



产品手册

KnowItAll 数据分析软件



KnowItAll 数据分析软件隶属于 Wiley 集团, 该软件主要用于解析、鉴别、验证和分类化合物。目前该软件支持不同品牌仪器的技术以及数据格式, 包括 FTIR, Raman, MS, NMR 和 UV-vis。KnowItAll 软件可以进行不同品牌不同仪器的同步分析。

KnowItAll 软件平台消除了用户需要通过不同的软件分析不同类型数据的壁垒, 提供了一个单一, 简单, 高效的数据分析平台, 而且软件平台本身拥有多项专利的数据解析技术。

传承于著名的萨特勒数据库 (Sadtler™) KnowItAll 软件平台可以提供客户快速, 精确的光谱分析。

KnowItAll 软件平台的主要功能如下:

- 谱图检索/组分解析
- 混合物分析, 官能团分析——红外, 拉曼
- 用户自建数据库, 质控模式
- 光谱处理与差谱, 化学结构绘制
- 检索结果报告, 密度热图 (专利)
- 多技术同步分析 (专利), 优化修正 (专利)
- NMR 预测, NMR 标峰



不同模块间的无缝切换

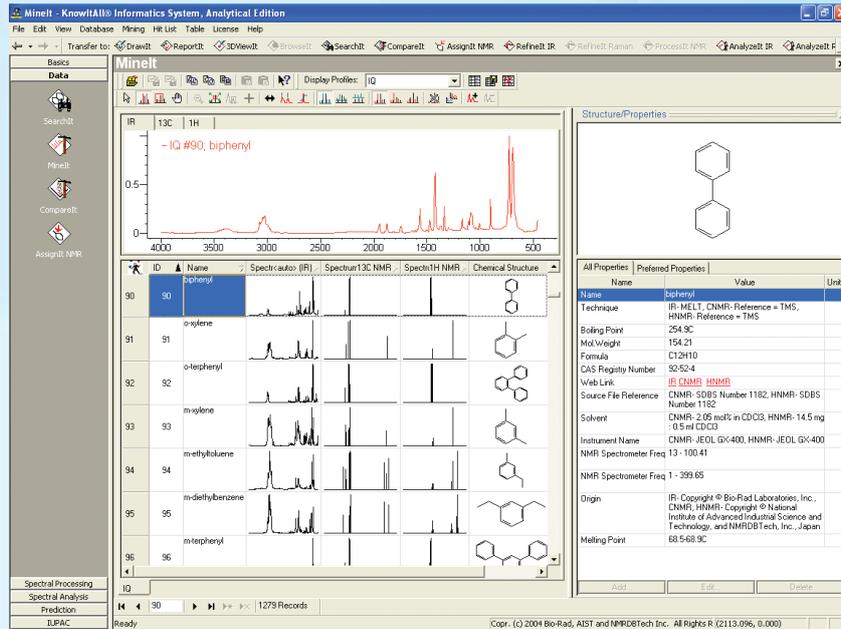
The screenshot displays the KnowItAll software interface. At the top, a menu bar includes File, Edit, View, Database, Hit List, Window, License, and Help. Below the menu is a toolbar with various icons for file operations and analysis. The main window is divided into several panes:

- Left Pane:** A sidebar with icons for ID Expert, SearchIt, Minelit/Create Database, QC Expert, and AssignIt NMR.
- Top Center:** A search bar with 'PubChem' selected and 'Display Profiles: DEMO'.
- Center:** A large plot area showing an NMR spectrum for 'DEMOX #10; Phenol'. The x-axis is labeled 'ppm' and ranges from 14 to -1. The spectrum shows several peaks, with the most prominent ones between 6 and 8 ppm.
- Bottom Center:** A table with columns for ID, Name, Sp-cau, (IR), Spectrum13C NMR, Spectrum1H NMR, and Chemical Structure. The table lists several compounds, with 'Phenol' selected in the first row.
- Right Pane:** A 'Structure/Properties' panel showing the chemical structure of phenol and a table of its properties.

