



Каталог Программного Обеспечения ACD/Labs

РАЗДЕЛЫ:

1. ХИМИЧЕСКИЙ РЕДАКТОР И БАЗЫ ДАННЫХ	1
2. ХИМИЧЕСКАЯ НОМЕНКЛАТУРА	1
3. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ	2
• ЯМР	2
• МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ И ХРОМАТОГРАФИЯ	4
• УФ-ИК СПЕКТРОСКОПИЯ И ДРУГИЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ	6
4. ПРЕДСКАЗАНИЕ ADME, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ТОКСИЧНОСТИ	6
СИСТЕМНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ	8

1. ХИМИЧЕСКИЙ РЕДАКТОР И БАЗЫ ДАННЫХ

Программное обеспечение для рисования и хранения химических структур, реакций, схем и диаграмм, а также вычисления ряда свойства молекул. Возможность создавать профессиональные отчеты и презентации. Поддерживаются требования основных научных журналов. В программное обеспечение для ведения баз данных интегрированы все аспекты химии, что позволяет ученым организовать в электронном виде и управлять сотнями и тысячами структур и реакций, создать 2D баркоды структур, группировать и анализировать самые разнообразные химические данные.

ACD/ChemSketch + Dictionary [1-01]

Всемирно известный химический редактор, включающий возможности генерации химических имен согласно номенклатуре IUPAC и InChI кодов для коммерческого использования. Содержит ACD/Dictionary – уникальную библиотеку 29,000 часто используемых химических и биологических молекул с более чем 158,000 тривиальных, торговых и систематических названий.

Предоставляет внешний интерфейс для большинства ACD/Labs приложений.

ACD/Chem Workbook [1-03]

Превосходный инструмент для создания пользовательских баз данных химических структур, свойств, экспериментальных данных, реакций, схем метаболизма (био-трансформационных путей) и управления ими. Поставляется с ACD/ChemCoder – уникальным модулем для кодирования химических структур вместе с ассоциированными данными в двумерные баркоды и обратно.

Продукт стал заменой базы данных ACD/ChemFolder.

(Включает также: ACD/ChemSketch)

2. ХИМИЧЕСКАЯ НОМЕНКЛАТУРА

Ведущие химические и фармацевтические компании по всему миру используют продукты от ACD/Labs для генерирования систематических химических названий молекул, отличающихся исключительным качеством и соответствием с правилами номенклатуры IUPAC и CAS Index. Программы доступны в Standalone и Batch версиях, соответствуют InChI™ протоколу.

ACD/Name [2-01]

Программа позволяет генерировать названия химических соединений согласно различным стандартам номенклатуры (IUPAC, Index (CAS), IUBMB) внутри одного программного интерфейса, предоставляет доступ к подробному протоколу называния соединения в соответствии с правилами IUPAC, со ссылками на соответствующие рекомендации IUPAC, упрощает ручную проверку и объяснение сгенерированных названий. Ускоряет литературный поиск и понимание научных текстов, используя преобразования структура>название и название>структура. Поддерживаемые языки: английский, немецкий, французский и еще 7 европейских языков.



ACD/Name Chemists' Version [2-02]

Программа позволяет одним нажатием кнопки добавлять систематические IUPAC названия к химическим структурам и создавать химические структуры из систематических, торговых и тривиальных имен внутри интерфейса ACD/ChemSketch с использованием всей мощи предсказательных алгоритмов ACD/Name. *ACD/ChemSketch приобретается дополнительно.*

ACD/Name Batch [2-03]

Вариант ACD/Name, работающий в пакетном режиме для называния крупных библиотек химических соединений на платформе Windows или Linux.
(Включает также: ACD/Name)

ACD/Name-To-Structure Batch [2-05]

Вариант ACD/Name, позволяющий преобразовывать в пакетном режиме крупные библиотеки систематических, торговых и тривиальных имен в химические структуры на платформе Windows или Linux.

3. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Компания ACD/Labs разрабатывает программное обеспечение, которое интегрирует химическую структуру с аналитической информацией — ChemAnalytics®. ACD/Labs предлагает производитель-нейтральные программные продукты, которые помогают поставить на поток обработку и анализ теоретически любых типов аналитических данных от любых популярных моделей приборов, используемых в лабораториях.

ACD/Spectrus Processor [3-100]

Позволяет обрабатывать аналитические данные различных типов (NMR, LC/MS, UVIR и многие другие) практически всех известных форматов различных фирм-производителей на единой платформе, а также анализировать и интерпретировать их с помощью уникальных встроенных алгоритмов. Объединяет в себе мощь всей линейки аналитических процессоров ACD/Labs версии 12.

ACD/ChemAnalytical Workbook [3-102]

Включает в себя ACD/Spectrus Processor, а также ACD/Spectrus DB – полнофункциональную Базу Данных для хранения аналитических данных, таких как спектры, хроматограммы, и прочие аналитические кривые, метаданных, а также химических структур и реакций – например, схем метаболизма. Является компромиссным вариантом для тех, кому не нужны экспертные инструменты анализа данных, но необходимо создавать собственные Базы Данных с аналитической информацией.

ACD/Spectrus Workbook [3-101]

Помимо инструментов, включенных в ACD/Spectrus Processor для обработки и анализа NMR, LC/MS, UVIR и многих других данных, содержит ряд специфичных инструментов для их экспертной интерпретации. Объединяет инструменты обработки данных с полнофункциональной спектральной базой данных (ACD/SpecDB) с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска.
(Содержит: ACD/NMR Workbook, ACD/MS Workbook Suite, ACD/Chrom Workbook, ACD/Optical Workbook, ACD/Curve Workbook)

ЯМР

ACD/Labs предлагает программное обеспечение для ЯМР, которое может предсказывать теоретические сдвиги и константы, обрабатывать и сохранять в базах данных экспериментальные спектры, а также помочь с их интерпретацией и выяснением химической структуры, для увеличения производительности ЯМР лабораторий.

ACD/NMR Workbook Suite [3-26]

Комплект программ, содержащий все модули ACD/Labs для предсказания ЯМР спектров, а также для работы с экспериментальными спектрами ЯМР.
(Состоит из: ACD/NMR Workbook, ACD/2D NMR Predictor, ACD/CNMR Predictor, ACD/HNMR Predictor, ACD/FNMR Predictor, ACD/NNMR Predictor и ACD/PNMR Predictor)

ACD/NMR Workbook [3-06]

Комплект программ для обработки, анализа, интерпретации и предоставления в отчетах 1D и 2D (COSY, HETCOR, TOCSY, и HMQC/HMBC/HSQC...) экспериментальных ЯМР данных в рамках одного интерфейса с полнофункциональной спектральной базой данных (ACD/SpecDB) с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска.
(Состоит из: ACD/1D NMR Manager и ACD/2D NMR Manager)

ACD/HNMR Predictor [3-07]

Позволяет быстро и точно предсказывать ¹H ЯМР спектры, химические сдвиги и константы взаимодействия для практически любой органической химической структуры.



ACD/HNMR DB Add-on [3-08]

Предоставляет доступ к внутренней ^1H ЯМР базе данных, используемой в наших ЯМР предсказаниях, и содержащей более 1,666,000 экспериментальных химических сдвигов и 589,000 констант взаимодействия для более чем 202,000 структур. Включает оригинальные ссылки, растворители, частоты, ЯМР методы, молекулярные формулы, молекулярные веса, IUPAC и тривиальные названия. Содержит удобные инструменты для поиска, просмотра и печати.

ACD/HNMR Predictor & DB Add-on [3-09]

Комплект программ для предсказания и поиска в базе ^1H ЯМР спектров.
(*Стоимость из: ACD/HNMR Predictor и ACD/HNMR DB Add-on*)

ACD/CNMR Predictor [3-10]

Позволяет быстро и точно предсказывать ^{13}C ЯМР спектры, химические сдвиги и константы взаимодействия для практически любой органической химической структуры.

