WILEY

KnowItAll ChemWindow エディション

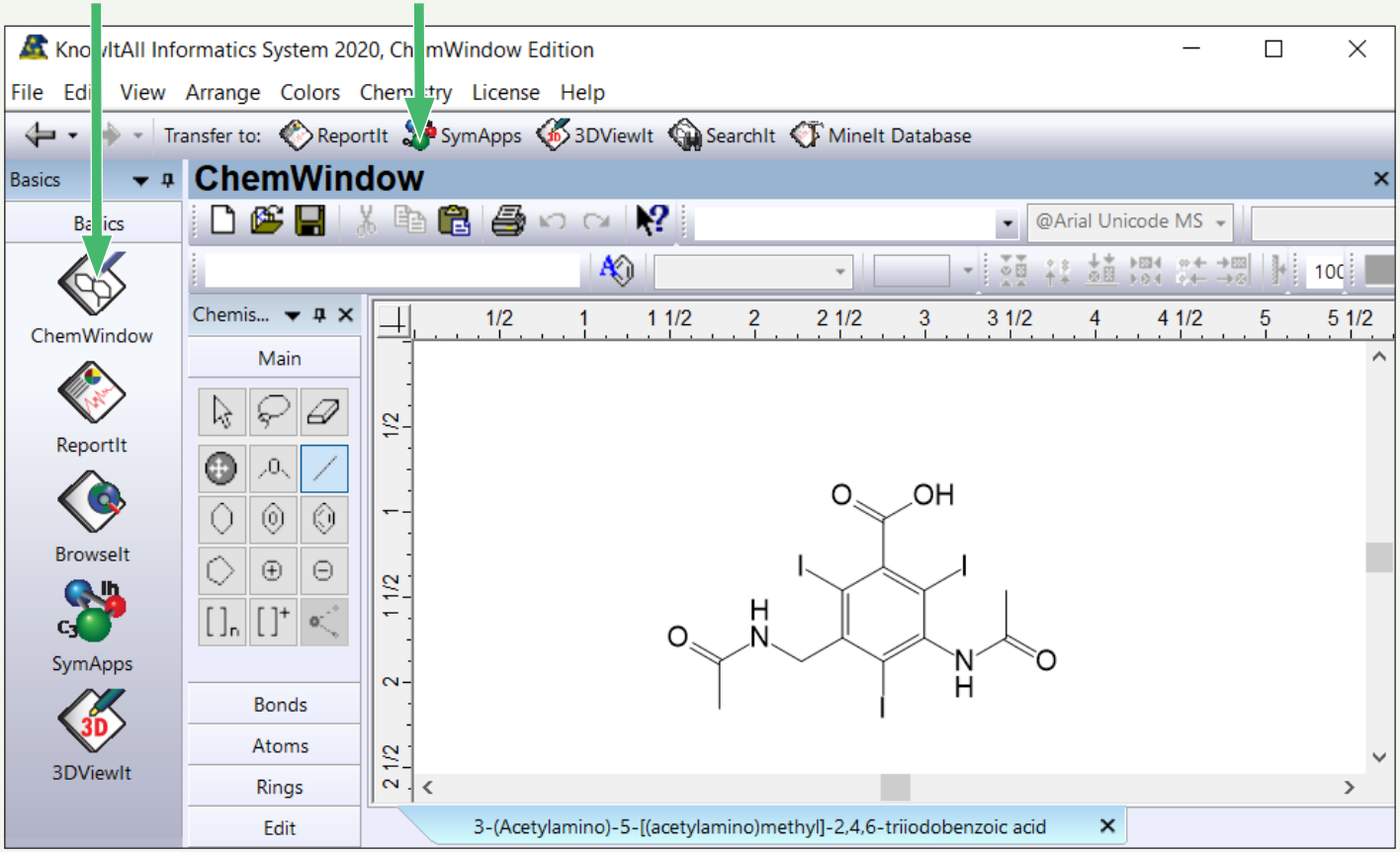
構造式作図、データ管理などのソフトウェア

構造を描画。レポートを作成。データを管理。

WileyのKnowItAll、ChemWindowエディションは、化学者が化学構造式作図とレポート作成の際に世界中で利用されているソフト ウェアです。ChemWindowは、化学構造式と特性の変更、保存、検索、取得するための統合ソリューションを備えており、科学者にさ らに多くのソリューションを提供します。

