



## Программы и Готовые Решения от ACD/Labs для Химии

Усовершенствуйте, оптимизируйте и ускорьте химические исследования

Программы ACD/Labs нашли свое применение в проведении передовых химических исследований в более чем 600 химических, фармацевтических и биотехнологических компаниях, а также в более чем 650 академических институтах и университетах по всему миру.

### Среди наших клиентов:

- ✚ **Химия и нефтехимия:** 3M Company, BASF, BP, Chevron, DuPont, Exxon Mobil
- ✚ **Фармацевтика и биотехнологии:** Abbott, Akzo Nobel, AstraZeneca, Bayer AG, Bristol-Myers Squibb, Eli Lilly, Gideon Richter, GlaxoSmithKline, Merck, Novartis, Pfizer, Sanofi-Aventis, Takeda
- ✚ **Производители высокотехнологичной продукции:** Canon, Eastman Kodak, Fuji, General Electric Company, General Motors, Lockheed Martin, Mitsubishi, Samsung Electronics, Bosch, Xerox
- ✚ **Потребительские и промышленные товары:** Bridgestone, Japan Tobacco, J&J, Philip Morris
- ✚ **Пищевые продукты, запахи и продукты гигиены:** Colgate-Palmolive, Henkel, L'Oreal, Nestlé, P&G
- ✚ **Государственные организации:** DSO National Laboratories (Singapore), Европейская Комиссия (European Commission), Национальный Институт Рака США (NCI), National Institute of Technology and Evaluation (Japan), Американское Агентство по Защите Окружающей Среды (US EPA), Таможня США (US Customs), Администрация Пищевых Продуктов и Лекарств США US (FDA).

### Среди наших партнеров:



Мы предлагаем уникальные инновационные программы для предсказания физико-химических свойств и спектров химических веществ, а также экспертные системы управления и анализа экспериментальных данными различной природы. Мы создали более 100 коммерческих компьютерных программ, предназначенных для научно-исследовательских институтов, предприятий и организаций. Наборы интегрированных модулей, награжденные престижными наградами и признанные отраслевыми стандартами, могут применяться в самых широких областях химических исследований и разработки. Чтобы узнать, как программные продукты ACD/Labs применяются в области Ваших исследований, обратите внимание на РЕШЕНИЯ, которые наиболее близки Вам и Вашей области деятельности на соответствующей странице этого каталога.





Этот список отражает наиболее общие области применения наших программ, где они ежедневно используются нашими клиентами для увеличения продуктивности их исследований и разработок

Спектральное Подтверждение Идентичности Химической Структуры	3
Выяснение Химической Структуры Неизвестных Веществ	3
Хроматографическое Разделение	4
Химическая Номенклатура	4
Аналитическая Отчетность и Химические Публикации	5
Ведение Молекулярных и Реакционных Баз Данных	5
Оптимизация Ключевых Соединений и Молекулярных Библиотек	5
Оценка Физ-химических и ADME Свойств Молекул. Предсказание Токсичности	6
Обработка и Анализ Спектральных Данных	6
Управление Аналитическими Данными	7



Посмотрите этот список, чтобы больше узнать о том, как различные возможности наших программ могут быть использованы в различных департаментах и отраслях

Аналитическая Лаборатория	7
ЯМР Лаборатория	8
Исследование и Разработка Новых Материалов	8
Агрехимические Исследования	9
Химия и Экология	9
Исследования в области Вкусов, Ароматов и Запахов	10
Судебная Экспертиза	10
Химия Высокой Пропускной Способности (High-Throughput Chemistry)	11
Идентификация Примесей и Продуктов Разложения	11
Химия Лекарств	12
Химия Полимеров	13
Разработка Оптимальных Форм Лекарственных Препаратов (Preformulation)	12
Химический Синтез	13
Химическое Образование и Обучение	14



**Заказать прайс-лист Вы можете по электронной почте:**

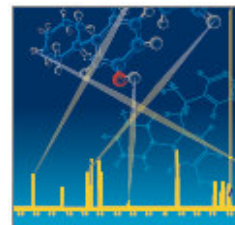
[acdlabs@chemlabs.ru](mailto:acdlabs@chemlabs.ru)





## Спектральное Подтверждение Идентичности Химической Структуры

Проверка идентичности вещества является одной из основных задач в аналитической химии. Компьютерные методы подтверждения химической структуры дают возможность применить самые современные разработки в интерпретации спектральных данных и технологии автоматизации этого процесса. Все это может существенно убыстрить и улучшить качество процесса проверки идентичности химического вещества.

