

来自光谱数据领域的领导者



## KnowItAll 分析版

提升红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见分析速度的解决方案

功能强大的软件。高质量数据。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识别、分析和**管理分析数据**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 **Wiley 全面的高品质光谱参照数据库\***——包括著名的 Sadtler 资料库、Wiley Registry、Hummel 以及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!



**VPAT 兼容。**具有辅助功能, 如键盘访问菜单、图标的音频解说和工具提示。



**多语言界面。**软件目前有英语、中文、法语、德语、日语和韩语版本。

## 主要功能

基本光谱分析

高级光谱搜索/混合物分析功能

主成分分析 (PCA)

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\*

## 数据类型

红外、气相色谱-质谱、液相色谱-质谱、近红外、核磁共振、拉曼、紫外可见

色谱图

结构

**用于专项技术工作流的工具-** KnowItAll 还包含一些用于专项技术工作流的自定义工具, 如红外/拉曼官能团分析、质谱逆谱库和自适应搜索(已获专利)、自动质谱去卷积/分析以及核磁共振预测等等!再加上1.2万张红外光谱图。

\*需要订阅 KnowItAll Spectral Libraries。

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

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、分析数据、管理数据、绘制结构等等!

The screenshot displays the KnowItAll Informatics System 2024, Analytical Edition interface. The main window shows a 1H NMR spectrum for 'DEMOX #10: Phenol' with peaks at 6.31, 6.83, 6.90, and 7.18 ppm. Below the spectrum is a table of related compounds with their respective spectra. On the right, the chemical structure of Phenol is shown with its properties table.

Substructs		Sel. Substructs		Original Data Files	
All Properties		Attachments		Preferred 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-formaldehyd 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				C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	

# 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
Minelt	光谱数据库构建和数据挖掘
QC Expert	QC 光谱对比

### 光谱分析工具箱

Trendfinder	运用主成分分析 (PCA) 引擎, 发现数据中潜藏的趋势
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
GC 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

### 基础知识工具箱

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

### 定量分析工具箱

定量	支持用于气相色谱-质谱、红外、拉曼、紫外可见的内部和外部标准工作流程
----	------------------------------------

### 可选项

LC Expert	自动执行非靶向 LC-MS/MS 分析和靶向精确质量鉴定
KnowItAll 数据库	订阅全面的高品质红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见光谱数据集

# 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
- 基础知识工具箱
- 定量工具箱



## KnowItAll ID Expert

### 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。

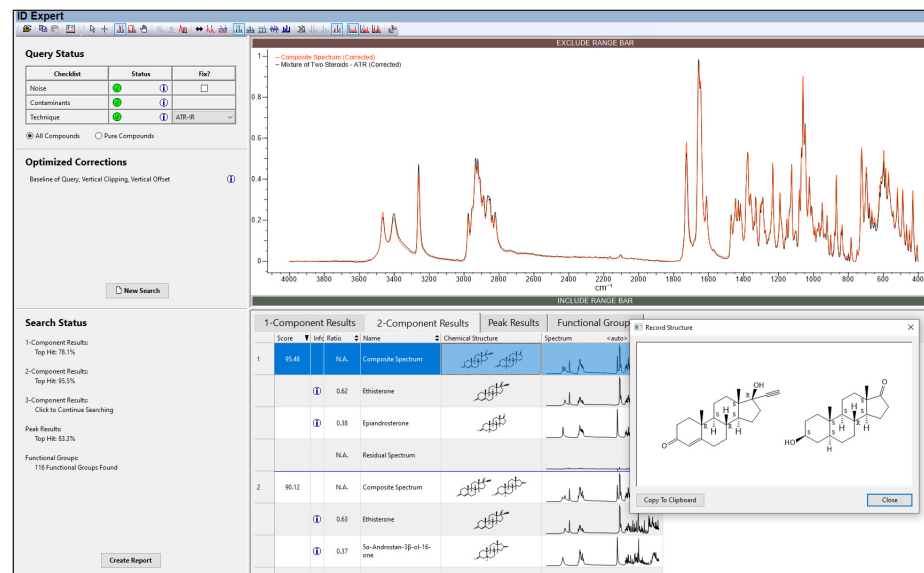
KnowItAll ID Expert 内置的光谱智能功能和 Wiley的优质 KnowItAll 光谱库\* (全球最大的光谱库) 结合在一起使用,使其成为**一款快速的首通分析工具**。

### 它是如何工作的?

- 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。

如果您已订阅 Wiley 的 Drug Classification Models, 则可在此处查看未知光谱的建议分类。



\*需要订阅 KnowItAll Spectral Libraries。

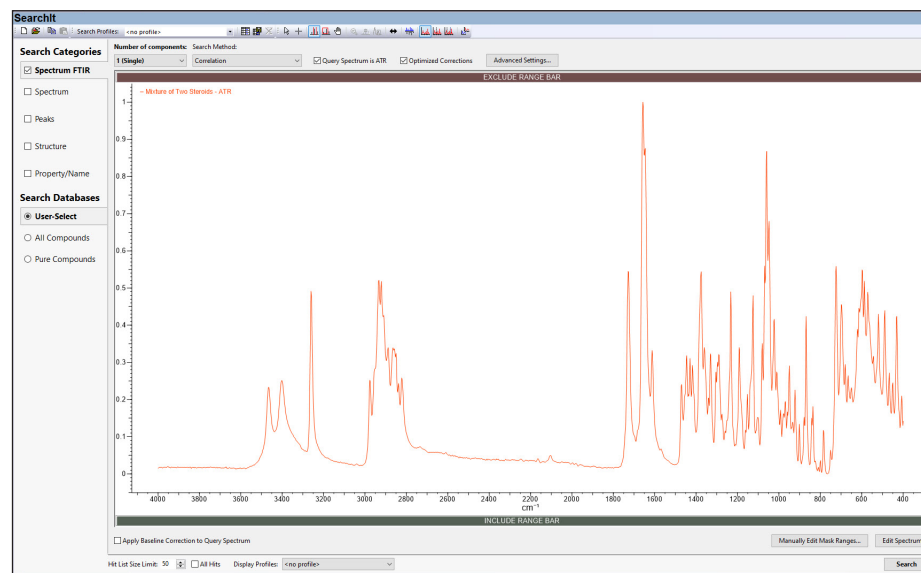


## 用于高级光谱数据库搜索

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。

### 主要特点

- 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 MS Adaptive Search (自适应搜索, 已获专利)、Reverse Search (逆谱库检索) 和新的 Accurate Mass Search (精确质量搜索)
- 使用各种视图轻松对比光谱: 叠加、偏移、堆叠、蝶形、减法等等。
- 支持多种仪器类型和供应商文件格式(参见支持的文件格式:  
<https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-supported-file-formats/>)
- Markush 结构搜索功能



