

スペクトルデータのリーダー



The screenshot displays the KnowItAll Analytical software interface. On the left, there is a sidebar with navigation icons and a 'Checklist' table. The main area shows an IR spectrum plot with a y-axis from 0 to 0.8 and an x-axis from 4000 to 500 cm⁻¹. Below the plot is a table of search results.

Score	Info	Weight	Name	Chemical Structure	Spectrum
95.48		N.A.	Composite Spectrum	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)C=C2</chem>	
		0.62	Ethisterone	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)C=C2</chem>	
		0.38	Epiandrosterone	<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)C=C2</chem>	
		N.A.	Residual Spectrum		

KnowItAll Analyticalエディション

IR、MS、NMR、ラマン、UV-Vis分析を加速するソリューション

強力なソフトウェア。高品質データ。信頼できる結果

WILEY

使用されている手法の数によらず、KnowItAllは、貴社のラボに最適なソリューションです。

WileyのKnowItAll Analyticalエディションは、分析データを同定、解析、管理するためのソリューションを提供します。

このベンダーニュートラルな環境は複数の機器のベンダーファイル形式と手法をサポートし、ラボのワークフローと作業方法を効率化します。

KnowItAllは、単一の使いやすいインターフェースに強力なツールが統合されているので、複数のソフトウェアパッケージの必要性を排除します。ソフトウェアにはスペクトルインテリジェンスを継続的に追加しています。これには、他のパッケージでは利用できない特許取得済みのツールも含まれています。

KnowItAllは、Sadtler™ ライブラリや信頼できるパートナーからのスペクトルを含む世界最大級のスペクトル参照データベース*と組み合わせることで、高速で正確な分析に利用できる最先端のテクノロジーを化学者に提供します。



キーボード操作によるメニューへのアクセス、音声ガイド付きアイコン、ヒントツールなどのアクセシビリティ機能。

英語、日本語、中国語、フランス語、ドイツ語で利用可能

KnowItAllおよびChemWindowは、特定の法域におけるWileyの商標です。

* KnowItAllスペクトルライブラリにはサブスクリプションが必要です。

主な機能

基本的なスペクトル分析

高度なスペクトル検索と混合物分析

データベース構築 / 管理

構造式描画とレポート作成 (ChemWindow)

スペクトル処理

KnowItAllの包括的なIR、MS、NMR、ラマン、UV-Visスペクトルライブラリはサブスクリプションが利用可能*

IR/ラマン官能基分析、MS逆検索および適応検索 (特許出願中)、自動MSデコンボリューション/分析、NMR予測やその他の様々な手法固有のツールへのアクセス。さらに12,000件のボーナスIRスペクトルデータベース。

データ型

IR、MS、NIR、NMR、ラマン、UV-Vis

クロマトグラム

構造式

必要なすべてのツールとデータを1つのシステムに統合することで、データから有意な知識を抽出する能力が高まります。

KnowItAllインターフェースは、ユーザーがメインインターフェースを離れたり、別のプログラムを開いたりすることなく、あるツールから別のツールに情報を転送したり、あるタスクから次のタスクに移動したりできるように設計されています。複数のタスクは、論理的にグループ化された「ツールボックス」を使用して実行されます。

すべてのツールが単一の統合環境に配置されているため、このシステムを使用すると、常に時間を節約し、ワークフローを改善し、データから結論に到達する能力を高めます。

単一の使いやすいインターフェースに統合された強力なツール。カスタマイズ可能なツールボックス

検索、処理、データの管理、構造式の描画など、タスク間をシームレスに移動します。

The screenshot displays the KnowItAll Informatics System interface. The main window shows a 1H NMR spectrum for Phenol (DEMOX #10) with peaks at 6.31, 6.83, 6.90, and 7.18 ppm. The chemical structure of Phenol is shown in the Structure/Properties panel. Below the spectrum is a table of related compounds:

ID	Name	Sp<auto> (IR)	Spectrum13C NMR	Spectrum1H NMR	Chemical Structure
10	Phenol	[Spectrum]	[Spectrum]	[Spectrum]	<chem>Oc1ccccc1</chem>
11	Poly(styrene)	[Spectrum]	[Spectrum]	[Spectrum]	<chem>[*]C(=O)c1ccccc1[*]</chem>
12	Cyclohexane	[Spectrum]	[Spectrum]	[Spectrum]	<chem>C1CCCCC1</chem>
13	Benzene	[Spectrum]	[Spectrum]	[Spectrum]	<chem>c1ccccc1</chem>
14	Carbon Tetrachloride	[Spectrum]	[Spectrum]	[Spectrum]	<chem>ClC(Cl)(Cl)Cl</chem>

The right panel shows the Structure/Properties for Phenol, including its chemical structure and a table of properties:

Name	Value
Name	Phenol
Boiling Point	181.8 °C
CAS Registry Number	108-95-2
Comments	Used in manufacturing many industrial compounds such as phenol-formaldehyde resins, bisphenol A, alkylphenols and certain dyes. Somewhat soluble in water; very soluble in alcohol, chloroform, ether, carbon disulfide. Highly toxic and caustic. A general disinfectant. NIOSH= SJ33250
Density	20C=1.0767; 25C=1.132 G/ML
Dielectric Constant	9.78 (60C)
Flash Point	175F (CC)
Formula	C6 H6 O

含まれているもの

含まれるツールとアプリケーションの概要

データツールボックス

ID Expert™	ワンクリックの「ファーストパス」スペクトル識別ツール
SearchIt™	高度なデータベース検索
Minelt™	スペクトルデータベースの構築とデータマイニング
QC Expert™	QCスペクトルの比較
AssignIt™ NMR	データベースに割り当てを追加する

スペクトル分析ツールボックス

AnalyzeIt™	官能基分析 - IR、ラマン、IRポリマー、気相IR合成カンナビノイド
PredictIt™ NMR	NMR化学シフト予測

スペクトル処理ツールボックス

ProcessIt™	IR、MS、NMR、ラマン、MSのスペクトル処理
MS Expert™	GC-MSデコンボリューションと自動参照データベース検索を組み合わせたコンポーネント分析

基本ツールボックス

ChemWindow	2D構造図
ReportIt™	構造、スペクトル、クロマトグラムなどの専門的レポートを公開します。
Browselt™	KnowItAllトレーニングリソースと製品ニュースへのリンクを含むWebポータル

スペクトルライブラリ*

KnowItAllライブラリ	IR、MS、NMR、ラマン、UV-Visから成る世界最大級のコレクションのサブスクリプション
----------------	--

* KnowItAllスペクトルライブラリにはサブスクリプションが必要です。

KnowItAllツールの詳細

- データツールボックス
- スペクトル分析ツールボックス
- スペクトル処理ツールボックス
- 基本ツールボックス

データツールボックス



「ファーストパス」スペクトル同定ツール

未知のスペクトル特定では、どこから始めればよいかを理解するのは困難です。WileyのKnowItAll ID Expertは、初心者と専門家の両方に最適なソリューションを提供します。参照スペクトルと照合することで未知のスペクトルを特定しようとする科学者に、高速で信頼性の高い回答を提供します。

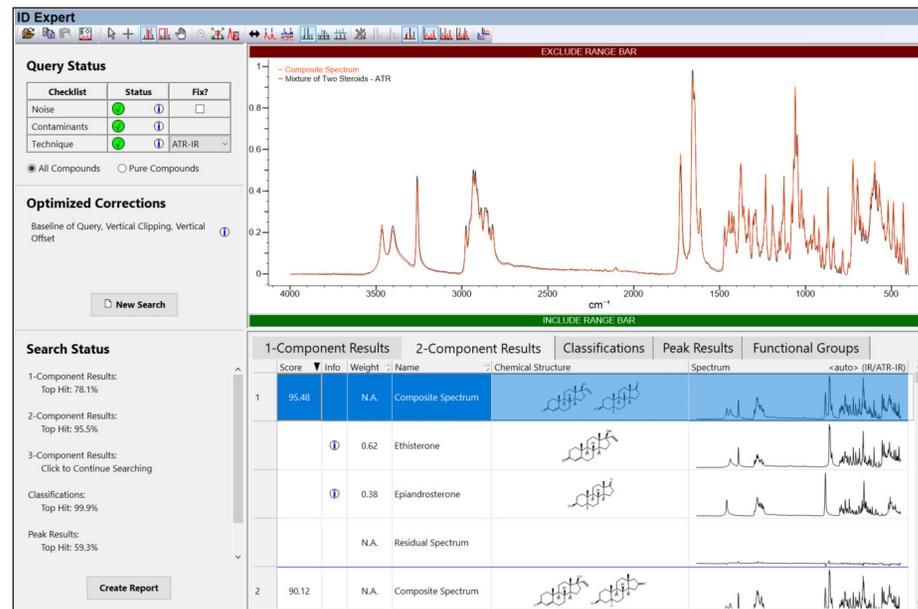
世界最大級のコレクションであるWileyの高品質なKnowItAllスペクトルライブラリ*と組み合わせると、KnowItAll ID Expertに組み込まれたスペクトルインテリジェンスにより、これは迅速なファーストパス分析ツールになります。

