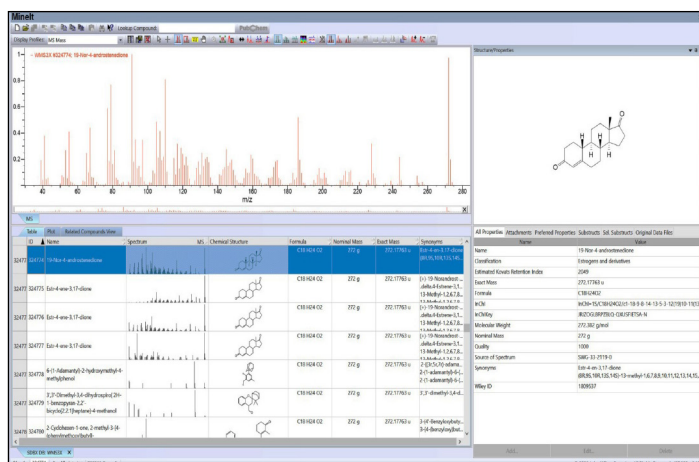


KnowItAll 质谱解决方案



KnowItAll 为您提供用于识别、分析和管理质谱数据的解决方案。该软件融合世界上最大的光谱参考数据库，提供了一项最先进的技术，可快速、可靠地完成光谱分析。

Wiley公司推出的新款 2023 版 KnowItAll, 质谱功能更加强大, 提供了自动处理质谱和加速分析工作流程的工具。



通过将质谱分析所需的所有工具和数据整合到操作便捷的界面中, KnowItAll **将节省您的时间, 改善工作流程, 并提高您从数据中得出结论的能力。**

自动化非目标的气相色谱-质谱分析

光谱搜索/处理

数据库构建/管理

用于绘制结构图/生成报告等的集成工具集

全面优质的质谱参考光谱库*

支持多个供应商/技术（质谱、核磁共振、红外、拉曼、紫外可见）文件格式

*需要订阅 KnowItAll 光谱库

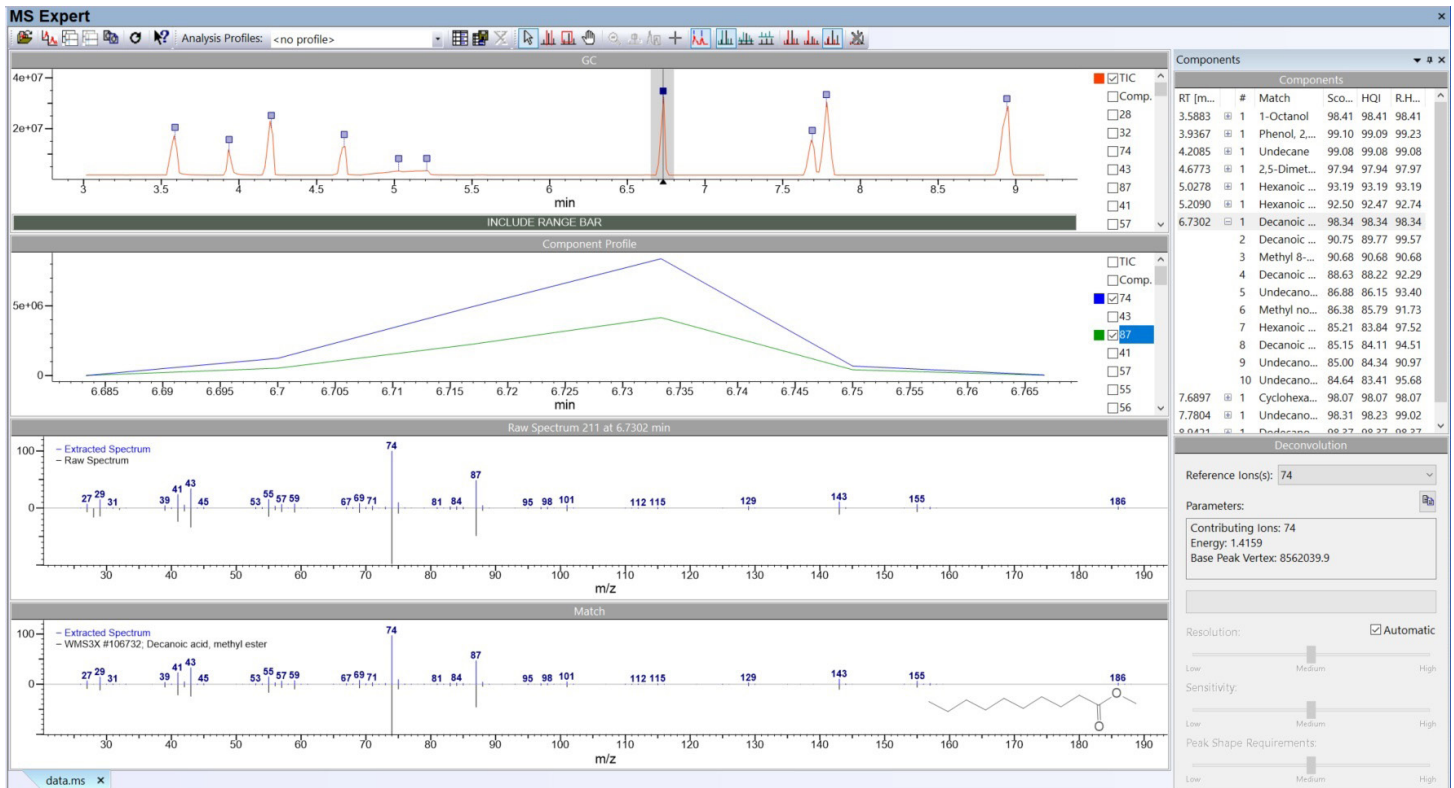
WILEY

自动化非目标的气相色谱-质谱分析

最新! MS Expert - 将去卷积功能与光谱搜索功能结合到一站式自动化的工作流程中

气相色谱-质谱 (GC-MS) 数据分析可能会耗费大量时间，特别是在检查复杂分析物时。新款 MS Expert 能自动处理、去卷积和分析 GC-MS 数据。

与 KnowItAll 的快速数据库搜索功能相结合，该软件能准确地提示与已知物的匹配信息，并允许进一步检查未知物。



