

# ACD/Labs для Образования и Университетских Исследований в Области Химии

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 обучения и 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



# Существующие возможности

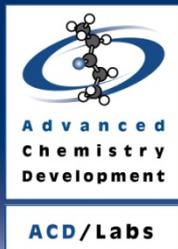
- ⊕ Скидки от 50 до 90% для научных и учебных заведений
- ⊕ ACD/ChemSketch – лицензия для учебного заведения
- ⊕ Лицензии для учебного заведения на любой пакет ПО
- ⊕ Обучение ЯМР Спектроскопии
- ⊕ ACD/Labs Онлайн (доступ через интернет/интранет)
- ⊕ ACD/Labs Онлайн – лицензия для всех учебных заведений региона или страны
- ⊕ Ресурсы для обучения – бесплатные версии ПО, учебные пособия по применению ПО, веб-ресурсы, и многое другое!



# Мировой опыт. Реализованные проекты.

- ④ **ACD/ChemSketch – лицензия для учебного заведения**
  - около 300 учебных заведений по всему миру, включая КубГУ (Кубанский Государственный Университет, Краснодар) и НГУ (Новосибирский Государственный Университет)
- ④ Возможна лицензия как на бесплатную версию ACD/ChemSketch (присутствует ряд ограничений функциональности), так и на коммерческую (со значительной скидкой)





# ACD/ChemSketch. Отзывы преподавателей

***Leonard Houser II***

***Преподаватель Химии, Redwood High School, CA***

*“Студентам нравится ChemSketch и я надеюсь содействовать его внедрению на нашем факультете, обучая преподавателей тому, как его можно использовать в их занятиях”*

*“The students like ChemSketch and I hope to promote the use of it throughout the department, by teaching teachers how to use it in their lessons”*



# Мировой опыт. Реализованные проекты.

## Лицензии для Учебных Заведений на другое ПО

➤ Сентябрь 2004. **Университет Оксфорда**. ПО для ЯМР. ACD On-line

*Tim Claridge, Руководитель ЯМР подразделений на Факультете  
Органической Химии*

*“Доступ к ПО ACD/Labs предоставит ценный химический ресурс, как для студентов, так и для их руководителей, и мы полагаем, что данное ПО окажется превосходным исследовательским и обучающим инструментом в академической среде. Множество возможностей, предоставляемых этим ПО, должны улучшить эффективность и точность работы студентов и научных сотрудников, а также сократить время на извлечение данных, получаемых на нашем спектроскопическом оборудовании.”*



# Мировой опыт. Реализованные проекты.



## Лицензии для Учебных Заведений на другое ПО:

- Февраль 2005. **Университет Кембриджа**. ПО для Дизайна Химических Структур для исследования Природных Веществ
- Август 2005. **Германский Институт Полимеров**. ПО для ЯМР для исследования полимеров (**полимеры – объект нано-технологий!**)
- Август 2005. Центр Химической Методологии и Создания Библиотек Данных **Университета Бостона**. ПО для ЯМР, Масс-спектрометрии, Хроматографии и Автоматизации Лабораторных Исследований
- Январь 2006. Департамент Химии и Химической биологии **Гарвардского Университета**. ПО для ЯМР

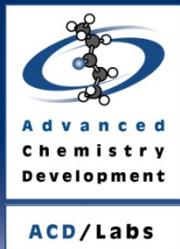


# Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

## Система Управления Аналитическими Данными (СУАД):

-  Автоматическая обработка экспериментальных аналитических данных, Анализ, и Управление
-  Быстро формирует взаимосвязи между химической структурой и их спектрами, хроматограммами, и свойствами для создания, выявления и сохранения химических знаний
-  Автоматическое создание Отчетов





# Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

- 20 копий ACD/MS Manager Suite и  
20 копий ACD/2D NMR Manager Suite
- Программа для создания Технологического Процесса -  
Workflow Manager
- Сервер Автоматизации - Automation Server
- Серверный вариант Базы Данных - SpecDB Enterprise
- Годовая Поддержка ПО
- \$76,000 + консультационные услуги специалистов



# Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

- ⦿ **Стоявшие проблемы (решены с внедрением ПО):**
  - ⦿ Слишком много данных
  - ⦿ Отсутствие централизованного хранилища данных
  - ⦿ Невозможность совместного использования данных и отслеживания природы их появления
  - ⦿ Отсутствие стандартных процедур обработки данных среди химиков и для различных техник
  - ⦿ Избыточность данных



# Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

- ☉ **CMLD-BU располагает 6-ю инструментами**
  - ☉ Agilent 6890 или 6850 под управлением GC Chemstation V.01.03
  - ☉ Waters LC-MS под управлением Masslynx 4.1
  - ☉ Waters Breeze под управлением программы Breeze (похоже на Empower)
  - ☉ Varian Mercury Plus под управлением VnmrJ 1.1D на платформе Red Hat Enterprise Linux WS 4
  - ☉ Nicolet Nexus 670 FT-IR ESP или Nicolet Nexus 470 FT-IR ESP
  - ☉ Waters ACQUITY UPLC



# Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

## СУАД от ACD/Labs предоставляет Бостонскому Университету:

-  Возможность зачитывать любые данные
-  Единый интерфейс обработки данных, полученных при помощи различных экспериментальных методик
-  Исчерпывающий список основных процедур обработки данных
-  Интеграция с химической структурой, позволяющая полное или частичное, ручное или автоматическое соотнесение структуры и спектров
-  Простая отчетность
-  Доступ к извлеченным знаниям в среде с полнофункциональным структурным, спектральным и текстовым поиском
-  Автоматизированная обработка данных круглосуточно



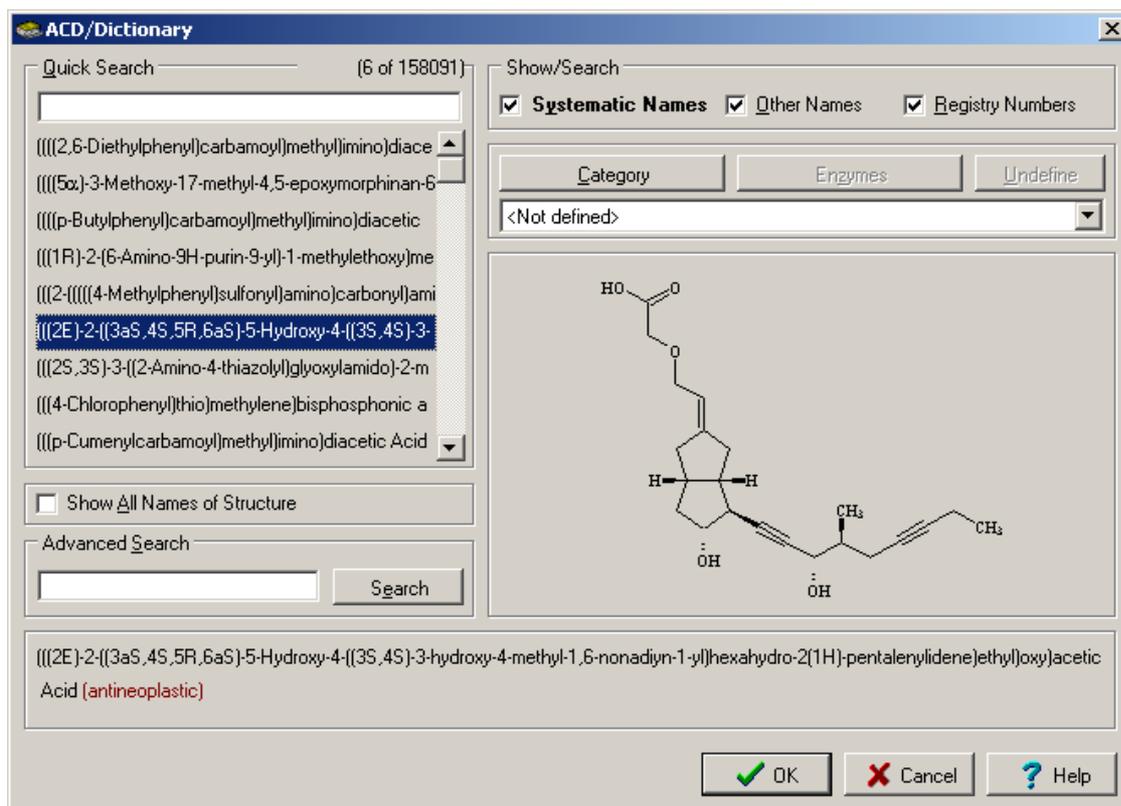
# Обучение ЯМР Спектроскопии

- Моделируйте одномерные и двумерные (1D/2D) эксперименты ЯМР, используя предсказательные ЯМР программы
  - Быстро и легко создавайте современные наглядные пособия и проверочные задания и тесты
  - Нет необходимости снова и снова использовать надоевшие примеры из учебников
  - Gene Mazzola и Lyle Isaacs из Университета Мериленда