用途の広いツールボックス。
構造式作図、レポート作成な

アプリの統合。
あるアプリケーションから別のアプ
リケーションにデータを即座に転 送します。



VPAT準拠。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、ントツールなどの ヒ アクセシビ リティ機能。

多言語インターフェイス。本ソフトウェアは現在、英 語、中国語、フランス語、ド イツ語、日本語、そして 韓 国語で利用可能です。

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

含まれているもの

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できます。

BASICSツールボックス

ChemWindow®	2D構造式作図(他のパッケージでは利用できない高度な立体化学認識を含む)
ReportIt™	構造式などの専門的なレポートを公開
SymApps™	3Dプレゼンテーションと3Dモデリングに加えて、点群、結合長、角度などの計算。
3DViewIt™	3D構造の視覚化
BrowseIt™	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

DATAツールボックス

SearchIt™	データベース検索(検索構造、プロパティ)
MineItTM/データベース構築	データベースの表示とマイニング。構造式とプロパティのデータベースを構築

追加機能

クリップアートライブラリ	実験用ガラス器具および化学工学コレクション
計算ツール	モルから質量への変換と構造式から質量を容易に計算
MSフラグメンテーションツール	提案された構造式がマススペクトルデータと一致するかどうかを判断

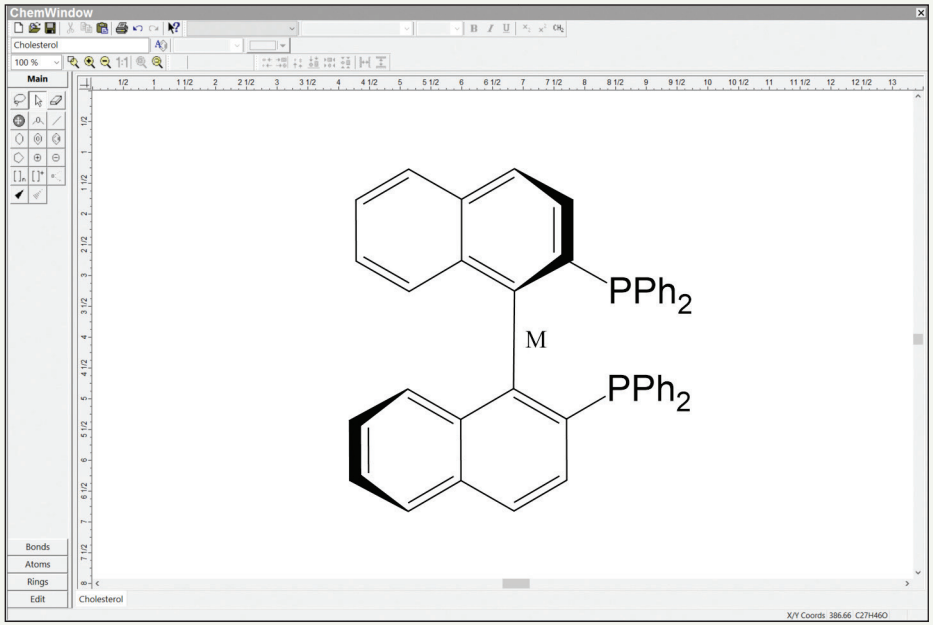
ツールを
詳しく学ぶ

- BASICSツールボックス
- DATAツールボックス
- 追加機能

ChemWindow®

フル機能の2D構造式作図プログラム

ChemWindowは、世界中の化学者が化学構造式作図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式を作図できる、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式を作図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
- 質量と組成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、XYZ - *.xyzなど)
- RInChI、CDX、CDXMファイルを含む反応ファイルをサポート

高度な立体化学認識 — 他のパッケージでは利用できません!