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-formaldehyde 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				C6 H6 O	

可以同时支持不同品牌, 不同技术的仪器文件格式

红外光谱 (FTIR,NIR) 数据库



全世界最大的红外光谱数据库

Wiley 红外光谱数据库前身是著名的萨特勒数据库 (Sadtler)。Wiley 红外谱库有超过 264,000 张红外谱图，它是全球最大且不断快速增长的高质标准图谱库集。丰富的谱库资源可以与 KnowItAll 软件或许多红外仪器厂商的搜索软件搭配使用，可用于鉴别未知物的谱图。

Wiley 红外光谱数据库可以提供如下各类的高质量光谱：

聚合物和相关化合物

纯有机化合物

工业化合物

刑侦数据库

环保应用数据库

无机物和有机金属化合物

近红外数据库

数据库的详细分类信息，请登录

<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/ir> 查询

数据库的详细分类信息，请登录

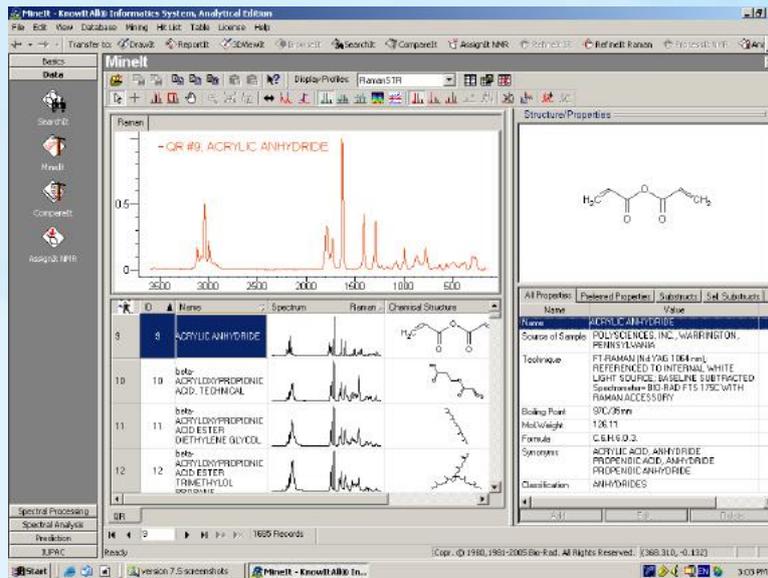
目前 KnowItAll 软件平台支持的红外光谱文件格式如下：

Sadtler IRF (*.irf)
Bomem (*.a01)
Bruker (*.*)
Digilab (*.dt)
Galactic/GRAMS (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)
HORIBA NGS/TSF (*.ngs, *.tsf)

Generic XY Data (*.*)
HORIBA MDW (*.mdw)
JASCO (*.jws, *.j1d)
JCAMP (*.dx, *.jdx)
JEOL (*.wsf) Mattson (*.ras, *.abs)

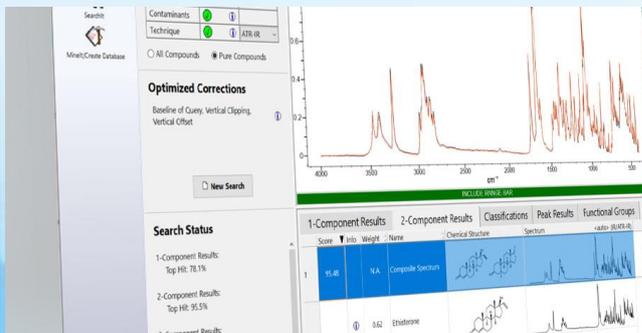
Nicolet (*.spa)
PE Spectrum (*.sp)
Shimadzu SMF (*.irs, *.smf)
Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)
RenishawWIRE Files (*.wdf, *.wxd)

拉曼光谱 (Raman) 数据库



全世界最大的拉曼光谱数据库

Wiley 拉曼光谱数据库前身是著名的萨特勒数据库 (Sadtlar)。Wiley 拉曼谱库有超过 25,000 张拉曼谱图，它是全球最大且不断快速增长的高质标准图谱库集。丰富的谱库资源可以与 KnowItAll 软件或许多拉曼仪器厂商的搜索软件搭配使用，可用于鉴别未知物的谱图。