機能の仕組み

- 未知のスペクトルを開くだけで、KnowItAll ID Expertは一連の基本的な分析（**単一および多成分検索、ピーク検索、官能基 (IR / ラマンの場合)**）を自動的に実行し、結果を要約して可能性の概要を示します。
- 未知のスペクトルまたは参照スペクトルに問題がある場合、ID Expertは、問題を特定してその一部を修正するためのスペクトルインテリジェンスを備えています。
- ユーザーが未知のスペクトルを特定すると、ワンクリックでPDFレポートを生成できます。

特許取得済みの最適化された補正技術が含まれており、可能な限り最高の検索結果を保証します。

Wileyの新しいIRデザイナードラッグモデルを使用したデザイナードラッグのIRスペクトル向けの迅速な分類ツールも含まれています。



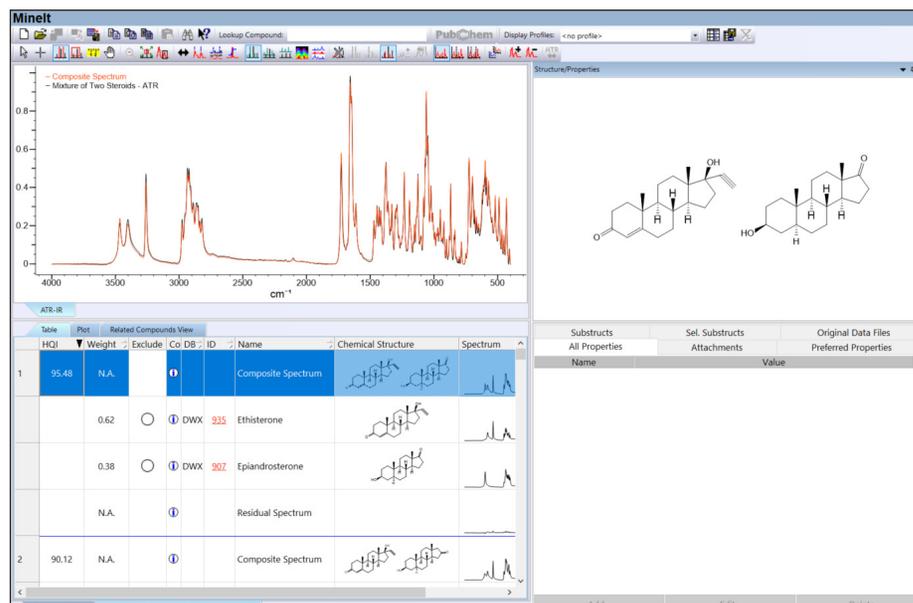
* KnowItAllスペクトルライブラリにはサブスクリプションが必要です。

高度なスペクトルデータベース検索用

Wileyは、自らが膨大なデータセットの分析に使用するのと同じテクノロジーを使用して構築された、スペクトルデータ検索のための最も強力なツールを提供します。Wileyは、高速の検索速度、強力なアルゴリズム、および特許取得済みのテクノロジーにより、信頼できる結果を提供できます。

主な機能

- サンプルスペクトルをインポートし、ユーザーデータベースまたはWileyの包括的な KnowItAllのIR、MS、NMR、ラマン、UV-Visスペクトル参照ライブラリに対して検索します*
- 検索はカスタマイズ可能で、強力なアルゴリズムによって実行されます
- 速度とパフォーマンスを最適化
- 名前、構造式、部分構造、プロパティ、スペクトル(フルスペクトルまたは選択した範囲)、ピークの任意の組み合わせで検索します
- 検索の際のスペクトル領域の選択設定と除外設定
- 複数のコンポーネントの混合分析を実行します
- 結果を絞り込むために、混合分析の際に必須成分/除外成分を設定
- 手動でのピーク選択、自動ピークピッキング機能を使用
- アルゴリズムには、ユークリッド距離、1次および2次微分ユークリッド距離、相関、およびベースライン補正が含まれます。MSの場合: ドット積(コサイン)、Wileyドット積(コサイン)、コンポジットP1およびP3
- さまざまな手法のスペクトルを使用して同時にマルチテクニック検索を実行し、より信頼性の高い分析のために2次元プロット
- 特許取得済みの最適化された補正技術が含まれており、最高の検索結果を保証します
- MSの適応検索(特許出願中)と逆検索が含まれています
- オーバーレイ、オフセット、スタック、パタフライ、減算など、さまざまなビューを使用してスペクトルを簡単に比較できます
- 複数の機器タイプとベンダー形式をサポートします(www.knowitall.com/formatsで完全なリストを参照)



Analyticalエディションには、次のボーナスデータベースも含まれます:

- IR – Sadtler Polymers、Hummel – Wiley (1,907のスペクトル)
- IR – Sadtler Standards (有機化合物と高分子化合物のサブセット) – Wiley (9,996のスペクトル)
- ATR-IR – Sadtler Solvents (629のスペクトル)
- **マイクロプラスチック分類データベース** - このデータベースは、現在IR / ATR-IRスペクトルのマイクロプラスチックを分類するための高速でコストパフォーマンスの良い方法として、Analyticalエディションに付属しています。マイクロプラスチックサンプルの識別には、包括的なKnowItAll IRスペクトルライブラリのサブスクリプションをお勧めします。

KnowItAllを際立たせる強力なスペクトル検索ツール

Wileyは、スペクトル分析を次のレベルに引き上げることに取り組んでいます。分析を加速するスペクトルインテリジェントツールをポートフォリオに継続的に追加しています。ここでは、WileyをスペクトルインフォマティクスのリーダーにするKnowItAllのSearchItのユニークで強力なソリューションのいくつかを詳しく見ていきます。

混合物分析: IRとラマンの業界をリードする機能がMSで利用可能になりました。最も強力な機能の1つは、混合物を分析するKnowItAllの機能です。参照データベースで不明なものを検索する場合、複数のコンポーネントを検索できます。結果は一連の複合スペクトルであり、それぞれが複合スペクトルを構成する個々の成分スペクトルと、残差スペクトル(クエリスペクトルと複合スペクトルの差)を伴います。次に、複合スペクトルは、クエリスペクトルにどれだけ似ているかによってランク付けされます。

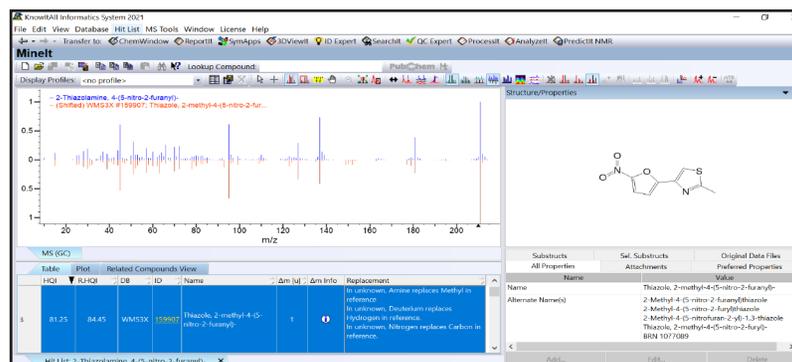
特許取得済みの最適化された補正技術: 検索は必ずしも簡単なプロセスではありません。クエリスペクトル、ライブラリ参照スペクトル、またはその両方に問題がある場合はどうなるでしょうか? 問題があると、ライブラリに存在するスペクトルであったとしても、適切な一致が見つからない可能性があります。Wileyは、この複雑な問題を解決し、最良の結果をもたらすための独自の特許取得済みソリューションを提供します。