无论您是专家还是新手，Wiley公司的这项新的质谱技术都可以为您节省数小时的手动分析时间，能将快速灵活的去卷积功能与综合参考数据库搜索功能结合在一起，通过自动化工作流程来进行成分识别。

工作原理

只需导入GC-MS数据文件，软件就会自动将 TIC(总离子流图)分解成不同成分。然后将在参考文献库*中搜索所有提取的质谱光谱成分，以寻找相应的匹配信息。在结果中根据每种成分显示匹配列表。

然后将未识别的成分或匹配分数低的成分发送至 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。

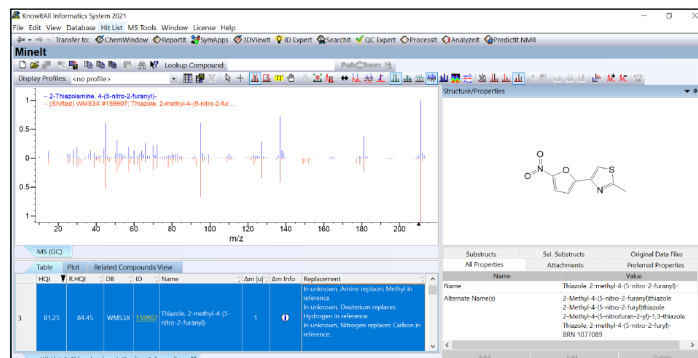
主要功能

- 自动进行GC-MS数据去卷积
- 自动搜索成分提取的质谱，在完善的 KnowItAll 质谱参考库中进行匹配*。
- 也允许将用户数据库纳入搜索范围
- 同时进行常规光谱搜索和反向搜索
- 可根据常规光谱搜索和反向搜索的 HQI 值调整匹配分数的计算方法
- 可以分析单位质量数据和精确质量数据
- 显示 TIC、成分图、提取的光谱与原始光谱的对比、提取的光谱与匹配参考光谱图的对比，以及匹配的参考数据结构
- 允许用户从 TIC 中手动选择额外的峰值
- 选择 TIC 区域进行分析
- 可调整分析灵敏度参数
- 可调整输入数据分辨率设置，以获得准确的质量数据
- 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
- 生成带有结果的报告
- 支持多种仪器供应商的文件格式(www.knowitall.com/formats)
- 优化的搜索速度和性能