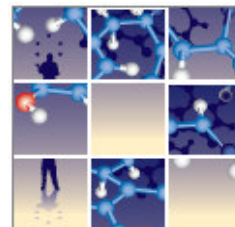


ACD/Labs предлагает самые современные и уникальные методы для автоматической компьютерной идентификации молекул и материалов. Устраните из рабочего процесса ручное определение химической структуры и ускорьте и сделайте более качественной идентификацию неизвестных компонентов.

- Спрогнозируйте ЯМР спектры и массовые фрагменты для автоматически предложенных молекул, чтобы подтвердить или опровергнуть соответствие с экспериментальными данными.
- Проведите автоматический анализ спектрально-структурного соответствия между химической структурой и ЯМР, MS, LC/GC/MS, ИК или Раман спектрами.
- Проверьте идентичность образцов, используя существующие или созданные спектральные библиотеки. В отсутствие точных соответствий, наилучшие совпадения спектральных характеристик могут пролить свет на присутствие тех или иных функциональных групп и принадлежность к тому или иному химическому классу.
- Доступ и удобный поиск в коммерческих компьютерных библиотеках с более чем 100,000 ИК, Раман и ЯМР спектров, вдобавок к базам данных по ЯМР-спектрам, собранным специалистами ACD/Labs и содержащим соотношенные химические сдвиги и константы для ~400,000 структур.
- Автоматизируйте тесты на подтверждение соответствия химической структуры и спектров, которые обеспечивают ДА/НЕТ ответы на основе пользовательских проверочных тестов.
- Используйте перекрестные технологии оценки для повышения доверия к проводимым проверкам подлинности.
- Легко и быстро создавайте свои базы данных и извлекайте необходимые знания из внутренних спектральных баз данных.

## Выяснение Химической Структуры Неизвестных Веществ

Одной из важнейших задач аналитической лаборатории является определение химической структуры неизвестных веществ. Процесс выяснения может осуществляться для различных целей, таких как, выявление метаболитов лекарств, определение примесей, продуктов разложения или структуры природных соединений.



Программное обеспечение от ACD/Labs может помочь существенно ускорить и упростить процесс выяснения молекулярной структуры с использованием всеобъемлющих баз данных, современных оценочных технологий и экспертной системы компьютерного определения химической структуры: *Computer-Assisted Structure Elucidation (CASE)*.

- Примените эффективные структурный, спектральный и фактический поиски для известных веществ. Имеется в наличии набор коммерческих ЯМР-, ИК- и Раман-спектральных баз данных, которые позволяют найти разнообразную спектральную информацию, помогающую сделать правильный выбор среди известных веществ-кандидатов.
- Храните и извлекайте аналитические, структурные и данные о физико-химических и прочих свойствах, полученные с помощью различных измерительных технологий и на оборудовании различных фирм-производителей. Вся информация хранится в единой базе данных и может быть открыта для доступа всем сотрудникам лаборатории или организации для содействия ускорению процесса выявления структуры неизвестных веществ.
- Определите молекулярную структуру непосредственно из экспериментальных спектров неизвестных веществ с использованием экспертной системы компьютерного определения химической структуры: *Computer-Assisted Structure Elucidation (CASE)*. Структура устанавливается в первую очередь на основе 1D и 2D ЯМР данных, а также молекулярной формулы и других сопутствующих данных, которые могут быть получены на основе MS, Хроматографии или ИК.
- Примените уникальные алгоритмы проверки для автоматической оценки достоверности предполагаемых структур в соответствии с базами данных и предсказаниями компьютерной экспертной системы.





## Хроматографическое Разделение

Хроматографические разделения происходят постоянно в течение жизненного цикла химического продукта. В таких областях как поиск и разработка новых веществ и материалов, контроль качества, хиральное разделение, или различные этапы производства, часто является насущной необходимостью быстро получить или разработать подходящий метод, позволяющий четко выделить все целевые компоненты. К сожалению, быстро подобрать такой метод не представляется возможным, в результате чего, химику-аналитику приходится проводить и анализировать множество дополнительных хроматографических экспериментов.