WileyのKnowItAll ChemWindowエディションには、他の構造図パッケージでは利用で きない立体化学を認識するテクノロジーが含まれています。このテクノロジーを使用する と、KnowItAllは、従来の立体化学描画規則を使用して構造式(描画またはインポート) を解釈できます。各構造式の立体化学的意図を理解して保存するKnowItAllの機能は、デ ータをマイニングおよび検索する際に、構造式を含むデータベースを構築し、レコードを 相互に関連付けるために重要です。

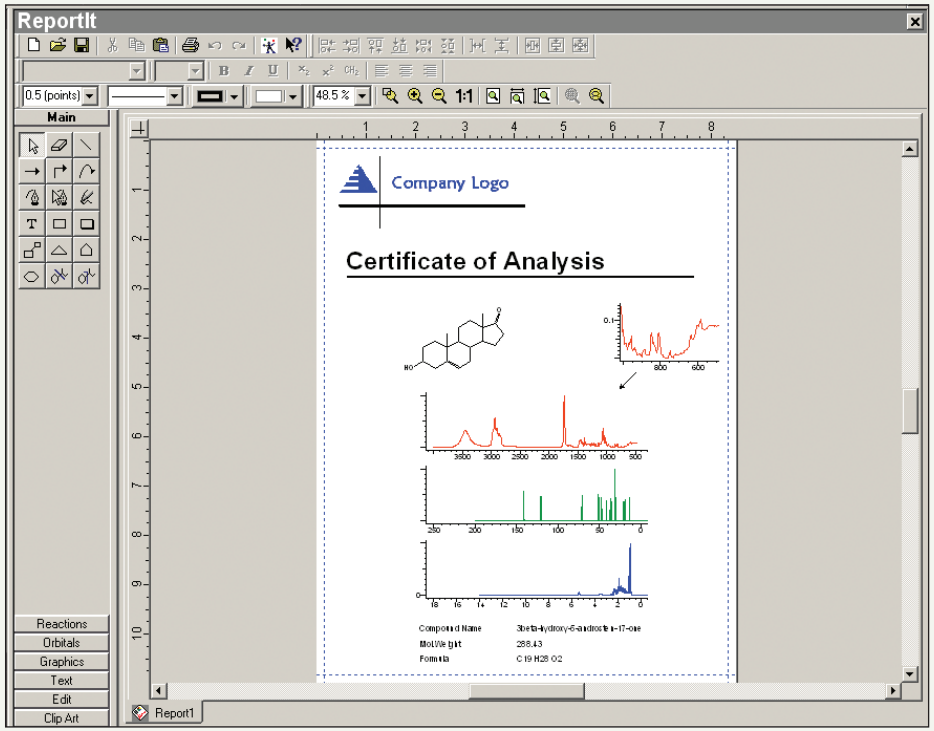
サポートされている立体化学記述子は次のとおりです:

- スピロ化合物を含む四面体キラリティー中心(R/S)
- 偶数の二重結合(M/P)を持つアレンやクムレンに見られるようなキラリティー軸
- 一部のo-置換ビフェニル(M/P)に見られるような立体軸
- らせん立体軸(M/P)
- 置換シクロファン(M/P)に見られるようなキラリティー平面
- 疑似キラル(疑似非対称)中心(r/s)
- 疑似キラル(疑似非対称)中心(M/P)
- 二重結合および奇数の二重結合を持つクムレンに見られるシス/トランス異性体(Z/Eまたはseqcis/seqtrans)
- 二重結合および奇数の二重結合を持つクムレンに見られる鏡像関係のシス/トランス異性体

