

KnowItAll 2021 の新機能



KnowItAllは、より多くの分析ツール、新しいデータベース、Microsoft Officeとの高い統合性、アクセシビリティ機能を備え、さらに進化しました。また高性能なマススペクトル解析向けの機能アップデートにより、KnowItAllが持つ業界最先端のIRとRamanの機能を拡張しました。

お客様やパートナーの皆様にとって興味深い2021年版の機能アップデートについて、詳細な概要を以下に示します。ご利用いただける機能とデータは、ユーザーライセンス(エディションなど)により異なります。

ソフトウェアの機能とアップデート

概要

- 品質レビューにより、機能の安定性を確保し、ユーザーエクスペリエンスを向上
- 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を強化

本リリースでは、MSを強化

- 新機能! MSに対応した検索技術(特許出願中) - リファレンスに対して未知のスペクトルを照合する場合、この技術により、選択的フラグメントが余分にある、あるいは欠けている未知のスペクトルに類似したものを検出します。その際、可能であれば、何が原因でその差異が生じているのかを示唆します。この機能により、完全一致しない場合でも、膨大な数の可能性のある構造に関する洞察を提供し、より高度な同定を可能にします。
- 新機能! MS Mixture Analysis - IRとRaman向けにすでに実装されているこの強力な機能が、本リリースではMSでも利用可能になります。KnowItAll SearchItアプリケーションでは、検索する成分の数を指定することで、多成分検索を行うことができます。結果は混合スペクトル、残差スペクトル(クエリースペクトルと混合スペクトルの差異)、それらを構成する各成分スペクトルからなる一連のスペクトルで示されます。
- 新機能! リバース検索 - リファレンススペクトル内でのピークに対してのみ一致度を検出し、未知のスペクトルのみにもみられるピーク値は除外します。
- 新しいMS検索アルゴリズムおよび追加のMSファイルフォーマットのサポート - NIST *.smp(単一あるいは複合スペクトル)、高分解能LC-MS (mzML, mzXML, MGF, MSn, Mz5) など

KnowItAllアプリケーションによる追加アップデート

SearchIt™

- 精密質量検索では、+/-のアダクト (例: H+, H-, Na+) を含めることができます
- 高速プロパティ検索: 一般的なプロパティを素早く検出する新機能
- 未知およびリファレンスのピーク表を結果に表示
- スペクトル比較の新画面表示: バタフライ表示 (未知のクエリースペクトルを正のY軸に、リファレンスペクトルを負のY軸に表示)、および差分表示 (スペクトルの違いを確認できます)

Minelt™

- 単一計算やバッチ演算にプロパティカリキュレータを追加 (元素組成、アイソトープ、C-13 NMR予測、bad baseline indicator、baseline analysis: area difference、SPLASH ID)、さまざまな質量 (平均、精密、ノミナル)
- R.HQI (リバースヒットクオリティインデックス) カラムは、結果リスト内に、マススペクトルのリバース検索を実行した場合に表示されます
- ユーザーはスペクトルと構造式をユーザーが作成したKnowItAllデータベースからNIST MS Interpreterに送ることや、NIST保持時間カリキュレータを統合することができます (カリキュレータを [C:\Program Files\KnowItAll\Bin]フォルダにコピー)
- **DEA規制物質規制予測 (DEA Controlled Substance Regulation Predictor)** ルールベースが更新、拡張されました。Mineltアプリケーションを介してKnowItAllユーザーデータベースの化学構造を分類するために使用できます (バッチプロパティ予測)。 (ChemWindowおよび分光法 (Spectroscopy) エディションの2021年1月バージョン)

ChemWindow®

- インプレース編集およびMicrosoft Officeとの統合に向けて、Windowsのオブジェクトのリンクと埋め込み (OLE) 機能を向上
- 化合物名を構造式に変換する、OPSIN Name2Structure ([Chemistry]メニューへの追加オプション)
- エレメンタルおよびアイソトープのカリキュレータが利用可能 ([MSツール]メニュー内)
- 再導入された反応式作図と反応式ファイルサポート: RInChI chemical identifiers reactions、およびCDX/CDXMファイルをサポート

インストール / OSアップデート

- 高い演算能力を必要とするため、KnowItAll 2021では、32ビット版のWindows OSをサポートしません。サポートするOSはWindows 10 64ビット版です。
- KnowItAllの32ビット版がまだ必要なお客様は、www.knowitall.com/downloadより、KnowItAll 2020の32ビット版をダウンロードしていただけます。
KnowItAllをwww.knowitall.com/downloadからダウンロードしたお客様は、インストールプロセスが変更されていることにご注意ください。データベースを選択してからKnowItAllをダウンロードする必要があります。

注: USBメモリからのインストールでも同様です。デフォルトでは、KnowItAllにはIRとRamanのコレクションがインストールされ、インストールプロセス中にインストールしたい追加データベースを選択する必要があります。

KnowItAllエディションのアップデート

- **新機能! Microplastic Classifications データベース**は、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費用効果の高い方法として、Spectroscopy エディションに含まれるようになりました。マイクロプラスチックサンプルの識別については、包括的なKnowItAll IRスペクトルライブラリーをご利用されることをお勧めします。
- InfometrixエンジンとAnalyzelt MVPアプリケーションは、全エディションで取り除かれました
- ChemWindowエディションには、スペクトル検索機能はなく、ATR solvent (WL) データベースも付属しません。スペクトルデータベース検索を行うには、KnowItAll Spectroscopyエディションをお選びください。