### 分析版软件还包括这些额外的数据库:

- 红外 - 萨特勒聚合物 Hummel - Wiley (1907 条光谱)
- 红外 - 萨特勒标准物(有机和高分子化合物子集) - Wiley (9996 条光谱)
- 衰减全反射红外 - 萨特勒溶剂 (629 条光谱)
- 微塑料分类数据库 - 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。对于微塑料样品的识别, 我们建议用户订阅内容全面的 KnowItAll 红外光谱库。

## 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未知物时,您可以选择搜索多种成分。搜索结果是一系列复合光谱,每个复合光谱都附有构成复合光谱的各个组分的光谱,以及残差光谱(查询光谱和复合光谱之间的差异)。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。

**质谱自适应搜索专利技术:**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。如可能,软件可给出产生差异的原因。当没有完全匹配时,这一功能可以为探索可能的结构上提供巨大的助力。最终,这可能会使得识别和确认过程变得更加智能并让人充满信心。



## 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。

### 建立来自不同供应商的单一技术或多技术数据库

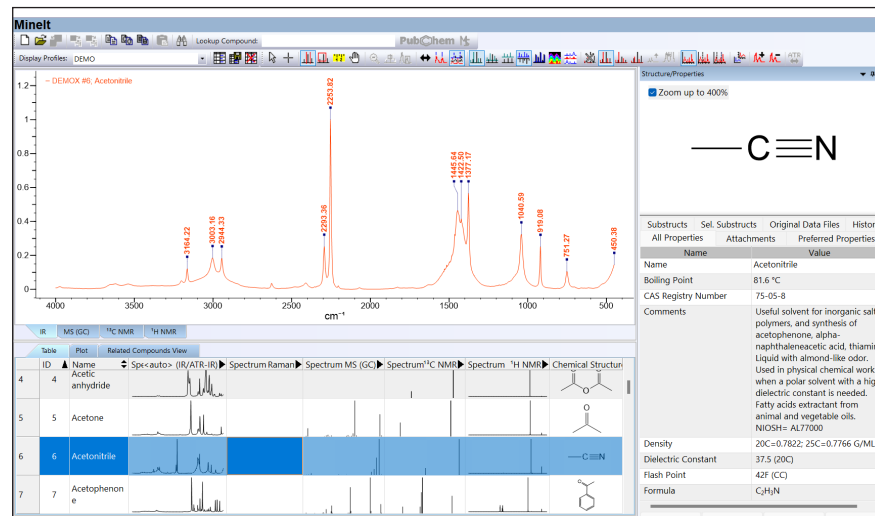
研究人员可构建包含一种或多种分析技术（红外、质谱、近红外、核磁共振、拉曼、紫外可见光谱）、化学结构以及其他元数据的可搜索数据库。因此，即使实验室的分析仪器来自多个制造商，KnowItAll 也可将数据归档。（参见支持的文件格式：

<https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-supported-file-formats/>）

### 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
- 根据缉毒局的法规（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个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）
- 为光谱图添加峰值标签
- 更新后的核磁共振工具可为一个结构分配多重谱线，能够自动根据数据库记录生成核磁共振报告
- 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，以使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

### 数据共享

- 用户可以通过使用云存储服务（如 AWS、Sharepoint、OneDrive、Google Drive 等）来管理和共享在其组织内创建的 KnowItAll 用户数据库，以扩大这些资源的覆盖范围。

### 数据控制（可选）

- 提升组织集中式共享数据库的安全性，加强管理。激活后，企业可连接并使用 Apache Subversion (SVN) 资源库来构建共享 KnowItAll 数据库，获得强大的版本控制能力和管理权限。

## 多技术查看和挖掘

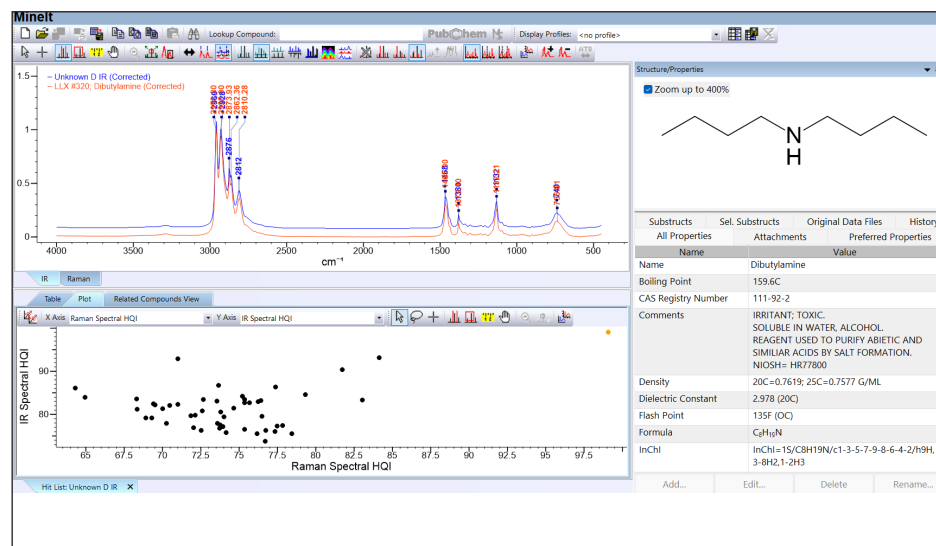
用户可通过 Minelt 查看参照数据库、用户创建的数据库或搜索结果。可访问包含光谱色谱图、结构、物理属性等多种类型数据的数据库。分析数据库的同一条记录中可包含一种或多种技术,因此,此工具非常适合访问参考光谱数据库。

## 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未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。

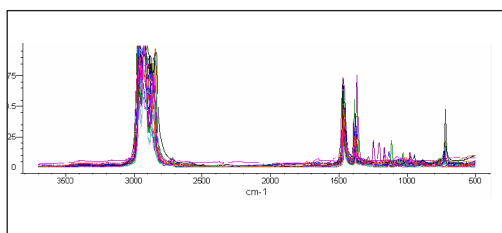
## 重叠密度热图专利技术

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。



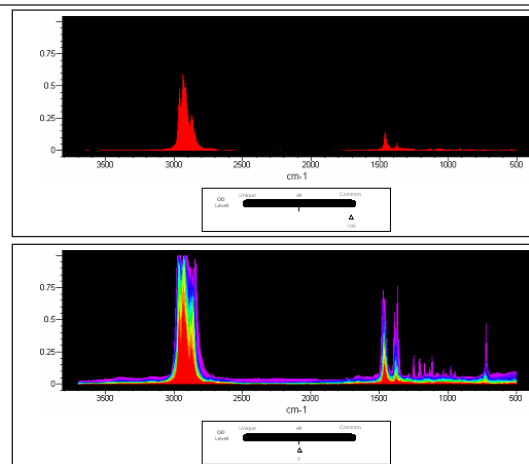
例如: 在运用多技术对光谱样品进行搜索时,这种绘图功能在光谱搜索分析方面非常有用,它将数据库搜索结果的质量(命中质量指数-HQI)相互对照(例如,红外HQI与拉曼HQI)进行绘图。