Wiley 拉曼光谱数据库可以提供如下各类的高质量拉曼光谱：

管制药与处方药

香精香料

无机化合物

基本聚合物与单体

聚合物与过程化合物

标准物 1—6

数据库的详细分类信息，请登录

<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/raman/查询>

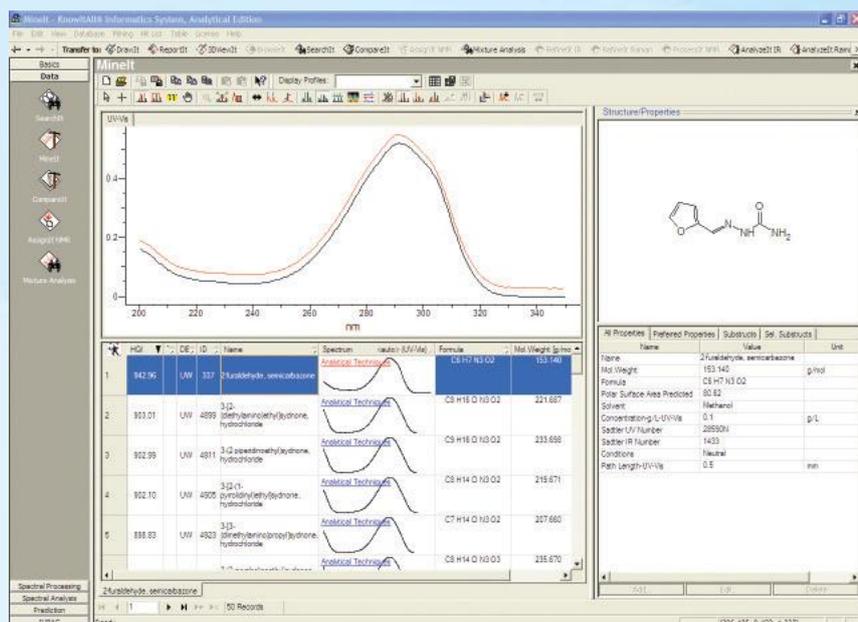
目前 KnowItAll 软件平台支持的拉曼光谱文件格式如下：

Sadtler IRF (*.irf)
Bomem (*.a01)
Bruker (*.*)
BWTek (*.txtr)
Digilab (*.dt)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)
Generic XY Data (*.*)

HORIBA MDW (*.mdw)
HORIBA LabSpec (*.l6s, *.ngs, *.tsf)
JASCO (*.jws, *.j1d)
JCAMP (*.dx, *.jdx)
JEOL (*.wsf)
Mattson (*.ras, *.abs)

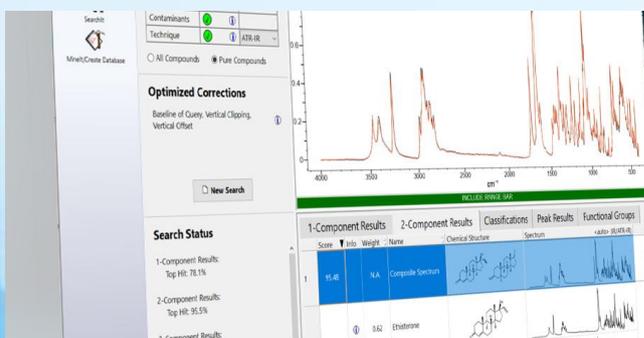
Nicolet (*.spa)
PE Spectrum (*.sp)
Rapid (*.JCM)
Renishaw WiRE Files (*.wxd, *.wdf)
Shimadzu SMF (*.irs, *.smf)
Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.uvd)

紫外可见光谱 (UV-vis) 数据库



全世界最大的紫外可见光谱数据库

Wiley 紫外可见光谱数据库前身是著名的萨特勒数据库 (Sadtler)。Wiley 紫外可见谱库有超过 30,000 张紫外可见谱图，它是全球最大且不断快速增长的高质标准图谱库集。丰富的谱库资源可以与 KnowItAll 软件或许多紫外可见仪器厂商的搜索软件搭配使用，可用于鉴别未知物的谱图。



Wiley 紫外可见光谱数据库可以提供如下各类的高质量光谱:

200-350nm

200-500nm

200-800nm

刑侦 200-500nm

数据库的详细分类信息，请登录

<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/uv-vis/> 查询

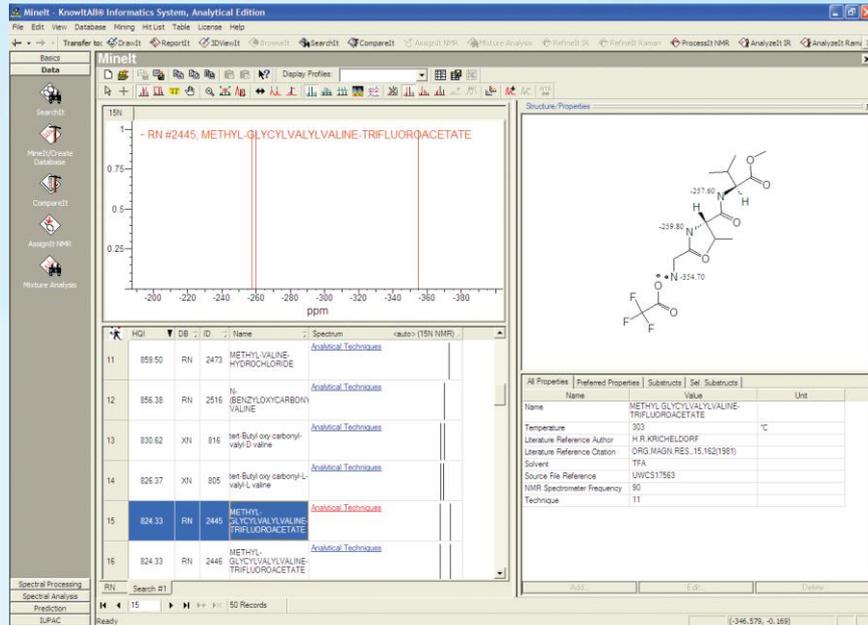
目前 KnowItAll 软件平台支持的紫外可见光谱文件格式如下:

Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir)
Generic XY Data (*.*)

JCAMP (*.dx, *.jdx)
JASCO (*.jws)

PG Instruments (*.spd)
Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.ugd)

核磁 (NMR) 数据库



全世界最大的核磁数据库

Wiley 核磁数据库前身是著名的萨特勒数据库 (Sadtler)。Wiley 核磁谱库有超过 920,000 张核磁谱图, 其中 CNMR 谱图 573,000 张, HNMR 谱图 245,000 张, XNMR 谱图 102,000 张。它是全球最大且不断快速增长的高质标准图谱库集。丰富的谱库资源可以与 KnowItAll 软件或许多核磁仪器厂商的搜索软件搭配使用, 可用于鉴别未知物的谱图。

Wiley 核磁数据库可以提供如下各类的高质量光谱:

CNMR

HNMR

XNMR

数据库的详细分类信息, 请登录

https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/tec_hnique/nmr/knowitall-nmr-collection/ 查询

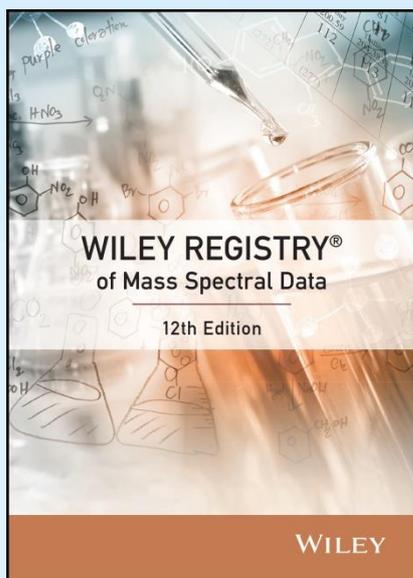
目前 KnowItAll 软件平台支持的核磁光谱文件格式如下:

Bruker Aspect (*.*)
Bruker UXNMR/XWinNMR 1D (*.1r, *.fid)
Bruker WinNMR (*.1r, *.fid)
Galactic/Grams (*.spc, *.fir, *.ir, *.rmn)
Generic XY Data (*.*)

