能存在的结构。最终，这能帮助我们更加智能和可靠地进行识别和确认。

质谱逆谱库搜索功能:这种搜索功能在参考光谱中寻找匹配的峰值，而忽略只存在于未知光谱中的峰值。



MineIt™

光谱数据库构建和管理

化学家和光谱学家每天都在其组织机构内产生有价值的数据。Wiley Science Solution 的主要业务是光谱数据库，而 KnowItAll 则是基于公司在该领域（即构建数据库）多年的经验打造而来。

建立源自不同供应商仪器数据的单一技术或多技术数据库

研究人员可构建包含一种或多种分析技术（红外、质谱、近红外、核磁共振、拉曼、紫外可见光谱）、化学结构以及其他元数据的可搜索数据库。因此，即使实验室的分析仪器来自多个制造商，KnowItAll 也可将数据归档。

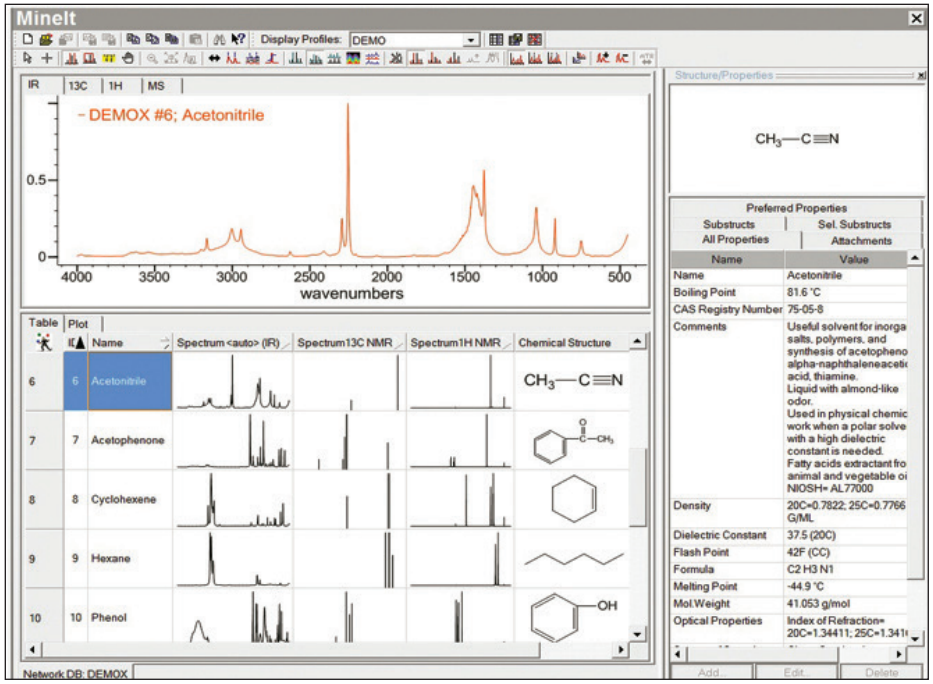
主要功能

用光谱和色谱数据构建数据库

- 用一种或多种分析技术构建数据库
- 构建同一条记录中有多个光谱的数据库
- 即使实验室的仪器来自多个供应商，也可导入分析数据
- 以常见的仪器文件格式或 *.csv 格式（电子表格）一键导入
- 以峰值信息、结构和属性（如样品来源、沸点等）完善每条记录
- 导入多种结构格式（带立体化学键和标识符）
- 利用“批量导入和导出”高效处理光谱、结构和属性文件
- 不限制光谱范围和分辨率——以测量各个光谱时的精确范围和分辨率存储光谱，而不是必须遵循固定的范围和分辨率
- 通过附加电子表格、化学品安全技术说明书(MSDS) 和其他文件或在网页中添加链接使数据库更强大
- 创建从记录到其他技术数据的交叉参照，例如一张核磁共振光谱可链接至一张红外光谱
- 最新！根据<418>缉毒局</418>的法规（可批量处理），对受控物质的化学结构进行分类
- 用于整个数据集的单次或批量计算的属性计算器--公式、分子量、C-13核磁共振预测、不良基线指标、基线分析：面积差、SPLASH ID、各种质量(平均，准确，标称)
- 用于计算元素组成和同位素分布的质谱工具
- 将 PubChem 中的属性和结构快速添加至您的数据库

自定义数据库

- 可根据实验室技术规格自定义数据库
- 用户可创建自定义字段，以支持与其工作相关的元数据
- 从三种属性字段中选择：文本、数字、超链接
- 生成“首选属性”表单，以便用户输入的属性保持一致
- 设置光谱参数，如 x 分辨率和 y 分辨率



从数据中尽可能多地提取信息

- 与其他 KnowItAll 应用全面整合，可进行处理、数据库搜索/挖掘、绘制结构图、生成报告等等

多技术查看和挖掘

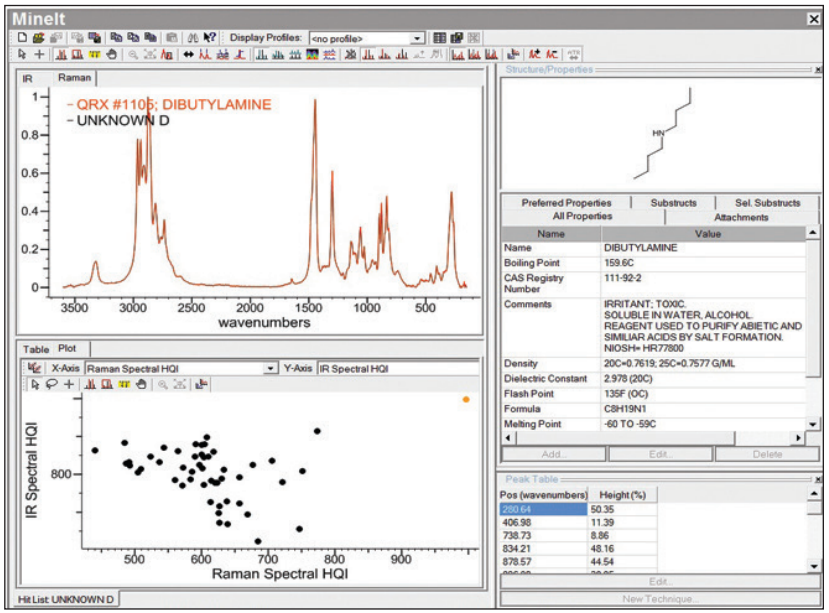
用户可通过 MineIt 查看参照数据库、用户创建的数据库或搜索结果。可访问包含光谱色谱图、结构、物理属性等多种类型数据的数据库。分析数据库的同一条记录中可包含一种或多种技术，因此，此工具非常适合访问参考光谱数据库。