先进的质谱搜索技术使识别和分类更加可靠

Wiley提供多种先进的工具，搜索未知的质谱并将其与 KnowItAll 优质参考光谱*或者用户生成的数据库进行比对。

凭借快速的搜索速度、强大的算法和先进的技术，Wiley公司能够提供给您值得信赖的结果。



主要功能

- 导入光谱进行搜索并与用户生成的数据库或 KnowItAll 数据库进行比较
- 搜索可完全自定义并由功能强大的算法驱动
- 可按名称、结构、子结构、特性、光谱和峰值的任意组合搜索
- 对多种成分进行混合分析
- 质谱自适应搜索技术（专利申请中）让您深入了解可能存在的结构
- 质谱逆谱库搜索
- 在您的搜索中包含或排除不同区域
- 在混合分析中包含或排除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
- 同时使用其他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
- 多种视图：叠加、偏移、堆叠、蝶形、减法
- 支持多种仪器供应商的文件格式 (www.knowitall.com/formats)
- 优化的搜索速度和性能

使 KnowItAll 脱颖而出的工具

最新!Wiley正在申请专利的质谱自适应搜索技术： 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。然后，在可能的情况下，它会指出可能导致这些差异的原因。在没有完全匹配的情况下，该功能能够让我们深入了解可能存在的结构。最终，这能帮助我们更加智能和可靠地进行识别和确认。

质谱的混合分析： 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一个未知光谱时，您可以选择搜索多种成分。结果得到一系列复合光谱，每个复合光谱都随附组成复合光谱的各个光谱以及残差光谱（查询的光谱与复合光谱之间的差）。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。

