



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

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

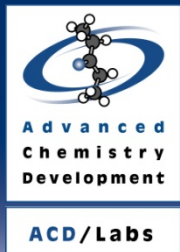
- ⊕ Скидки от 50 до 90% для научных и учебных заведений
- ⊕ ACD/ChemSketch – лицензия для учебного заведения
- ⊕ Лицензии для учебного заведения на любой пакет ПО
- ⊕ Обучение ЯМР Спектроскопии
- ⊕ ACD/Labs Онлайн (доступ через интернет/интранет)
- ⊕ ACD/Labs Онлайн – лицензия для всех учебных заведений 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

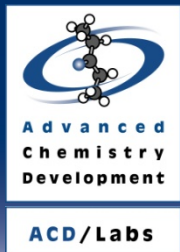


Система Управления Аналитическими Данными (СУАД) для Бостонского Университета

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

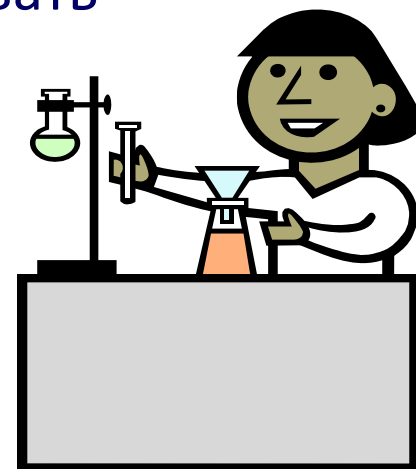
СУАД от ACD/Labs предоставляет Бостонскому Университету:

-  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



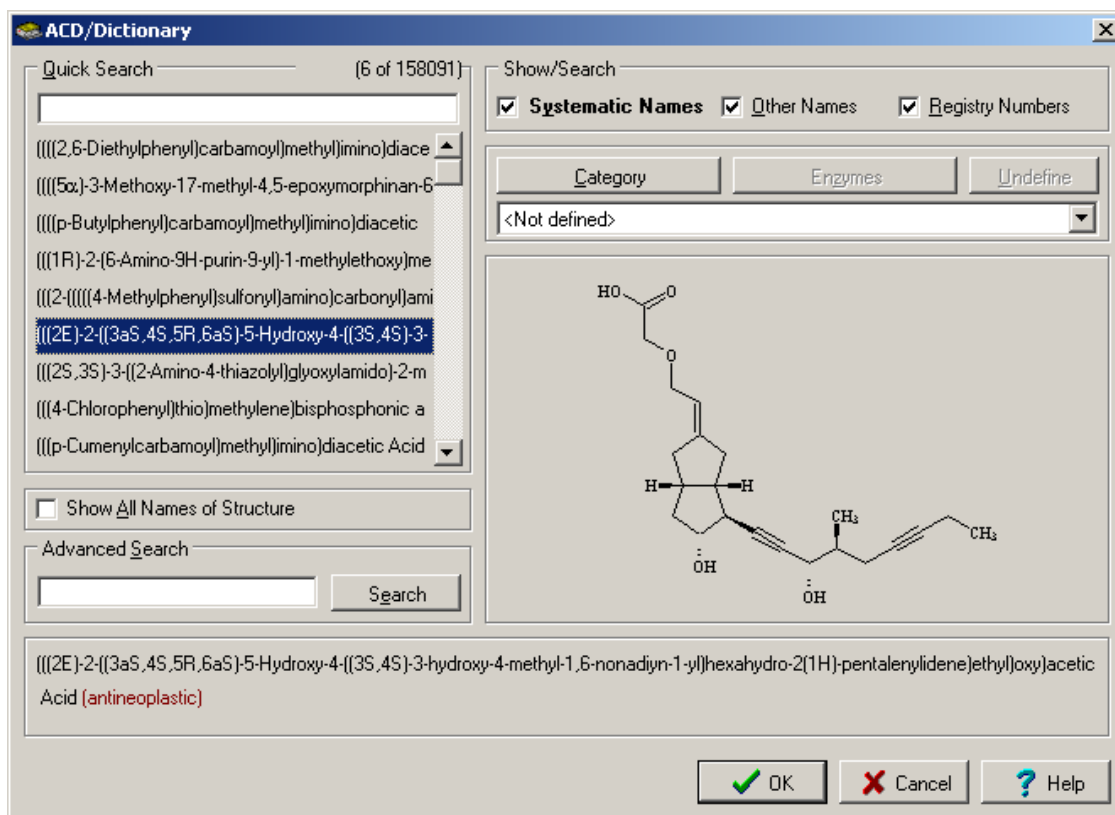
Обучение ЯМР Спектроскопии

- 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 α)-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