高级数据挖掘功能

利用散点图对比数据库中的任意两个变量，从而将按期望趋势发展的数据和不按期望趋势发展的数据区分开来。选择散点图上的任意一点来显示与该记录相关的化合物。

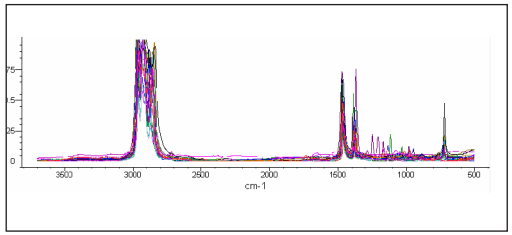
重叠密度热图专利技术

传统上，多个光谱的可视化是以叠加、偏移或堆叠的方式进行的。但是，这些传统的标绘方法在查看大量数据时会使趋势变得模糊不清。利用重叠密度热图，用户可使趋势可视化，并评估海量数据的相同点和不同点。具体来说，该技术允许用户通过对从重叠度最高到最低的光谱区域进行颜色编码来查看重叠对象（如光谱）的共同特征。



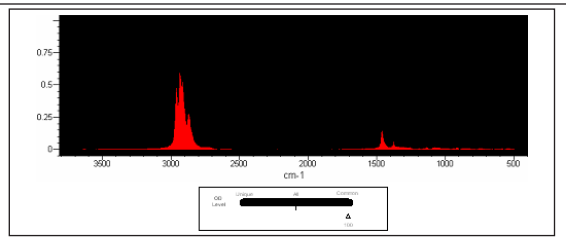
例如：在运用多技术对光谱样品进行搜索时，这种绘图功能在光谱搜索分析方面非常有用，它将数据库搜索结果的质量（命中质量指数-HQI）相互对照（例如，红外HQI与拉曼HQI）进行绘图。

重叠密度热图：示例



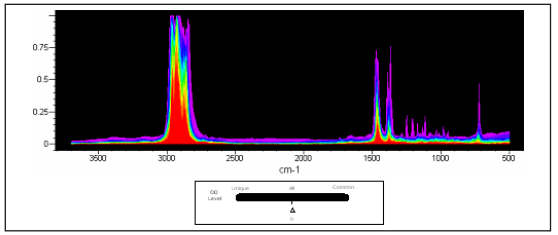
传统堆叠显示

显示 31 张烷烃红外光谱。虽然出现了某些趋势，但趋势的范围模糊不清。



重叠密度热图
重叠密度水平 = 100

重叠密度热图仅显示所有光谱共有的重叠区域。



重叠密度热图
重叠密度水平 = 0

31 张烷烃光谱重叠密度热图显示了所有重叠水平。重叠水平高的区域显示为红色；重叠水平低的区域显示为紫色。

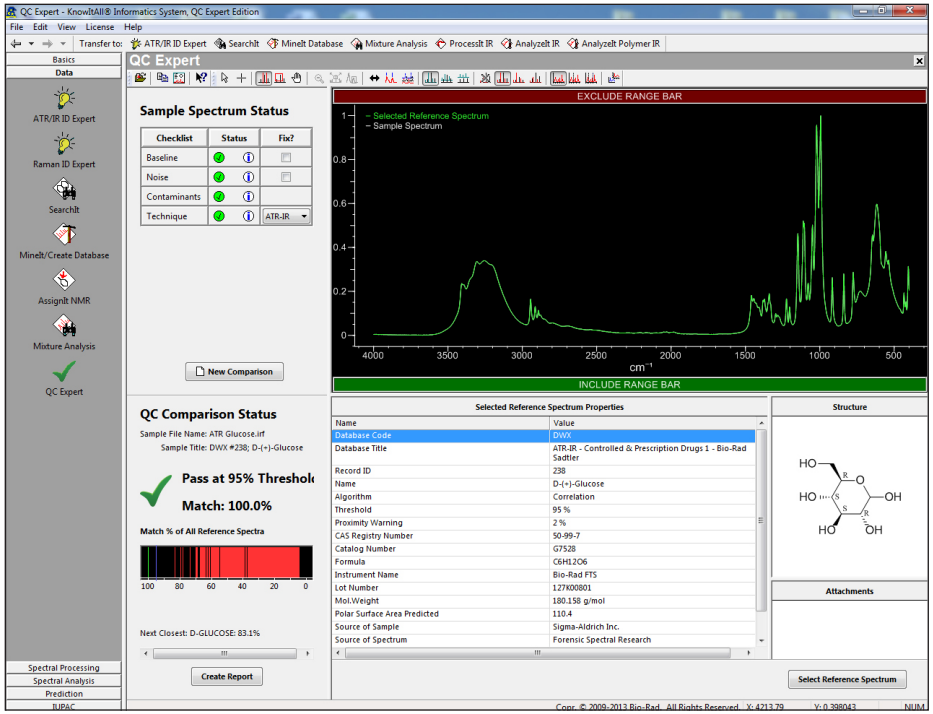
QC Expert™

红外、拉曼和色谱图质量控制对比

Wiley公司的 KnowItAll QC Expert 软件根据“ 黄金标准”用户光谱或色谱图对红外、拉曼光谱或色谱图样品进行快速质量检查，以检验材料是否符合控制规格。