ACD/CNMR DB Add-on [3-11]

Предоставляет доступ к ^{13}C ЯМР базе данных, используемой в наших ЯМР предсказаниях, и содержащей более 2,430,000 экспериментальных химических сдвигов и 101,260 констант взаимодействия для более чем 191,900 структур. Включает оригинальные ссылки, растворители, частоты, ЯМР методы, молекулярные формулы, молекулярные веса, IUPAC и тривиальные названия. Содержит удобные инструменты для поиска, просмотра и печати.

ACD/CNMR Predictor & DB Add-on [3-12]

Комплект программ для предсказания и поиска в базе ^{13}C ЯМР спектров.
(*Стоимость из: ACD/CNMR Predictor и ACD/CNMR DB Add-on*)

Aldrich NMR Library Add-on for ACD/Labs [3-13]

Коммерческая библиотека более чем 35,000 химических структур с ^1H и ^{13}C ЯМР спектрами, доступ к которой может быть осуществлен через интерфейс ACD/1D NMR Manager (*приобретается дополнительно*).

ACD/Polymer Database [3-14]

Коммерческая база данных соотнесенных ^1H и ^{13}C ЯМР спектров 439 полимеров. Доступна к просмотру и поиску через интерфейс ACD/1D NMR Manager (*приобретается дополнительно*).

ACD/NMR Predictor Suite [3-16]

Комплект программ, позволяющий рассчитывать ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P , а также 2D ЯМР спектры.
(*Стоимость из: ACD/2D NMR Predictor, ACD/CNMR Predictor и ACD/HNMR Predictor, ACD/F, N, P-NMR-Predictors*)

ACD/FNMR Predictor [3-17]

Позволяет быстро и точно рассчитывать ^{19}F ЯМР химические сдвиги и константы взаимодействия для органических химических структур, содержащих фтор.

ACD/FNMR DB Add-on [3-18]

Предоставляет доступ к экспериментальным ^{19}F ЯМР химическим сдвигам и константам взаимодействия, которые использует наш ACD/FNMR Predictor. Содержит более 35,014 экспериментальных химических сдвигов и 28,276 констант взаимодействия для более чем 16,780 структур и представляет собой на сегодняшний день крупнейшую в мире электронную коллекцию по ^{19}F ЯМР. Включает оригинальные ссылки, растворители, частоты, ЯМР методы, молекулярные формулы, молекулярные веса, IUPAC и тривиальные названия. Содержит удобные инструменты для поиска, просмотра и печати.

ACD/FNMR Predictor & DB Add-on [3-19]

Комплект программ для предсказания и поиска в базе ^{19}F ЯМР спектров.
(*Стоимость из: ACD/FNMR Predictor и ACD/FNMR DB Add-on*)

ACD/NNMR Predictor [3-20]

Позволяет быстро и точно рассчитывать ^{15}N ЯМР химические сдвиги и константы взаимодействия для азотсодержащих органических химических структур.

ACD/NNMR DB Add-on [3-21]

Предоставляет доступ к ^{15}N ЯМР базе данных, которую использует наш ACD/NNMR Predictor. Содержит более 21,400 экспериментальных химических сдвигов и 4600 констант взаимодействия для более чем 9,000 структур. Включает оригинальные ссылки, растворители, частоты, ЯМР методы, молекулярные формулы, молекулярные веса, IUPAC и тривиальные названия. Содержит удобные инструменты для поиска, просмотра и печати.



ACD/NNMR Predictor & DB Add-on [3-22]

Комплект программ для предсказания и поиска в базе ^{15}N ЯМР спектров.
(*Состоит из: ACD/NNMR Predictor и ACD/NNMR DB Add-on*)

ACD/PNMR Predictor [3-23]

Обеспечивает возможностью оценивать ^{31}P ЯМР химические сдвиги и константы взаимодействия для фосфорсодержащих соединений.