## 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。

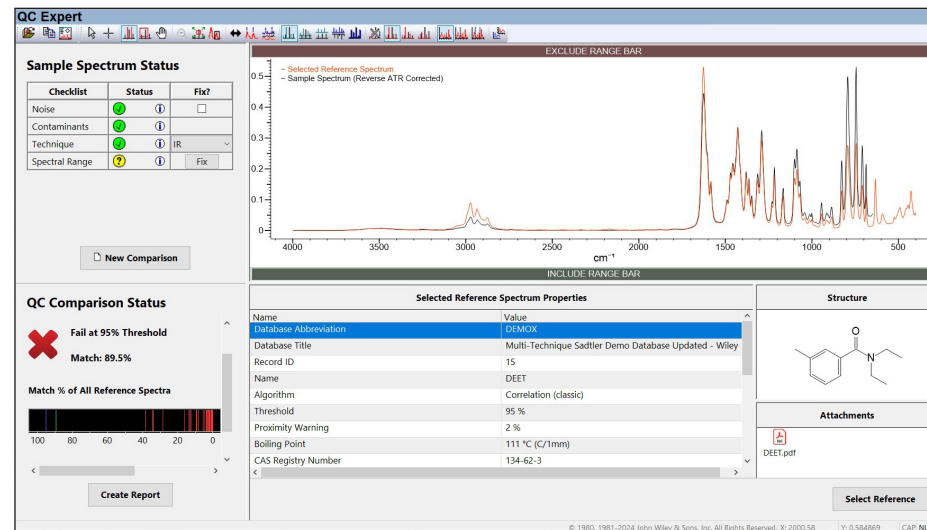


## 红外、拉曼和色谱图质量控制对比

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。

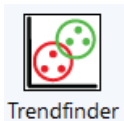
### 主要功能

- 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,确保样品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 Spectral Libraries。

# 光谱分析工具箱



## Trendfinder

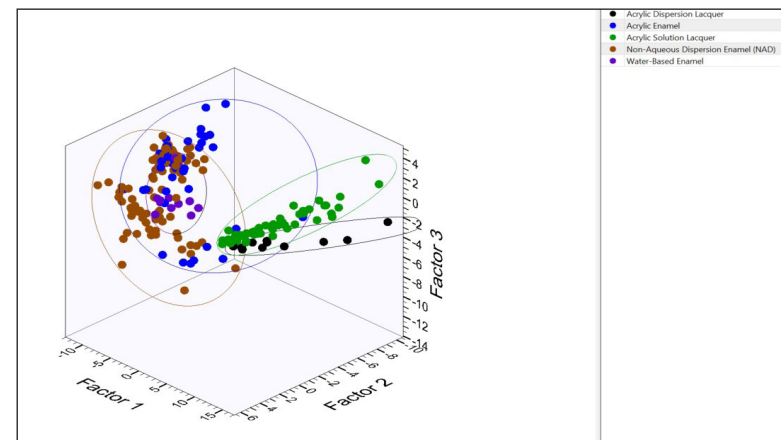
### 化学计量学数据分析, 从此化繁为简

在海量光谱或色谱数据集中发掘潜藏趋势与规律

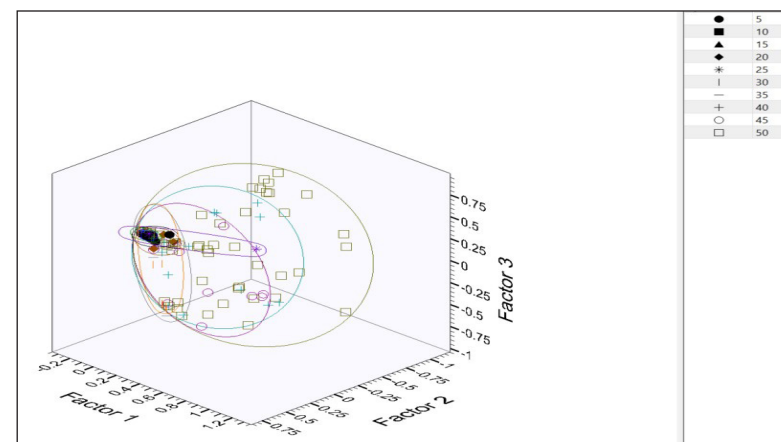
KnowItAll 2026 全新推出的 Trendfinder 采用主成分分析 (PCA) 技术, 可帮助您从复杂的数据集 (无论是光谱库还是色谱图) 中发现重要规律。其设计初衷是让趋势检测和关系映射变得直观易懂, 即便您没有化学计量学方面的背景知识亦是如此。您可以使用自有数据, 也可以利用 KnowItAll 庞大的光谱数据库集\*开展分析, 从而有效发掘各种关联、异常值以及可能被忽略的隐藏结构。

#### 主要功能

- **全面数据集分析:** 对光谱或色谱数据集执行主成分分析
- **专家级分析, 用户友好界面:** 采用先进专利技术, 直观呈现关联性或趋势
- **未知化合物预测与发现:** 对未知样品进行分类并鉴定标志物
- **覆盖全面的处理流程:** 提供全套数据预处理工具集, 无需额外软件 (例如: 数据预处理、Y 轴变换、智能数据分箱/分组、坐标轴旋转)
- **交互式数据挖掘:** 多种分析图谱作为集成查询工具, 支持即时数据探索
- **多数据源支持:** 支持使用用户自建数据库, 亦可导入 KnowItAll 的数据库, 同时可接入 Wiley 的海量数据集\* (\*需订阅数据服务)
- **多技术兼容性:** 数据分析兼容多种技术——核磁共振、红外、拉曼、质谱、紫外可见光谱及色谱
- **无缝集成:** 通过 KnowItAll 生态系统原生集成, 杜绝数据流转问题



本傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 示例展示了对汽车漆片数据库光谱子集执行的主成分分析。用户可通过点击右侧图例中的对应行, 选择一个或多个属性进行查看。