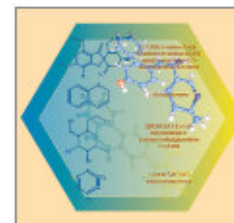


ACD/Labs может помочь хроматографистам быстро найти и восстановить старый метод или существенно сократить время разработки нового метода с помощью комбинирования и системного анализа всех имеющихся данных с последующим предложением оптимальных условий разделения.

- Системно оптимизируйте параметры метода с привлечением ваших предыдущих экспериментов, отслеживайте все получаемые данные, организуйте и контролируйте ваши проекты по разработке хроматографического метода. Комбинируйте единичные UV-сигналы, LC/UV (DAD, PDA) и LC/MS данные в едином интерфейсе для визуализации и анализа проведенных экспериментов.
- Создайте корпоративную базу данных всех предыдущих разделений, которая будет доступна исследователям всех ваших лабораторий. Найдите наиболее подходящие предварительные результаты, основываясь на схожести химических структур, параметров метода или других критериев поиска, используя внутренние или коммерческие базы данных.
- Разработайте надежные методы на основе предсказания констант диссоциации pKa соединений, которые необходимо разделить, и выбирая наилучшее экспериментальное pH.
- Избегайте рутинного повторения серий стандартных методов, выбирая наиболее подходящий метод перед тем, как перейти к рутинным автоматизированным анализам или проведению повторяющихся дорогостоящих LC/MS экспериментов.
- Обрабатывайте хроматограммы, полученные на оборудовании различных производителей внутри одного программного пакета для обеспечения стандартной интерпретации и презентации данных.
- Создавайте профессиональные отчеты с химическими структурами, хроматограммами, спектрами, таблицами и текстом внутри программного обеспечения от ACD/Labs или копируя их в Microsoft® Office.
- Легко обменивайтесь методами и результатами, полученными ранее в течение всего жизненного цикла исследуемого продукта внутри корпоративной сети.
- Сравните и сопоставьте хроматографические колонки от различных производителей.

## Химическая Номенклатура

Так как новые химические структуры постоянно синтезируются, все более важным становится адаптировать точные и эффективные подходы по систематическому называнию веществ в соответствие со стандартной химической номенклатурой. Химические базы данных могут прирастать тысячами новых молекул, что требует огромных усилий и временных затрат на генерацию точных систематических названий. Часто поиски и запросы в таких базах данных основаны именно на названиях веществ. При регистрации патентов, неправильное химическое название может привести к их оспариванию.



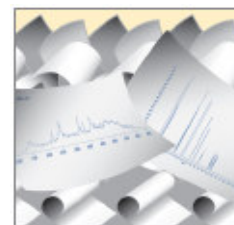
Программное обеспечение от ACD/Labs на данный момент является признанным отраслевым стандартом, используемым множеством ученых и компаний в химической и фармацевтической отраслях для быстрого и точного присваивания строгих номенклатурных имен химическим соединениям для отчетов, баз данных, патентов и публикаций.

- Используйте различные стандарты номенклатуры (IUPAC, Index (CAS), IUBMB) внутри единого интерфейса.
- Получите доступ к подробному протоколу называния соединения в соответствии с правилами IUPAC, со ссылками на соответствующие рекомендации IUPAC, делая простыми ручную проверку и объяснение сгенерированных имен.
- Ускорьте литературный поиск и понимание научных текстов, используя преобразования структура>имя и имя>структура.
- Дополните генерацию систематических имен базой данных с более чем 156,000 общепринятых, устаревших имен, и торговых названий и регистрационных номеров, содержащихся внутри одного пакета с доступным поиском, как по имени, так и по химической структуре.
- Используйте вариант программы, работающий в пакетном режиме, для называния крупных библиотек соединений и встройте систематическую номенклатуру во внутреннюю инфраструктуру вашей организации.
- Создавайте ярлыки в соответствии с InChI протоколом, а также преобразуйте InChI идентификаторы в химическую структуру в целях содействия цифровой обработке химической структурной информации.

## Аналитическая Отчетность и Химические Публикации

Практически любой проект, связанный с химией должен заканчиваться отчетом. Это может быть как внутренний документ, так и публикация или заявка на патент. Создание таких отчетов требует, как правило, утомительного сбора и упорядочивания структур, спектров, хроматограмм и текста с целью создания сжатых, емких и легких для чтения документов.