ACD/PNMR DB Add-on [3-24]

Обеспечивает прямой доступ к ^{31}P ЯМР базе данных, которые использует наш ACD/PNMR Predictor. Содержит более 33,690 экспериментальных химических сдвигов и 27,200 констант взаимодействия для более чем 28,670 структур и представляет собой на сегодняшний день крупнейшую в мире электронную коллекцию по ^{31}P ЯМР. Включает оригинальные ссылки, растворители, частоты, ЯМР методы, молекулярные формулы, молекулярные веса, IUPAC и тривиальные названия.

ACD/PNMR Predictor & DB Add-on [3-25]

Комплект программ для предсказания и поиска в базе ^{31}P ЯМР спектров.
(*Состоит из: ACD/PNMR Predictor и ACD/PNMR DB Add-on*)

ACD/1D NMR Expert [3-27]

Экспертная система для быстрой обработки, верификации и количественного анализа больших массивов одномерных ЯМР данных в пакетном режиме. Автоматически оценивает соответствие между химической структурой и 1D ЯМР данными для больших наборов соединений при помощи уникального верификационного алгоритма. (*Включает также: ACD/NMR Workbook, ACD/HNMR Predictor*)

ACD/2D NMR Expert [3-28]

Данная экспертная система поможет специалистам существенно уменьшить время оценки соединений с помощью одно- и двумерного ЯМР. Входящие в состав пакета модули превращают компьютер в рабочую станцию для быстрой обработки, верификации и количественного анализа больших массивов данных одно- и двумерного ЯМР в пакетном режиме. Система автоматически оценивает соответствие между химической структурой и ЯМР данными для больших наборов соединений при помощи мощнейшего комбинированного верификационного алгоритма.
(*Включает также: ACD/NMR Workbook, ACD/NMR Predictor Suite, P-, N-, F- NMR Predictors*)

ACD/Structure Elucidator Suite [3-62]

Экспертная система, позволяющая определять неизвестную химическую структуру из экспериментальных одномерных и двумерных ЯМР, масс, Уф-ИК спектров и хроматографических данных. Дополнительно поставляется с базой данных 30 миллионов структур (Pubchem и ChemSpider) с рассчитанными ЯМР-спектрами, что обеспечивает быструю идентификацию структур. Также содержит обширные базы данных с экспериментальными спектрами ЯМР: C, H, N, P, F, а также модули для углубленного анализа и обработки МС, ИК, Уф, ЖХ, ГХ, ЖХ/МС, ГХ/МС и др.
(*Включает также: ACD/NMR Workbook Suite, ACD/MS Workbook Suite, ACD/CNMR DB Add-on, ACD/HNMR DB Add-on, ACD/NNMR DB Add-on, ACD/PNMR DB Add-on, ACD/FNMR DB Add-on, ACD/MS Structure ID Add-on.*)

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ И ХРОМАТОГРАФИЯ

ACD/MS Workbook Suite [3-58]

Объединяет всю мощь ACD/Spectrus Processor с полнофункциональной базой данных для хранения MS, LC/GC/MS и других связанных данных с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска. Помимо инструментов, доступных в ACD/Spectrus Processor, содержит ряд экспертных инструментов для анализа экспериментальных МС и хромато-масс-спектральных данных. Содержит уникальные инструменты для анализа сложных смесей, а также для предсказания фрагментации и соотношения фрагментов.

(*Включает также: ACD/Spectrus Processor, ACD/IntelliXtract, ACD/IntelliTarget, ACD/MS Fragmenter*)

ACD/Metabolites Predictor[3-60]

дополнение к ACD/MS Workbook Suite

Модуль, позволяющий предсказывать метаболиты соединений, находить их в экспериментальных LC/MS данных и создавать схемы метаболизма в базе данных. При совместном приобретении с модулями ACD/Percepta возможно предсказание таких свойств предсказанных и экспериментально найденных метаболитов, как токсичность, влияние на здоровье человека, поведение в организме человека и др.