# Обучение ЯМР Спектроскопии

- Доступ к >158,000 химических имен с предварительно нарисованными химическими структурами с ACD/Dictionary



ACD/Dictionary

Quick Search (6 of 158091)

[[[(2,6-Diethylphenyl)carbamoyl)methyl]imino]diace  
 [[[(5 $\alpha$ )-3-Methoxy-17-methyl-4,5-epoxymorphinan-6  
 [[[(p-Butylphenyl)carbamoyl)methyl]imino]diacetic  
 [[[(1R)-2-(6-Amino-9H-purin-9-yl)-1-methylethoxy]me  
 [[[(2-[[[(4-Methylphenyl)sulfonyl]amino)carbonyl]ami  
**[[[(2E)-2-[(3aS,4S,5R,6aS)-5-Hydroxy-4-[(3S,4S)-3-**  
 [[[(2S,3S)-3-[(2-Amino-4-thiazolyl)glyoxylamido]-2-m  
 [[[(4-Chlorophenyl)thio)methylene]bisphosphonic a  
 [[[(p-Cumenyl)carbamoyl)methyl]imino]diacetic Acid

Show/Search

Systematic Names  Other Names  Registry Numbers

Category Enzymes Undefine

<Not defined>

Chemical structure: CCCC#CC(C)C(O)C(O)C1=CC=C2C3=CC=CC=C3C(O)C2=C1

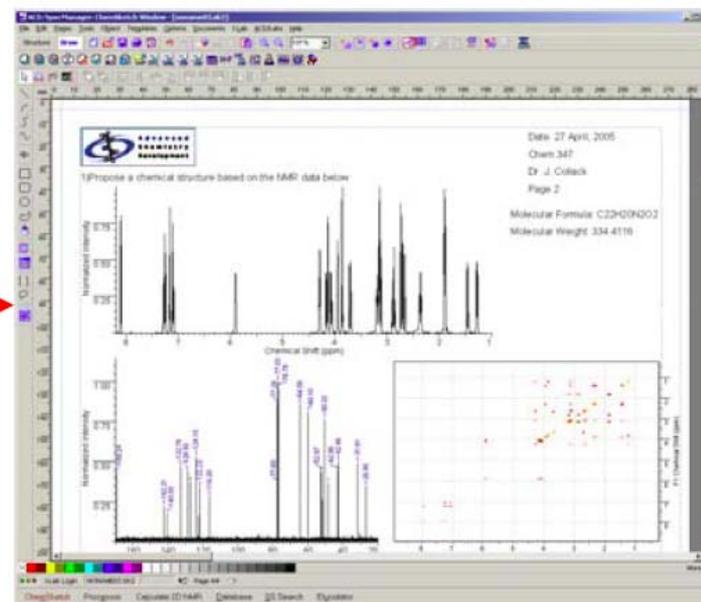
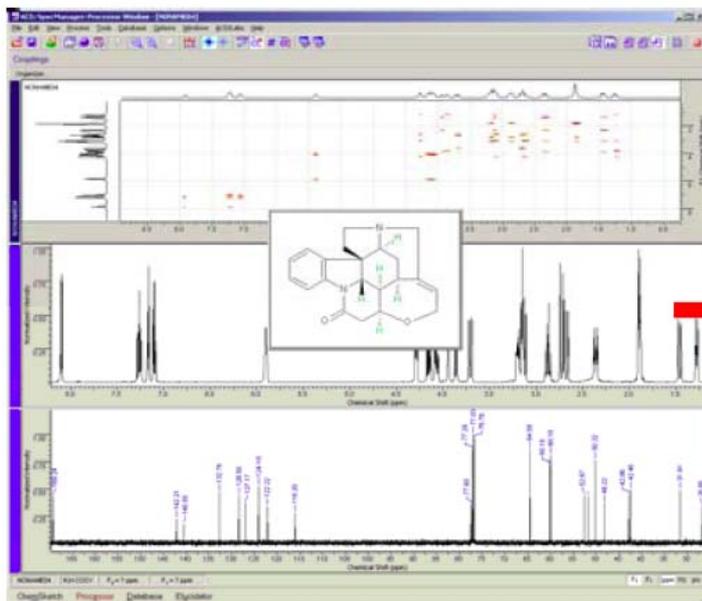
[[[(2E)-2-[(3aS,4S,5R,6aS)-5-Hydroxy-4-[(3S,4S)-3-hydroxy-4-methyl-1,6-nonadiyn-1-yl]]hexahydro-2(1H)-pentalenyldiene)ethyloxy]acetic Acid (antineoplastic)

