

**A d v a n c e d  
C h e m i s t r y  
D e v e l o p m e n t**

**ACD/Labs**

# Программное Обеспечение ACD/Labs для Химических Исследований (краткий обзор)

Представительство в России и СНГ  
тел.: +7 (499) 503-1-035  
e-mail: [acdlabs@chemlabs.ru](mailto:acdlabs@chemlabs.ru)

**Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs)**

Visionary Software



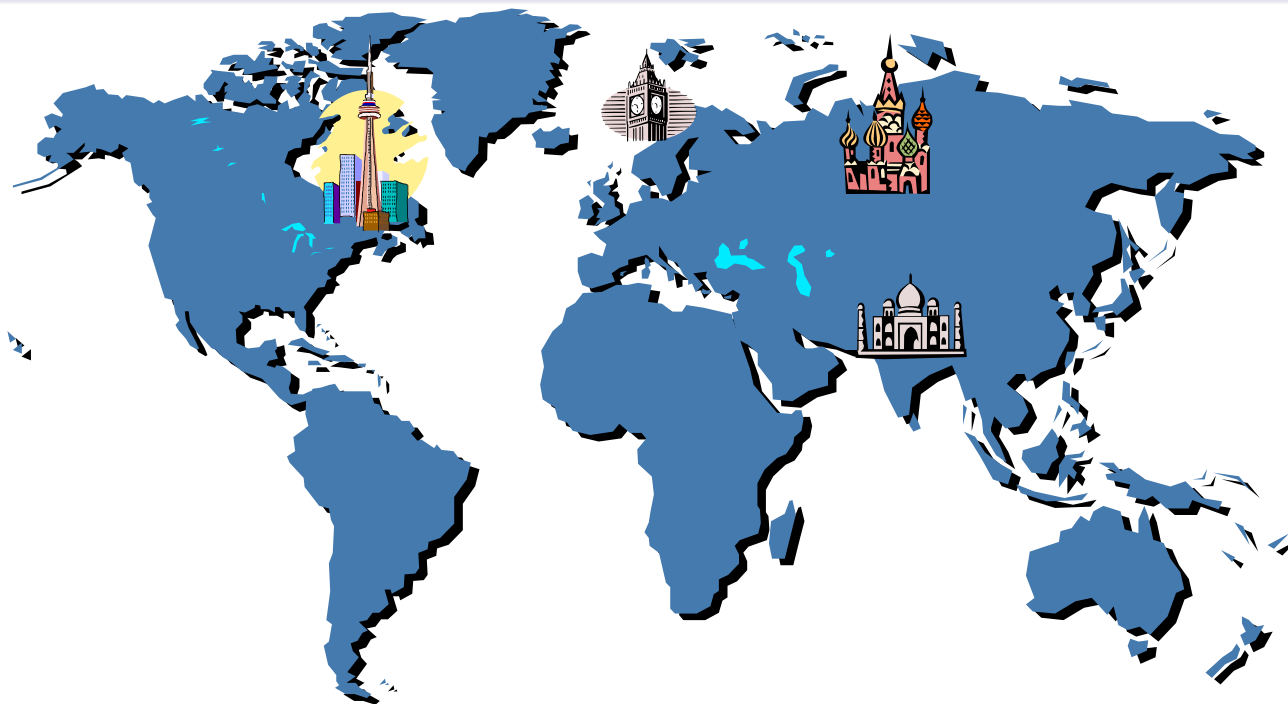
Advancing Research

# Что предлагает ACD/Labs?

- ④ ACD/Labs предоставляет программное обеспечение для поддержки исследований и производства в фармацевтических, био-технологических и химических исследовательских компаниях, а так же для академических исследований
- ④ Наши программы установлены в более чем 600 фармацевтических, био-технологических и химических компаниях и более чем в 650 академических институтах по всему миру



# Где размещается ACD/Labs?



- Компания основана в 1994 году и насчитывает более 145 человек; непосредственная разработка осуществляется в Москве (>60 сотрудников)
- Головной офис располагается в Торонто, Канада с подразделениями в России, Великобритании и Индии
- Всемирная дистрибьюторская сеть ACD/Labs состоит из 15 дистрибьюторов на 5 континентах



# Области применения наших продуктов

## Spectroscopy and Analytical Techniques

### Спектроскопия и Аналитические Технологии

**1D ЯМР** ... <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N, <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P