ACD/IXCR Add-on [3-55]

дополнение к ACD/MS Workbook Suite

Набор инструментов для идентификации компонентов в GC/MS, сравнения образцов и др.

**ACD/MS Structure ID Add-on[3-63] дополнение к ACD/MS Workbook Suite**

Модуль для быстрой идентификации структур за счет быстрого поиска в базах данных с 30 миллионами структур (Pubchem и ChemSpider) с рассчитанными ЯМР-спектрами. Поиск возможен по точной массе, разрешенным или запрещенным фрагментам. Также доступна верификация по MSn-спектрам.

ACD/MS Fragmenter [3-39]

Позволяет генерировать список теоретических ионов, исходя из возможных путей фрагментации. Полезен для предположения структур из MS/MS экспериментов.

ACD/IntelliXtract [3-32]**включен в ACD/MS Workbook Suite**

Программный модуль для анализа сложных LC/MS данных. Выделяет из исходных данных все индивидуальные хроматографические компоненты с одновременным поиском их молекулярных ионов с использованием инновационной технологии ACD/IntelliXtract™.

Данный модуль приобретается дополнительно к ACD/MS Workbook.

ACD/IntelliTarget [3-33]**включен в ACD/MS Workbook Suite**

Дополнительный программный модуль для анализа сложных LC(GC)/MS данных. Находит целевые вещества (хроматографические компоненты) в исходных LC(GC)/MS данных с использованием инновационной технологии ACD/IntelliTarget™.

Данный модуль приобретается дополнительно к ACD/MS Workbook.

ACD/Chrom Workbook [3-41]

Объединяет всю мощь ACD/Spectrus Processor с полнофункциональной базой данных для хранения хроматограмм с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска. Содержит базу данных с более чем 10,000 экспериментальных хроматограмм для различных классов соединений и хроматографических условий.

(Включает также: ACD/Spectrus Processor).

ACD/LC-GC Simulator [3-42]

Мощный инструмент для разработки хроматографического метода. Экономьте время и материальные ресурсы, подбирая оптимальные условия разделения и колонку перед тем, как делать первый впрыск.

(Включает также: ACD/Spectrus Processor)

ACD/AutoChrom for LC/MS [3-43]

Позволяет системно оптимизировать параметры метода с привлечением ваших предыдущих экспериментов, отслеживать все получаемые данные, организовать и контролировать ваши проекты по разработке хроматографического метода. Позволяет комбинировать единичные UV-сигналы, LC/UV (DAD, PDA) и LC/MS данные в едином интерфейсе для визуализации и анализа проведенных экспериментов.

(Включает также: ACD/ChromWorkbook, ACD/LC[GC] Simulator, ACD/IntelliXtract)

ACD/AutoChrom for LC/UV [3-44]

Программа для разработки хроматографического метода в лабораториях, не использующих LC/MS.

(Включает также: ACD/ChromWorkbook, ACD/LC[GC] Simulator)

ACD/AutoChrom for ChemStation LC/MS [3-45]

ПО для полуавтоматической разработки хроматографического метода. Объединяет в себе контроль над оборудованием Agilent HPLC, Rapid Resolution LC, и LC-MS систем с программой для рациональной разработки метода с существенным сокращением временных затрат и материальных ресурсов.

(Включает также: ACD/AutoChrom for LC/MS)

ACD/AutoChrom for Empower LC/MS [3-46]

ПО для полуавтоматической разработки хроматографического метода. Объединяет в себе контроль над оборудованием Waters HPLC, UPLC®, и LC/MS систем с программой для рациональной разработки метода с существенным сокращением временных затрат и материальных ресурсов.