Wileyの最適化された補正技術は、KnowItAllのID ExpertおよびSearchItアプリケーションに組み込まれているスペクトルインテリジェントソリューションです。これは、検索内のすべてのクエリと参照スペクトルに対して複雑な計算による修正を実行して、クエリと各参照スペクトル間の最適な一致を見つけます。複数の補正が自動的に適用され、さまざまな機器やアクセサリの変動、および人為的エラーを含むその他の要因によって引き起こされるスペクトル間の差異が補正されます。補正には、ベースライン補正、クリッピング、水平シフト、垂直シフト、強度歪み、およびATRの補正が含まれます。

マルチテクニックの「同時」スペクトル検索: KnowItAllは、1つまたは複数のデータベースから同時に複数の分析技術でスペクトルを検索できる世界初の検索システムです。たとえば、あるデータベースのNMRスペクトルと別のデータベースのマススペクトルを同時にクエリして、化学構造によって相互にリンクされている各データベースから最も関連性の高いヒットを見つけます。

MSの特許出願中の適応検索: 未知のマススペクトルをリファレンスと照合する場合、このテクノロジーは、未知のマススペクトルと類似しているが、選択フラグメントが追加または欠落しているスペクトル一致を検出します。次に、可能であれば、違いの原因となっている可能性のあるものを提案します。この機能は、完全に一致するものがない場合に構造上の可能性を探るための大きなヒントになります。最終的に、これはよりインテリジェントで自信のある識別と確認につながる可能性があります。

MS逆検索機能: この検索では、参照スペクトルのピークに一致するものが見つかり、未知のスペクトルにのみ存在するピークは無視されます。



スペクトルデータベースの構築と管理

化学者と分光学者は、組織内で毎日貴重なデータを作成しています。Wiley Science Solutionの主な事業はスペクトルデータベースであるため、KnowItAllは、長年の経験によりデータベースが構築されています。

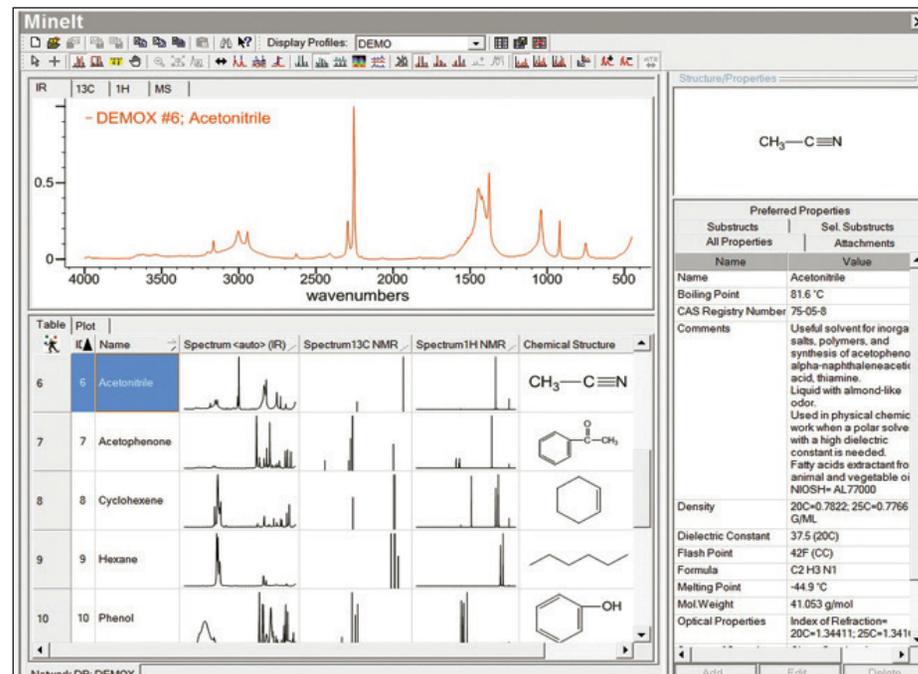
さまざまなベンダーから単一または複数テクニックのデータベースを構築する

研究者は、1つ以上の分析技術 (IR、MS、NIR、NMR、ラマン、UV-Vis)、化学構造、およびその他のメタデータを含む検索可能なデータベースを構築できます。そのため、ラボの機器が複数のメーカーから提供されている場合でも、KnowItAllはデータをアーカイブできます。

主な機能

スペクトルおよびクロマトグラフィーデータを使用してデータベースを構築する

- 1つ以上の分析技術を使用してデータベースを構築する
- 同じレコードに複数のスペクトルを含むデータベースを構築する
- ラボに複数のベンダーの機器がある場合でも分析データをインポートする
- 一般的な機器のファイル形式または*.csv形式 (スプレッドシート) のワンクリックインポート
- サンプルのソース、沸点などのピーク情報、構造、プロパティで各レコードを拡張する
- 複数の構造形式をインポートする (立体化学結合と識別子を使用)
- スペクトル、構造、プロパティファイルを効率的に処理するために、「バッチインポートおよびエクスポート」を使用する
- 無制限のスペクトル範囲と解像度をサポート: 固定範囲と解像度を強制されるのではなく、各スペクトルが測定された正確な範囲と解像度でスペクトルを保存する
- スプレッドシート、MSDS、その他のドキュメントを添付したり、Webページにハイパーリンクを追加することによるデータベース強化
- レコードから別の手法のデータへの相互参照を作成 (NMRスペクトルをIRスペクトルにリンク可能)
- 新機能: 麻薬取締局の規制に従った規制物質の化学構造の分類 (一括処理が可能)
- データセット全体の単一またはバッチ計算用のプロパティ計算機 - 式、分子量、C-13 NMR予測、不良ベースラインインジケータ、ベースライン分析: 面積差、スブラッシュID、さまざまな質量 (平均、正確、公称)
- 元素組成と同位体分布を計算するためのMSツール
- PubChemからデータベースにプロパティと構造をすばやく追加



データベースをカスタマイズ

- データベースをラボの仕様に合わせてカスタマイズ
- 作業に関連するメタデータをサポートするカスタムフィールドを作成
- テキスト、数値、ハイパーリンクの3種類のプロパティフィールドから選択
- ユーザーが一貫してプロパティを入力できるように「優先プロパティ」フォームを生成
- x解像度やy解像度などのスペクトルパラメータを設定

データからほとんどの情報を抽出

- 処理、データベース検索/マイニング、構造図作成、処理、レポートなどのため他の KnowItAllアプリケーションと完全に統合

マルチテクニックの表示とマイニング

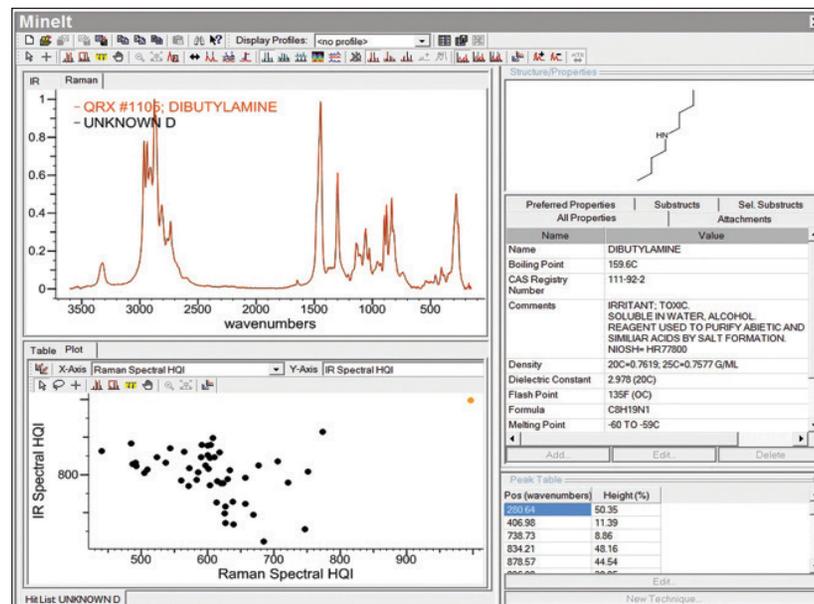
Mineltを使用すると、参照データベース、ユーザーが作成したデータベース、または検索結果を表示できます。スペクトルクロマトグラム、構造、物理的特性など、さまざまな種類のデータを含むデータベースにアクセスします。分析データベースには同じレコードに1つ以上の手法を含めることができるため、参照スペクトルのデータベースにアクセスするのに理想的です。

