

## 25-октября в рамках 4-ой выставки «МЕЖДУНАРОДНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ АССАМБЛЕЯ – ICA-2012. ЗЕЛЕНАЯ ХИМИЯ» прошел презентационный семинар ACD/Labs



довательских центрах указанных компаний. Помимо этого, клиентами ACD/Labs являются более 300 фармацевтических и биотехнологических компаний, 250 химических компаний и более 650 академических, государственных и исследовательских организаций по всему миру.

3 года назад компания начала активное продвижение и на российский рынок.

### ДОКЛАДЫ СЕМИНАРА

Первый доклад «Представление компании ACD/Labs. Презентация новых флагманских программных продуктов: ACD/Spectrus и ACD/Percepta» был представлен Эдуардом Коловановым,



Э.Колованов

Официальным дистрибьютором ACD/Labs в России и СНГ.

В своей презентации господин Колованов кратко остановился на истории компании, после чего внимание было уделено основным направлениям деятельности компании, таким как спектроскопическое подтверждение химических структур, определение компонентов сложных смесей, предсказание спектров ЯМР и масс-фрагментации, предсказание свойств соединений, генерация названий молекул и другие. Большая часть доклада была посвящена рассказу о новых флагманских платформах ACD/Labs: ACD/Spectrus и ACD/Percepta. Формат статьи не позволяет подробно остановиться на описаниях этих уникальных продуктов, и мы лишь кратко передадим их суть, тогда как подробно о них можно узнать как на сайте компании, так и у ее представителей.

ACD/Spectrus: единая информационная платформа для работы с аналитическими данными различной природы (ЯМР, ЖХ/ГХ/МС, УФ, ИК, и многие другие) практически всех форматов мировых фирм-производителей. ACD/Spectrus позволяет анализировать и интерпретировать данные с помощью уникальных встроенных алгоритмов, создавать базы данных и готовить быстрые отчеты. Предназначен для установки на рабочем компьютере каждого химика.

ACD/Percepta: Экспертная система для предсказания ADME и физико-химических свойств, а также Токсичности. Включает в себя обновленный модуль для Скрининга

и Дизайна Лекарств. Содержит обширные базы литературных данных.

Доклад «Программное обеспечение для поиска, выделения и идентификации компонентов сложных смесей органических веществ. От сложной смеси к индивидуальным веществам» представил Виталий Лашин, ведущий специалист ACD/Labs по разработке ПО для MS, LC/MS, GC/MS. Краткое содержание доклада предлагаем ниже.

Предлагается пакет программ для исследователей, применяющих в своей практике хромато-масс-спектрометрический анализ как сложных смесей, так и чистых веществ. Программы могут быть полезны экспертам и новичкам, работающим в различных областях химии, биологии, медицины и фармакологии.

Пакет программ позволяет быстро и эффективно определить состав сложной смеси веществ, например, биологической жидкости, содержащей лекарственные препараты и их метаболиты; а также подтвердить или опровергнуть присутствие определенного вещества в исследуемом объекте. При обнаружении неизвестного вещества возможна его последующая идентификация с применением спектрального поиска в коммерческих и своих собственных базах данных; при отсутствии искомого соединения в библиотеке можно определить его молекулярную формулу. Соответствие предполагаемой структуры спектру можно подтвердить или опровергнуть с помощью автоматического отнесения. При наличии спектра с отнесениями можно легко перенести их на спектры родственных соединений. Специальная программа позволяет увидеть все возможные пути фрагментации и структуры фрагментов.

Следующий доклад представил Михаил Евгеньевич Эляшберг, Профессор, ведущий специалист ACD/Labs. Необходимо отметить, что за разработки, представленные в его докладе «Установление структуры новых органических соединений с помощью экспертной системы ACD/Structure Elucidator на основе ЯМР-спектров» профессор Эляшберг в 2000 году был удостоен Государственной премии РФ. Ниже мы передаем краткое содержание доклада.

Экспертная система Structure Elucidator предназначена для иденти-



М.Эляшберг

фикации новых (впервые синтезированных или выделенных из природных объектов) сложных органических соединений по ЯМР спектрам. Исходными данными являются молекулярная формула и набор одномерных (1D) и двумерных (2D) ЯМР спектров (наличие 2D спектров обязательно). Система использует аксиоматические и фактографические знания (сотни тысяч структурных формул органических соединений и их 1H и 13C ЯМР спектры), а также знания и опыт исследователя.

Программа выдает все без исключения структуры, отвечающие экспериментальным данным. Ответная структура выявляется путем предсказания ЯМР спектров всех сгенерированных структур.

Система широко используется во многих ведущих фармацевтических компаниях (Pfizer, Novartis, Merck, Bayer и т.д.) и университетах мира для идентификации новых природных соединений, продуктов фармацевтической промышленности, загрязнителей лекарств и т.д. С ее помощью установлены структуры, которые не смогли расшифровать крупные ЯМР спектроскописты.

Завершал семинар доклад Андрея Ерина, действительного члена отделения IUPAC по номенклатуре, ведущего специалиста ACD/Labs по разработке ПО «Программные средства ACD/Labs для сбора и визуализации химической информации: от химии до фармацевтики».



А.Ерин

Программы компании ACD/Labs предоставляют широкий набор инструментов для разработки, характеристики, контроля и регистрации химических продуктов от простых химических веществ до готовых лекарственных форм. Разнообразные данные, полученные с помощью программ ACD/Labs, могут быть представлены в едином интерфейсе программы ChemFolder, позволяющей хранить, искать и визуализировать химические структуры, текстовые данные, спектральную и хроматографическую информацию.

Уникальной особенностью программы является возможность хранения многостадийных химических реакций, включая схемы метаболизма. Возможность расчета различных фармакологически значимых свойств, таких как биодоступность, объем распределения и токсичность, позволяющая использовать программу ChemFolder для разработки лекарственных препаратов. Немаловажным дополнением к характеристикам веществ является и возможность автоматической генера-

ции систематических названий соединений.

Универсальность в отношении форматов данных позволяет использовать программы баз данных ACD/Labs в качестве регистрационной системы для сбора и хранения данных внутри компании, а также для подготовки данных для официальной регистрации препаратов.



На семинаре было распространено 40 журналов «Фармацевтические технологии и упаковка»



**ACD/Spectrus** – единая платформа для экспертного анализа, интерпретации и хранения данных ЯМР, МС, ГЖХ, УФ, ИК, ТГА и многих других для использования на рабочем столе каждого химика.

**ACD/Name** – генерация названий химических соединений в соответствии с номенклатурой IUPAC и CAS Index.

**ACD/Percepta** – предсказание ADME, физико-химических свойств и токсичности, скрининг и дизайн лекарств, обширные базы данных.

**ACD/AutoChrom** – автоматическая разработка метода хроматографического разделения сложных смесей.

**ACD/Structure Elucidator** – определение неизвестной химической структуры из одномерных и двумерных ЯМР спектров и данных МС, УФ и ИК.