(Включает также: ACD/AutoChrom for LC/MS)

ACD/AutoChrom for ChemStation LC/UV [3-47]

Вариант ACD/AutoChrom для работы с Agilent системами без LC/MS.

(Включает также: ACD/ AutoChrom for LC/UV)

ACD/AutoChrom for Empower LC/UV [3-48]

Вариант ACD/AutoChrom для работы с Waters системами без LC/MS.

(Включает также: ACD/ AutoChrom for LC/UV)

**ACD/ChromGenius [3-49]**

Позволяет избежать трудоемкого повторения серий хроматографических экспериментов при стандартных методах, выбирая наиболее подходящий метод перед тем, как перейти к рутинным автоматизированным анализам или проведению повторяющихся дорогостоящих LC/MS экспериментов.

ACD/ChromGenius Batch [3-64] дополнение к ACD/MS Structure ID Add-on

Позволяет дифференцировать найденные изомеры по хроматографическим характеристикам.

(Включает также: ACD/ChromGenius).

УФ-ИК СПЕКТРОСКОПИЯ И ДРУГИЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ**ACD/Optical Workbook [3-52]**

Объединяет мощь ACD/Spectrus Processor с полнофункциональной спектральной базой данных (ACD/SpecDB) с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска. Содержит специальные инструменты для анализа и интерпретации УФ, видимых, ИК и Раман спектров с помощью уникальных встроенных алгоритмов.

(Включает также: ACD/Spectrus Processor).

ACD/Curve Workbook [3-54]

Объединяет мощь ACD/Spectrus Processor с полнофункциональной базой данных для хранения аналитических кривых и спектров (ACD/SpecDB) с многочисленными возможностями структурного, спектрального и текстового поиска. Содержит специальные инструменты для анализа и интерпретации экспериментальных и расчетных аналитических данных из различных источников (термальный анализ (DSC, DTA, TGA), DMA, калориметрия, потенциометрия, титриметрия, вольтамперометрия, полярография, X-Ray дифракция, кинетика и др.) с помощью уникальных встроенных алгоритмов.

(Включает также: ACD/Curve Processor).

4. ПРЕДСКАЗАНИЕ ADME, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ТОКСИЧНОСТИ

ACD/Labs известна своими предсказаниями молекулярных свойств на основе химической структуры, которые широко признаны и приняты за стандарты в ведущих мировых компаниях и университетах. Данное программное обеспечение помогает оценивать соединения еще до того, как их свойства были экспериментально измерены, или даже до синтеза самих соединений. Доступны Standalone и Batch версии.

ACD/Percepta full Suite [4-40] ACD/Percepta Core включена!

Экспертная система для предсказания ADME-TOX-PhysChem свойств. Включает в себя все предсказания, доступные в ACD/ADME Suite, ACD/Tox Suite, ACD/PhysChem Suite, а также модуль для Structure Design. Содержит обширные базы литературных данных.

ACD/ADME Suite [4-31] ACD/Percepta Core включена!

Экспертная система для предсказания ADME-свойств. Включает в себя такие предсказания как:

- ACD/Absorption
- ACD/BBB Permeation Core
- ACD/Distribution
- ACD/Maximum recommended daily dosw
- ACD/P450 Inhibitors
- ACD/P450 Regioselectivity and Substrate Specificity
- ACD/P-gp Substrate specificity Core
- ACD/P-gp Inhibitor specificity Core
- ACD/PK Explorer.

Содержит обширные базы литературных данных.

ACD/Tox Suite [4-32] ACD/Percepta Core включена!

Экспертная система для предсказания Токсичности. Включает предсказания различных ее видов:

- ACD/Acute Toxicity
- ACD/Aquatic Toxicity
- ACD/Carcinogenicity
- ACD/Endocrine Disruption
- ACD/Genotoxicity/Ames Test
- ACD/Health Effects
- ACD/hERG Inhibitor
- ACD/Irritation
- ACD/P450 Inhibitors

Содержит обширные базы литературных данных.