主要功能

- 对样品和选取的参考文件进行质量控制对比
- 通过对比样品和参照数据库来验证结果，确保样本与选定的参考相匹配，并且与参照数据库*中的其他任何光谱均不匹配
- 定义用户权限、参照数据及其他设置，确保技术人员遵循设定的协议并专注于输出
- 识别样品光谱中的问题——质量控制专家（QC Expert）的内置光谱智能功能可发现问题并提出解决问题的方法



*需要订阅 KnowItAll 光谱库

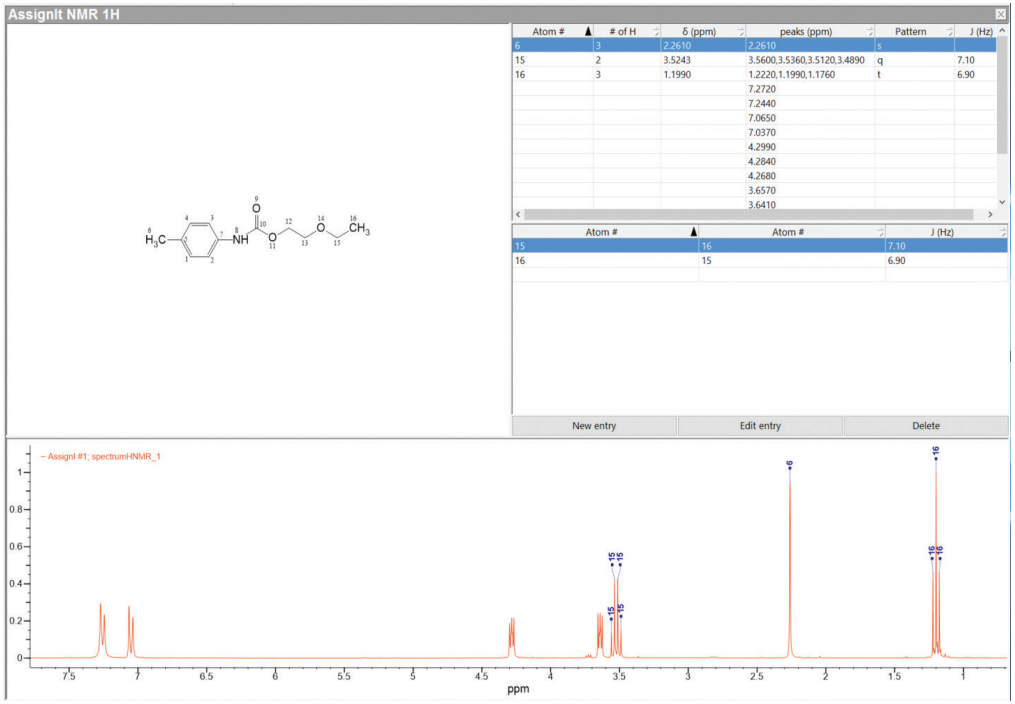
AssignIt™ NMR

创建完全指定的核磁共振数据库

AssignIt NMR 使用户能够向 ^{1}H、^{13}C、^{19}F、^{31}P、^{15}N、^{17}O、^{11}B 以及 ^{29}Si 核磁共振光谱数据库中的结构添加核磁共振光谱。AssignIt 的界面易于使用，可快速输入数据库信息，如峰值位移赋值、强度、耦合常数以及多重度——所有这些都与化学结构相关联。

主要功能

- 导入多种核磁共振光谱格式
- 将原子指定到实验光谱中的峰值
- 交互耦合计算工具
- 自动计算多重信号中的 J 值
- 寻找具有相同 J 特征的信号，以便找出光谱内的相似分裂
- 界面简单直观，带有汇总视图和数据输入表单，便于添加/编辑任务
- 自动和手动峰值拾取工具
- 与 ChemWindow（绘制结构图）和 MineIt™ 全面整合



光谱分析工具箱

AnalyzeIt™

高级官能团分析

适用于红外、拉曼、红外（聚合物）和气相红外（合成大麻素）

解释说明光谱：只需加载光谱并点击感兴趣的峰即可；然后，AnalyzeIt 将列出该峰位置可能存在的所有官能团。通过光谱叠加来比较各个组的峰区，并通过标记“最可能”的候选对象来缩小结果范围。

确定结构与光谱的相关性：这一强大的功能可帮助确定提出的结构是否与观察的光谱相匹配。只需绘制或导入一个结构来查看其各部分官能团。然后，通过光谱叠加来比较各个官能团的峰区。

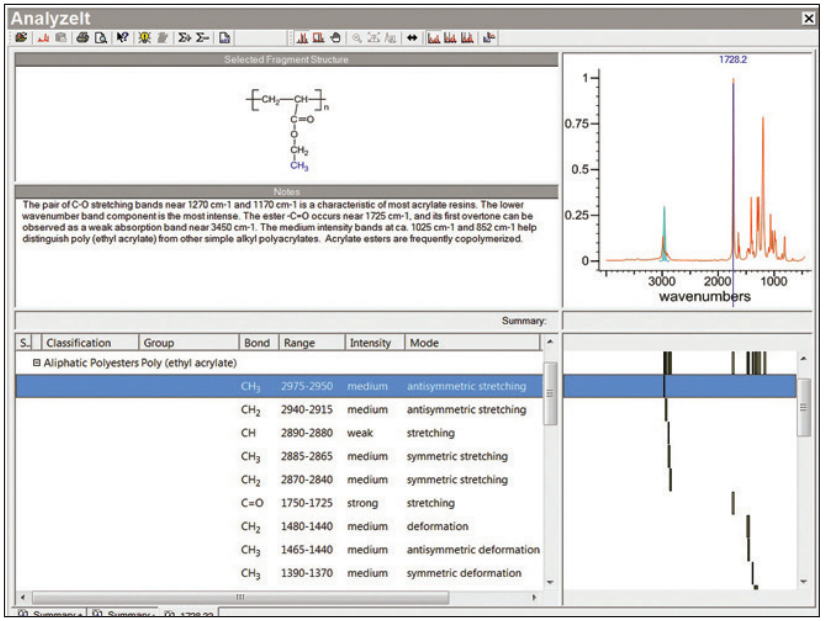
• 查看可用的官能团说明	
分类知识库	红外和拉曼
200 多个官能组和数百个频率解释	红外聚合物
最新!最新！	气相红外 – 合成大麻素（已申请专利）
60 多个桥接羰基团	