本示例展示的是串联质谱数据的主成分分析。高碰撞能谱图呈分散分布, 而低碰撞能谱图则紧密聚集 (黑点所示)。这与高碰撞能会使分子碎裂成更小片段, 从而导致谱图差异加剧的现象相符。

\*需要订阅 KnowItAll 光谱库。

## 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。

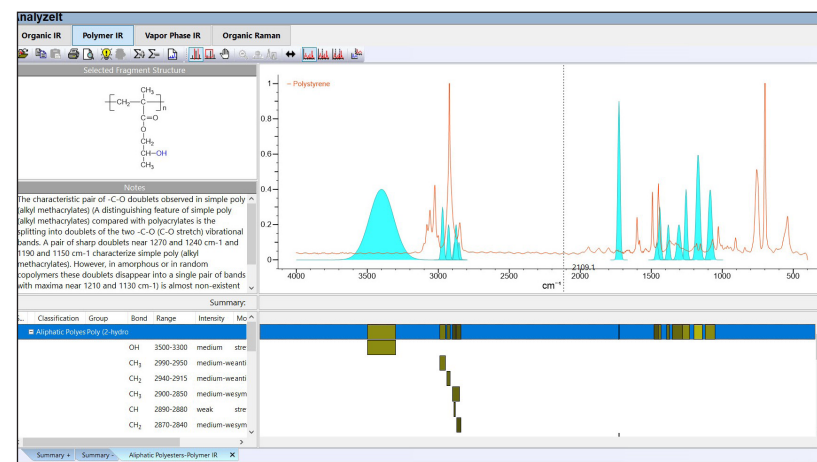
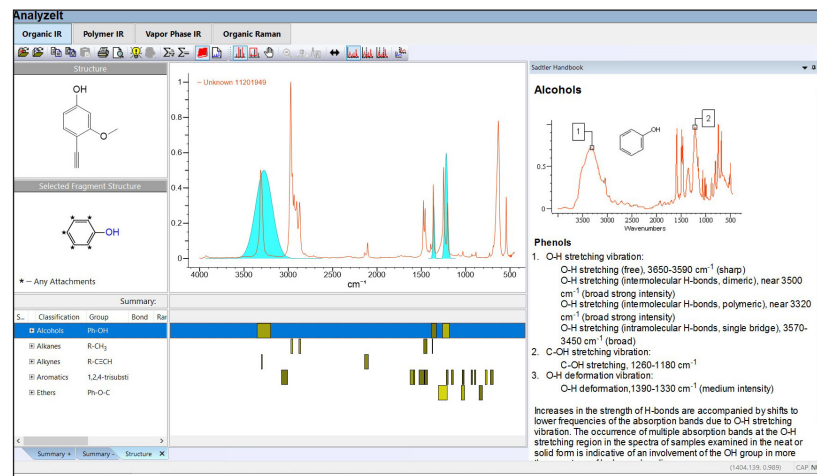
分类知识库	
红外和拉曼	200 多个官能团和数百个频率解释
红外聚合物	100 多个官能团和数百个频率解释
气相红外 - 合成大麻素 (已获得专利)	60 多个桥接羰基团
<b>或建立您自己的知识库, 使解释更加准确</b>	

## 优点

- 可用于未知化合物的光谱分类
- 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



## 核磁共振光谱预测

有了 PredictIt NMR, 可针对  $^{13}\text{C}$ 、 $^1\text{H}$  和 X-NMR 原子核执行基于数据库的 NMR 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  $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$  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。

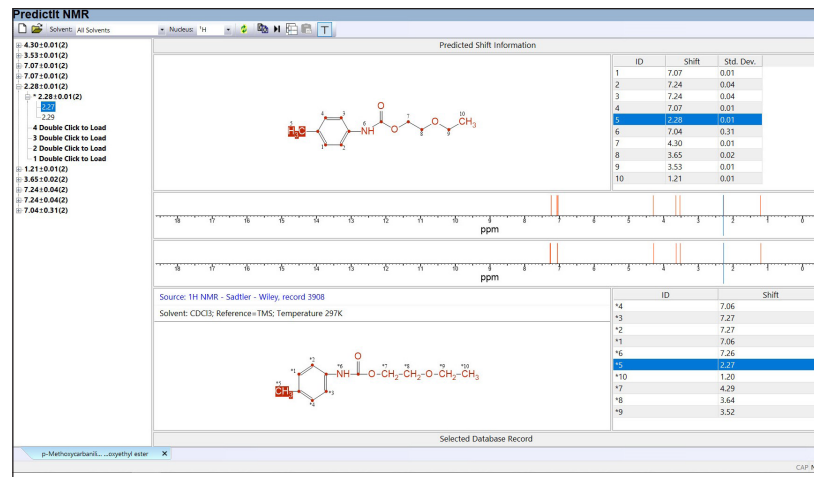
该工具在数据库中搜索采用经修改的 HOSE (环境分层有序球形描述) 码描述的特定化学环境。HOSE 码是用于描述分子结构中原子周围化学环境的拓扑结构代码。PredictIt NMR 的主窗口中显示原始结构和结果。树控件的顶层将显示每个原子的平均位移 (和标准偏差)。

### 特定溶剂预测提高准确性

KnowItAll 提供特定溶剂的核磁共振化学位移预测。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