高度なデータマイニング機能

散布図を使用してデータベースの任意の2つの変数を比較し、目的の傾向に従うデータとそうでないデータを分離します。散布図の任意の点を選択して、そのレコードに関連付けられている化合物を表示します。

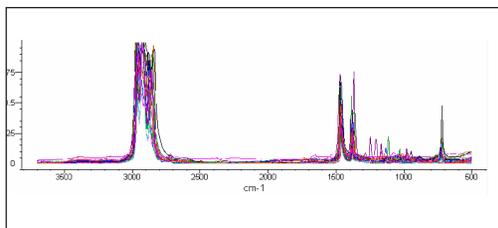
特許取得済みのオーバーラップ密度ヒートマップテクノロジー

従来、複数のスペクトルの視覚化は、オーバーレイ、オフセット、またはスタックプロットで行われます。ただし、これらの従来のプロット方法では、大量のデータを表示するときに傾向がわかりにくくなります。オーバーラップ密度ヒートマップを使用すると、ユーザーは傾向を視覚化し、大量のデータの類似点と非類似点を評価できます。具体的には、このテクノロジーにより、ユーザーは、スペクトル領域を最も高いものから最も低いものへと色分けすることにより、スペクトルなどの重なり合ったオブジェクトの一般的な特徴を確認できます。



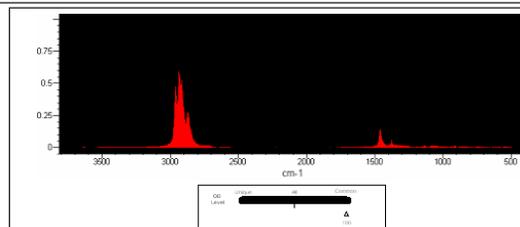
例：このプロット機能は、データベース検索結果の品質 (Hit Quality Indices-HQI) を相互にプロットすることにより (たとえば、IRHQI と RamanHQI)、複数の手法で実行されたサンプルのスペクトル検索の分析に役立ちます。

オーバーラップ密度ヒートマップ：例：



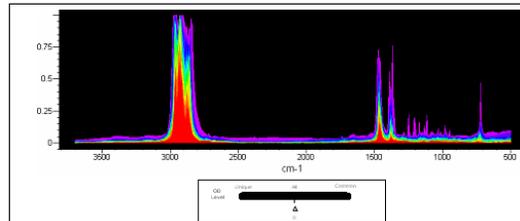
従来のスタックディスプレイ

アルカンの31のIRスペクトルが示されています。いくつかの傾向が現れますが、傾向の範囲はあいまいです。



ODヒートマップ ODレベル = 100

すべてのスペクトルに共通するオーバーラップ領域のみを示すオーバーラップ密度ヒートマップです。



ODヒートマップ ODレベル = 0

示されている31個のアルカンのオーバーラップ密度ヒートマップは、すべてのオーバーラップレベルを示しています。高レベルのオーバーラップは赤で表示されます。低レベルは紫で表示されます。

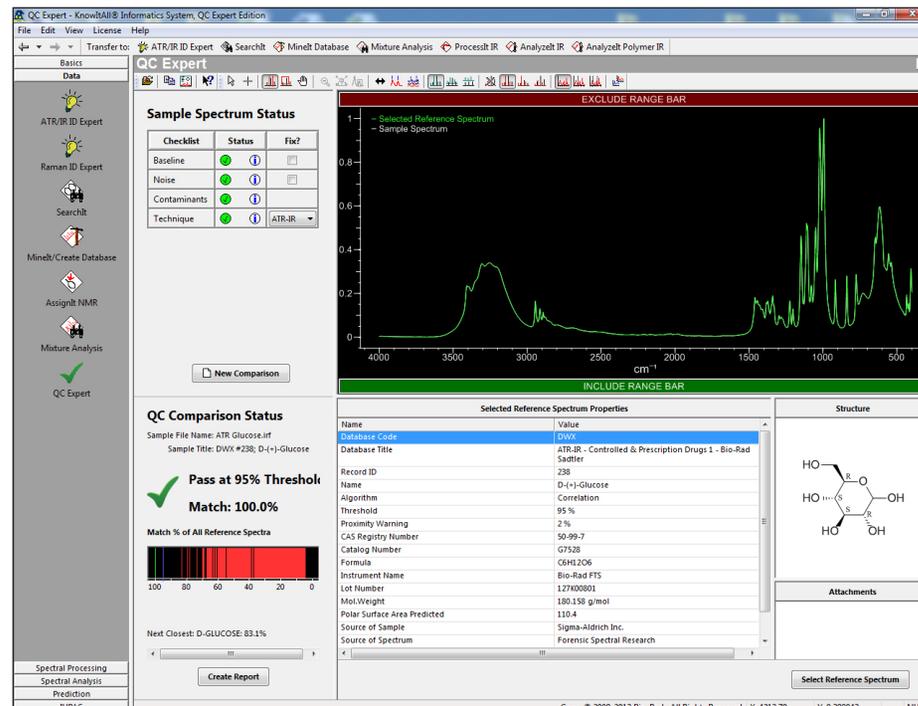


IR、ラマン、クロマトグラムの品質管理の比較

WileyのKnowItAll QC Expertソフトウェアは、サンプルIR、ラマンスペクトル、クロマトグラムを、「ゴールドスタンダード」ユーザースペクトルまたはクロマトグラムに対して迅速な品質チェックを実行して、材料が管理仕様を満たしていることを確認します。

主な機能

- サンプルと選択した参照ファイルのQC比較を実行する
- サンプルを参照データベースと比較して結果を検証し、サンプルが選択した参照データと一致するだけでなく、参照データベース内の他のどのスペクトルとも一致しないことを確認する
- 技術者が設定されたプロトコルに従い、成果に集中できるように、ユーザー特権、参照データ、およびその他の設定を定義する
- サンプルスペクトルの問題を特定する - QC Expertの組み込みスペクトルインテリジェンスが問題を特定し、それを修正する方法を提案する



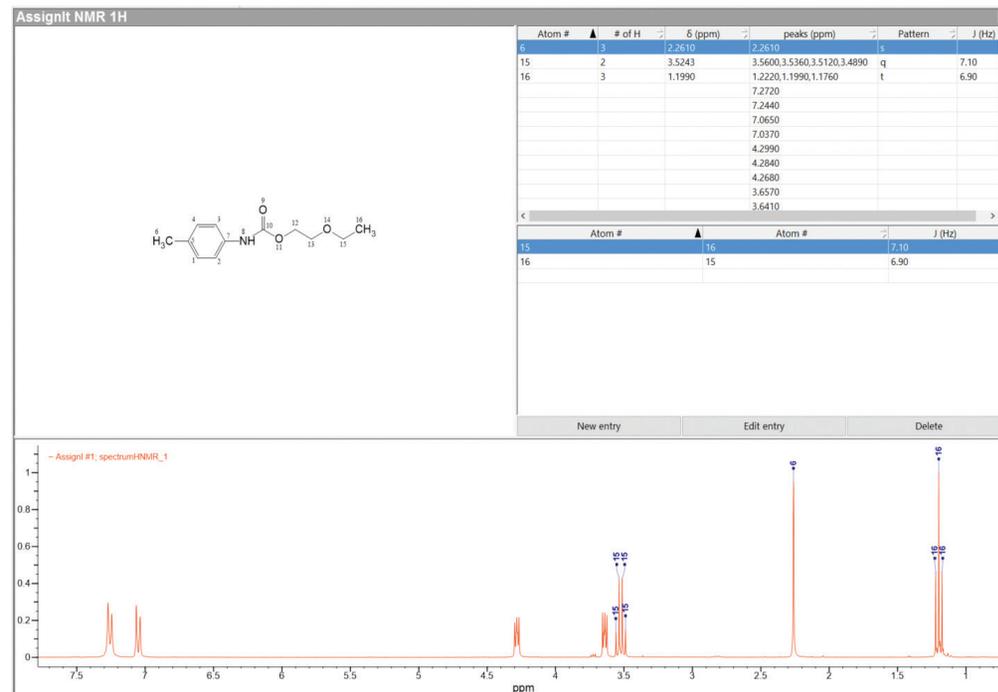
* KnowItAllスペクトルライブラリにはサブスクリプションが必要です。

完全に帰属されたNMRデータベースを作成

AssignIt NMRを使用すると、ユーザーは¹H、¹³C、¹⁹F、³¹P、¹⁵N、¹⁷O、¹¹B、²⁹Si NMRのデータベースの構造にNMR帰属を追加できます。AssignItの使いやすいインターフェースにより、ピークシフトの帰属、強度、結合定数、多重度など、すべて化学構造にリンクされたデータベース情報をすばやく入力できます。