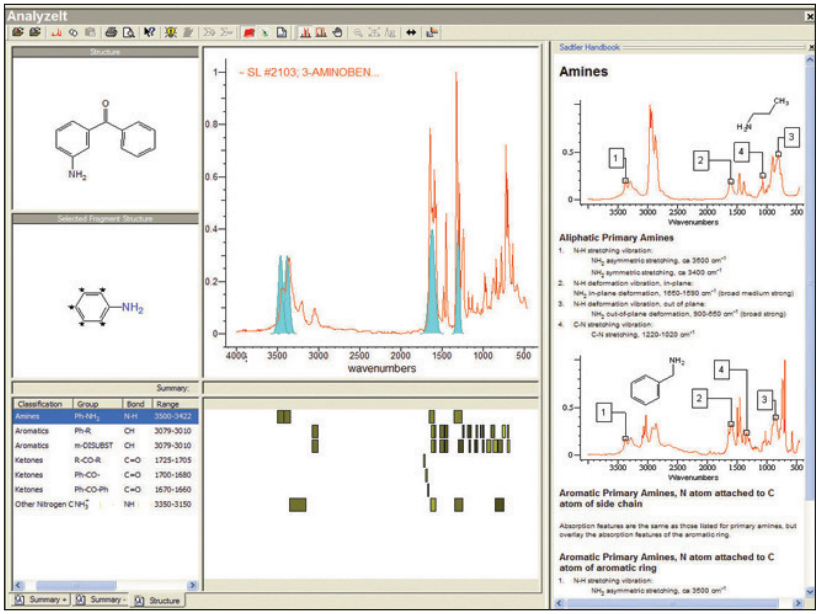
优点

优点
- 其他光谱解释方法的有益补充

主要功能

- 导入光谱并进行峰值分析
- “建议峰值”智能功能
- 确定结构是否与光谱匹配
- 按化学类别浏览知识库
- 标记并汇总否定或肯定判读
- 峰值叠加显示，易于比较
- 显示/突出显示与振动频率有关的结构键
- 链接至《萨特勒手册》(Sadtler Handbook) 中的其他数据（仅 限AnalyzeIt IR）
- 查看可用的官能团说明





或建立您自己的知识库，使解读更加准确

核磁共振光谱预测

使用 PredictIt NMR，可针对 ^{13}C、^{1}H 及其他原子核执行基于数据库的核磁共振光谱预测。

用户在 PredictIt NMR 中打开一个结构时，将自动执行预测。为进行预测，此工具将检索已指定了 ^{1}H、^{13}C 或其他位移的子结构数据库。子结构由代表中心原子 n 个键内原子的壳层数定义。

例如，四层壳包含中心碳原子和此原子四个键内的所有原子。 搜索完全匹配项之后，PredictIt NMR 将针对结构中的每个原子寻找匹配的壳层，从第四壳层开始，一直到较小的壳层，直至找到匹配项。

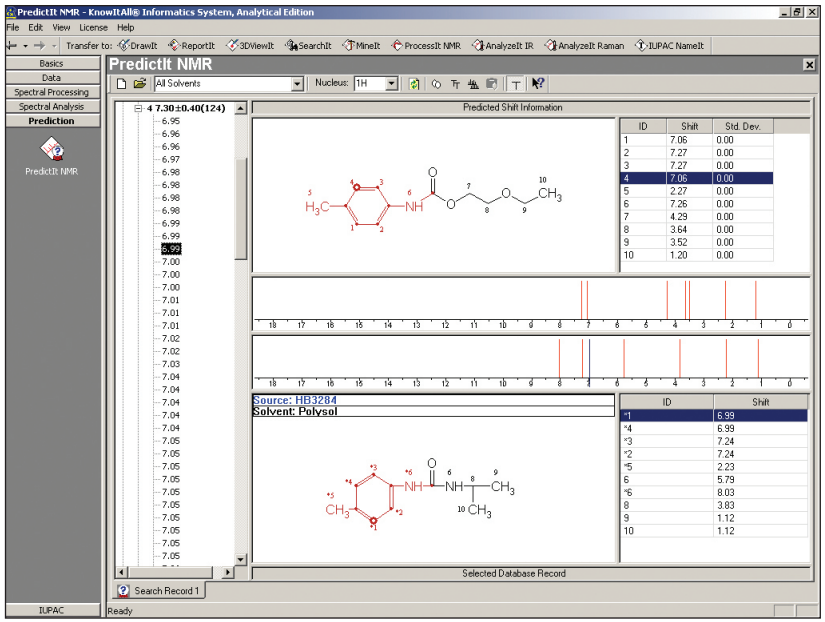
该工具在数据库中搜索采用经修改的 HOSE（环境分层有序球形描述）码描述的特定化学环境。HOSE 码是用于描述分子结构中原子周围化学环境的拓扑结构代码。PredictIt NMR 的主窗口中显示原始结构和结果。树控件的顶层将显示每个原子的平均位移（和标准偏差）。