## 红外和拉曼光谱处理

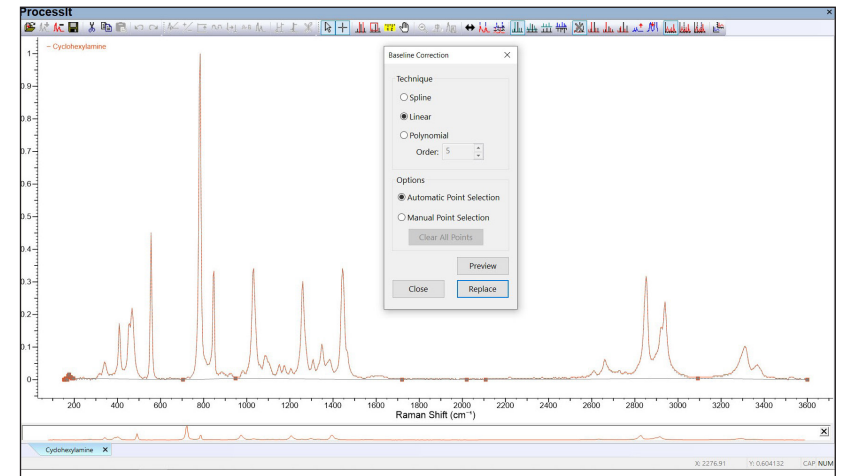
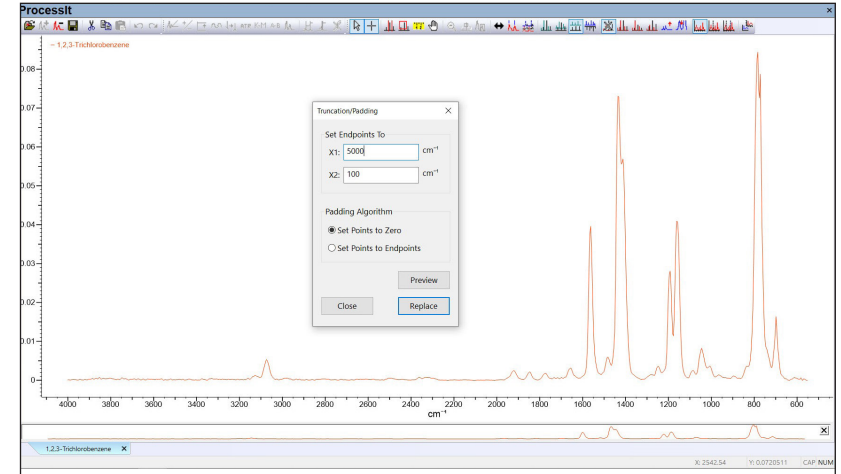
ProcessIt 提供用于处理红外和拉曼光谱以及提高归档数据和搜索结果质量的各种工具。还可与其他 KnowItAll 工具联合使用。例如, 可将光谱从 SearchIt 转入 ProcessIt, 以便纠正潜在的搜索问题, 然后再转回 SearchIt。

### 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
- 拉曼 - 荧光校正
- 拉曼 - 宇宙射线去除
- 可在处理过程中添加谱峰标签, 并将其保留到报告中

### 分析功能包括:

- 曲线下面积 (AUC)



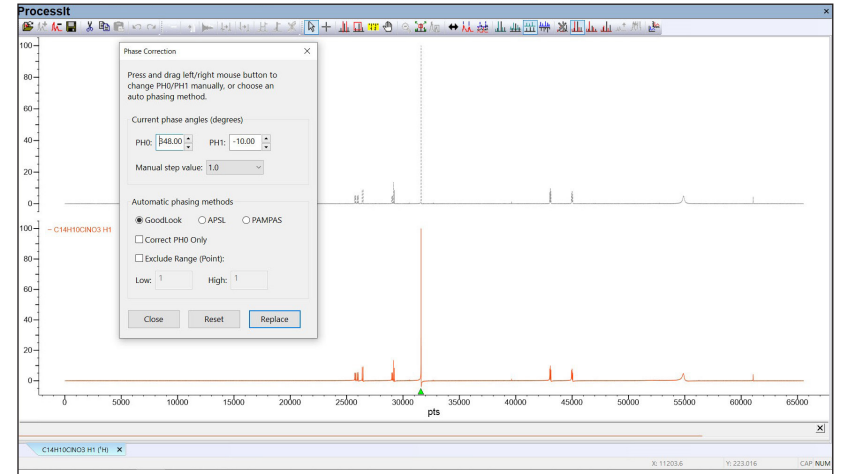
## 核磁共振光谱处理

ProcessIt 不仅易于使用,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。用户可使用完整的处理工具包,其中包括预处理和后期转换工具以及自动和手动处理方法。KnowItAll 的 ProcessIt 包含用于重复工作流程的宏功能。

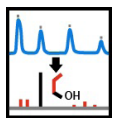
### 主要功能:

- 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
- 相位校正(自动和手动)
- 基线校正(自动和手动),其中包括多项式、样条曲线算法和线性算法
- 峰值拾取(自动和手动)
- 整合(自动和手动)
- 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
- 以 JCAMP 格式导入和导出
- 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
- 可在处理过程中添加谱峰标签,并将其保留到报告中

利用 MineIt 的核磁共振工具可进行多重谱线分析和结构分配。







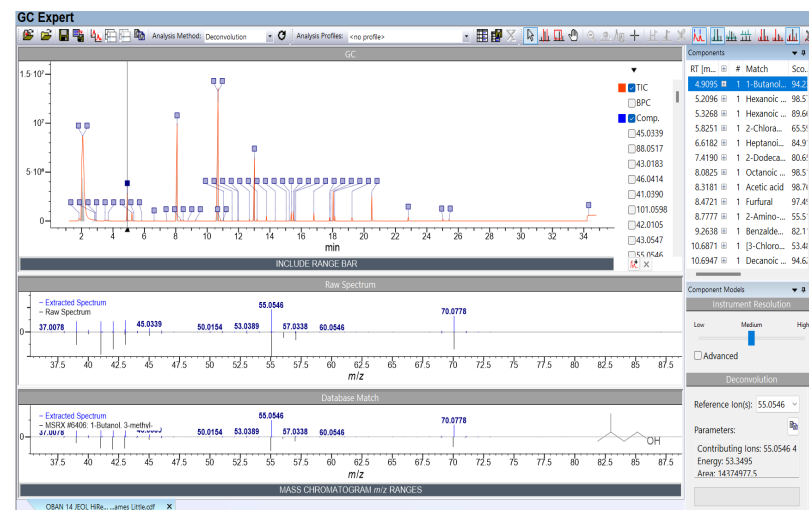
## 非靶向 GC-MS 分析

GC-MS 数据分析可能很耗时,特别是在检测复杂分析物时。有了 GC Expert,可自动处理、解卷积和分析 GC-MS 数据。还可进行手动拾峰和分析。它结合了 KnowItAll 的快速数据库搜索功能,可提示与已知化合物匹配的化合物,并允许对未知化合物进行进一步检测。

在需要将共洗脱组分传输至 KnowItAll 系统内建的高级混合物分析应用时,GC Expert 可无缝实现这一过程。新化合物的结构特征可通过应用 MS Adaptive Search (在 SearchIt 中) 专利技术进一步推断,该技术利用碎片化和结构信息提出可能的结构细节。