主な機能

- 多種多様なNMR形式のインポート
- 実験スペクトルのピークに原子を帰属
- インタラクティブカップリング計算ツール
- マルチプレット信号内のJ値の自動計算
- 「同じJ」の信号を検索」機能を使用してスペクトル内で同様の分割を検索する
- 帰属を追加/編集するための概要ビューとデータ入力フォームを備えた直感的なインターフェイス
- 自動および手動のピークピッキングツール
- ChemWindow (構造式) およびMinelt™との完全な統合



スペクトル分析ツールボックス



高度な官能基分析

IR、ラマン、IR (ポリマー)、気相IR (合成カンナビノイド) 向け

スペクトルの解釈: スペクトルをロードして、関心のあるピークをクリックするだけで、Analyzeltはそのピーク位置で可能なすべての官能基を一覧表示します。スペクトルをオーバーレイして各グループのピーク領域を比較し、「最も可能性の高い」候補にタグを付けて結果を絞り込みます。

構造式とスペクトルの相関: この機能は、提案された構造式が観測されたスペクトルと一致するかどうかを判断するのに役立ちます。構造式を描画またはインポートするだけで、そのコンポーネントの官能基を表示できます。スペクトルを重ね合わせて、各グループのピーク領域を比較します。

分類ナレッジベース

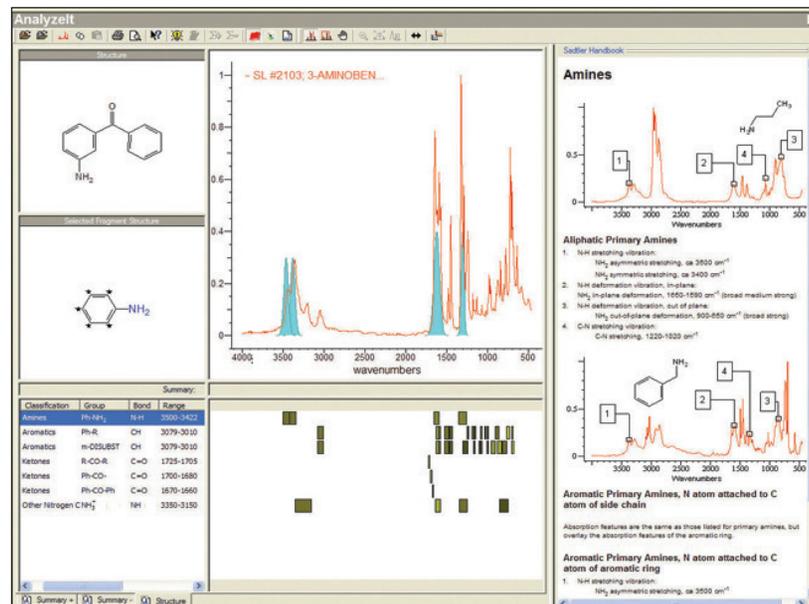
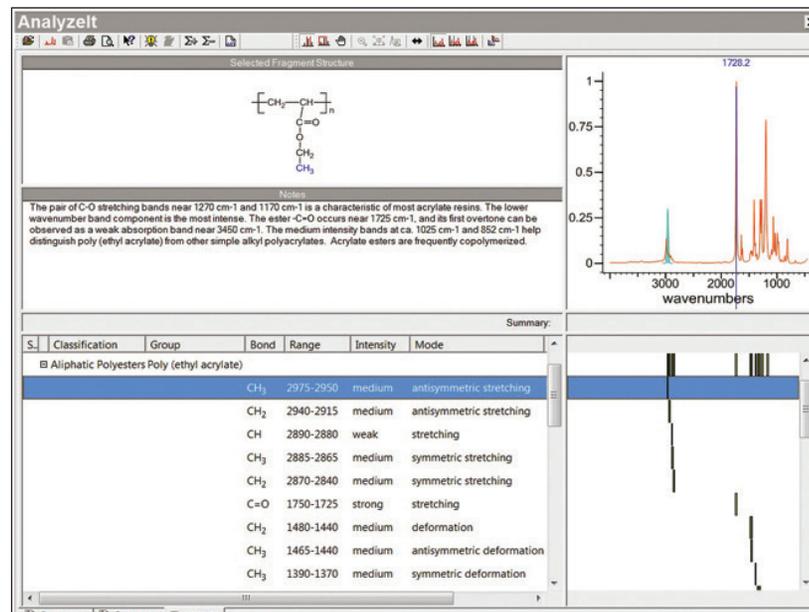
IRおよびラマン	200を超える官能基と数百の周波数の解釈
IRポリマー	100を超える官能基と数百の周波数の解釈
新機能気相IR - 合成カンナビノイド (特許取得済み)	60を超えるブリッジカルボニル基
または解釈を改善するために独自のナレッジベースを構築	

メリット

- 未知の化合物のスペクトルの分類に便利
- スペクトル解釈の他の方法を補足

主な機能

- スペクトルのインポートとピーク分析
- インテリジェントな「ピークを提案する」機能
- 構造式がスペクトルと一致するかどうかを判断
- 化学分類ごとにナレッジベースを参照
- 否定的または肯定的な解釈にタグを付けて要約
- 簡単に比較できるピークオーバーレイ表示
- 振動周波数に関係する構造結合を表示/強調表示
- Sadtlerハンドブックの追加データへのリンク (Analyzelt IRのみ)
- 利用可能な場合、官能基のメモを表示



NMRスペクトル予測

PredictIt NMRを使用して、¹³C、¹H、およびその他の核のデータベースを基礎としたNMRスペクトル予測を実行します。

ユーザーがPredictIt NMRで構造式を開くと、予測が自動的に実行されます。予測を行うために、このツールは、¹H、¹³C、またはその他のシフトが帰属されている部分構造のデータベースを調べます。部分構造は、中心原子のn個の結合内の原子を表すシェルの数によって定義されます。

たとえば、4つのシェルには、中央の炭素原子と、この原子の4つの結合内のすべての原子が含まれます。完全に一致するものを探した後、PredictIt NMRは、構造内の各原子に一致するシェルを探します。シェル4から始まり、一致するものが見つかるまで小さいシェルに進みます。

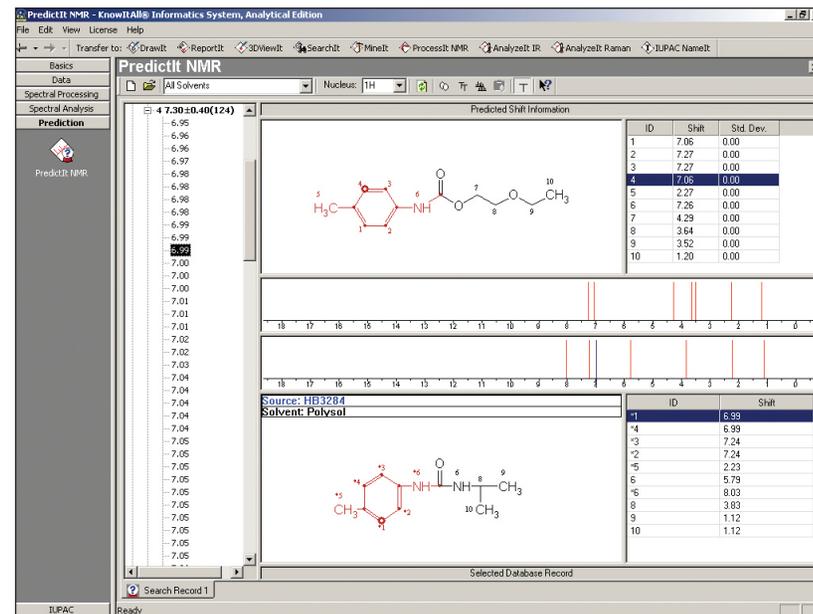
このツールは、データベースで特定の化学環境を検索します。特定の化学環境は、分子構造内の原子の化学的環境を記述するために使用されるトポロジコードである修正されたHOSE (Hierarchically Ordered Spherical description of Environment) コードによって記述されます。元の構造と結果は、PredictIt NMRのメインウィンドウに表示されます。各原子の平均シフト（および標準偏差）は、ツリーコントロールの最上位に表示されます。

