

光谱和化学解决方案

# KnowItAll 2021 版的新功能



KnowItAll 的功能提升前所未有，配备了更多分析工具、新数据库并改善了与 Microsoft Office 及辅助工具功能的整合性。我们还对 KnowItAll 行业领先的红外光谱和拉曼光谱的功能进行了更新扩展，以实现更智能的质谱 (MS) 解析。

以下是 2021 版专为我们的客户和合作伙伴提供的详细更新摘要。对功能和数据的访问权取决于用户的许可证(版本等)

## 软件功能和更新

### 通用功能

- 全面质量审核，确保功能稳定并提升用户体验
- 增强辅助工具功能，包括通过键盘访问菜单、图标音频旁白和工具提示

### 本版本的 MS 高级功能

- **最新!MS 自适应搜索技术(专利申请中)** - 当将未知光谱与参考光谱进行匹配时，新技术可以找到与未知光谱相似但有额外或缺失的选定片段的匹配。如可能，软件可给出产生差异的原因。当没有完全匹配时，此功能提供了对结构可能性的大量见解，以便最终可作出更智能的识别。
- **最新!MS 混合物分析** - 这一强大的功能已在红外光谱和拉曼光谱中应用，现在也应用于本版本的 MS。在 KnowItAll SearchIt 应用程序中，您可以选择要搜索的组件数量来执行多组件搜索。所得的结果是一系列复合谱，以及含复合谱和残差谱（查询谱和复合谱的差异）的单个成分谱。
- **最新!反向搜索** - 此搜索功能在参考光谱中查找匹配的峰值，并忽略仅在未知光谱中找到的峰值。
- **支持新的 MS 搜索算法和其他 MS 文件格式** - 包括 NIST \*.smp（单光谱或多光谱）和高分辨率 LC-MS (mzML、mzXML、MGF、MSn、Mz5)

## KnowItAll 应用程序的其他更新

### SearchIt™

- 精准的批量搜索现在可让用户包含 +/- 加合物（即 H<sup>+</sup>、H<sup>-</sup>、Na<sup>+</sup>）
- 属性快速搜索：快速查找最常见属性的新功能
- 查看结果中的未知和参考峰表
- 比较光谱的新视图：Butterfly（将未知查询谱放在正 Y 轴上，将参考谱放在负 Y 轴上）和 Subtraction（允许查看差异光谱）

### Minelt™

- 新增用于单次或批量计算的属性计算器（元素、同位素、C-13 NMR 预测、不良基线指标、基线分析：区域差异、SPLASH ID）、各种质量（平均、精确、标称）
- 当用户执行质谱反向搜索时，结果列表中会出现一个 R.HQI（反向命中质量系数）列
- 用户可将光谱-结构对从用户创建的 KnowItAll 数据库发送到 NIST MS Interpreter 图谱解析或集成 NIST 保留时间计算器（将计算器复制到“C:\Program Files\KnowItAll\Bin”文件夹）
- 缉毒局管控物质监管预测 规则库已得到更新和扩展。该库可以用来对 KnowItAll 用户数据库中的化学结构进行分类（通过 MineIt 应用程序—批量属性预测）。(ChemWindow和光谱版本的2021年1月版)

### ChemWindow®

- 改进的 Windows 对象链接和嵌入 (OLE) 功能，用于在位编辑以及与 Microsoft Office 集成
- OPSIN Name2Structure 可进行从名称到结构的转换（该选项功能已添加至“化学”菜单）
- 现在增加了元素和同位素计算器（在“MS 工具”菜单下）
- 重新推出反应绘图和反应文件支持：支持 RInChI 化学标识符反应和 CDX/CDXM 文件

## 安装/操作系统更新

- 由于计算能力增加，KnowItAll 2021 版不再支持 Windows 32 位操作系统。现支持 Windows 10 的 64 位操作系统。需要 KnowItAll 32 位版本的客户仍可在 [www.knowitall.com/download](http://www.knowitall.com/download) 下载 32 位版本的 KnowItAll 2020 版
- 从 [www.knowitall.com/download](http://www.knowitall.com/download) 下载 KnowItAll 时，您会注意到安装流程的改变；KnowItAll 现在将提示您选择并下载数据库。

注意：从 USB 安装时，安装流程保持不变：KnowItAll 将默认安装红外光谱和拉曼光谱集合；在安装过程中，您必须选择要额外安装的数据库。

## KnowItAll 版本更新

- 最新数据！微塑料分类数据库 现在包含在光谱版中，它可以快速且经济高效地对红外/衰减全反射红外光谱的微塑料进行分类。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。（2021年1月版）
- 从所有版本中删除 Infometrix Engine 和 AnalyzeIt MVP 应用程序
- ChemWindow 版将不具光谱搜索功能，并且不包括 ATR 溶剂 (WL) 数据库。对于光谱数据库搜索，用户应选择 KnowItAll 光谱版。