特定溶剂预测提高准确性

KnowItAll 提供市场上第一款特定溶剂核磁光谱化学位移预测工具。用户可从常见溶剂列表中选择，如氯仿、丙酮和二甲亚砜，KnowItAll 会自动重新计算该溶剂的所有化学位移。

不只是光谱数据

核磁共振光谱学家需要的不只是峰位移预测信息。PredictIt NMR 不仅可轻松检索用于预测的实际光谱数据，还可访问与参考光谱相关的可用信息，如样品来源、溶剂、生产条件、设备以及分子属性。

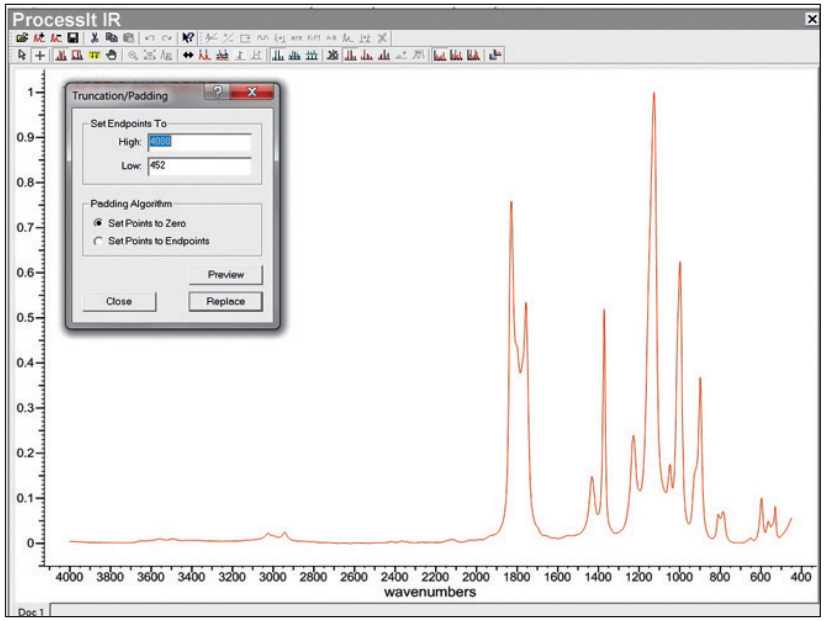


光谱处理工具箱

光谱处理工具箱

红外光谱处理

ProcessIt 提供用于处理红外光谱以及提高归档数据和搜索结果质量的各种工具。 还可与其他 KnowItAll 工具联合使用。例如，可将光谱从 SearchIt 转入 ProcessIt，以便纠正潜在的搜索问题，然后再转回 SearchIt。



处理功能包括：

- 平整线
- 截断/填充
- 标准化
- 平滑化（Quad-Cubic Savitsky Golay，傅里叶算法）
- 基线校正（样条曲线、线性和多项式算法）
- 衰减全反射校正
- 反向衰减全反射校正
- Kubelka-Munk 变换
- 谱减和谱加
- 平均光谱
- 峰值拾取

分析功能包括：

- 曲线下面积 (AUC)

拉曼光谱处理

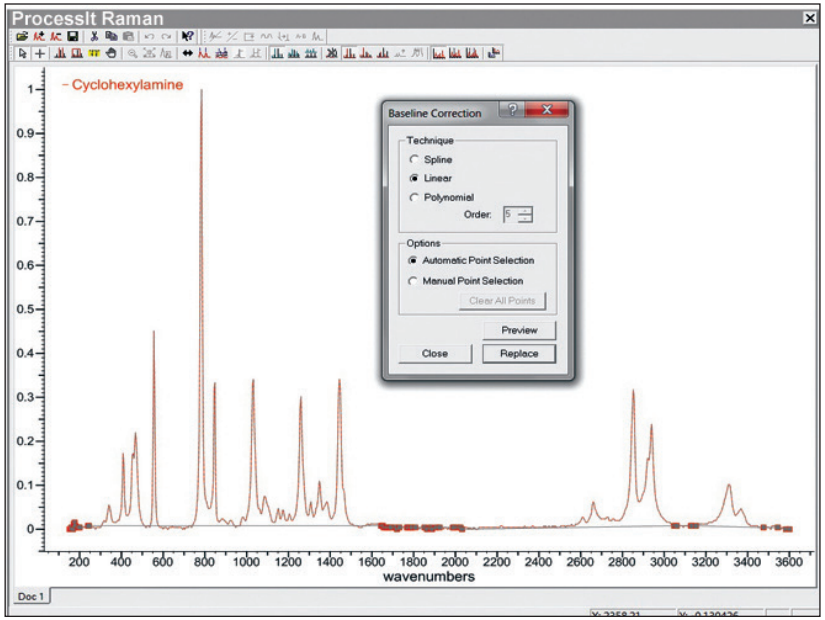
ProcessIt 提供许多用于处理拉曼光谱以及提高归档数据和搜索结果质量的工具。 还可与其他 KnowItAll 工具联合使用。例如，可将光谱从 SearchIt 转入 ProcessIt，以便纠正潜在的搜索问题，然后再转回 SearchIt。