### 主要功能

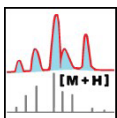
- **自动处理:** 自动处理 GC-MS 数据并进行解卷积,搜索提取的 MS 光谱,与参考数据库进行比对,以鉴定成分——所有这些步骤只需轻轻一点即可完成
- **优化加速:** 快速自动数据库搜索,速度为上
- **全面信息显示:** 可视化总离子色谱图、成分概况、提取光谱与原始光谱对比、提取光谱与匹配参考光谱对比以及匹配参考成分结构
- **整合自定义数据库:** 使用专有数据库格式建立内部数据库,该格式针对光谱搜索进行了优化,并以原始格式保留原始数据
- **配置解卷积和搜索设置:** 从自动解卷积过渡到手动解卷积,支持单位质量和精确质量数据集。调整分析灵敏度参数并配置仪器分辨率
- **搜索配置文件可重复使用:** 创建并重复使用光谱搜索配置文件,以便为选定的色谱方法存储首选数据库
- **无缝传输至 SearchIt 进行手动分析:** 将与参考光谱不匹配的成分直接转移到 SearchIt,以便使用自适应搜索或混合分析功能完成人工检查。可根据常规光谱搜索和逆谱库检索 HQI 值,调整匹配分数的计算方式
- **广泛兼容:** 支持多种仪器类型和供应商文件格式 (参见支持的文件格式: <https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-supported-file-formats/>)
- **海量数据库访问:** 兼容覆盖全面的 KnowItAll GC-MS 光谱参考数据库\*
- **集成报告:** 将结果直接发送到 KnowItAll 的集成 ReportIt 工具,以展示您的光谱鉴定结果,包括光谱、结构、注释、数据表等



### 它是如何工作的?

只需导入一个 GC-MS 数据文件,软件就会自动将 TIC 解卷成各种成分。然后,自动在参考数据库中\*对所有提取的成分 MS 光谱进行搜索,以寻找匹配的成分。每个成分的搜索结果显示在一个命中列表中。

随后,可以将未识别的成分或匹配分数较低的成分发送至 KnowItAll 的 SearchIt 工具中进行人工调查。在 SearchIt 中,可以使用自适应搜索功能来匹配相似的成分,或者使用混合分析功能来分离共混的成分。



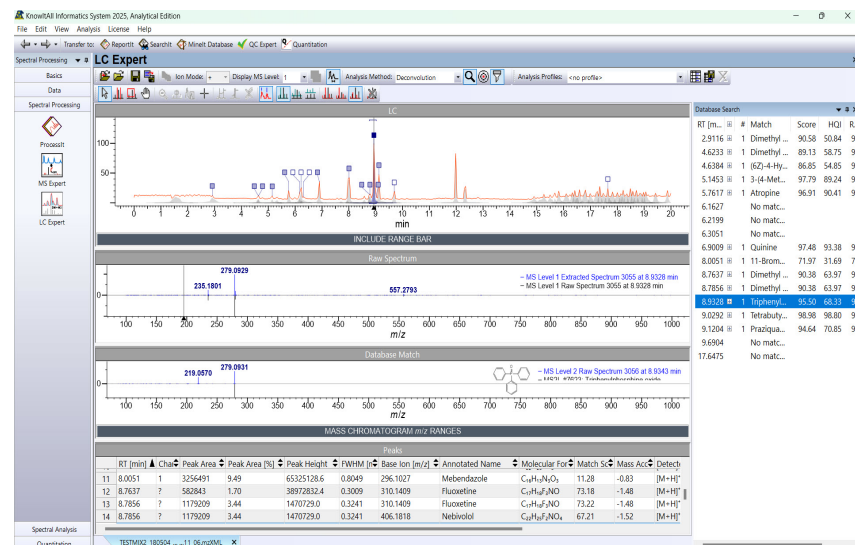
## LC Expert™ (可选)

### 利用 LC Expert 自动化工作流程的强大功能, 可简化成分鉴定过程

液相色谱-质谱数据分析既耗时又乏味。全新 LC Expert 通过自动工作流程处理、解卷积和搜索原始液相色谱-质谱色谱图来应对这一挑战。LC Expert 同时支持 MS/MS 和精确质量搜索两种方法, 可进行最全面的分析。结合 KnowItAll 覆盖全面的高质量数据库集\*, LC Expert 将非目标和目标光谱分析提升到了一个新的水平。

#### 主要功能

- **自动处理:** 自动处理和解卷积原始色谱图, 并根据参考数据库进行搜索以鉴定成分——所有这些步骤只需轻轻一点即可完成
- **优化加速:** 快速自动数据库搜索, 速度为上
- **全面信息显示:** 可视化总离子色谱图、成分概况、提取光谱与原始光谱对比、提取光谱与匹配参考光谱对比以及数据库匹配成分结构
- **整合自定义数据库:** 使用专有数据库格式建立内部数据库, 该格式针对光谱搜索进行了优化, 并以原始格式保留原始数据
- **配置解卷积和搜索设置:** 调整分析灵敏度参数, 并根据仪器分辨率进行配置。支持单位质量和精确质量数据集
- **搜索配置文件可重复使用:** 创建并重复使用光谱搜索配置文件, 以便为选定的色谱方法存储首选数据库
- **无缝传输至 SearchIt 进行手动分析:** 将与参考光谱不匹配的成分直接转移到 SearchIt, 以便使用自适应搜索或混合分析功能完成人工检查。可根据常规光谱搜索和逆谱库检索 HQI 值, 调整匹配分数的计算方式
- **访问著名的 MSforID 搜索算法:** 使用该算法可充分利用包含每个化合物多个碰撞能量测量值的数据库的强大功能
- **广泛兼容:** 支持多种仪器类型和供应商文件格式 (参见支持的文件格式: <https://sciencesolutions.wiley.com/knowitall-supported-file-formats/>)



- **海量数据库访问:** 与覆盖全面的 KnowItAll LC-MS 光谱数据库集以及以 KnowItAll 格式提供的许多其他常用 MS/MS 数据库兼容
- **集成报告:** 将结果直接发送到 KnowItAll 的集成 ReportIt 工具, 以展示您的光谱鉴定结果, 包括光谱、结构、注释、数据表等

#### 操作说明

导入液相色谱-质谱色谱图数据文件后, 软件会自动将总离子色谱图解卷积成谱峰。所有谱峰都会整合并制表。如果数据集包含串联质谱数据, 则会自动在预选的 LC-MS 数据库\*中搜索原始 MS/MS 光谱。用户还可以对已知目标化合物列表进行精确质量搜索。

\*需要订阅 KnowItAll 光谱库

# 基础知识工具箱



## 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。它提供了一套先进的绘图工具,而且操作简单——只需点击和拖动即可绘制任何化学结构。使用内容最丰富的工具集来绘制环、键、原子、电子、电荷、链、箭头等。