JEOL AL NMR (*.als)
JEOL Delta NMR (*.jdf)
JEOL GX/GSX/EX-90 NMR (*.gxd, *.gxp)
JCAMP (*.dx, *.jdx)

MestRe-C (*.mrc)
NUTS (*.*)
Spectacle/Shimadzu (*.irs, *.nmr, *.ugd)
Varian 1D NMR (phasefile, data, fid)

质谱 (MS) 数据库



Wiley Registry[®] 质谱数据库 (第 12 版) 已经过现场检验, 是目前市场上最大的质谱库, 其化合物覆盖范围达竞争对手的两倍以上。可应用于非靶向 GC-MS 筛选和 MS-TOF 仪器的精确质量工作流程。

通过第 12 版数据库体验优化后的光谱搜索性能。最新版本经过了广泛验证, 可以从主库中隔离和移除可疑光谱。新版数据库还引入了化学分类、Kovats 保留指数计算值和 splash ID。

研究人员使用 *Wiley Registry* 质谱数据库 (第 12 版) 可充分确信其非靶向光谱搜索范围为全球最广。新版数据库新增 41450 张光谱。

普库技术指标:

光谱: 817290

可搜索的化学结构: 785061

唯一化合物: 668452

数据库兼容性:

Agilent ChemStation、MassHunter、OpenLab*

Bruker MS Workstation*

Chromatec Analytic*

JEOL msFineAnalysis*

Leco ChromaTOF*

NIST MS Search

PerkinElmer TurboMass

Scion MS Workstation*

岛津 GCMSsolution

Thermo Chromeleon™*、TraceFinder™*、Xcalibur™

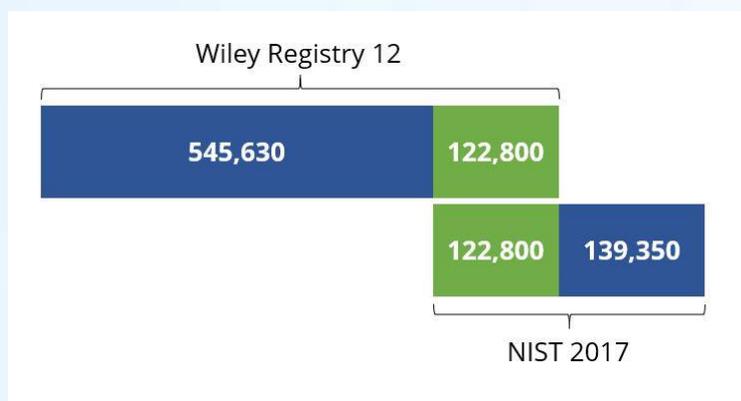
Waters MassLynx

其他可用版本:

ACD/Labs ACD/Spectrus Processor**

KnowItAll®**

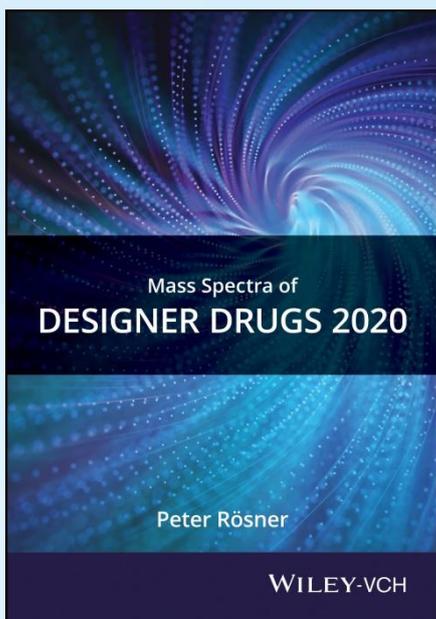
Wiley Spectra Lab**



数据库的详细分类信息, 请登录
<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/gc-ms/wiley-registry-of-mass-spectral-data-12th-edition/> 查询

旨在协助抗击全球阿片类药物健康流行病

*设计物质谱数据库 2020 版*是全球最大的 NPS 和滥用药物的化学特征图集。2020 版质谱库新增 1300 多张新质谱，以及 30 多个不同分类组新增 700 多个唯一化合物，例如芬太尼、合成大麻素和阿片类等。该光谱库中平均每张光谱的质量指数为 951.0，Kovats 保留指数为 18793，拥有新型精神活性物质最新列表的综合数据。2020 版质谱库每年更新一次，涵盖截至 2019 年 12 月 31 日已知的一系列新型精神活性物质。