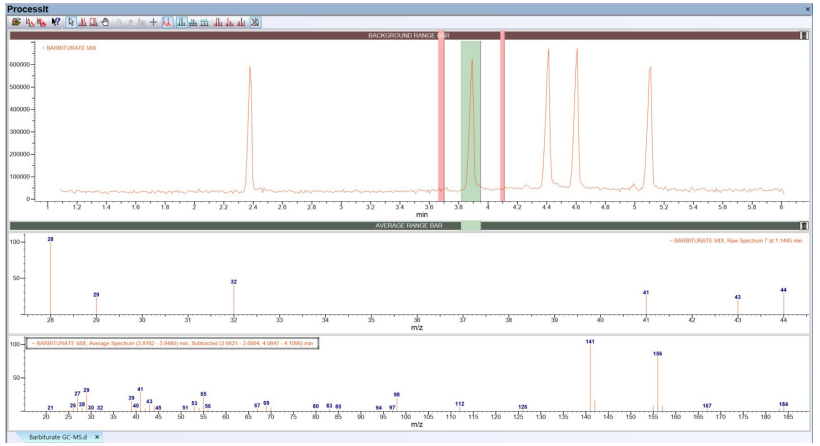
处理功能包括：

- 平整线
- 截断/填充
- 标准化
- 平滑化（Quad-Cubic Savitsky Golay，傅里叶算法）
- 基线校正（样条曲线、线性和多项式算法）
- 衰减全反射校正
- 反向衰减全反射校正
- Kubelka-Munk 变换
- 谱减和谱加
- 平均光谱
- 峰值拾取

分析功能包括：

- 曲线下面积 (AUC)





• 峰值拾取

分析功能包括：• 曲线下面积 (AUC)

气相色谱-质谱数据处理用户可以使用 ProcessIt 查看并选择一个质谱或质谱的平均值并定义背景。

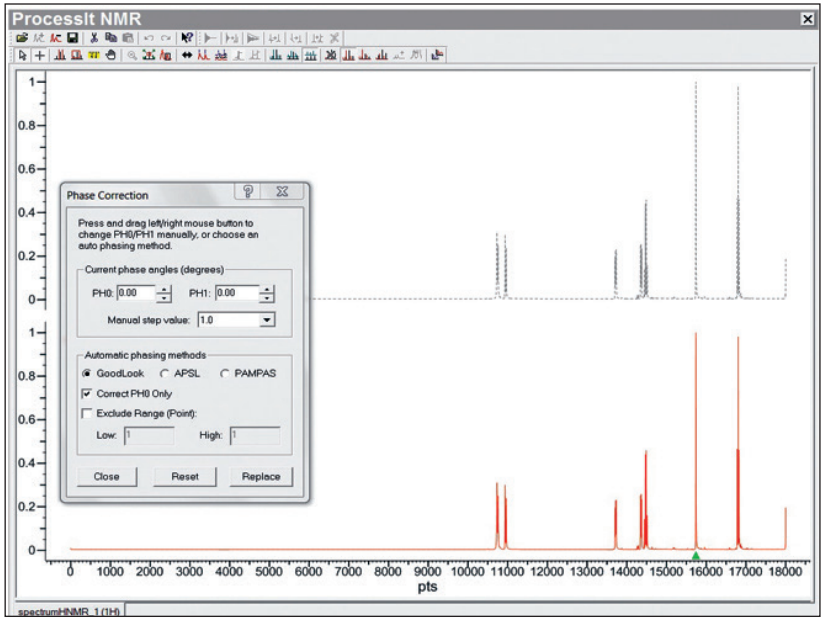
可以传输选定的质谱或提取的光谱，以供数据库搜索或导入用户数据库使用。可为任一过程指定一个或多个范围。顶部窗格中可显示多个离子色谱图。

核磁共振光谱处理

利用 ProcessIt，可从各种来源导入核磁共振光谱并进行处理，以提高归档数据和搜索结果的质量。该工具易于使用，而且提供了一套全面的处理功能，用于纠正实验假象以及改善光谱外观。

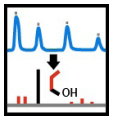
化学家和光谱学家可在自己的电脑上处理和再处理实验数据。除了为用户带来更多便利，ProcessIt 还节省了仪器宝贵的处理器时间，从而提高了样品处理量。

ProcessIt 已完全整合到 KnowItAll 信息环境中，因此只需一键单击即可将处理后的光谱转入其他 KnowItAll 工具。



主要功能：

- 从多种格式导入一维处理或 FID 光谱
- 处理功能：　零填充、交互式窗口功能和傅里叶变换
- 自动和手动相位校正
- 　自动和手动基线校正，其中包括多项式、样条曲线算法和线性算法
- 自动和手动峰值拾取
- 自动和手动集成
- 加减光谱
- 叠加多个光谱以便于比较
- 便于快速高效处理的宏功能
- 用 JCAMP 格式导出
- 光谱处理工具，如水平缩放、拉框缩放、手标以及按比例缩放
- 与 MineIt 整合在一起可对处理的光谱进行归档，与 ReportIt 整合可创建包含光谱、峰值和积分表的报告，与 SearchIt 整合可用于搜索光谱



• 用 JCAMP 格式导出

• 光谱处理工具，如水平缩放、拉框缩放、手标以及按比例缩放

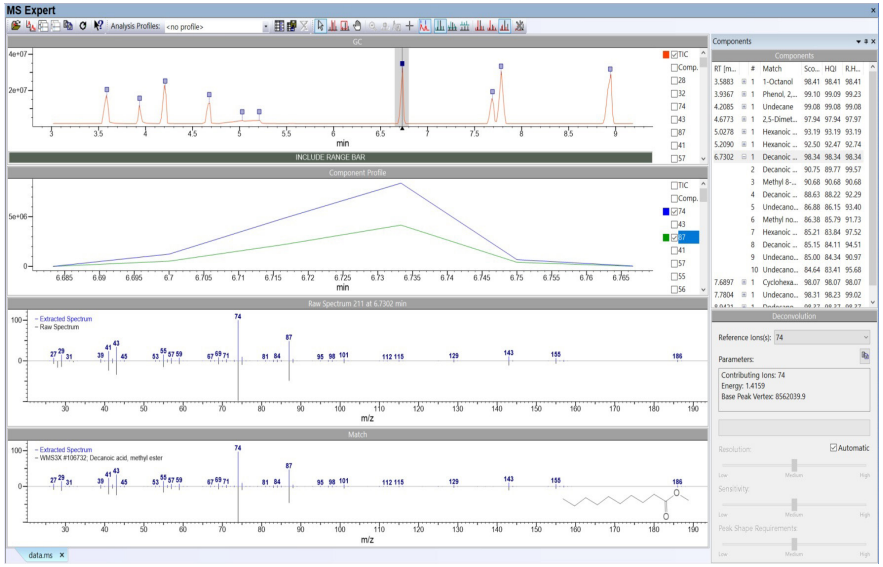
• 与 MineIt 整合在一起可对处理的光谱进行归档，与 ReportIt 整合可创建包含光谱、峰值和积分表的报告，与 SearchIt 整合可用于搜索光谱MS Expert™自动化非目标的气相色谱-质谱分析