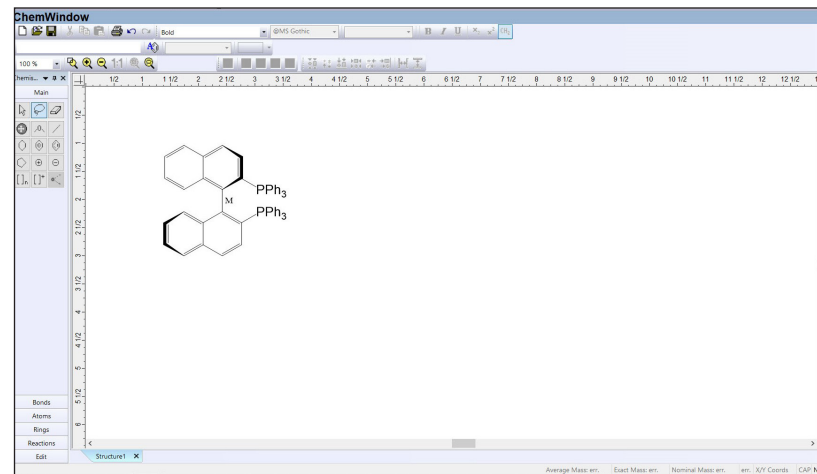
### 主要功能

- 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 (ChemDraw - \*.cdx、CDXML - \*.cdxml、Hampden - \*.hsf、InChI - \*.txt、JCAMP - \*.dx、\*.jdx、BIOVIA/MDL - \*.mol、\*.rxn、Smiles - \*.smi、XYX - \*.xyz 等) 轻松导入现有结构
- 支持包括 RInChI 在内的反应文件,以及 CDX 和 CDXML 文件
- 利用 Markush 类结构表示复杂化学类的定义



## 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。

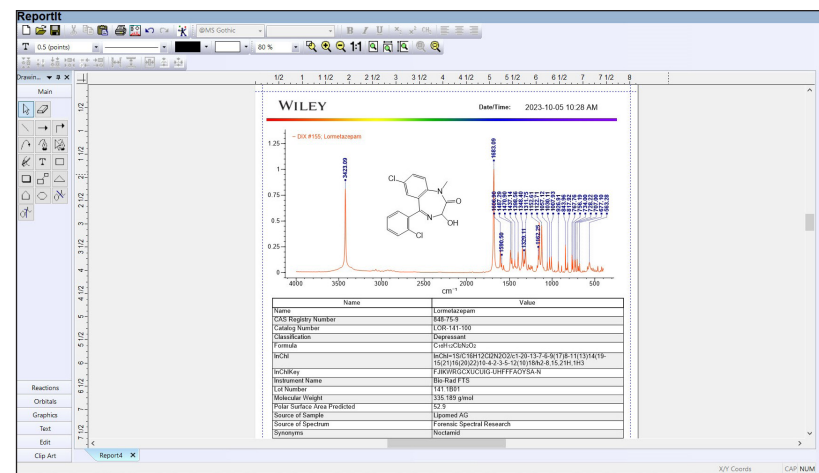


## 功能齐全的发布程序

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





### 定量分析工具

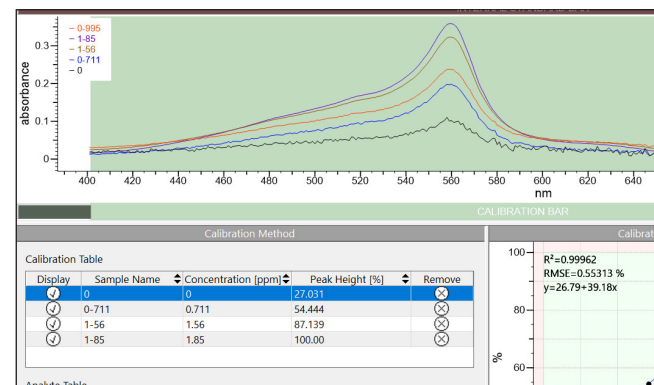
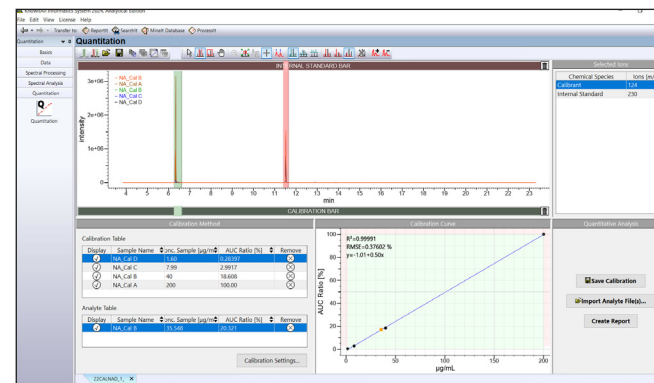
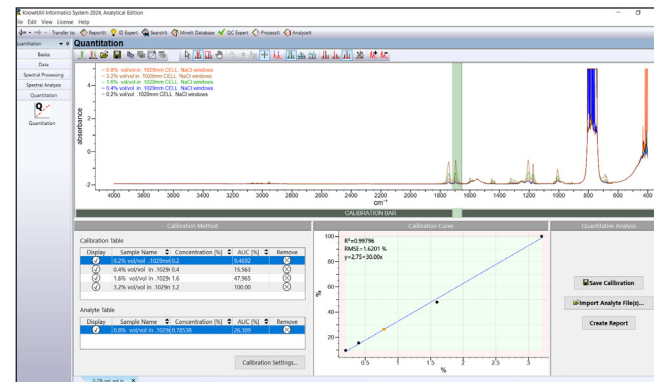
一直以来, Wiley 的 KnowItAll 都在帮助我们回答物质的特性是“什么”。现在,您可以利用集成定量分析工具回答物质的“含量”问题,从而完善并简化您的分析工作流程。

进行化学定量分析时,研究人员经常发现需要用到多个软件包。要掌握多个软件包的使用方法以达到相同水平的专业知识、再现性和互操作性,这是一个很大的痛点和培训挑战。当实验室人员根据不同的分析技术类型或数据文件格式被迫切换工具或在软件包之间剪切和粘贴时,会进一步中断分析。

为克服这些挑战, Wiley 的新 KnowItAll 定量工具提供一个易于使用的单一工具,在支持多种技术(气相色谱-质谱、红外、拉曼、紫外可见、气相色谱)和仪器文件格式的供应商中立环境中保持一致地执行这些任务。

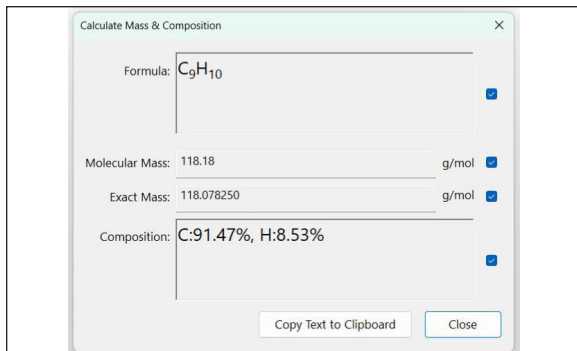
### 主要功能

- 与其他软件包不同, KnowItAll 定量分析支持多种技术和供应商文件格式。目前适用于**气相色谱-质谱、红外、拉曼、紫外可见、气相色谱**。
- 设计直观,在单一界面中提供简单的**逐步流程**。
- 方法包括:**外部校准、内部校准和标准添加分析**。
- **不必切换使用分析工作流程以外的工具**(如 excel), 这些工具需要手动处理, 因此容易出错。
- 此外,由于该工具集成了熟悉的 KnowItAll 界面,因此**缩短了学习曲线**。
- 可使用基本数学运算符进行定量分析,包括**线性回归和二次回归、加权拟合和强行绘制一条经过原点的直线**。