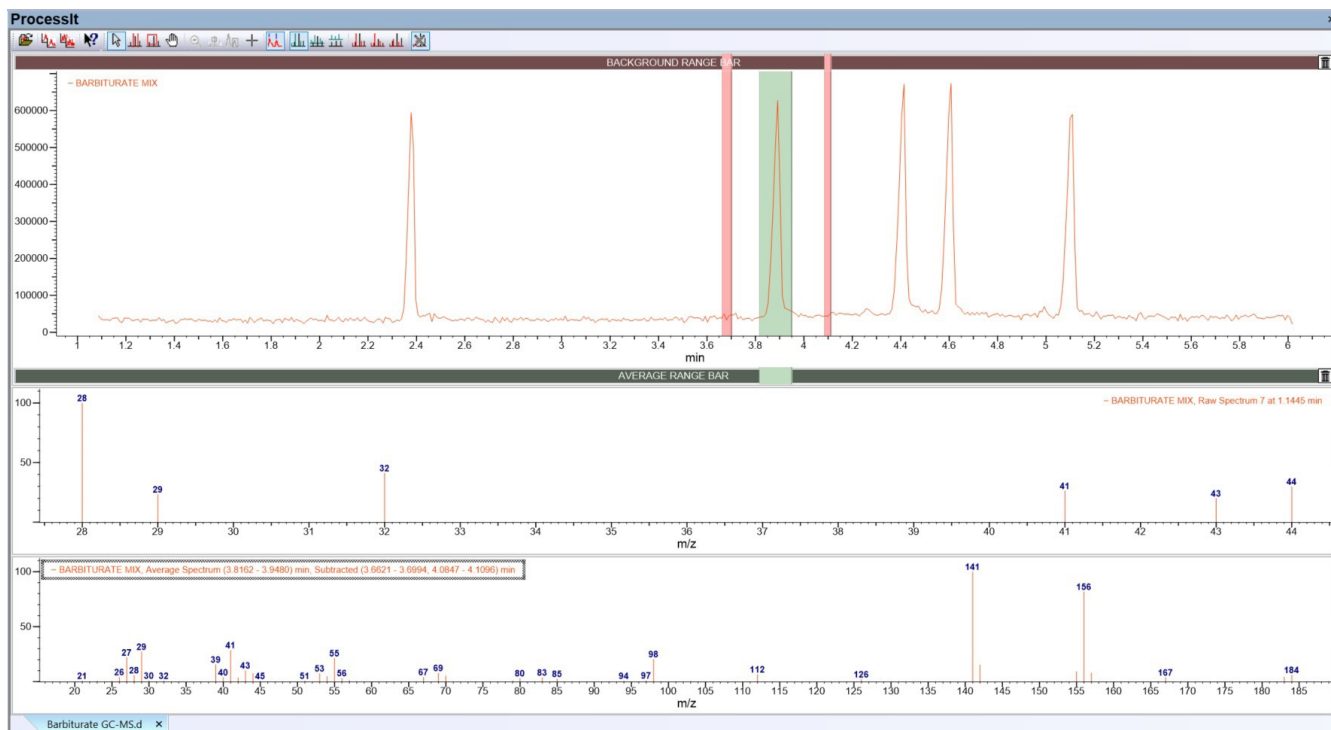
GC-MS数据处理

用户可以使用 ProcessIt 查看并选择一个质谱或质谱的平均值，并定义背景。可以传输选定的质谱或提取的光谱，以供数据库搜索或导入用户数据库使用。

选定的离子色谱图 (SICs) – ProcessIt 能够显示选定的离子色谱图。顶部窗格中可显示多个离子色谱图。

差谱– 此功能可用于计算平均质谱，还可通过手动背景减除来消除背景噪声。可为任一过程指定一个或多个范围。

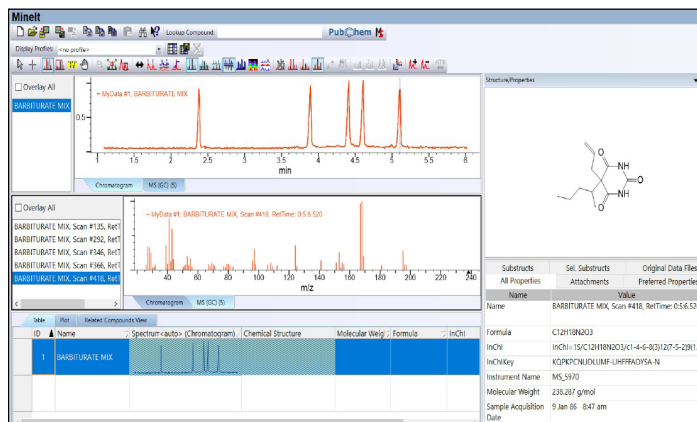
如下面的截图所示，可以在下方的窗格容纳选定的质谱，选定的质谱-背景（红色条形柱）、平均质谱（绿色条形柱）、或平均质谱（绿色条形柱）– 背景（红色条形柱）。



建立源自不同供应商仪器数据的单一技术或多技术数据库

Wiley Science Solution 的主要业务是运行光谱数据库，而 KnowItAll 则基于公司在该领域（即构建数据库）多年的经验打造而来。

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。



主要功能

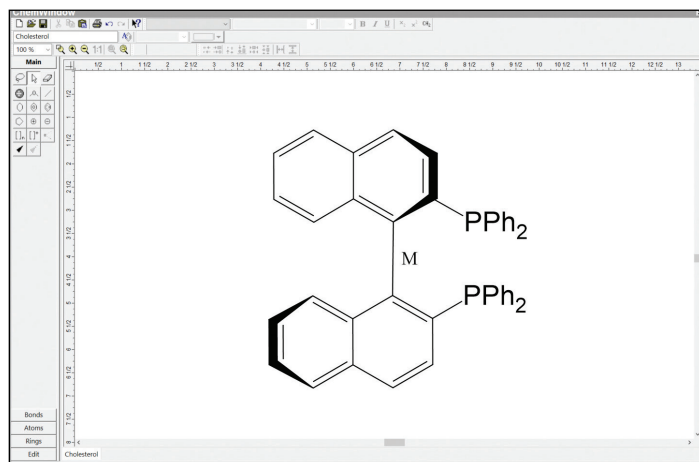
- 用质谱数据或更多分析技术来构建数据库
- 构建同一条记录中有多个光谱的数据库
- 以常见的仪器文件格式或 *.csv 格式（电子表格）一键导入
- 以峰值信息、结构和属性（包括自定义字段）来完善每条记录
- 导入多种结构格式（带立体化学键和标识符）
- 利用“批量导入和导出”高效处理光谱、结构和属性文件
- 不限制光谱范围和分辨率——以测量各个光谱时的精确范围和分辨率存储光谱
- 附加电子表格、化学品安全技术说明书(MSDS) 和其他文件，并在网页中添加链接
- 用于整个数据集的单次或批量计算的属性计算器：公式、分子量、C-13核磁共振预测、不良基线指标、基线分析：面积差、SPLASH ID、各种质量(平均，准确，标称)
- 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
- 根据缉毒局的法规，对受控物质的结构进行分类
- 与其他 KnowItAll 应用全面整合，可进行数据处理、数据库搜索/挖掘、绘制结构图、生成报告
- 包括采用获得专利的重叠密度热图技术，使大数据集中的趋势以可视化方式展现