气相色谱-质谱数据分析可能会耗费大量时间，特别是在检查复杂分析物时。该应用能自动处理、去卷积和分析GC-MS数据。

主要功能

- 在必要的情况下，MS Expert 可以快速高效地将共混成分发送到 KnowItAll 中的复杂混合物分析程序。
- 使用SearchIt 中的质谱自适应搜索功能（正在申请专利），可以进一步推断出新化合物的结构特征，该搜索功能使用碎片和结构信息来推导可能的结构细节。
- 主要功能
- 自动进行气相色谱-质谱数据去卷积
- 自动搜索成分提取的质谱，在完善的 KnowItAll 质谱参考库中进行匹配*。
- 也允许将用户数据库纳入搜索范围
- 同时进行常规光谱搜索和反向搜索
- 可根据常规光谱搜索和反向搜索的 HQI 值调整匹配分数的计算方法
- 可以分析单位质量数据和精确质量数据
- 显示 TIC（总离子流图）、成分图、提取的光谱与原始光谱的对比、提取的光谱与匹配参考光谱图的对比，以及匹配的参考数据结构。
- 允许用户从 TIC 中手动挑选额外的峰值
- 选择 TIC 区域进行分析
- 可调整分析灵敏度参数
- 支持多种仪器供应商的文件格式(www.knowitall.com/formats)
- 生成带有结果的报告

*需要订阅 KnowItAll 光谱库



工作原理

优化的搜索速度和性能*需要订阅 KnowItAll 光谱库工作原理

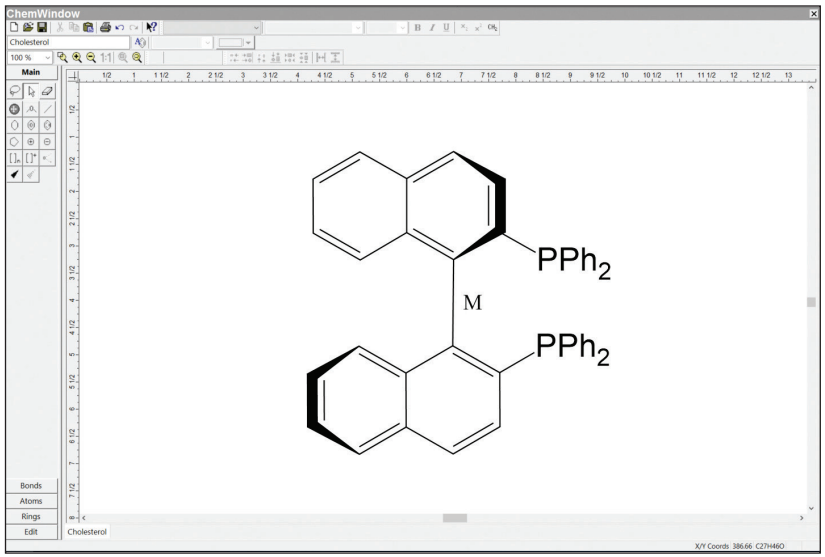
只需导入气相色谱-质谱数据文件，软件就会自动将 TIC 分解成各成分。然后将在参考文献库*中搜索所有提取的质谱光谱成分，以寻找匹配。

基本工具箱

可以将未识别的成分或匹配分数低的成分发送至 KnowItAll 的 SearchIt 工具中进行人工调查。

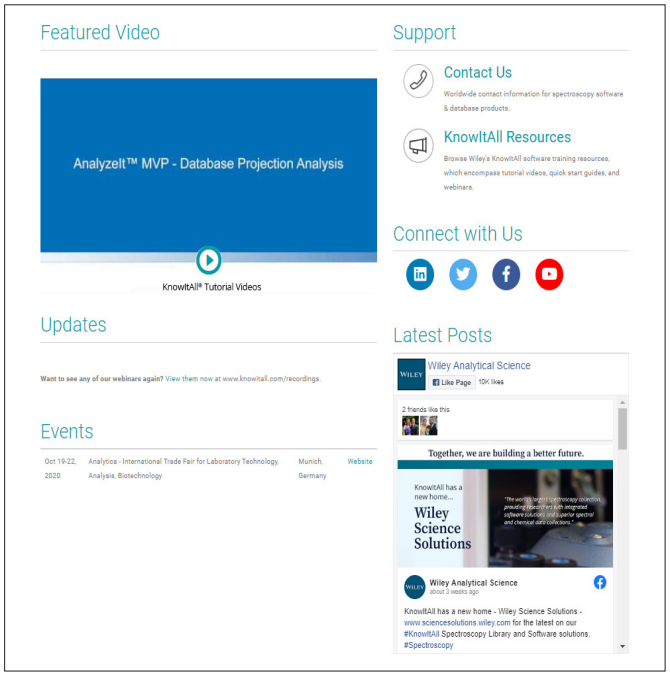
一种功能全面的二维结构图绘图程序

ChemWindow 是被世界各地的化学家所选择用于绘制化学结构图的软件。它提供一套设计先进而简单易用的绘图工具，只需点击和拖放即可绘制任何化学结构图。可使用最全面的工具来绘制环、键、原子、电子、电荷、链、箭头等等。