OK Cancel Help



# Обучение ЯМР Спектроскопии

- Предсказывайте различные спектры
- Быстро проводите анализ и соотнесение



[http://www.acdlabs.com/download/app/nmr/teaching\\_2dnmr.pdf](http://www.acdlabs.com/download/app/nmr/teaching_2dnmr.pdf)



# Мировой опыт. Реализованные проекты.

## 🌐 ACD/Labs Онлайн

Лицензия на использование во всех высших учебных заведениях Великобритании в течение 4-х лет (оператор Daresbury Laboratory)

- Доступ к предсказаниям спектров, названий, а также различных физико-химических свойств химических структур
- Доступ осуществляется через внесение IP сервера учебного заведения в соответствующий список доступа
- Стоимость лицензии >100,000 USD в год.
- **Каждый** студент, аспирант или профессор получает доступ к предсказаниям, используемым в крупнейших компаниях мира
- **Дополнительно** в системе ACD/Labs Онлайн возможен доступ к спектральным базам, а также базам с физико-химическим свойствам

# Что такое ACD/Labs Онлайн

- ☉ Интернет Сервис, позволяющий всем учащимся и профессорам получить легкий и быстрый доступ к нашим химическим базам данных и предсказательным программам
- ☉ Онлайн доступ к :
  - ☉ ЯМР предсказаниям и базам данных
    - $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ , &  $^{31}\text{P}$
  - ☉ Физико-химические предсказания и базы данных
    - $pK_a$ ,  $\text{LogP}$ ,  $\text{LogD}$ , Водная растворимость, Температура кипения и Давление пара, Коэффициент Адсорбции и Биоконцентрационный Фактор и др...
  - ☉ Предсказания Химических Названий
    - IUPAC, Index (CAS-like), и Name-to-Structure



## Университет Мичигана

*“Как наши инструктора, так и наши студенты, находят эти программы очень полезными для их домашних работ по соотнесению и надеются получить пользу от расширившихся возможностей в обучении”*

*“Both our instructors and students found these programs very useful in their homework assignments and will benefit from the enhanced learning opportunities”*

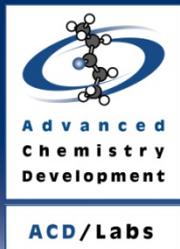


## Университет Торонто

*“Существенные выгоды для исследовательских групп быстро становятся очевидными, однако истинными выигравшими стали студенты, которые получили очень мощный и легкий в использовании инструмент, который помогает им визуализировать и понимать многие трудные для восприятия идеи”*

*“The obvious benefits to individual research groups is readily apparent, however the true winners are the undergraduate students who have gained a very powerful and easy to use tool to help them in visualizing and comprehending many challenging concepts”*





# ACD/Labs Онлайн – отзывы пользователей

## Выпускники, использующие I-Lab Факультет Химии и Химической Инженерии, Стенфордский Университет

*“Я не могу поверить, как это замечательно!”*

*“Когда я учился, не было ничего подобного. Если бы было, это сделало бы многие вещи гораздо проще”*

*“I cannot believe how wonderful this is!”*

*“There was nothing like this when I was an undergrad. If there had been, it would have made things so much easier ”*



# ACD/Labs интернет ресурсы



[Reactive Reports](#) – читайте последний номер нашего химического интернет-журнала



[Chemistry Education Centers](#) – посмотрите ссылки на институты, связанные с химией



[Internet Chemistry Directories](#) – найдите полезные ссылки по вашим интересам



[Demo Movies](#) – скачайте живые демонстрации наших программ, со звуком (англ.), графикой и анимацией



[ACD/Labs Online Service](#) – платный доступ к спектральным и физико-химическим предсказаниям и базам данных



# Официальный дистрибьютор ACD/Labs в России и СНГ

тел.: +7 (499) 503-1-035

e-mail: [acdlabs@chemlabs.ru](mailto:acdlabs@chemlabs.ru)