数据库的详细分类信息，请登录

<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/gc-ms/mass-spectra-of-designer-drugs/>查询

数据库包括：

质谱：29371；化学结构：29371

唯一化合物：22371；阿片类：354

芬太尼：1440；大麻仿制药：1033

大麻素：111

实测 Kovats 指数：18793

平均质量指数/光谱 (QI)：951.0



数据库的详细分类信息，请登录

<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/gc-ms/nist-epa-nih-mass-spectral-library-2017/>查询

一个值得信赖的可获取质谱库

*NIST/EPA/NIH 质谱库 2017 版*取代了 NIST 2014 版，是一个经过充分评估的电子电离 (EI) 和 MS/MS 质谱图集，包含化学和气相色谱数据，加上搜索软件可用于识别您未知的质谱。NIST 17 包含近 100 万张质谱，其中包括 267000 种化合物的 306000 张 EI 光谱和 652000 张串联 MS/MS 光谱。该质谱库是美国国家标准与技术研究院 (NIST) 经验丰富的质谱专家团队通过对全球应用最广泛的质谱参考库进行长达 30 多年的全面评估与扩展得到的，每张光谱都通过了正确性检验。

数据库包括：

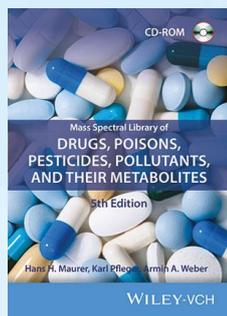
超过 262150 种化合物的 306622 张 EI 光谱

超过 15243 种化合物的 652475 张 MS/MS 光谱

超过 99400 种化合物的 404045 个保留指数值

质谱 (MS) 数据库

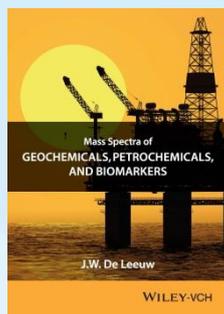
Wiley 还提供下列其他质谱数据库, 数据库的详细信息, 请登录
<https://sciencesolutions.wiley.com/solutions/technique/gc-ms/> 查询



药物、毒物、杀虫剂、污染物及其代谢物质谱库 (第 5 版)

适用于气相色谱-质谱

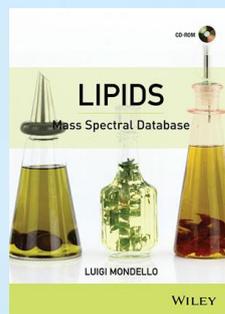
应用分类: 代谢组学, 法医学与毒理学



地质化学品、石油化工产品和生物标记物质谱 (SpecData)

适用于气相色谱-质谱

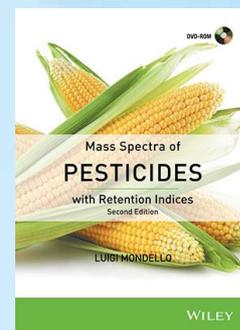
应用分类: 环境



LIPIDS 质谱数据库

适用于气相色谱-质谱

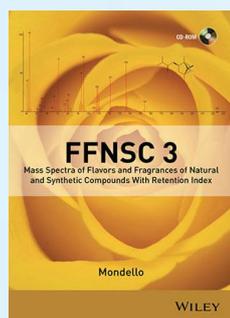
应用分类: 环境, 食品与化妆品



带保留指数的杀虫剂质谱库 (第 2 版)

适用于气相色谱-质谱

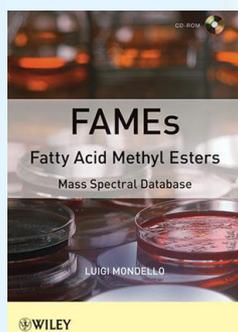
应用分类: 环境, 食品与化妆品



天然和合成的香精和香料化合物质谱 (第 3 版)