Программы ACD/Labs могут форматировать спектральную и хроматографическую информацию, полученную с использованием различных экспериментальных технологий и на оборудовании различных производителей для создания отчетов пользовательских форматов.

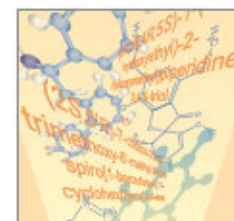


- Создайте аналитический отчет, который включает в себя спектры, хроматограммы, аналитические кривые, химические структуры, таблицы данных, экспериментальные параметры и текст.
- Вырезайте и вставляйте структуры, таблицы, рисунки и текст в программы Microsoft Office. Создавайте отчеты в формате Adobe® PDF прямо из программного обеспечения ACD/Labs.
- Установите стандарты отчетности для команды или для целой компании.
- Создавайте отчеты автоматически, используя пользовательские шаблоны и автоматизированные процессы.
- Добавьте систематические названия к структурам одним нажатием кнопки.
- Примените шаблоны для форматирования химических структур в соответствии с требованиями 45 ведущих научных журналов. Создавайте таблицы данных в формате, готовом для публикации.

## Ведение Молекулярных и Реакционных Баз Данных

Химические лаборатории сталкиваются с вызовом эффективно управлять массой химических структур и связанными с ними данными. Значительное количество времени и ресурсов могут быть сэкономлены через создание удобных для поиска хранилищ химической информацией.

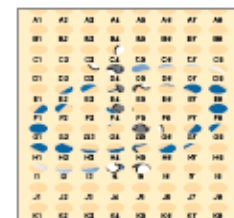
Программы от ACD/Labs для ведения химических баз данных позволяют создать всеобъемлющие структурные хранилища, которые могут содержать самые различные химические данные.



- Управляйте работой по химическому синтезу, создавая файлы внутри баз данных с химическими структурами и реакциями. Храните одно- и многостадийные реакционные схемы совместно с ассоциированными экспериментальными условиями, количествами реагентов, выходом, а также наблюдениями.
- Свяжите записи из базы данных со связанными с ними отчетами, ссылками, аналитическими данными, изображениями и другими электронными файлами.
- Получите легкий доступ к данным за счет текстового поиска, поиска по схожести структуры или подструктурных запросов. Преобразуйте эту информацию в Adobe PDF или Microsoft Office документы для удобного просмотра и распространения данных.
- Интегрируйте структурные и реакционные базы данных с инструментами для обработки и предсказания спектров, а также со спектральными базами данных.
- Создавайте графические презентации в удобном и простом для использования интерфейсе.

## Оптимизация Ключевых Соединений и Молекулярных Библиотек

Понимание взаимосвязей между физико-химическими свойствами, химической структурой и связанными ADME-характеристиками помогает подбирать хорошие ключевые соединения и создавать сфокусированные библиотеки, отражающие разнообразное химическое множество. Такое понимание также критично для оценки структурных модификаций, которые требуются для получения более перспективных соединений с улучшенными общими характеристиками. Такой подход позволяет сфокусироваться на меньшем количестве молекул, устраняет ненужные этапы синтеза, и увеличивает вероятность успеха.



ACD/Labs предлагает оптимизационные инструменты для синтетической химии, агрохимии и химии лекарств, фокусирующихся на достижении желаемых молекулярных свойств, отталкиваясь от неоптимизированных молекул.

- Планируйте эксперименты и разрабатывайте синтетические библиотеки, основываясь на анализе эффекта заместителей на размер, форму, а также физико-химические свойства ваших соединений.
- Модифицируйте соединения для улучшения их физико-химических свойств, сохраняя неизменными элементы, ответственные за активность. Программа автоматически использует известные модели и взаимосвязи, чтобы предложить возможную структурную оптимизацию, которая должна привести к желаемой биологической конечной точке.
- Изучите детали протоколов и корреляции молекулярных физических свойств с химической структурой для разработки будущих синтетических экспериментов.