ReportIt™

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構造式などを含 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

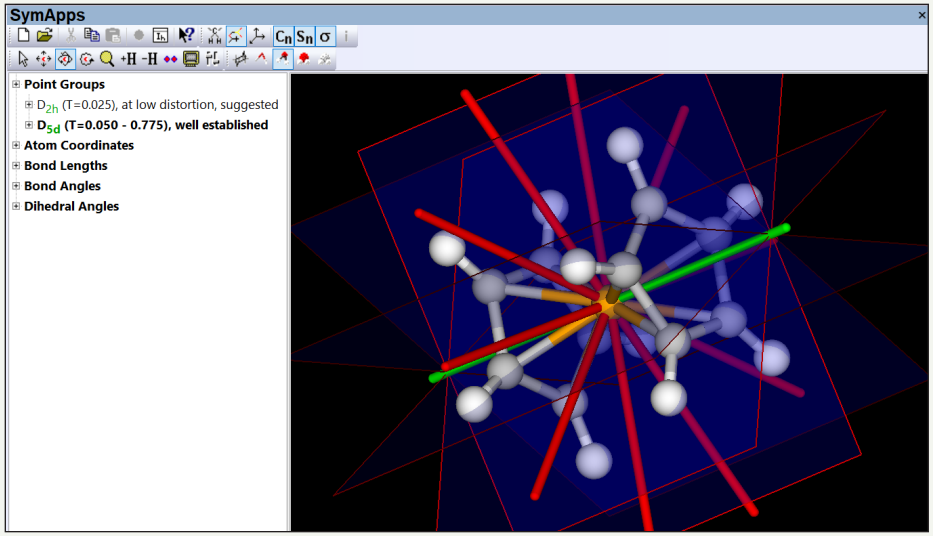
- 企業全体の形式標準化のための統一されたレポートを作成するためのカスタムテンプレート
- 矢印、テキストボックス、形状など、化学反応やその他のレポートを描画するためのカスタマイズ可能なツールバー
- 何百もの実験用ガラス器具の図面とエンジニアリングシンボルを含むクリップアートライブラリ
- ワードプロセッシングおよびプレゼンテーションソフトウェアでのインプレース編集のためのOLE技術(オブジェクトリンクおよび埋め込み)
- 各フラグメントの質量を表示するMSフラグメンテーションツール
- キャプションの配置、間隔空け、中央揃え、回転を行うための高度な編集オプション
- キャプションと構造式の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

SymApps™

3Dプレゼンテーションおよび3Dモデリング

SymAppsは、デスクトップの視覚化と公開用に設計された、プロの対称性分析および3D分子レンダリングプログラムです。変更されたMM2力場最小化モジュールは、2D構造式をわずか数秒で3Dに変換します。

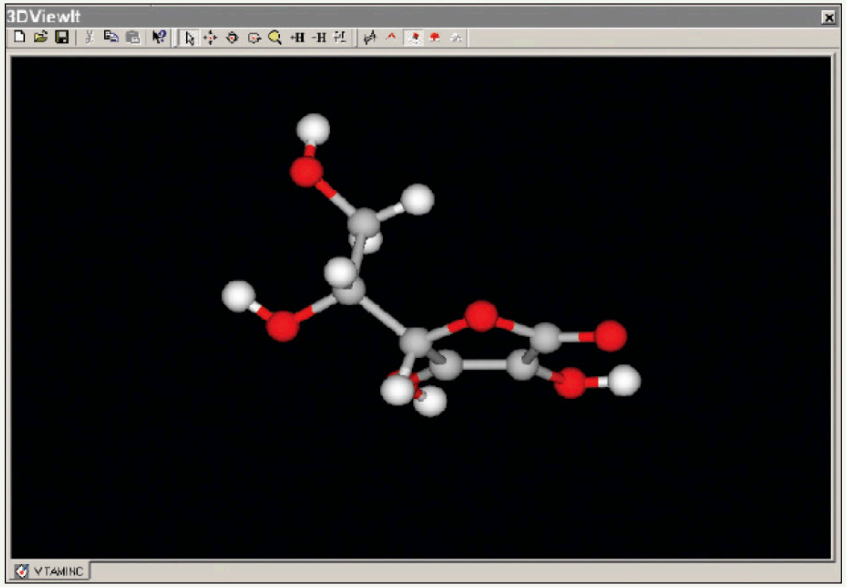
SymAppsは、回転軸、ミラープレーン、反転中心など、分子の対称性を計算、表示、アニメーション化します。3つの基本的な回転のムービーを作成し、この形式をサポートするすべてのWindowsアプリケーションで実行される.aviファイルとしてエクスポートします。SymAppsでは、構造内のすべての原子の点群、結合長、角度、二面角を計算することもできます。