**2D ЯМР** ... COSY, HETCOR, TOCSY, HMQC/HMBC/HSQC

**Масс-Спектрометрия** ... MS, LC(GC)/MS, MS/MS, LC/DAD

**УФ-Видимые, ИК и Раман** ... NIR, Флуоресценция, Фосфоресценция

**Хроматографические Данные** ... HPLC, GC, CE, GC/IR, LC/DAD

**Другие Аналитические Данные** ... XRPD, TGA, DSC, EPR, IMS,

## PhysChem

### Физико-Химические Предсказания

**Structure Design Suite** (структурный дизайн)

**Physicochemical Parameters** (предсказания свойств)

**Log D, Log P** (гидрофобность)

**pKa** (диссоциация)

**Aqueous solubility** (водная растворимость)

**PSA, FRB, Rule of 5**

## Chemical Naming

### Химическая Номенклатура

IUPAC и CAS номенклатура

Генерация Имени из Структуры

Генерация Структуры из Имени

InChI идентификаторы

## Chemical Databasing

### Химические Базы Данных

Организуйте и управляйте:

Химические Структуры

Реакции

Спектры и Хроматограммы

Аналитическая Информация

Локальные и Удаленные Версии

## Chemical Drawing

### Химический Редактор

ACD/Chemsketch

Изобразите: Молекулы и Реакции

Структуры Маркуша (Markush)

Программа просмотра и оптимизации 3D

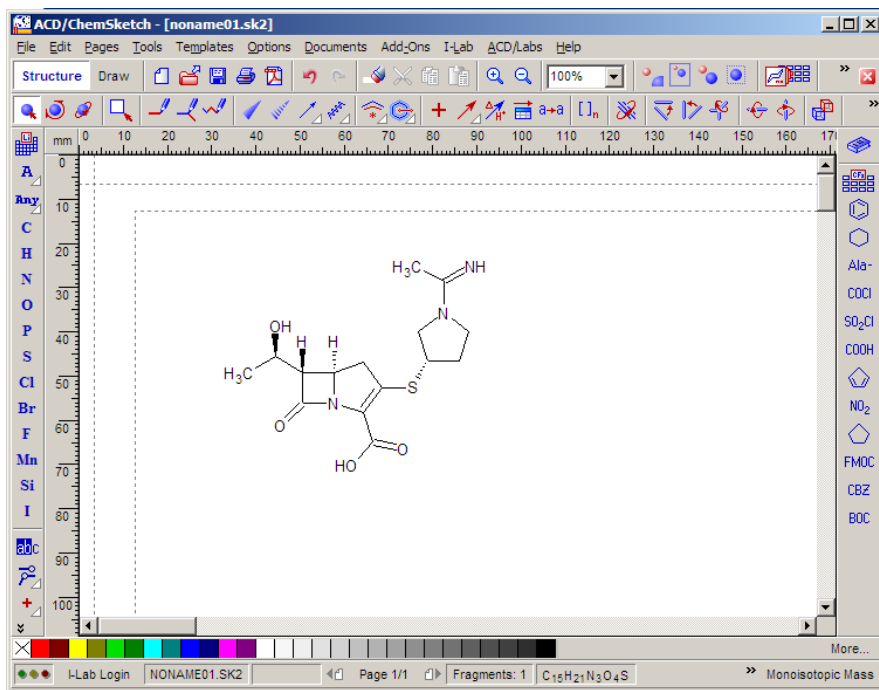
Схематические Диаграммы



# Как мы можем помочь: Работа с Химической Структурой

## ChemSketch:

- Предоставляет **внешний интерфейс** для большинства ACD/Labs приложений



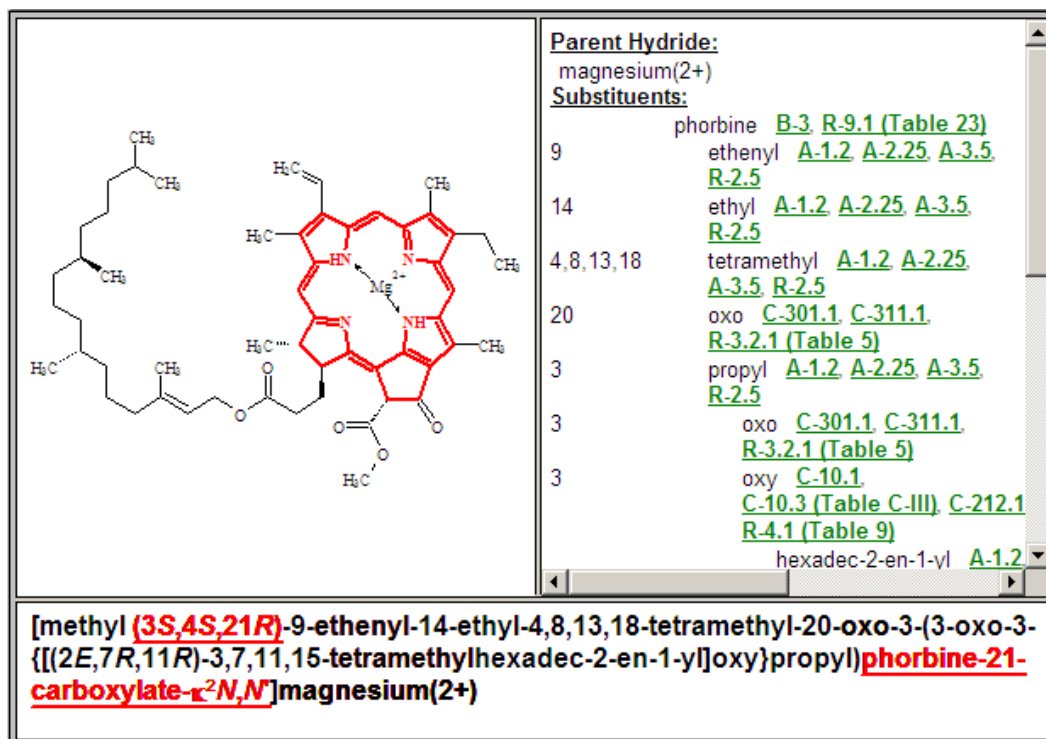
- **Возможность рисовать химическую структуру и реакции и делать предсказания определенных типов**
- **Возможность импортировать файлы различных форматов**
- **Высококачественные отчеты**
- **Хранение структур и реакций в базе данных (ChemFolder) с возможностью поиска по самым различным критериям**