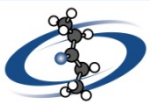
Category Enzymes Undefine

<Not defined>

Chemical structure: CCCC#CC(C)C(O)C#CC12CC3C(C1)C(O)C2

(((2E)-2-((3aS,4S,5R,6aS)-5-Hydroxy-4-((3S,4S)-3-hydroxy-4-methyl-1,6-nonadiyn-1-yl)hexahydro-2(1H)-pentalenylidene)ethyl)oxy)acetic Acid (antineoplastic)

OK Cancel Help

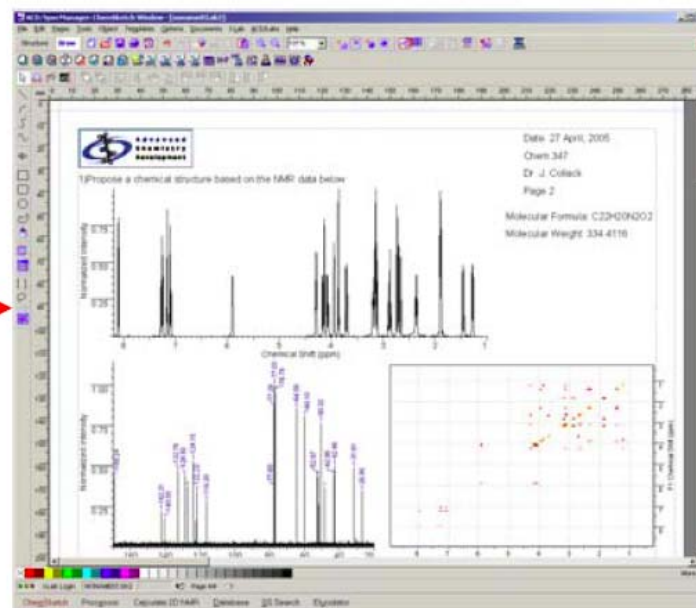
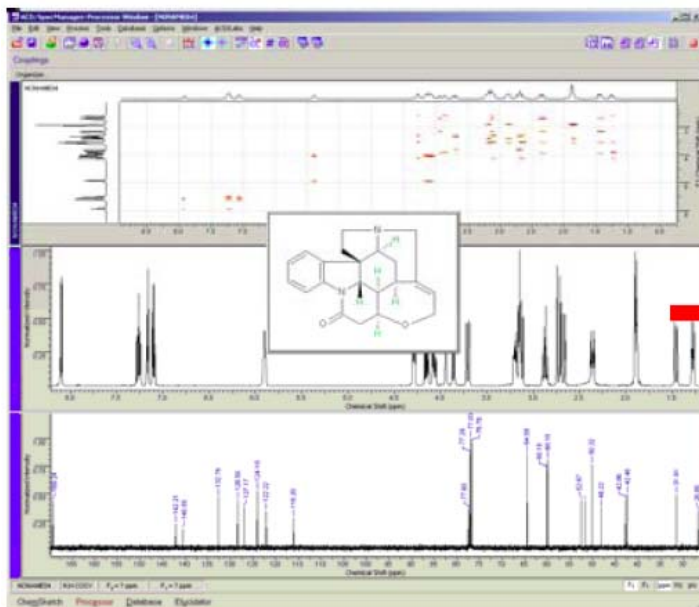


Advanced
Chemistry
Development

ACD/Labs

Обучение ЯМР Спектроскопии

- Предсказывайте различные спектры
- Быстро проводите анализ и соотнесение



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
 - ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , & ^{31}P
 - ☉ Физико-химические предсказания и базы данных
 - pK_a , LogP , 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”

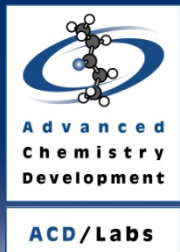


Университет Торонто

“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