用于绘制结构图、生成报告等的集成工具

ChemWindow 二维结构图绘制程序及通信工具

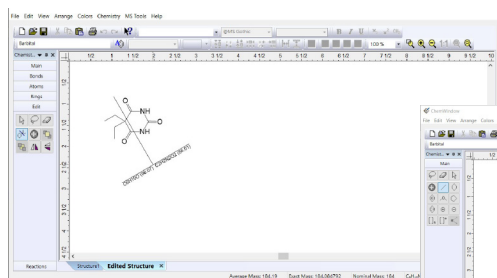
因为结构对您的工作至关重要，所以我们整合了您需要的所有工具，以帮助您简化工作流程并节省时间。

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。它提供一套设计先进而简单易用的绘图工具，只需点击和拖放即可绘制任何化学结构图。可使用最全面的工具来绘制环、键、原子、电子、电荷、链、箭头等等。

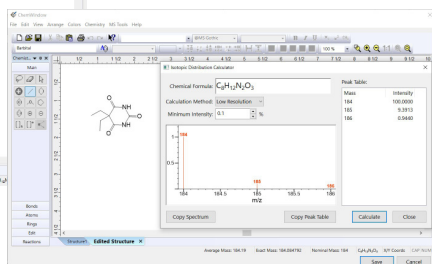


使用 KnowItAll 的 ReportIt 工具，可以创建标准报告、图纸和演示文稿，其中包括注释、数据表、光谱图、二维和三维结构等。

还有更多物超所值的质谱工具！



质量分割工具



同位素分布工具

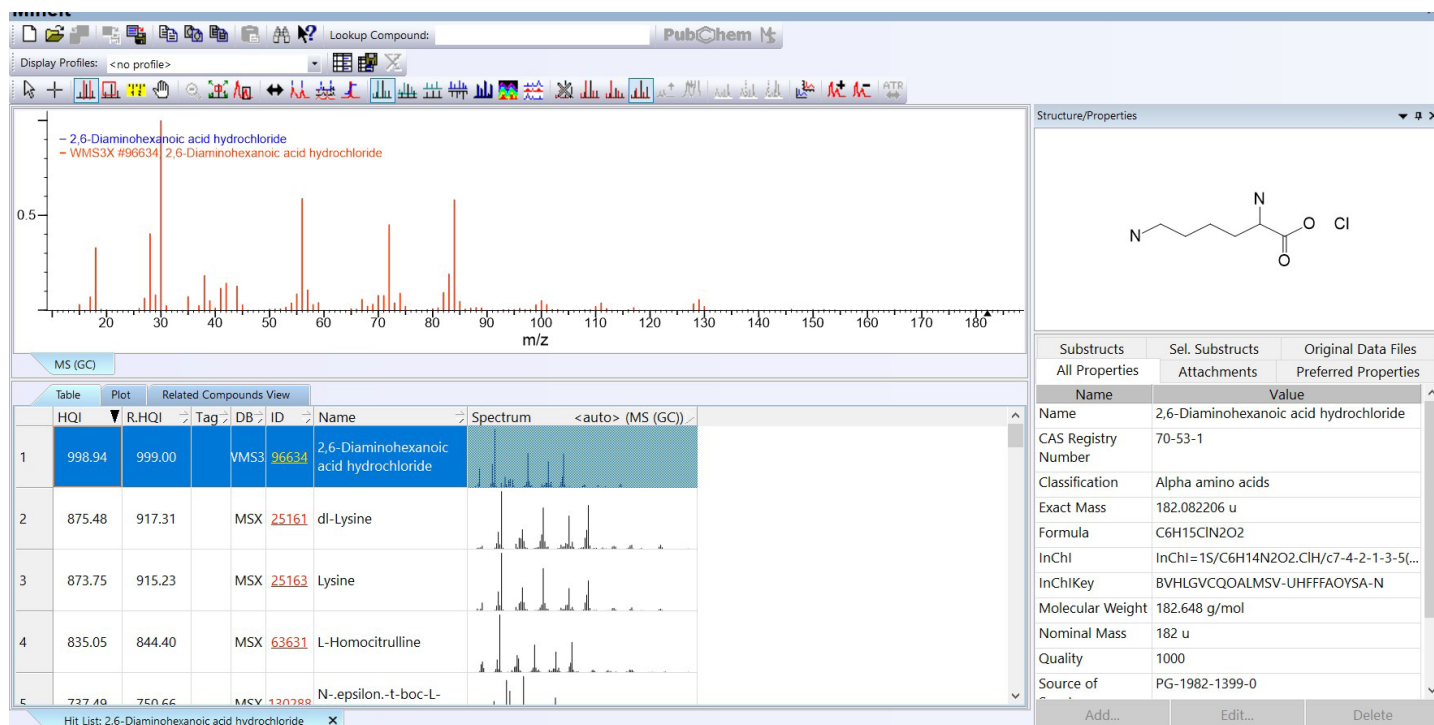
Elemental Composition Calculator					
Target Mass:		388		±	0.5
				u	
Element:	Mass:	Min. Count:	Max. Count:	Charge:	
C	12	1	20	☐ -1 ☒ 0 ☐ +1	
H	1.0078250322	1	36		
O	15.994914619	1	2		
I	126.90447	0	1		
Reset		Calculate		Close	