**ACD/EcoTox Suite [4-47]****ACD/Percepta Core включена!**

Полный набор инструментов для предсказания свойств, имеющих влияние на экологию.
(*Costoum* из: ACD/Acute Toxicity, ACD/Aquatic Toxicity, ACD/Endocrine Disruption, ACD/Irritation, ACD/Absolv)

ACD/PhysChem Suite [4-33]**ACD/Percepta Core включена!**

Полный набор инструментов для предсказания молекулярных физических свойств, рKa, logP, logD, pH-зависимости растворимости, температуры кипения, давления насыщенного пара и др.
(*Costoum* из: ACD/LogD, ACD/LogP DB, ACD/pKa DB, ACD/Sigma Predictor и ACD/Solubility DB, ACD/Boiling Point Predictor)

ACD/LogD Suite [4-06]**ACD/Percepta Core включена!**

Быстро и точно предсказывает зависимость коэффициента распределения вода/октанол от pH для соединений, имеющих несколько ионных форм, а также такие свойства молекул, как рKa и logP.
(*Включает также: ACD/LogP DB, ACD/pKa DB и ACD/Sigma Predictor*)

ACD/LogP DB [4-09]**Дополнительно приобретается ACD/Percepta Core!**

Программа рассчитывает точные величины коэффициента распределения вода/октанол и ряда связанных свойств в стандартных условиях при 25°C. Предоставляет доступ к внутренней базе экспериментальных данных по logP для более чем 18,400 соединений. Позволяет улучшать точность предсказаний для ваших новых уникальных классов соединений через обучение программы с вашими экспериментальными данными.

ACD/pKa DB [4-12]**Дополнительно приобретается ACD/Percepta Core!**

Быстро и точно предсказывает константы кислотно-основной диссоциации для широкого ряда органических соединений. Предоставляет доступ к базам данных содержащей более чем 31,000 экспериментальных величин рKa для примерно 16,000 соединений в воде и 2000 молекул в неводных растворителях. Позволяет улучшать точность предсказаний для ваших новых уникальных классов соединений через обучение программы с помощью ваших экспериментальных данных.

ACD/Solubility DB [4-15]**Дополнительно приобретается ACD/Percepta Core!**

Предсказывает растворимость соединений в воде при различных условиях. Позволяет просматривать профиль растворимости и распределение ионных форм во всем интервале pH (0-14) для того чтобы вы могли лучше понимать поведение ваших соединений в растворе и улучшать их растворимость.

ACD/Boiling Point Predictor [4-18]

Позволяет рассчитывать температуру кипения и давление пара органических соединений и переводит их в различные единицы измерения. Предсказывает энтальпию парообразования и температуру вспышки.

ACD/Sigma Predictor [4-21]

Рассчитывает электронные (σ), стерические (MV и MR) и гидрофобные (π) константы заместителей.

ACD/Profiler Suite [4-42]**ACD/Percepta Core включена!**

Те же расчеты, что и в ACD/Percepta (за исключением Acute Toxicity, Aquatic Toxicity, Health Effects и Irritation), но нет Баз Данных, данных о похожих структурах и все расчеты представлены только в табличном варианте без протоколов расчета и сопутствующей информации. Также нет модулей ACD/Structure Design Engine и ACD/DMSO Solubility.

(*Costoum* из: ACD/Drug Profiler, ACD/PhysChem Profiler, ACD/Percepta Core)

ACD/Drug Profiler [4-43]**ACD/Percepta Core включена!**

Содержит почти все расчеты, что и в ACD/ADME-Tox Suites (за исключением Acute Toxicity, Aquatic Toxicity, Health Effects и Irritation), но нет Баз Данных, данных о похожих структурах и все расчеты представлены только в табличном варианте без протоколов расчета и сопутствующей информации.