# Как мы можем помочь: Предсказания на основе Структуры

## Химическая Номенклатура:

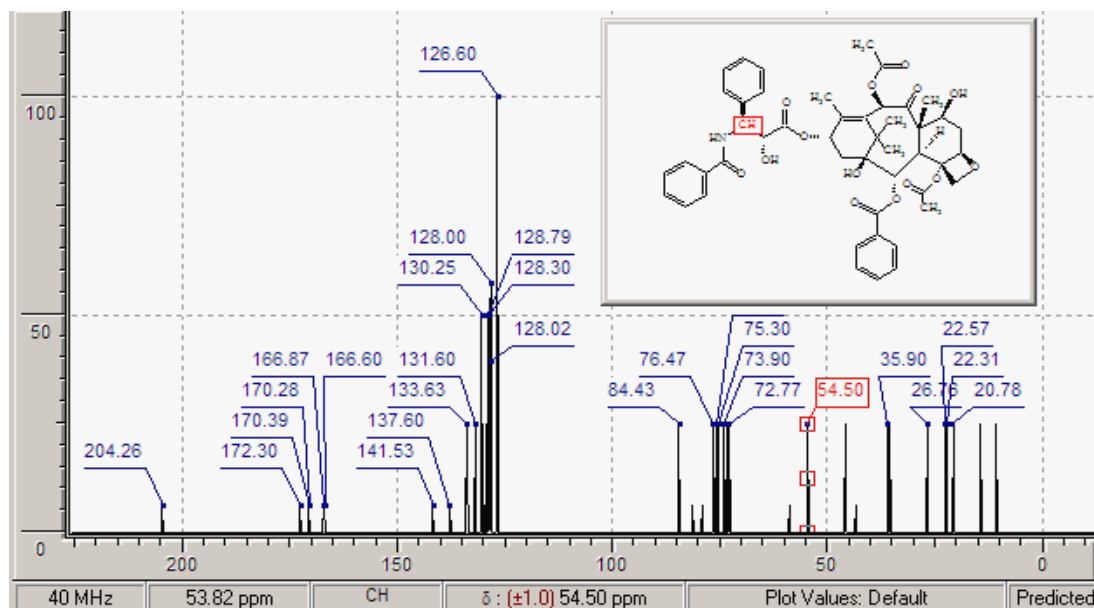
- Надежное генерирование **IUPAC** и **Index** имен. Так же как и **SMILES** и **InChI** текстовых дескрипторов
- Доступен также обратный процесс