精度を向上させるための溶媒固有の予測

KnowItAllは、市場で最初の溶媒固有のNMR化学シフト予測を提供します。ユーザーは、クロロホルム、アセトン、ジメチルスルホキシドなどの一般的な溶媒のリストから選択でき、KnowItAllはその溶媒のすべての化学シフトを自動的に再計算します。

単なるスペクトルデータ以上のもの

NMR分光器が必要とする情報は、予測されるピークシフトだけではありません。PredictIt NMRを使用すると、予測の作成に使用された実際のスペクトルデータを簡単に取得できるだけでなく、サンプルソース、溶媒、製造条件、機器、分子の特性など、参照スペクトルに関連する利用可能な情報にアクセスできます。



スペクトル処理ツールボックス



IRスペクトル処理

ProcessItは、IRスペクトルを処理し、アーカイブされたデータと検索結果の品質を向上させるためのさまざまなツールを提供します。他のKnowItAllツールと組み合わせて使用することもできます。たとえば、スペクトルをSearchItからProcessItに転送して、潜在的な検索の問題を修正し、元に戻すことができます。

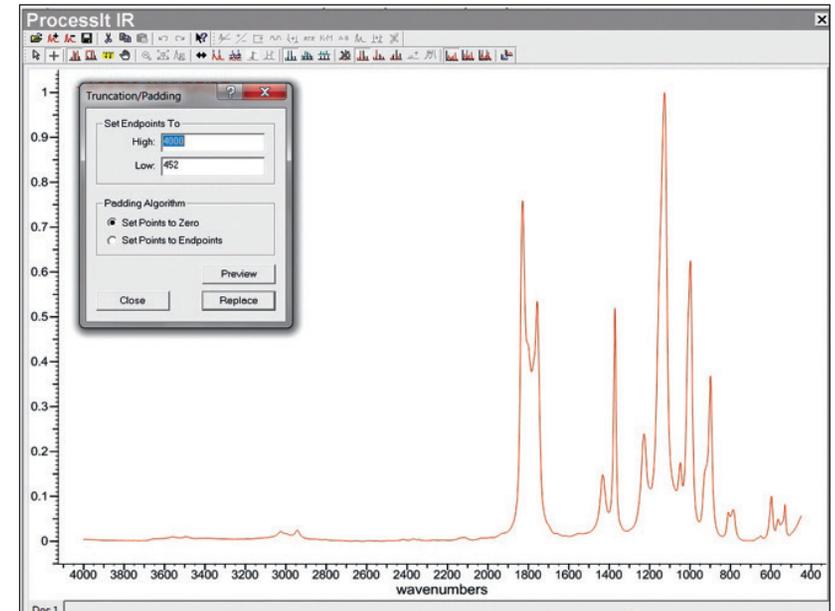
処理機能は次のとおりです：

- フラットライン
- 切り捨て/パディング
- 正規化
- 平滑化 (Quad-Cubic Savitsky Golay工法、フーリエ工法)
- ベースライン補正 (スプライン、線形、および多項式の工法)
- ATR補正
- 逆ATR補正
- Kubelka-Munk転換
- スペクトル減算とスペクトル加算
- 平均スペクトル

- ピークピッキング

分析機能は次のとおりです：

- 曲線下面積 (AUC)



ラマンスペクトル処理

ProcessItは、ラマンスペクトルを処理し、アーカイブされたデータと検索結果の品質を向上させるためのさまざまなツールを提供します。他のKnowItAllツールと組み合わせて使用することもできます。たとえば、スペクトルをSearchItからProcessItに転送して、潜在的な検索の問題を修正し、元に戻すことができます。

処理機能は次のとおりです：

- フラットライン
- 切り捨て/パディング
- 正規化
- 平滑化 (Quad-Cubic Savitsky Golayl工法、フーリエ工法)
- ベースライン補正 (スプライン、線形、および多項式の工法)
- ATR補正
- 逆ATR補正
- Kubelka-Munk転換
- スペクトル減算とスペクトル加算
- 平均スペクトル

- ピークピッキング

分析機能は次のとおりです：

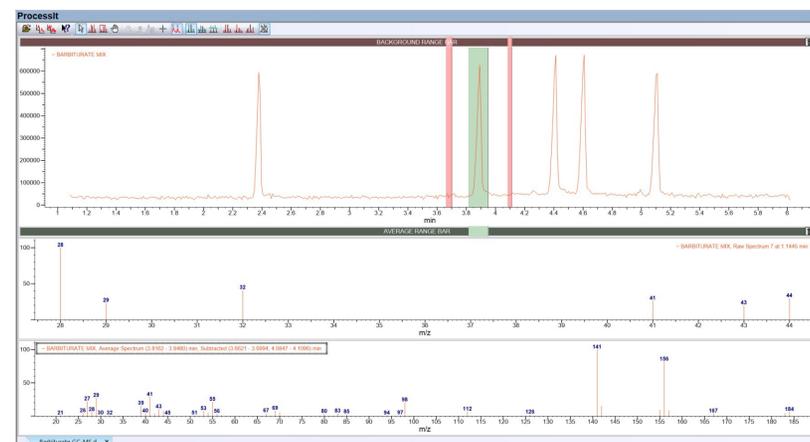
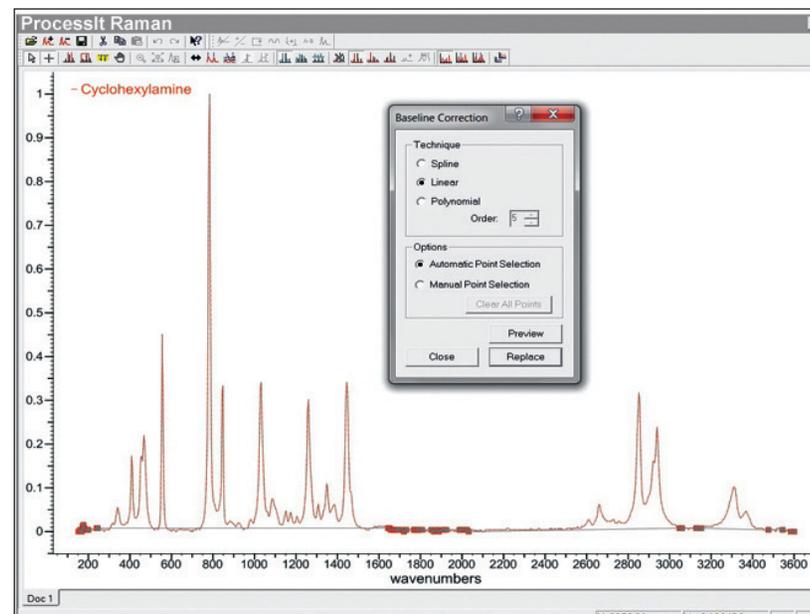
- 曲線下面積 (AUC)

GC-MSデータ処理

ProcessItを使用すると、ユーザーはマススペクトル、または平均マススペクトルを表示および選択し、バックグラウンドを定義することができます。選択したマススペクトルまたは抽出したスペクトルを転送してデータベース検索するか、ユーザーデータベースにインポートすることができます。

選択イオンクロマトグラム (Selected Ion Chromatograms: SIC) - ProcessItでは選択イオンクロマトグラムを表示できます。複数のイオンクロマトグラムを一番上のペインに表示できます。

スペクトル減算 - この機能により、平均マススペクトルの計算が可能になり、手動のバックグラウンド減算によるバックグラウンドノイズの除去も可能になります。いずれかのプロセスに単一または複数の範囲を指定できます。右のスクリーンショット (下) に示される通り、下側のペインには、選択したMS、選択したMSとバックグラウンド (赤色のバー)、平均MS (緑色のバー)、または平均MS (緑色のバー) とバックグラウンド (赤色のバー) のいずれかを保持することができます。