## Оценка Физических и ADME Свойств Молекул. Предсказание Токсичности.

Существует строгое соответствие между физико-химическими характеристиками химических веществ и многими аспектами их коммерческого использования. Вдобавок к фармакологическому и экологическому применению, такие проекты как улучшение геля для бритья, усовершенствование методов доставки взрывчатых веществ, разработка синтеза новых полимеров, а также другие вызовы, связанные со смешиванием компонентов или доставкой, могут извлечь существенную пользу из знаний о молекулярных физических свойствах.

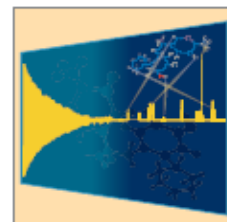


ACD/Labs широко известна своими предсказаниями молекулярных физических свойств на основе молекулярной структуры, помогающим компаниям оценивать соединения до того, как их свойства были экспериментально измерены, или даже до того, как сами соединения были синтезированы.

- Отфильтровывайте библиотеки соединений, основываясь на рассчитанных молекулярных физических свойствах (таких как, площадь полярной поверхности PSA, растворимость при определенном pH, logP/D, или взаимосвязи по аналогии с "Правилом 5" Липинского (Lipinski's "Rule of 5").
- Предсказывайте Физико-химические (растворимость в воде и DMSO, logP, logD, pKa, BP и др.) и ADME свойства (BBB Penetration, Absorption, Bioavailability, Distribution, Pgp-substrate and inhibition specificity, параметры Absolv)
- Предсказывайте различные виды токсичности (Genotoxicity и hERG-inhibition, Acute Toxicity и Health Effect).
- Создайте собственные модели для разработки и оптимизации перспективных структур
- Используйте вычисленные параметры для создания всеобъемлющих количественных моделей взаимосвязей между структурой и активностью (QSAR).
- Производите поиск в базах данных с экспериментальными значениями logP, pKa, растворимости и др.
- Улучшайте точность предсказаний для ваших новых уникальных классов соединений, используя обучение программ вашими экспериментальными данными.

## Обработка и Анализ Спектральных Данных

Современные аналитические лаборатории используют различные технологии, результаты каждой должны быть обработаны и проанализированы различными методами. Общая несовместимость форматов файлов между различными моделями инструментов и индивидуальные технические требования делают крайне затруднительными управление и возможность поделиться этими данными внутри единственной системы данных. В результате, хаос выходящих файлов и форматов обычно создает серьезные проблемы для аналитиков. Например, последние исследования показывают, что более чем 70% аналитиков испытывают серьезные трудности с поиском данных, которые, как они точно знают, существуют.



Осуществляя поддержку различных технологий и модульную интеграцию, ACD/Labs предлагает производительнейшие программные продукты, которые могут помочь поставить на поток анализ и обработку теоретически любых типов аналитических данных от любых популярных моделей инструментов, используемых в лабораториях.

- Объедините результаты, собранные на различных моделях инструментов в едином программном интерфейсе для обеспечения последовательности обработки, анализа и представления данных. ACD/Labs работает со всеми основными производителями оборудования и форматами данных. Поддерживаемые производители включают AV/MDS Sciex, Agilent, Bruker, Hitachi, JEOL, Shimadzu, Thermo Scientific, Waters, и другие.
- Интегрируйте результаты различных методик, таких как ЯМР, MS, UV-Vis, ИК, Хроматография на единой программной платформе. Храните и распространяйте результаты в единой манере, независимо от первоначальной экспериментальной методики, модели инструмента, или даже географического расположения.
- Увеличьте время работы инструмента за счет обработки и интерпретации данных на удаленном компьютере, независимо от компьютера, управляющего инструментом.
- Примените передовые алгоритмы обработки и анализа, дополняющие стандартные методы, доступные как от производителя инструмента, так и от ACD/Labs.
- Устраните рутинные и повторяющиеся задачи по обработке и анализу через автоматизацию. Увеличьте производительность лаборатории, обрабатывая результаты в ночное время.
- Дополните спектры и хроматограммы химическими структурами для ускорения интерпретации результатов. Восстанавливайте ранее полученные результаты, используя уникальные идентификаторы химических структур и фрагментов, ассоциированных с соответствующими спектральными сигналами.
- Интерпретируйте и соотносите спектры быстрее и качественнее при помощи компьютерной системы подтверждения химической структуры.
- Передавайте результаты с легкостью, собирая в одном месте, доступном из любого местонахождения, все знания, связанные с конкретным проектом или соединением.
- Создавайте профессиональные отчеты при помощи настраиваемых шаблонов, которые могут включать структуры, спектры, хроматограммы, систематические названия, таблицы, изображения и текст.