# Как мы можем помочь: Предсказания на основе Структуры

## ЯМР:

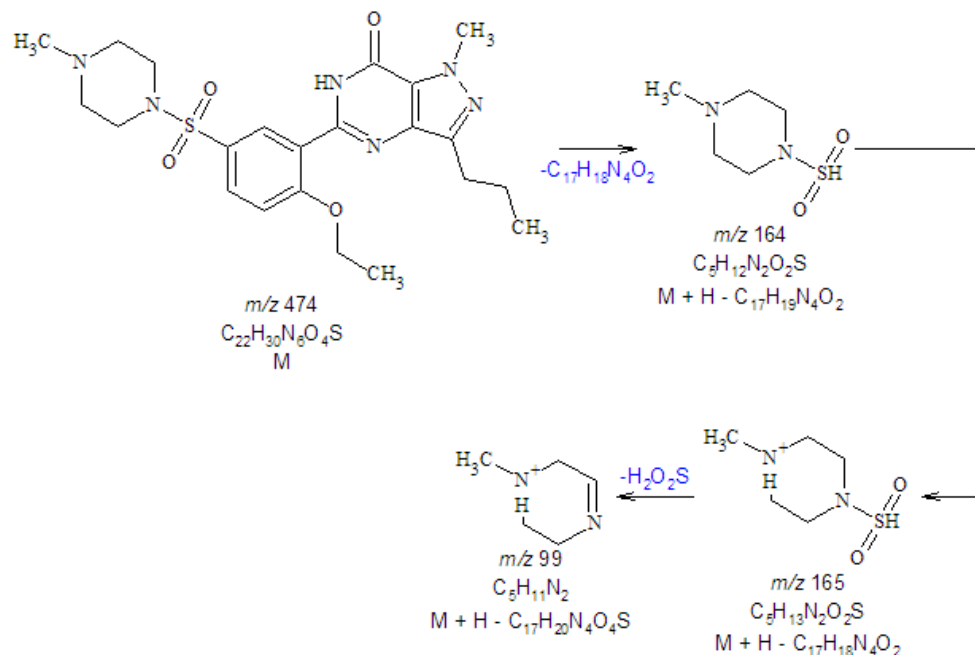
- Возможность предсказывать  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$  и  $^{31}\text{P}$  изотопы
- Работает в сопряжении с инструментами для обработки ЯМР для **автоматизированного контроля спектров (1D и 2D)**
- Возможное использование **пользовательских баз данных** увеличивает точность предсказаний для новых соединений



# Как мы можем помочь: Предсказания на основе Структуры

## Масс Спектрометрия:

- MS/Fragmenter может генерировать список теоретических ионов, исходя из **известных путей фрагментации**
- Полезен для предположения структур из MS/MS экспериментов

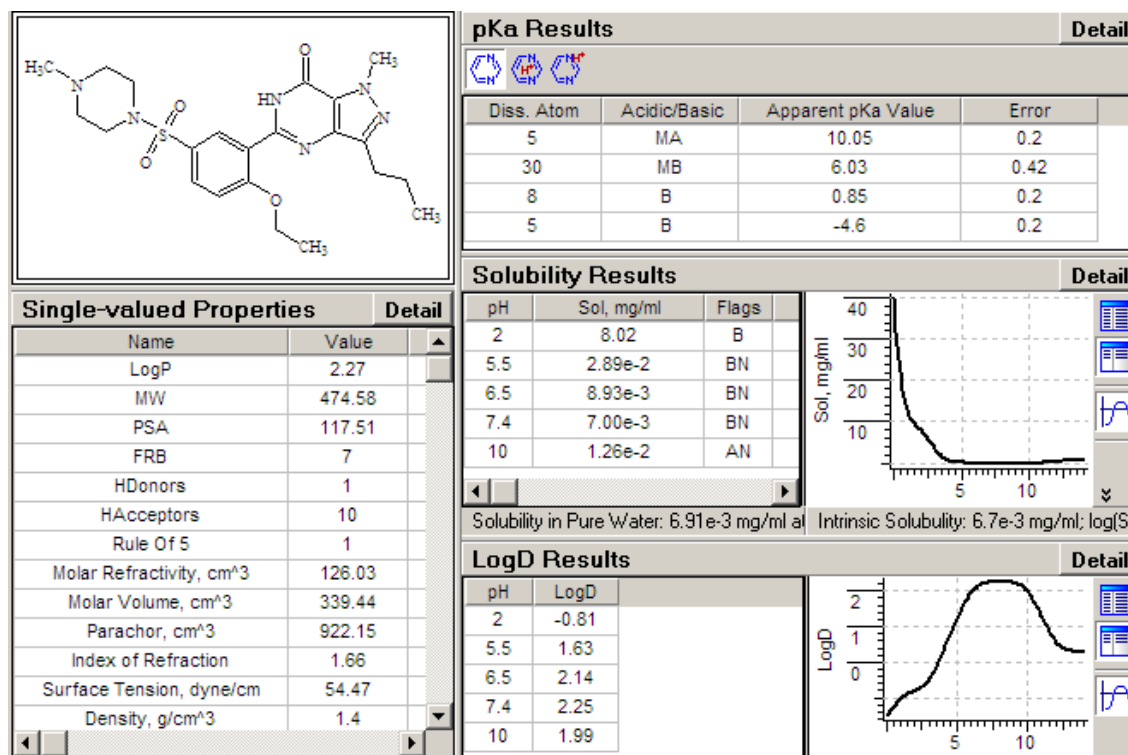




# Как мы можем помочь: Предсказания на основе Структуры

## Физико-химические Параметры:

- Предсказания  $pK_a$ ,  $LogP$ ,  $LogD$  и Solubility (Растворимости)
- Structure Design Suite для ОПТИМИЗАЦИИ КЛЮЧЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ



# Как мы можем помочь: Обработка Аналитических Данных

## Формат нейтральный по отношению к производителю:

- Возможность читать более 85 форматов файлов (и с каждым годом это количество возрастает!)
- Наши программы предлагают **уникальные возможности**, которые отсутствуют в стандартных программных пакетах производителей и делают обработку и интерпретацию данных **легче и быстрее**