WILEY

# 光谱数据库更新

## 红外数据库

KnowItAll 红外光谱数据库 - 我们在此集合中添加了以下新的数据库:

- 红外 - Sigma-Aldrich 气相变换红外光谱库 [WSAVX] - 5,245 个谱图
- 红外 - Sigma-Aldrich 香精和香料变换红外光谱库 [WSAFX] - 2,488 个谱图

## NMR 数据库

我们对 NMR 的 KnowItAll 产品组合进行了更改:

- 最新! Sigma-Aldrich NMR 数据库 (按年订阅) - 访问超过 26,000 种有机化合物。
  - 包括以下数据库: Sigma-Aldrich 13C NMR 谱库 (13,265 个谱图) 和 Sigma-Aldrich 1H NMR 谱库 (13,164 个谱图)
  - 本谱库须单独按年订阅
- 最新! AIST NMR 数据库 (按年订阅) -
  - 访问超过 25,000 个谱图, 包括 1H 和 13C 数据 (注意: 本数据库不再包含在 KnowItAll NMR 谱库中。本谱库须单独按年订阅。)

以下是目前可用的 KnowItAll NMR 数据库产品的摘要:

产品代码	名称	#光谱
978EALDB04409	<b>KnowItAll NMR 光谱数据库 (按年订阅)</b> 订阅包括: <ul style="list-style-type: none"><li>• 超过 894,000 个谱图 (CNMR、HNMR、XNMR)</li><li>• 一键式基本光谱搜索 KnowItAll ID Expert 系统</li></ul>	894,000+
978EALDB04393	<b>KnowItAll NMR 识别和预测专业版 (按年订阅)</b> 年度包用户可获得以下订阅: <ul style="list-style-type: none"><li>• KnowItAll NMR 光谱数据库</li><li>• 用于高级分析/预测的 KnowItAll 光谱版软件</li></ul>	894,000+
978EALDB04379	<b>AIST NMR 库 (按年订阅)</b> 订阅包括: <ul style="list-style-type: none"><li>• 访问超过 25,000 个谱图 (CNMR、HNMR)</li><li>• 一键式基本光谱搜索 KnowItAll ID Expert 系统</li></ul>	25,000+
978EALDB04355	<b>Sigma Aldrich NMR 库 (按年订阅)</b> 订阅包括: <ul style="list-style-type: none"><li>• 访问超过 26,000 个谱图 (CNMR、HNMR)</li><li>• 一键式基本光谱搜索 KnowItAll ID Expert 系统</li></ul>	26,000+

注意: KnowItAll NMR 光谱数据库产品编号: 不再提供 978EALDB03273, 978EALDB03266。

## MS 数据库

我们对 KnowItAll MS 订阅产品进行了一些更改：

- KnowItAll Wiley 质谱库可访问 14 个数据库（含 Wiley Registry）共 870,000 多个质谱

现在提供以下库作为订阅选项：

- NIST 库现在单独在 KnowItAll 质谱库订阅的年度包中提供
  - Wiley 设计药物质谱数据库现在作为单独的订阅选项提供
- SPLASH ID 已添加到集合中 Wiley Registry 质谱数据第 12 版数据库

以下是目前可用的 KnowItAll MS 数据库产品的摘要：

产品代码	名称	#光谱
978EALDB04256	KnowItAll Wiley 质谱库（按年订阅） 包括一键式基本光谱搜索 KnowItAll ID Expert 系统	870,000+
978EALDB04270	KnowItAll Wiley MS 识别专业版（按年订阅） 年度包用户可获得以下订阅： <ul style="list-style-type: none"><li>• KnowItAll Wiley 质谱库</li><li>• 用于高级分析的 KnowItAll 光谱版软件</li></ul>	870,000+
978EALDB03242	KnowItAll Wiley 质谱库 + NIST（按年订阅） 年度包包括： <ul style="list-style-type: none"><li>• 订阅 KnowItAll Wiley 质谱库 + NIST（EI 数据）</li><li>• 还包括 NIST 库/软件永久许可证的 USB（ISBN: 9781119750291）*</li></ul>	1,200,000+
978EALDB04294	KnowItAll Wiley MS 识别专业版 + NIST（按年订阅） 年度包包括： <ul style="list-style-type: none"><li>• 订阅 KnowItAll Wiley 质谱库 + NIST（EI 数据）+ KnowItAll 光谱版软件</li><li>• 还包括 NIST 库/软件永久许可证的 USB（ISBN: 9781119750291）*</li></ul>	1,200,000+
978EALDB04331	Wiley 设计药物 GC-MS 质谱数据库（按年订阅） 包括一键式基本光谱搜索 KnowItAll ID Expert 系统	31,000+

\*许可证须在与 KnowItAll 订阅相同的计算机上使用。

## AntiBase - 天然化合物识别库

- 属性被映射到并替换为 KnowItAll 的属性，以进行更精确的数据挖掘