3DViewIt™

3D構造式作図

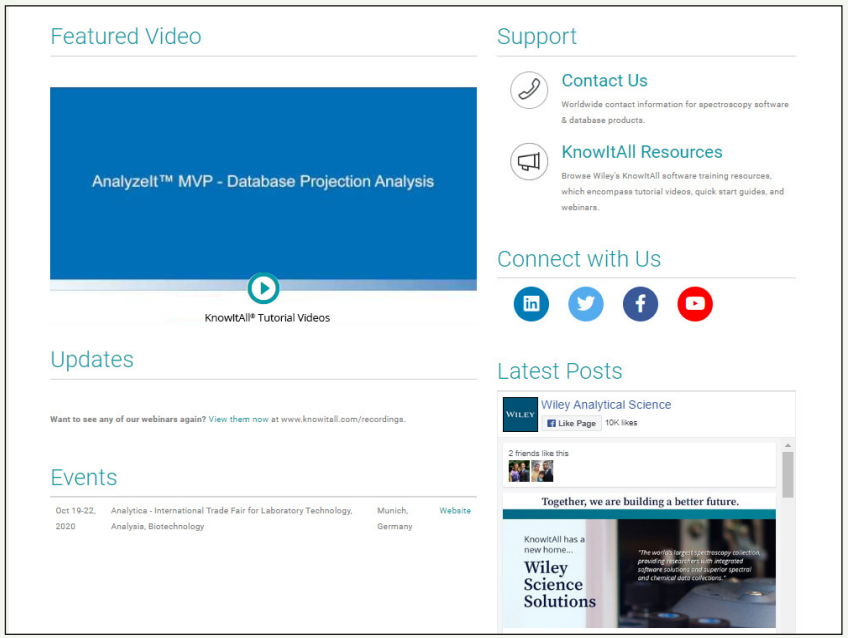
3D ViewItを使用すると、3D構造式の入力と視覚化が可能になります。2D構造式ファイルには、基本的な2Dから3Dへの変換が含まれています。原子、結合、背景の調整可能なカラーディスプレイは、スペースフィル、ボールアンドスティック、スティック、およびワイヤーフレーム表示オプションを備えた、高品質でリアルな3D描画を提供します。