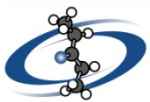








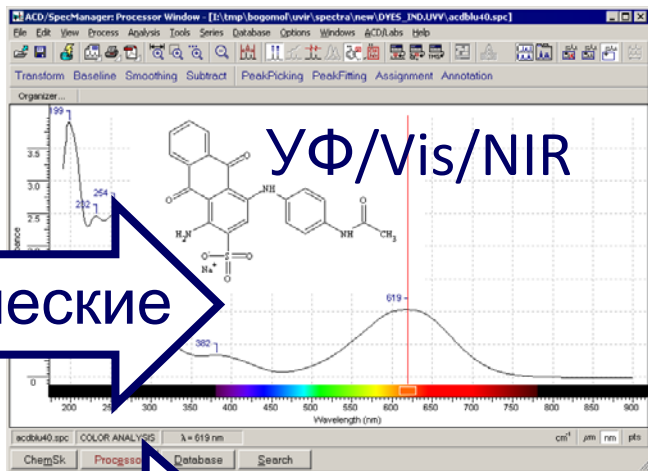




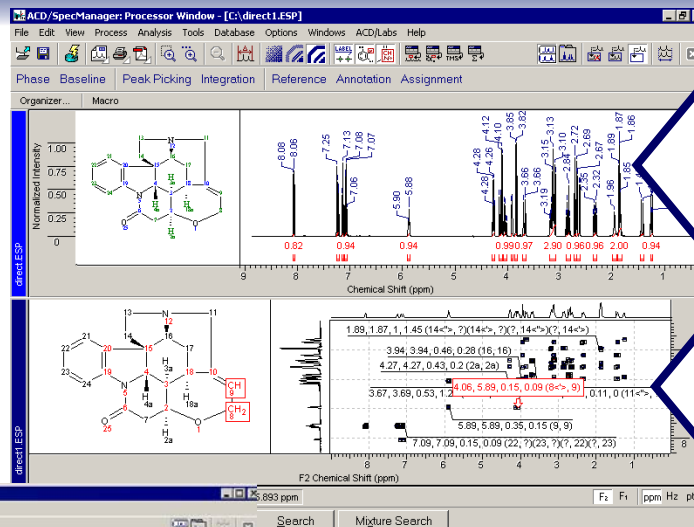
Advanced  
Chemistry  
Development

ACD/Labs

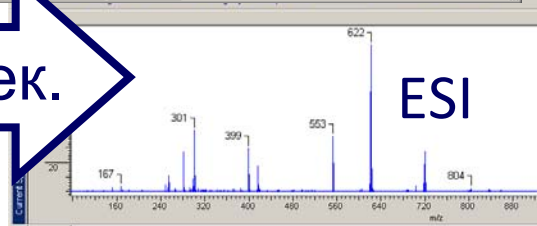
# Как мы можем помочь: Обработка Аналитических Данных



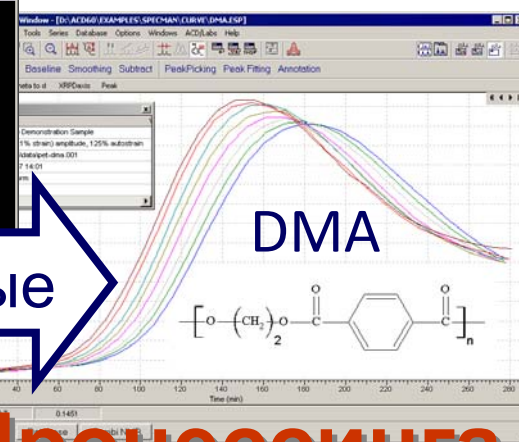
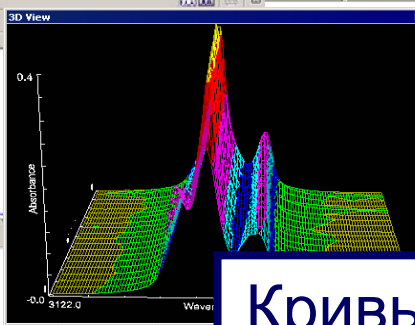
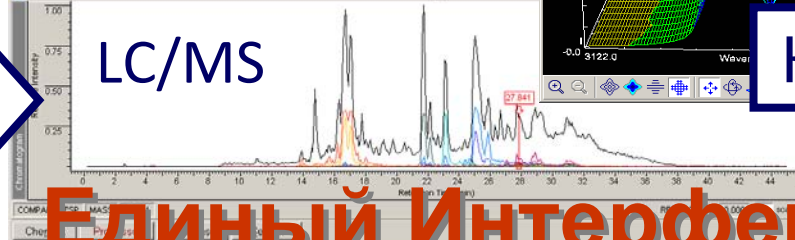
Оптические



Масс. Спек.