主要功能

- 工具栏可自定义，其中的工具可用于绘制键、环、原子标签、电荷等化学结构。
- 化学识别功能，如热键、化学句法检查器
- 高级立体化学识别——使用其他软件包所不具备的技术。
- 对象链接与嵌入（OLE）技术，用于文字处理和演示软件中的就地编辑
- 计算质量的工具和公式，以及用于计算元素组成和同位素分布的质谱工具
- 说明文字和结构的预定义样式
- 链接到 OPSIN Name2Structure，将名称转换为结构
- 可从多种文件格式轻松导入现有结构
  (ChemDraw – *.cdx, CML – *.xml, Hampden – *.hsf, InChI – *.txt, JCAMP – *.dx, *.jdx, BIOVIA/MDL – *.mol, *.rxn, Smiles – *.smi, XYX – *.xyz, etc.)
- 支持包括 RInChI 在内的反应文件，以及 CDX 和 CDXM 文件



- 可从多种文件格式轻松导入现有结构

网络培训资源

BrowseIt 是 KnowItAll 软件中内置的一款网络浏览器，其中带有指向 KnowItAll 教程视频和为 KnowItAll 用户提供的其他资源的链接。

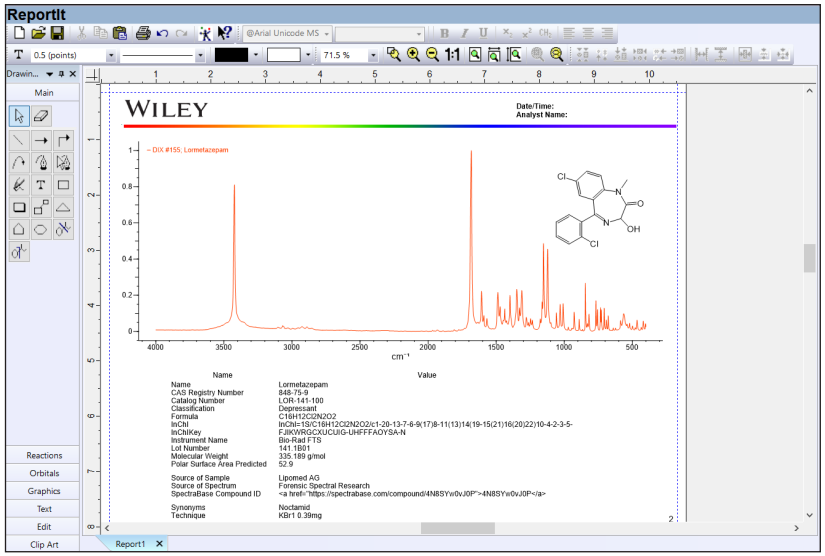
BrowseIt™

功能齐全的发布程序

使用 ReportIt 可创建标准报告、设计图纸、演示文稿和网络发布材料（包括注解、数据表、光谱图以及二维和三维结构等等）。

主要功能

- 自定义模板用于创建统一的报告，以便在企业范围内实现格式标准化
- 自定义工具栏用于绘制化学反应和其他报告，包括箭头、文本框、形状等等
- 剪贴图库内含数百种实验室玻璃器皿图和工程符号
- 对象链接与嵌入（OLE）技术，用于文字处理和演示软件中的就地编辑
- 质谱分割工具可用于显示各个片段的质谱
- 高级编辑选项，可对齐、间隔、使图形居中和旋转文字
- 说明文字和结构的预定义样式
- 3D 结构可视化，实现高质量逼真的 3D 绘图
- 便于输入和管理数据的表格工具
- 以常见的原文件格式导入光谱/色谱图
- 以三种显示模式显示多个光谱：叠加、堆叠和偏移
- 光谱显示高级编辑功能，可自定义光谱和色谱图的外观，其中包括轴、颜色、标签等等
- 自定义注解工具，可将光谱峰等对象与文本图形或化学结构说明文字相关联



• 以三种显示模式显示多个光谱：叠加、堆叠和偏移

- **光谱显示高级编辑功能，可自定义光谱和色谱图的外观，其中包括轴、颜色、标签等等**

- 自定义注解工具，可将光谱峰等对象与文本图形或化学结构说明文字相关联使用 KnowItAll 光谱数据库加快您的分析速度

Wiley公司是一流的光谱数据库生产商和发布者，公司拥有 200 多万张光谱图（红外、质谱、核磁共振、拉曼以及紫外可见光谱），涵盖纯化合物和广泛的商用产品。

没有优质的参考光谱数据库，光谱分析软件就不完整。

KnowItAll 软件与Wiley的 KnowItAll 光谱库订阅结合使用，可为用户提供无与伦比的光谱识别解决方案。有了海量的优质参考光谱集，光谱分析的概率和速度均得到提升。更快地分析样品就是那么简单。

有了海量的优质参考光谱集，光谱分析的概率和速度均得到提升。

您的实验室就可以更快地分析样品，从而节省宝贵的研究时间。

可靠来源的可靠数据

Wiley是光谱数据的权威来源。KnowItAll 数据库集是识别、分类和验证各种未知化合物的重要工具，广泛应用于不同领域，例如聚合物/材料、环境、法医/毒理学、制药、生物技术、汽车/航空航天、食品/化妆品等等。这些鉴定程序从数据采集开始，贯穿整个数据库开发过程。我们从可信赖的合作伙伴处获取数据，且所有数据需经过全面审查后才能纳入我们的数据库。



其著名的数据库根据严格的协议进行管理，确保其达到最优品质。

- KnowItAll 红外光谱数据库
- KnowItAll 质谱数据库
- KnowItAll 核磁共振光谱数据库
- KnowItAll 拉曼光谱数据库
- KnowItAll 紫外可见光谱数据库

KnowItAll 核磁共振光谱数据库

KnowItAll 拉曼光谱数据库优质数据。值得信赖的结果。

sciencesolutions.wiley.com

REV2022-10-07

WILEY