ACD/PhysChem Profiler [4-44]**ACD/Percepta Core включена!**

Те же расчеты, что и в ACD/PhysChem Suite, но нет Баз Данных, данных о похожих структурах и все расчеты представлены только в табличном варианте без протоколов расчета и сопутствующей информации.

ACD/Structure Design Engine + PhysChem Profiler [4-45]

Уникальная экспертная система, которая предоставляет возможность медицинским и синтетическим химикам в течение минут находить структурные модификации ключевых соединений для получения аналогов с улучшенными молекулярно-физическими свойствами. Доступны предсказания рKa, LogP, logD и водной растворимости с возможностью их оптимизации – нет баз данных, возможности обучения и экспертной функциональности для соответствующих модулей. Возможно использование как встроенных, так и пользовательских модификаторов.

(*Включает также: ACD/PhysChem Profiler на платформе ACD/Percepta Core*)





ACD/Structure Design Engine + Profiler Suite [4-46]

Версия ACD/Structure Design Engine с дополнительной удобной возможностью контроля для предлагаемых аналогов ряда важных для фармацевтической химии ADME и Токс-свойств.

(Включает также: ACD/PhysChem Profiler и ACD/Drug Profiler на платформе ACD/Percepta Core)

ACD/LogP Batch [4-10]

Вариант ACD/LogP DB с возможностью в пакетном режиме на платформе Windows или Linux быстро и автоматически производить расчеты для больших библиотек химических соединений.

(Включает также: ACD/LogP DB)

ACD/pKa Batch [4-13]

Вариант ACD/pKa DB с возможностью в пакетном режиме на платформе Windows или Linux быстро и автоматически производить расчеты для больших библиотек химических соединений.

(Включает также: ACD/pKa DB)

ACD/Solubility Batch [4-16]

Вариант ACD/Solubility с возможностью в пакетном режиме на платформе Windows или Linux быстро и автоматически производить расчеты для больших библиотек химических соединений.

(Включает также: ACD/Solubility DB)

ACD/LogD Batch [4-07]

Вариант ACD/LogD Suite с возможностью в пакетном режиме на платформе Windows или Linux быстро и автоматически производить расчеты для больших библиотек химических соединений.

(Включает также: ACD/LogD, ACD/LogP DB, ACD/pKa DB, ACD/Sigma Predictor)

ACD/PhysChem Batch [4-25]

Полный набор программ для предсказания физико-химических свойств ACD/Labs с возможностью в пакетном режиме на платформе Windows или Linux быстро и автоматически производить расчеты для больших библиотек химических соединений.

(Состоит из: ACD/Boiling Point Batch, ACD/LogD Batch, ACD/LogP Batch, ACD/pKa Batch, ACD/Solubility Batch)

ACD/Percepta Core [4-41]

Базовая платформа экспертной системы Персепта, к которой подключаются отдельные расчетные модули. ОТДЕЛЬНО НЕ ПОСТАВЛЯЕТСЯ.

Отдельные модули, подключаемые к ACD/Percepta Core.

Список модулей соответствует модулям, указанным для ACD/PhysChem Suite, ACD/ADME Suite и ACD/Tox Suite. Дополнительно доступны модули Absolv, DMSO Solubility.

-
- Все цены указаны на бессрочную лицензию для одного компьютера.
 - Дополнительно можно приобрести услугу “Годовая Поддержка”. Стоимость данной услуги составляет 20% от цены закупаемого пакета ПО и включает получение обновлений в течение 1 года, а также техническую поддержку производителя по телефону и электронной почте в течение 1 года.

СИСТЕМНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ

1. Процессор класса Pentium с тактовой частотой не менее 1GHz
2. Графический адаптер с разрешением не менее 800x600 и 256 цветами
3. Требования к дисковому пространству могут варьироваться от 10 до 2000 MB, в зависимости от приобретаемых модулей
4. Microsoft® мышь или полностью совместимое устройство
5. Windows® 2000 SP4, XP Professional SP2, Win7, Win8, Windows Vista с RAM - 512 MB или более