Хром.



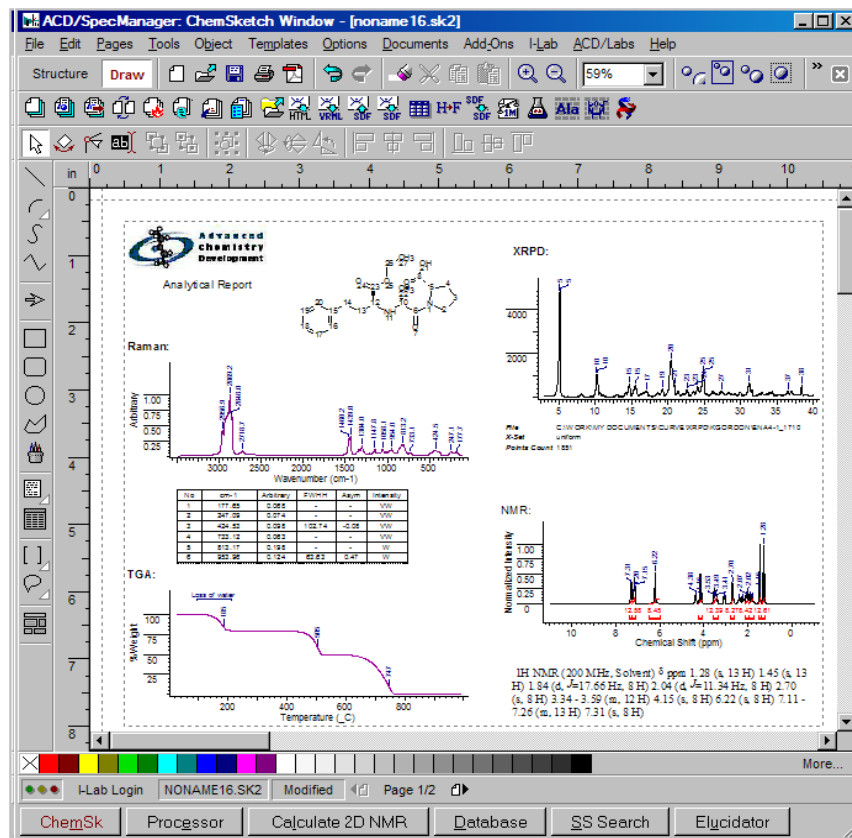
## Единый Интерфейс Процессинга



# Как мы можем помочь: Представление Аналитических Данных

## Расширенные опции для создания отчетности:

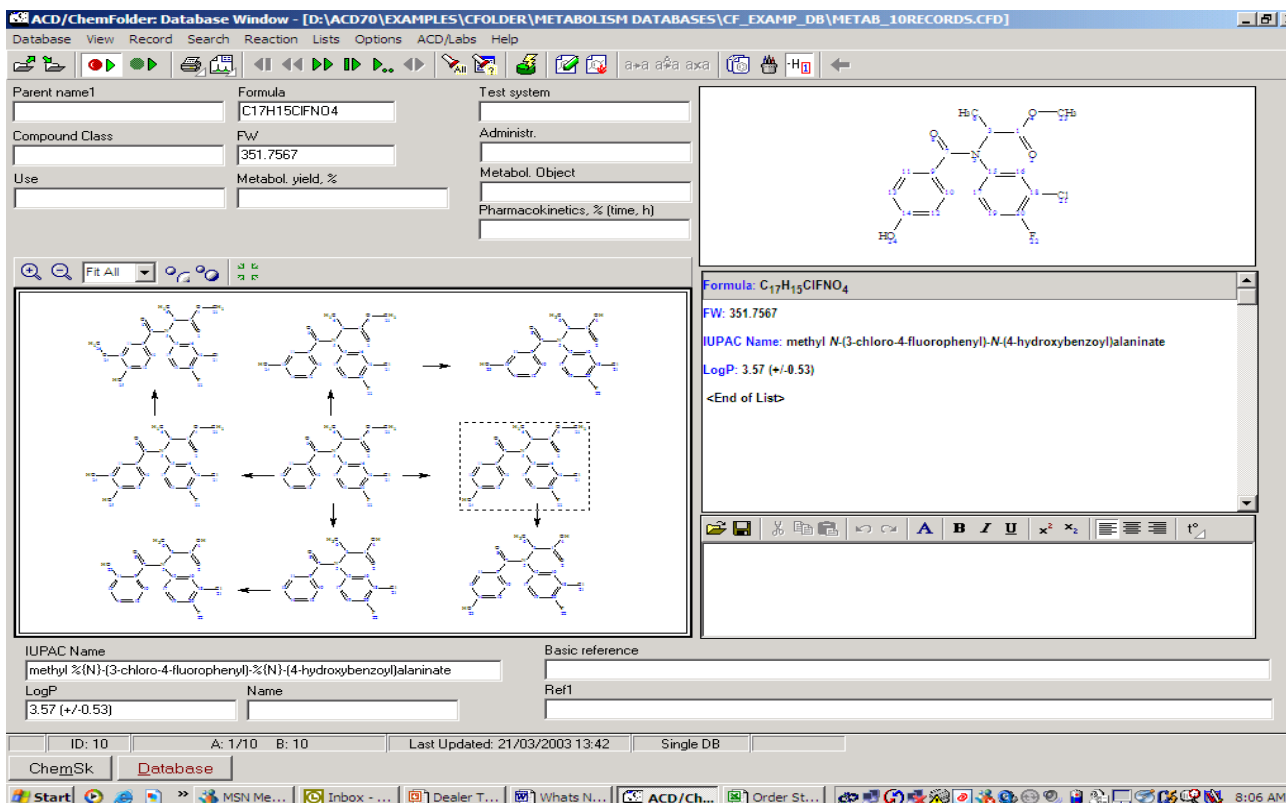
- Шаблоны позволяют пользователю создать **персональный макет отчета**