WILEY

スペクトルデータベースのアップデート

IRデータベース

KnowItAll IRスペクトルライブラリー - 本コレクションには次の新規ライブラリーを追加しました。

- IR - Sigma-Aldrich Library of Vapor Phase FT-IR Spectra[WSAVX] - 5,245スペクトル
- IR - Sigma-Aldrich Library of Flavors & Fragrances FT-IR Spectra[WSAFX] - 2,488スペクトル

NMRデータベース

NMR向けKnowItAll製品のポートフォリオを次のように変更しました。

- 新機能!Sigma-Aldrich NMRライブラリー (年間サブスクリプション) - 26,000件を超える有機化合物へのアクセス権。
 - 以下のデータベースが同梱されます: Sigma-Aldrich Library of ¹³C NMR Spectra (13,265スペクトル)、Sigma-Aldrich Library of ¹H NMR Spectra (13,164スペクトル)
 - 個別の年間サブスクリプションとなります。
- 新機能!AIST NMRライブラリー (年間サブスクリプション) -
 - ¹Hおよび¹³Cデータを含む25,000件を超えるスペクトルへのアクセス権 (注:このデータベースは、KnowItAll NMRスペクトルライブラリーには含まれなくなりました。個別の年間サブスクリプションとなります。)

現在入手可能なKnowItAll NMRデータベース製品の要約:

製品コード	名称	スペクトル数
978EALDB04409	KnowItAll NMRスペクトルライブラリー (年間サブスクリプション) サブスクリプション内容: <ul style="list-style-type: none">• 894,000件を超えるスペクトル (CNMR、HNMR、XNMR)• ワンクリックでベーシックスペクトル検索が行えるKnowItAll ID Expert	894K+
978EALDB04393	KnowItAll NMR Identification & Prediction Pro (年間サブスクリプション) 本バンドルのサブスクリプション内容: <ul style="list-style-type: none">• KnowItAll NMRスペクトルライブラリー• 高度な分析と予測が可能なKnowItAll Spectroscopyエディションソフトウェア	894K+
978EALDB04379	AIST NMRライブラリー (年間サブスクリプション) サブスクリプション内容: <ul style="list-style-type: none">• 25,000件を超えるスペクトル (CNMR、HNMR) へのアクセス権• ワンクリックでベーシックスペクトル検索が行えるKnowItAll ID Expert	25K+
978EALDB04355	Sigma Aldrich NMRライブラリー (年間サブスクリプション) サブスクリプション内容: <ul style="list-style-type: none">• 26,000件を超えるスペクトル (CNMR、HNMR) へのアクセス権• ワンクリックでベーシックスペクトル検索が行えるKnowItAll ID Expert	26K+

注: KnowItAll NMRスペクトルライブラリー製品コード: 978EALDB03273、978EALDB03266は、今後ご利用いただけません。

MSデータベース

KnowItAll MSサブスクリプション製品のご提供にいくつかの変更を加えました。

- KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリーでは、Wileyレジストリを含む14のデータベースから870,000件を超えるマススペクトルを提供しております。

以下のライブラリーが、オプションとして提供されます。

- NISTライブラリーは、KnowItAll Massスペクトルライブラリー年間サブスクリプションのバンドルとして個別に提供いたします
 - Wiley Mass Spectra of Designer Drugsは、年間サブスクリプションのオプションとして個別に提供いたします
- SPLASH IDは、本コレクション内のWiley Registry of Mass Spectral Data 12th Edition databasesに添付されています

現在入手可能なKnowItAll MSデータベース製品の要約：

製品コード	名称	スペクトル数
978EALDB04256	KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリー (年間サブスクリプション) ワンクリックでベーシックスペクトル検索が行えるKnowItAll ID Expertを含む	870K+
978EALDB04270	KnowItAll MS Identification Pro (年間サブスクリプション) 本バンドルのサブスクリプション内容： <ul style="list-style-type: none">KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリー高度な分析が可能なKnowItAll Spectroscopyエディションソフトウェア	870K+
978EALDB03242	KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリー + NIST (年間サブスクリプション) バンドル内容： <ul style="list-style-type: none">KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリー + NIST (EIデータ)NISTライブラリーとソフトウェア (ISBN:9781119750291) *の永久ライセンス付きUSBも同梱	1.2M+
978EALDB04294	KnowItAll MS Identification Pro + NIST (年間サブスクリプション) バンドル内容： <ul style="list-style-type: none">KnowItAll Wiley Massスペクトルライブラリー + NIST (EIデータ) + KnowItAll SpectroscopyエディションソフトウェアNISTライブラリーとソフトウェア (ISBN:9781119750291) *の永久ライセンス付きUSBも同梱	1.2M+
978EALDB04331	Wiley Mass Spectra of Designer Drugs GC-MS Library (年間サブスクリプション) ワンクリックでベーシックスペクトル検索が行えるKnowItAll ID Expertを含む	31K+

*各ライセンスは、KnowItAllサブスクリプションとして同一のコンピュータで使用すること。

AntiBase - The Natural Compound Identifier Database

- プロパティは、より優れたデータマイニングができるよう、KnowItAllプロパティにマッピングされ、KnowItAllプロパティで置き換えられています