BrowseIt™

Webトレーニングリソース

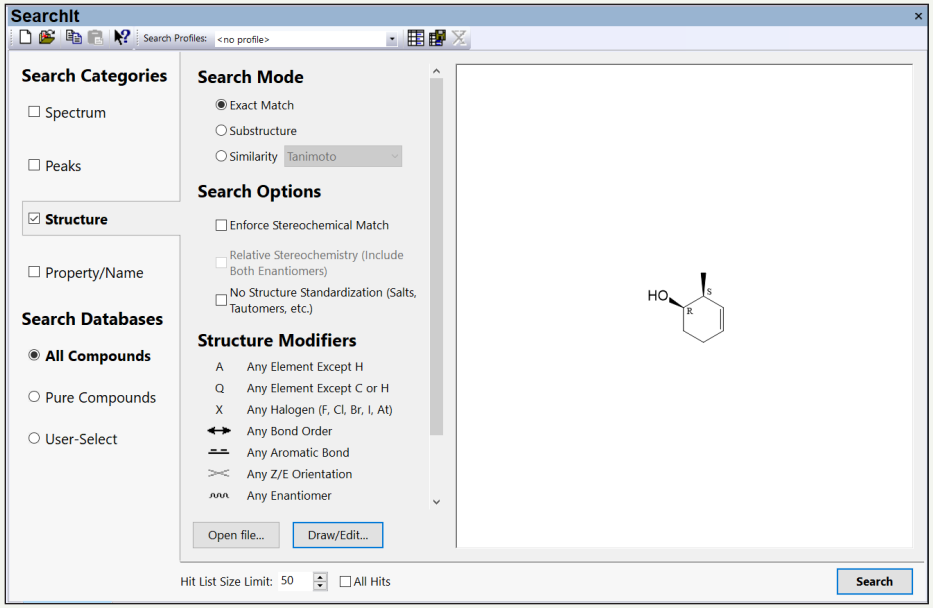
BrowseItは、KnowItAllソフトウェアに組み込まれているWebブラウザで、KnowItAllチュートリアルビデオおよびKnowItAllユーザー向けの他のリソースへのリンクが記載されています。



SearchIt™

データベース検索

SearchItを使用すると、研究者はデータをインポートし、自分で生成したデータベースやリファレンスデータベースを検索できます。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。検索は、名前、構造式、部分構造、プロパティなど、任意の組み合わせで実行できます。



MineIt™/データベース構築

データベースの構築、マイニング、管理

研究者は、化学構造式や化学的性質など他の関連情報について、検索可能なデータベースを構築できます。

主な機能

データベースの構築

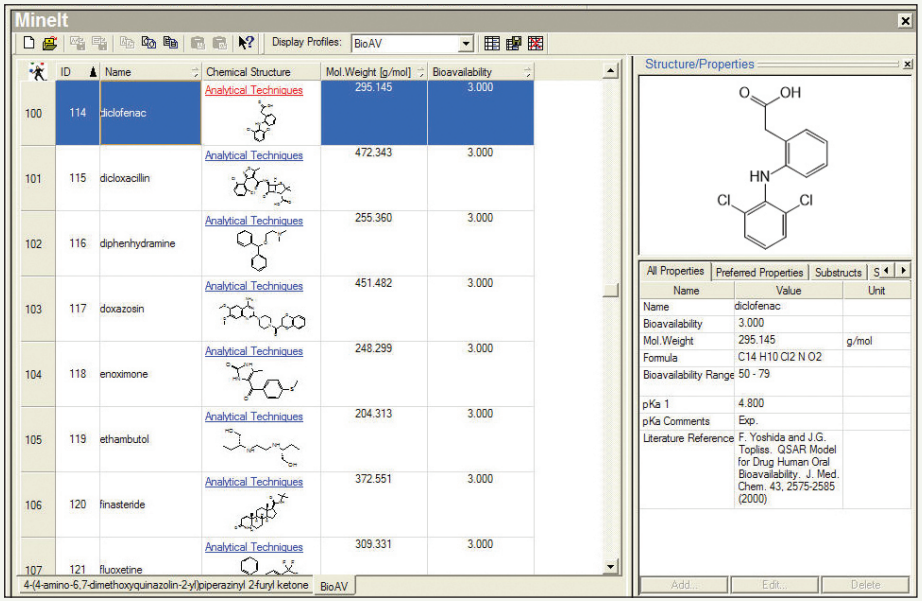
- ChemWindowで作図された構造式をデータベースに直接インポート
- 立体化学結合と識別子を使用した複数の構造形式からの既存の構造のワンクリックインポート(ChemDraw - *.cdx、CML - *.xml、Hampden - *.hsf、InChI - *.txt、JCAMP - *.dx/*.jdx、BIOVIA/MDL - *.mol/*.rxn、Smiles - *.smi、XYZ - *.xyzまたは*.csv形式)
- 沸点、融点などのプロパティで各レコードを拡張
- 単一レコードのプロパティ計算、またはデータセット全体のバッチでのプロパティ計算 - 化学式、分子量、C-13 NMR予測、不良ベースライン指標、ベースライン分析：面積差、SPLASH ID、各種質量（平均、正確、公称）
- 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
- 構造式、プロパティファイルを効率的に処理するための、「バッチインポートおよびエクスポート」
- 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
- 麻薬取締局の規制に従って規制物質の化学構造を分類します（バッチ処理 が利用可能）