# Как мы можем помочь: Не-спектральные Базы Данных

## ChemFolder:

- Хранение единичных соединений, химических реакций или био-трансформационных путей



ACD/ChemFolder: Database Window - [D:\ACD70\EXAMPLES\CFOLDER\METABOLISM DATABASES\CF\_EXAMP\_DB\METAB\_10RECORDS.CFD]

Database View Record Search Reaction Lists Options ACD/Labs Help

Parent name1: [ ] Formula: C<sub>17</sub>H<sub>15</sub>ClFNO<sub>4</sub> Test system: [ ]

Compound Class: [ ] FW: 351.7567 Administr.: [ ]

Use: [ ] Metabol. yield, %: [ ] Metabol. Object: [ ]

Pharmacokinetics, % (time, h): [ ]

Fit All

IUPAC Name: methyl  $\alpha$ -(N)-(3-chloro-4-fluorophenyl)- $\alpha$ -(N)-(4-hydroxybenzoyl)alaninate

LogP: 3.57 (+/-0.53)

Basic reference: [ ] Ref1: [ ]

ID: 10 A: 1/10 B: 10 Last Updated: 21/03/2003 13:42 Single DB

ChemSk Database

Start MSN Me... Inbox - ... Dealer T... Whats N... ACD/Ch... Order St... 8:06 AM

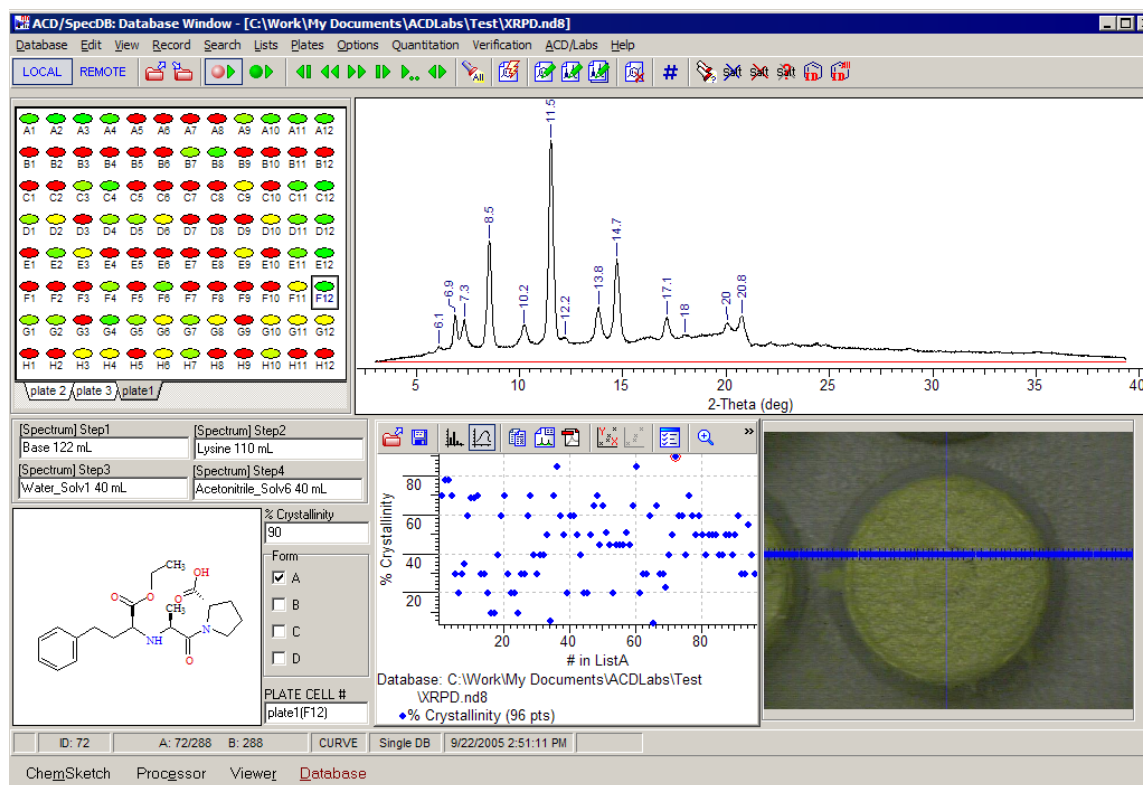




# Как мы можем помочь: Базы Спектров и Аналитических Данных

## Спектральные Базы Данных:

Хранение различных аналитических данных



# Как мы можем помочь: Решения для Предприятий

## Сервер Автоматизации (Automation Server)

- ⦿ Автономное приложение для **автоматического детектирования, обработки и хранения** аналитических данных, которые производятся в больших объемах