适用于气相色谱-质谱

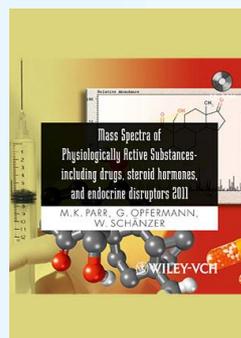
应用分类: 食品与化妆品



FAME: 脂肪酸甲酯质谱库

适用于气相色谱-质谱

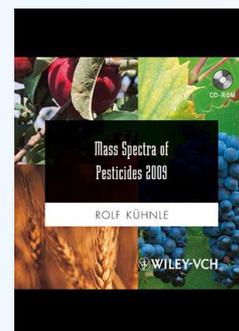
应用分类: 食品与化妆品



生理活性物质质谱 (2011 版)

适用于气相色谱-质谱

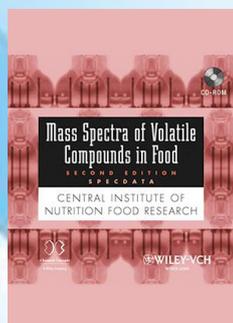
应用分类: 代谢组学



杀虫剂质谱 (2009 版)

适用于气相色谱-质谱

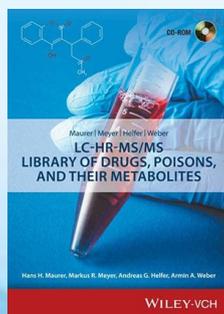
应用分类: 环境, 食品与化妆品



食品中的挥发性物质质谱 (SpecData) (第 2 版)

适用于气相色谱-质谱

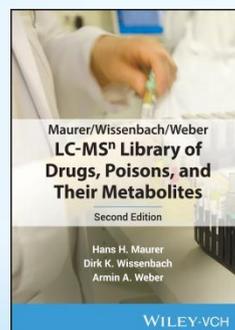
应用分类: 食品与化妆品



LC-HR-MS/MS 药物、毒物及其代谢物数据库

适用于液相色谱-质谱

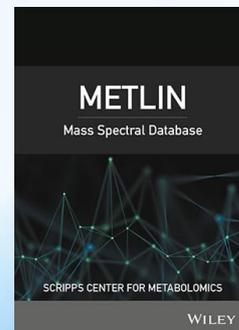
应用分类: 代谢组学, 法医学与毒理学



LC-MSn 药物、毒物及其代谢物数据库 (第 2 版)

适用于液相色谱-质谱

应用分类: 代谢组学, 法医学与毒理学



METLIN 质谱数据库 (与 NIST MS/MS 捆绑使用)

适用于液相色谱-质谱

应用分类: 代谢组学, 法医学与毒理学, 环境, 食品与化妆品

北京寰宇腾创科技有限公司 DSC培训教程

Part1
DSC基础知识

培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C392924.htm> 查询

北京寰宇腾创科技有限公司 MDSC培训教程

Part1
MDSC基础知识

MDSC 培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C392927.htm> 查询

DSC 仪器培训

差示扫描量热仪（DSC）是一款实验室的常用仪器，我公司可提供不同品牌，不同型号的 DSC 仪器培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户id提供全方位的培训服务。

可培训的 DSC 仪器品牌型号如下：

TA: 29XX 系列, Q 系列, Discovery 系列

Netzsch: 204F1, 214

Mettler: DSC1, DSC2

PE: Diamond 系列

培训内容包括：

- | | | |
|-------------|---|-----------|
| 1. DSC 理论基础 | → | DSC 的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | DSC 的基本原理 |
| 3. 数据分析 | | DSC 的基础试验 |
| 4. 仪器保养 | | DSC 的典型试验 |
| 5. 注意事项 | | DSC 的校正 |

MDSC 仪器培训

差示扫描量热仪（DSC）是一款实验室的常用仪器，MDSC 是 DSC 的一项重要功能，我公司可提供不同品牌，不同型号的 DSC 仪器培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户id提供全方位的培训服务。