NMRスペクトル処理

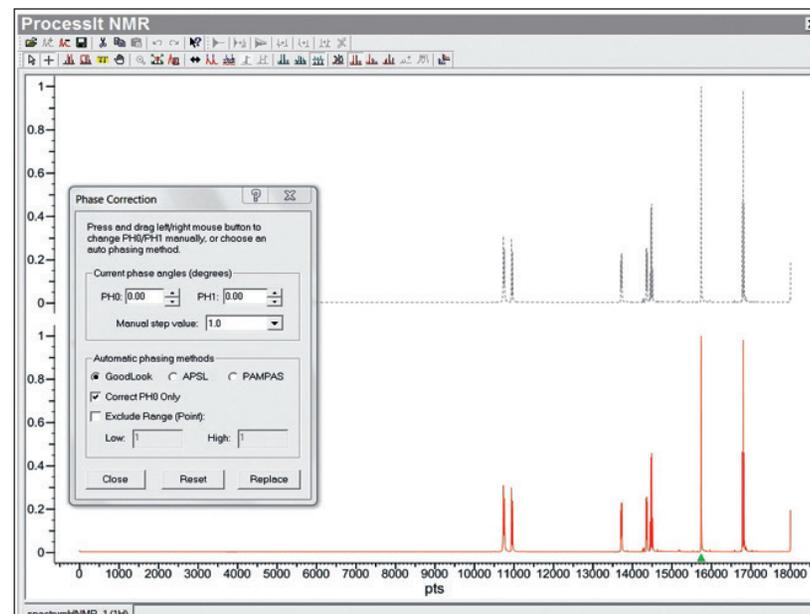
ProcessItを使用すると、さまざまなソースからNMRスペクトルをインポートして処理し、アーカイブデータと検索結果の品質を向上させることができます。この使いやすいツールは、実験的なアーティファクトを修正し、スペクトルの外観を改善するための包括的な処理機能のセットを提供します。

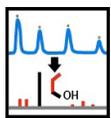
化学者と分光学者は、自分のデスクトップでProcessItを使用して、実験データを処理および再処理できます。ProcessItは、便利であることに加えて、機器での貴重なプロセッサ時間を節約し、それによってサンプルスループットを向上させます。

ProcessItはKnowItAllインフォマティクス環境に完全に統合されているため、処理されたスペクトルをワンクリックで他のKnowItAllツールに転送できます。

主な機能:

- 複数の形式から1D処理またはFIDスペクトルをインポート
- 処理機能: ゼロフィリング、インタラクティブウィンドウ関数、およびフーリエ変換
- 自動および手動の位相補正
- 多項式、スプライン、線形アルゴリズムを含む自動および手動のベースライン補正
- 自動および手動のピークピッキング
- 自動および手動積分
- スペクトルの加算と減算
- 複数のスペクトルをオーバーレイして簡単に比較
- 迅速かつ効率的な処理のためのマクロ機能
- JCAMP形式でエクスポート
- 水平ズーム、ボックスズーム、ハンドカーソル、スケーリングなどのスペクトル処理ツール
- 処理されたスペクトルをアーカイブするためのMinelt、スペクトル、ピーク、および積分テーブルを含むレポートを作成するためのReportIt、およびスペクトル検索のためのSearchItとの統合





MS Expert™

ノンターゲット自動GC-MS分析

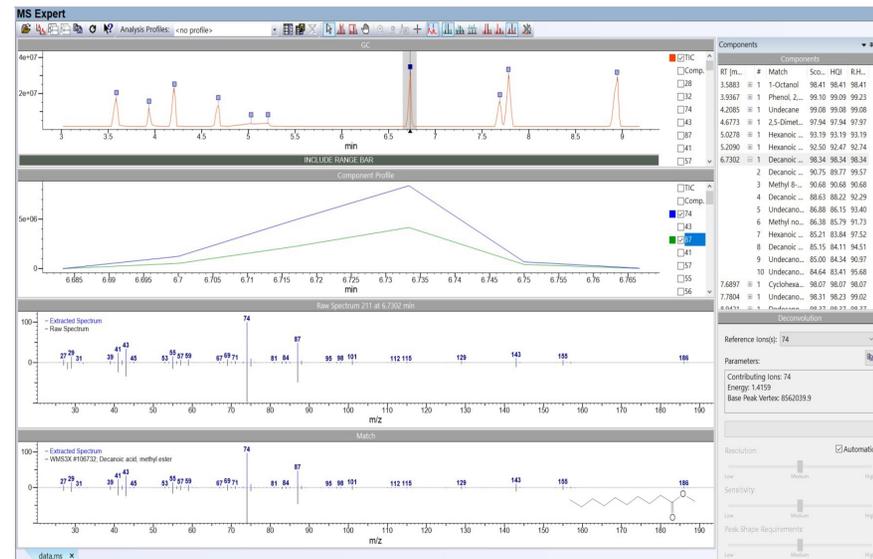
GC-MSデータ分析は、特に複雑な分析物を検査する場合には、時間がかかることがあります。このアプリケーションは、GC-MSデータを自動的に処理、デコンボリュート、および分析します。KnowItAllの高速データベース検索と組み合わせることで、既存のデータとの一致を提案し、未知のデータを精査できるようにします。

共溶出したコンポーネントをKnowItAllの洗練された混合分析アプリケーションに送信する必要がある場合は、MS Expertでこれをシームレスに行うことができます。断片化と構造的情報を用いて可能な構造的詳細を提案する (SearchIt) 特許申請中のMS適応検索を適用することで、新規化合物の構造特性をより深く推定することができます。

主な機能

- 自動GC-MSデータデコンボリューション
- コンポーネントの抽出されたMSスペクトルを包括的なKnowItAll MSスペクトル参照ライブラリ*と自動検索で照合
- 検索にユーザーデータベースを含めることも可能
- 通常のスเปクトル検索と逆検索を同時に実行可能
- 通常のスเปクトル検索と逆検索HQI値に基づく調整可能な一致スコア計算
- 精密マスデータだけでなく、整数マスデータも分析可能
- 画面にはTIC、コンポーネントのプロファイル、抽出されたスペクトルと生スペクトルの比較、抽出されたスペクトルと一致する参照スペクトルのグラフ、および一致する参照データ構造を表示
- TICから追加のピークを手動で選択可能
- 分析するTIC領域を選択
- 調整可能な分析感度パラメータ
- 精密マスデータ向けの調整可能な入力データ分解能セットアップ
- 参照スペクトルと上手く一致しないコンポーネントを、適応検索または混合検索を用いて手動で検索するためにSearchItへシームレスに転送
- 結果が記載されたレポートを生成
- 複数の機器タイプとベンダー形式をサポートします (www.knowitall.com/formats)
- 速度とパフォーマンスを最適化

* KnowItAllスペクトルライブラリにはサブスクリプションが必要です。



機能の仕組み

GC-MSデータファイルをインポートするだけで、ソフトウェアが自動的にTICをコンポーネントにデコンボリュートします。次に、一致を見つけるために、抽出されたすべてのコンポーネントのMSスペクトルが、参照ライブラリ*と自動的に照合検索されます。結果が各コンポーネントのヒットリストとして表示されます。

次に、未知のコンポーネントまたは一致スコアの低いコンポーネントをKnowItAllのSearchItツールに送信して手動検索を行うことも可能です。SearchItでは、適応検索を使用して、類似のコンポーネントと照合または混合分析を使用して共溶出したコンポーネントを分離することができます。