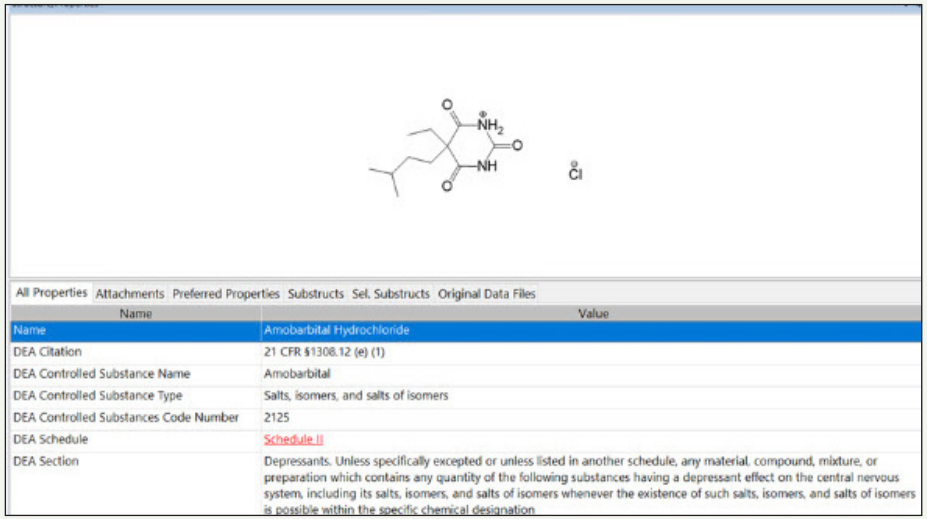
データベースのカスタマイズ

- 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

複雑なジアステレオマー混合物の保存と検索

ジアステレオマーの複雑な混合物を表すレコードを作成および検索します。KnowItAllの独自の
色分けシステムにより、レコードごとに複数の構造を追加してすべての立体異性体を指定するのではなく、絶対立体化学の中心と、同じ相対立体化学の2つ以上の中心のグループを指定できます。これにより、複雑なジアステレオマー混合物をデータベースから簡単かつスマートに保存、検索、および取得できる、前例のないシステムが実現します。



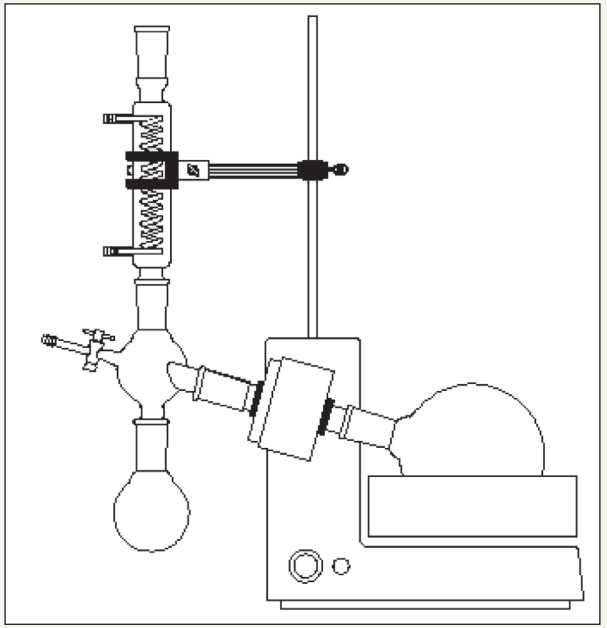


追加機能

クリップアートライブラリ(ReportItに含まれる)