可培训的 DSC 仪器品牌型号如下：

TA: 29XX 系列, Q 系列, Discovery 系列

Netzsch: 204F1, 214

Mettler: DSC1, DSC2

PE: Diamond 系列

培训内容包括：

- | | | |
|--------------|---|------------|
| 1. MDSC 理论基础 | → | MDSC 的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | MDSC 的基本原理 |
| 3. 数据分析 | | MDSC 的基础试验 |
| 4. 仪器保养 | | MDSC 的典型试验 |
| 5. 注意事项 | | MDSC 的校正 |

仪器培训服务

北京寰宇腾创科技有限公司 TGA培训教程

Part 1
TGA 基础知识

培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C392929.htm> 查询

TGA 仪器培训

热重分析仪（TGA）是一款实验室的常用仪器，我公司可提供不同品牌，不同型号的 TGA 仪器培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户提供全方位的培训服务。

可培训的 DSC 仪器品牌型号如下：

TA: 29XX 系列, Q 系列, Discovery 系列

Netzsch: 209F1, 209F3

Mettler: TGA1, TGA2

PE: TGA400, 600, 800

培训内容包括：

- | | | |
|-------------|---|-----------|
| 1. TGA 理论基础 | → | TGA 的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | TGA 的基本构成 |
| 3. 数据分析 | | TGA 的典型试验 |
| 4. 仪器保养 | | TGA 的校正 |
| 5. 注意事项 | | |

北京寰宇腾创科技有限公司 SDT培训教程

Part 1
SDT 基础知识

培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C394978.htm> 查询

SDT 仪器培训

同步热分析仪（SDT）是一款实验室的常用仪器，我公司可提供不同品牌，不同型号的 SDT 仪器培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户提供全方位的培训服务。

可培训的 DSC 仪器品牌型号如下：

TA: 29XX 系列, Q 系列, Discovery 系列

Netzsch: 449 系列

Mettler: TGA/DSC

PE: STA400

培训内容包括：

- | | | |
|-------------|---|-----------|
| 1. SDT 理论基础 | → | SDT 的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | SDT 的基本构成 |
| 3. 数据分析 | | SDT 的典型试验 |
| 4. 仪器保养 | | SDT 的校正 |
| 5. 注意事项 | | |

北京寰宇腾创科技有限公司 流变培训教程

Part 1
流变学基础知识

培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C392926.htm> 查询

流变仪培训

流变仪 (Rheometer) 是一款测试样品流变性能仪器，我公司可提供不同品牌，不同型号的流变仪培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户id提供全方位的培训服务。

可培训的流变仪品牌型号如下：

TA: AR 系列, Discovery 系列, ARES 系列

Anton Paar: MCR 系列

Thermofisher: RS 系列, MARS 系列

培训内容包括：

- | | | |
|----------|---|-----------------|
| 1. 流变学基础 | → | 流变学的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | 流变仪的基本构成 |
| 3. 数据分析 | | 流变仪的典型试验（稳态，动态） |
| 4. 仪器保养 | | |
| 5. 注意事项 | | 流变仪的校正，保养 |

北京寰宇腾创科技有限公司 DMA培训教程

Part 1
流变学基础知识

培训的详细信息，请登录

<https://www.instrument.com.cn/netshow/S1104640/C393127.htm> 查询

DMA 仪器培训

动态热机械分析仪 (DMA) 是一款测试固态样品流变性的仪器，我公司可提供不同品牌，不同型号的 DMA 仪器培训服务。我们有非常专业的培训团队，培训人员均为硕士学历以上的一线实验人员，有直接操作仪器五年以上的经验，精通仪器操作，数据分析，试验注意事项等不同方面的经验，能够给客户id提供全方位的培训服务。

可培训的 DSC 仪器品牌型号如下：

TA: 29XX 系列, Q 系列, Discovery 系列

Mettler: DMA1

培训内容包括：

- | | | |
|-------------|---|-----------|
| 1. DMA 理论基础 | → | DMA 的基本概念 |
| 2. 上机操作 | | DMA 的基本构成 |
| 3. 数据分析 | | DMA 的典型试验 |
| 4. 仪器保养 | | DMA 的校正 |
| 5. 注意事项 | | |

服务客户

服务科学



寰宇腾创
HUANYUTENGCHUANG

北京寰宇腾创科技有限公司

<https://www.instrument.com.cn/netshow/SH104640/>

保留所有权利 2014-2020

15711138845