基本ツールボックス

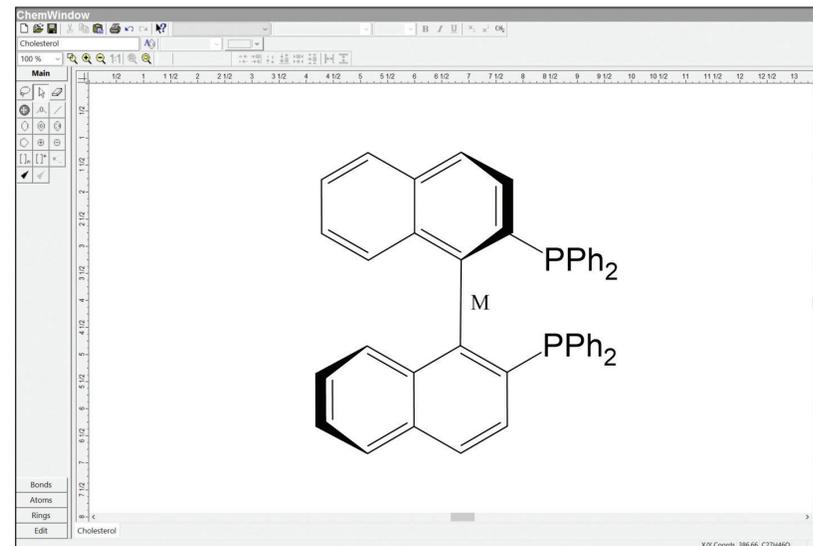


フル機能の2D構造図面プログラム

ChemWindowは、世界中の化学者が化学構造の描画のために選択するソフトウェアです。クリックしてドラッグするだけで化学構造を描画できる、使いやすい高度な描画ツールのセットを提供します。環、結合、原子、電子、電荷、鎖、矢印などを描画するための最も包括的なツールセットにアクセスします。

主な機能

- 結合、環、原子ラベル、電荷などの化学構造を描画するためのツールを備えたカスタマイズ可能なツールバー
- ホットキー、化学構文チェッカーなどの化学認識機能
- 高度な立体化学的認識—他のパッケージでは利用できないテクノロジーを使用
- ワードプロセッシングおよびプレゼンテーションソフトウェアでのインプレース編集のためのOLE（オブジェクトリンクおよび埋め込み）技術
- 質量と式を計算するためのツール、元素組成と同位体分布を計算するためのMSツール
- キャプションと構造の事前定義されたスタイル
- 名前を構造に変換するためのOPSIN Name2Structureへのリンク
- 複数のファイル形式から既存の構造を簡単にインポート可能
(ChemDraw - *.cdx、CML - *.xml、Hampden - *.hsf、InChI - *.txt、JCAMP - *.dx/*.
jdx、BIOVIA/MDL - *.mol/*.rxn、Smiles - *.smi、XYX - *.xyzなど)
- RInChI、CDX、CDXMファイルを含む反応ファイルをサポート



Webトレーニングリソース

BrowseItは、KnowItAllソフトウェアに組み込まれているWebブラウザで、KnowItAllチュートリアルビデオおよびKnowItAllユーザー向けの他のリソースへのリンクが記載されています。

The screenshot shows a web page with several sections:

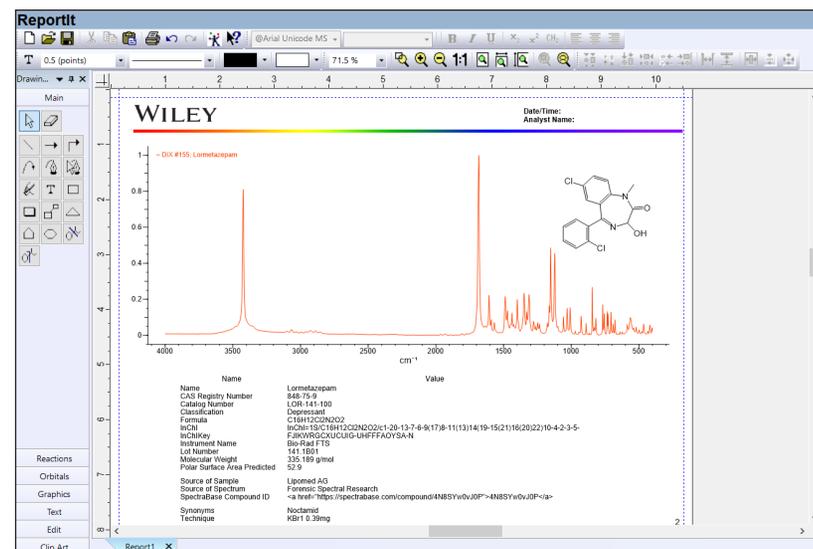
- Featured Video:** A video player for "AnalyzIt™ MVP - Database Projection Analysis" by KnowItAll Tutorial Videos.
- Support:** Links for "Contact Us" and "KnowItAll Resources".
- Connect with Us:** Social media icons for LinkedIn, Twitter, Facebook, and YouTube.
- Updates:** A section for staying updated on webinars, with a link to "www.knowitall.com/recordings".
- Events:** An event listing for "Oct 19-22, Analytica - International Trade Fair for Laboratory Technology" in Munich, Germany.
- Latest Posts:** A social media post from "Wiley Analytical Science" announcing a new home for "Wiley Science Solutions" on the website www.sciencesolutions.wiley.com.

フル機能のパブリッシングプログラム

ReportItを使用して、注釈、データの表、スペクトル、2Dおよび3D構造などを含む、標準のレポート、デザインペーパー、プレゼンテーション、Webパブリケーションを作成します。

主な機能

- 企業全体の形式標準化のための統一されたレポートを作成するためのカスタムテンプレート
- 矢印、テキストボックス、形状など、化学反応やその他のレポートを描画するためのカスタマイズ可能なツールバー
- 何百もの実験用ガラス器具の図面とエンジニアリングシンボルを含むクリップアートライブラリ
- ワードプロセッシングおよびプレゼンテーションソフトウェアでのインプレース編集のためのOLE技術 (オブジェクトリンクおよび埋め込み)
- 各フラグメントの質量を表示するMSフラグメンテーションツール
- キャプションの配置、間隔空け、中央揃え、回転を行うための高度な編集オプション
- キャプションと構造の事前定義されたスタイル
- 高品質でリアルな3D図面のための3D構造の視覚化
- データを入力および整理するためのテーブルツール
- 一般的なネイティブファイル形式でのスペクトル/クロマトグラムのインポート
- オーバーレイ、スタック、オフセットの3つの表示モードでのマルチスペクトル表示
- 軸、色、ラベルなど、スペクトルとクロマトグラムの外観をカスタマイズするための高度なスペクトル表示編集機能
- スペクトルピークなどのオブジェクトをテキストグラフィックまたは化学構造キャプションにリンクするカスタム注釈ツール



KnowItAllスペクトルライブラリで分析を加速

スペクトルデータのリーダー

参照スペクトルの高品質データベースがあってこそ、完全なスペクトル分析ソフトウェアと言えます。KnowItAllにより、Wileyは両方の長所を提供することができます。

Wileyは、純粋な化合物と幅広い市販製品をカバーする200万を超えるスペクトル (IR, MS, NMR, ラマン, UV-Vis) を含むコレクションを備えた、スペクトルデータベースの主要なプロデューサーおよびパブリッシャーです。

サンプルをより素早く分析

KnowItAllソフトウェアをWileyのKnowItAllスペクトルライブラリサブスクリプションと組み合わせることで、スペクトル識別のための卓越したソリューションを提供します。高品質な参照スペクトルの膨大なコレクションにアクセスできるため、分析の可能性と速度が向上します。貴社のラボでサンプルをより素早く分析し、貴重な研究時間を節約することができます。ご利用はととても簡単です。

化合物を幅広く網羅

KnowItAllコレクションは、ポリマー/材料、環境、法医学/毒物学、製薬、バイオテクノロジー、自動車/航空宇宙、食品/化粧品などの幅広いアプリケーションで未知の化合物を識別、分類、検証するための不可欠なツールです。

信頼できるソースからの信頼できるデータ

Wileyは、スペクトルデータの信頼できる情報源です。定評のあるこれらのデータベースは、最高品質を保证するために、厳格なプロトコルに従って処理されています。これらの認定手順は、データ取得から始まり、データベース開発プロセス全体にわたって継続されます。信頼できるパートナーから取得したデータは、コレクションに含める前に徹底的に精査されます。



貴社のラボに最適なデータの組み合わせを決定するために当社の専門家がサポートいたします:

- KnowItAll IRスペクトルライブラリ
- KnowItAll マススペクトルライブラリ
- KnowItAll NMRスペクトルライブラリ
- KnowItAll ラマンスペクトルライブラリ
- KnowItAll UV-Visスペクトルライブラリ

KnowItAllの年間サブスクリプションにより、研究者はスペクトルの包括的なコレクションに加えて、更新にも随時アクセスできます。

強力なソフトウェア。高品質データ。信頼できる結果。

sciencesolutions.wiley.com