元素组成计算器

KnowItAll 光谱数据库

利用最全面的数据为您提供值得信赖的结果

没有优质的参考光谱数据库，光谱分析软件就不完整。而Wiley公司的 KnowItAll 提供了两者兼顾的最佳方案！



Wiley公司的 KnowItAll 质谱数据库* 是值得信赖的数据来源，提供超过 870,000 张质量最优的质谱图。

- 访问 14 个质谱数据库，包括著名的Wiley公司资料库
- 涵盖各种化合物，其中包括 有机物、药物、类固醇、添加剂、地球化学物质、石油化工产品和生物标志物、工业化合物及更多其他物质
- 除光谱图外，记录中还包含可用的物理属性和结构信息
- 包括 KnowItAll ID Expert 搜索工具，可以一键完成基本光谱搜索
- 从大多数质谱仪器导入光谱进行识别
- 即时访问添加到库中的最新数据

通过增加 NIST 和其他数据选项，增加对超过 120 万张光谱的访问。

*需要订阅 KnowItAll 光谱库

订阅选项

产品代码	名称	# 光谱
978EALDB04256	Wiley KnowItAll 质谱数据库 (年度订阅) 包括KnowItAll ID Expert 搜索软件，可以一键完成基本光谱搜索	870K+
978EALDB04270	Wiley KnowItAll 质谱识别专家 (年度订阅) 订阅包包括 - Wiley KnowItAll 质谱数据库 - 用于高级分析的 KnowItAll 光谱版软件	870K+
978EALDB03242	Wiley KnowItAll 质谱数据库 + NIST (年度订阅) 订阅包包括： - Wiley KnowItAll 质谱数据库 + NIST (EI数据) - 还包括对整个 NIST 资料库和软件 (9781119750291) 的永久许可证**	1.2M+
978EALDB04294	Wiley KnowItAll 质谱识别专家 + NIST (年度订阅) 订阅包包括： - Wiley KnowItAll 质谱数据库 + NIST (EI数据) + 用于高级分析的 KnowItAll 光谱版软件 - 还包括对整个 NIST 资料库和软件 (9781119750291) 的永久许可证**	1.2M+
978EALDB04331	Wiley策略药 GC/MS 质谱数据库 (年度订阅) 包括KnowItAll ID Expert 搜索软件，可以一键完成基本光谱搜索	31K+
** 每个许可证必须与 KnowItAll 订阅在相同的电脑上使用。		

兼容性

有关支持的文件格式，请访问 <https://www.paastech.com/filedownload/247677>

提供英语、日语、汉语、法语和德语版本。

现在还具备辅助功能，如键盘访问菜单、图标的音频解说和工具提示。