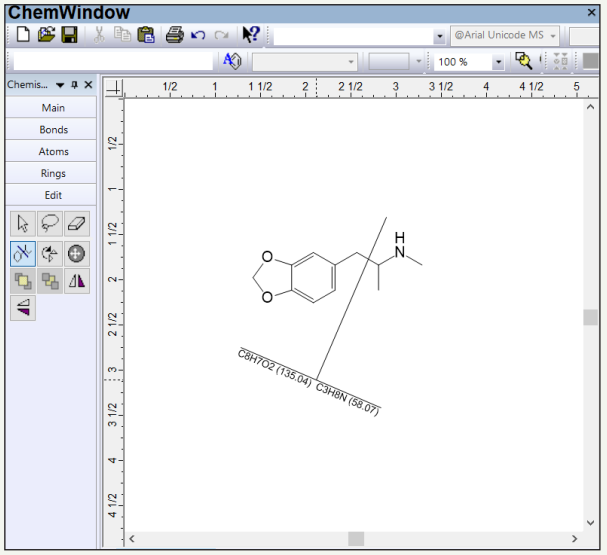
実験用ガラス器具コレクションには、実験の説明と文書化に役立つ130を超えるイラストが含まれています。すべての部品は、簡単に構築できるように、縮尺どおりに描かれ、接合部でスナップされます。

化学工学コレクションは、現実的なプロセスフロー図を描くための250を超えるプロセスフローシンボルを提供します。炉、フィルター、コンプレッサー、クーラー、交換器、蒸発器、サイロ、セパレーター、タンク、容器、バルブが含まれます。

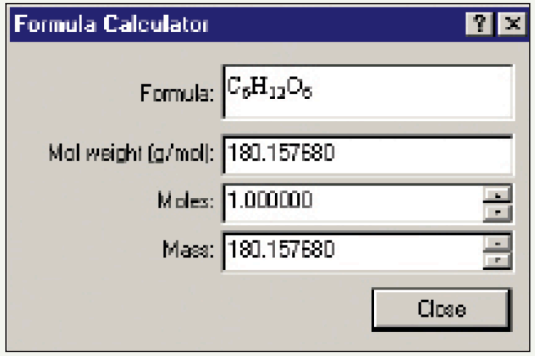


MSフラグメンテーションツール(ReportItに含まれる)

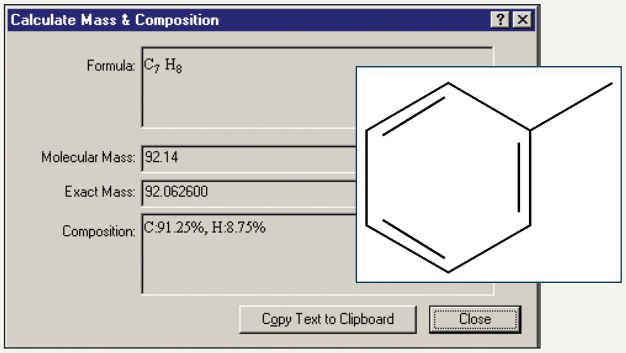
MSフラグメンテーションツールなら、提案された構造式が質量スペクトルデータと一致するかどうかを最速で判断できます。このツールは、提案された構造を介して移動可能なフラグメンテーション線を描画し、線の両側にフラグメントの質量を表示します。



計算ツール(ChemWindowに含まれる)



簡単にモルから質量へ変換



構造式から質量を計算

元素組成と同位体分布用の新しいMS計算ツール。

WILEY

sciencesolutions.wiley.com

REV20260810