- ⦿ Единожды отконфигурированное, работает без сопровождения 24/7

## Программа Управления Технологическим Процессом (Workflow Manager)

- ⦿ Предоставляет интерфейс для **отслеживания образцов** и текущего статуса образца
- ⦿ Часто используется аналитическими департаментами

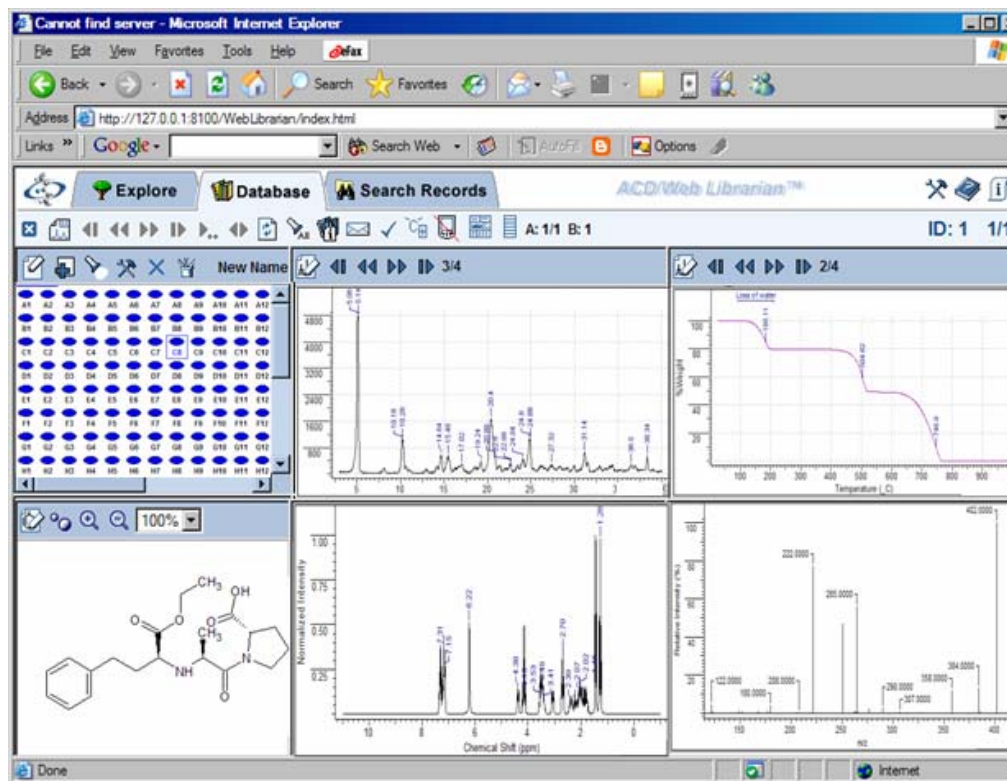




# Как мы можем помочь: Решения для Предприятий

## Программа работы с Веб-Библиотеками (Web Librarian)

- Интерфейс для просмотра Спектральных или Баз Данных ChemFolder через **Internet Browser**



# Кто использует программы ACD/Labs

Глобальные соглашения и инсталляции программ внутри компаний:

- AstraZeneca
- Pfizer
- GSK
- Sanofi Aventis
- Novartis
- Johnson & Johnson
- BMS
- Merck
- Bayer
- Boehringer Ingelheim

Для следующих отраслей:

- Химическая
- Агрохимия
- Фармацевтика/Биотехнологии
- R&D Службы, Медицинское Оборудование
- Высокотехнологичное производство
- Потребительское и промышленное производство
- Пищевые продукты, Вкусы, Запахи
- Правительственные лаборатории, Научно-исследовательские институты
- Университеты

**Официальный дистрибьютор в России и СНГ**

тел.: +7 (499) 503-1-035, e-mail: [acdlabs@chemlabs.ru](mailto:acdlabs@chemlabs.ru)