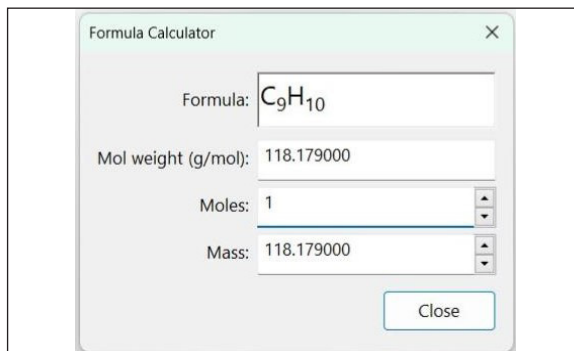


# 附加工具

## 化学工具

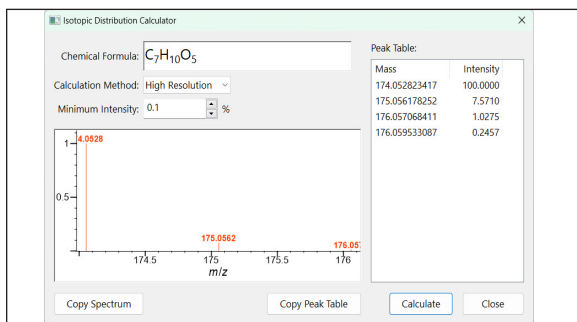


**计算质量和成分。**根据化学式自动计算分子量、精确质量和成分。

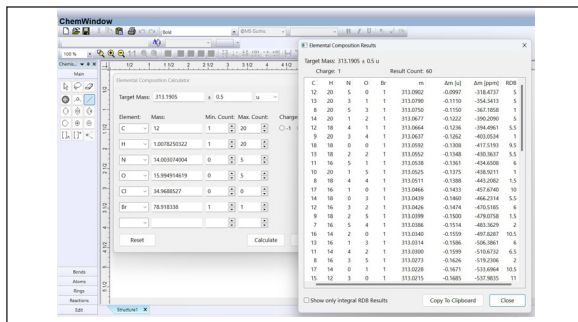


**公式计算器。**根据化学式自动调优计算分子量、摩尔数和质量。

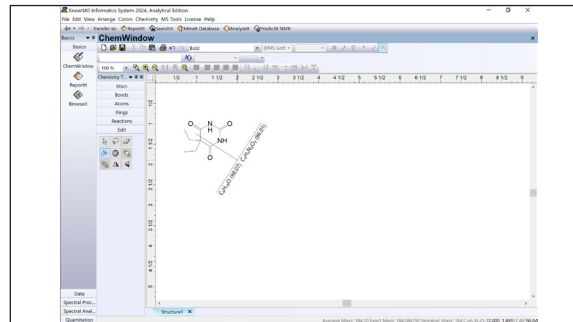
## 质谱工具



**同位素分布计算器。**根据用户定义的阈值,使用低分辨率或高分辨率从化学式计算同位素分布。



**元素组成计算器。**根据目标质量和样本元素计算可能的化学式。



**碎片工具。**根据结构预测质谱中质量碎片的 m/z 值。

# 以三种显示模式显示多个光谱: 叠加、堆叠和偏移

## 来自光谱数据领域的领导者

没有高质量的参考光谱数据库, 就无法构建完整的光谱分析软件。而 Wiley 公司的 KnowItAll 提供了两者兼顾的最佳方案!

Wiley 是领先的光谱数据库制作商和出版商, 其数据库包含数百万条光谱(红外、质谱、核磁共振、拉曼和紫外可见光), 涵盖纯化合物和各种商业产品。

## 更快地分析样品

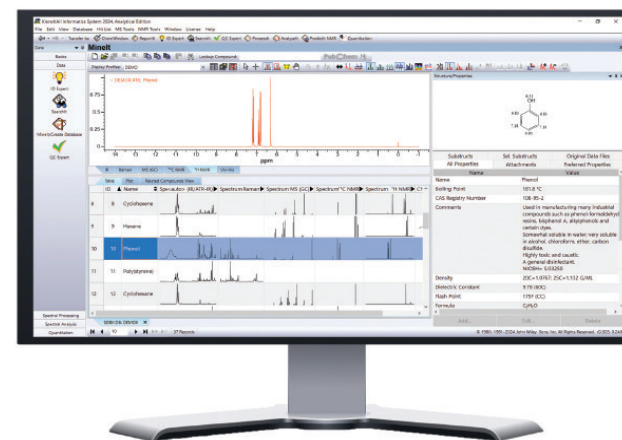
KnowItAll 软件与 Wiley 的 KnowItAll 光谱库订阅结合使用, 可为用户提供无与伦比的光谱识别解决方案。有了海量的优质参考光谱集, 光谱分析的概率和速度均得到提升。实验室可以更快地分析样品并节省宝贵的研究时间。

## 广泛的化合物覆盖面

KnowItAll 数据库集是在各种应用中识别、分类和验证未知化合物的重要工具, 其应用范围广泛, 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。

## 来源可靠的靠谱数据

Wiley 是光谱数据的权威来源, 其著名的数据库按照严格的协议来处理数据, 以确保具有最卓越的质量。这些验证程序从数据采集开始, 并涵盖整个数据库开发过程。从值得信赖合作伙伴处获得的数据在纳入我们的集合前均已经过彻底审查。



## 我们的专家可以帮助您确定适合您实验室的最佳数据组合

- KnowItAll 红外光谱库
- KnowItAll 气相色谱-质谱光谱库
- KnowItAll 液相色谱-质谱光谱库
- KnowItAll 核磁共振光谱库
- KnowItAll 拉曼光谱库
- KnowItAll 紫外可见光谱库
- KnowItAll SmartSpectra 光谱库

通过 KnowItAll 年度订阅, 研究人员可访问包罗万象的光谱数据库——而且还可以及时获得更新。

功能强大的软件。高质量数据。可信赖的数据。

[sciencesolutions.wiley.com](https://sciencesolutions.wiley.com)