## Управление Аналитическими Данными

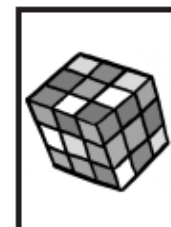
Сегодня для научных предприятий, ученых и их менеджеров/руководителей существует необходимость иметь удобную возможность быстро и грамотно интерпретировать аналитические данные, сделать пронципальное решение и представить результаты в удобном виде, как для внутреннего использования, так и для внешней коммуникации. Кроме того, сохранение и легкий доступ к уже накопленным данным становятся приоритетными задачами по мере увеличения аналитического материала. ACD/Labs предлагает всеобъемлющее решение, **ChemAnalytics** - применение информационных систем, формирующих интеллектуальную взаимосвязь между химической структурой, свойствами, экспериментальными и аналитическими данными для эффективной работы химиков



- Объедините данные различной природы с возможностью увидеть полную аналитическую картину. Храните все данные в единой базе данных, в том числе, 1D и 2D ЯМР, Жидкостная Хроматография LC, Масс спектрометрия, LC/MS, Инфракрасная спектроскопия IR, Раман спектроскопия, UV-Vis-NIR, Газовая Хроматография, GC/IR, X-Ray порошковая дифракция, DSC и TGA. Реализована интеграция программ для предсказания молекулярных свойств, спектров, а так же для быстрого называния молекул по правилам принятой химической номенклатуры, которые приняты за стандарты многими пользователями, с экспериментальными данными.
- Примените ранее полученные результаты к новому исследованию во избежание ненужного повторения экспериментов, посредством создания и удобного использования базы данных накопившихся химических и аналитических данных.
- Используйте универсальный пакет представления химической информации, позволяющий быстро и легко создавать профессиональные отчеты и презентации, в том числе в программах Adobe Acrobat ® и Microsoft Office. Импортируйте и экспортируйте данные различных химических форматов.
- Создайте удобный интерфейс для просмотра тех или иных данных по вашим собственным требованиям, в целях содействия решению конкретной задачи.
- Передавайте результаты и получите простой доступ к данным, на основе создания единой базы данных аналитических результатов, доступной для всех пользователей с соответствующими правами доступа по всей компании, лаборатории или институту, независимо от их географического расположения.

## Аналитическая Лаборатория

Начиная с аналитических лабораторий с постоянно работающими экспертами химиками-аналитиками и до лабораторий, где ученые сами проводят эксперименты и собирают данные и затем их интерпретируют, программное обеспечение от ACD/Labs может помочь анализаторам с обработкой данных, интерпретацией и представлением результатов для публикаций или презентацией для руководства.



- Упростите интерпретацию результатов и увеличьте продуктивность использования аналитических приборов на основе уникальной платформы (программного обеспечения), поддерживающей работу с оборудованием от всех ведущих фирм-производителей. Наше программное обеспечение поддерживает все ведущие аналитические технологии и форматы данных и позволяет объединить в единой структуре информацию, полученную от разных источников. Кроме того, пользователь получает возможность обрабатывать данные на удаленном от инструмента компьютере, что позволяет эффективнее использовать рабочее время оборудования.
- Рационализируйте при помощи программного обеспечения обработку данных за счет автоматизации стандартных процедур: загрузка/импорт данных, обработка, сохранение и предоставление отчетности; а также автоматической доставки экспериментальных данных в удобном виде для анализа химиком-исследователем.
- Примените передовые хемометрические алгоритмы для выделения сигналов анализируемых веществ от шума, разделения смесей компонентов, невозможное или сильно затрудненное вручную.
- Определите наилучшие стартовые условия и оптимизируйте хроматографический метод с помощью всеобъемлющих баз данных и высокотехнологичного ПО, разработанных специально для хроматографистов.
- Быстро находите ранее сделанные анализы и полученные результаты, чтобы избежать дублирования. Создайте центральное электронное хранилище аналитических данных, отделенное от инструментального оборудования, и доступное всем работникам лаборатории на их рабочих компьютерах.
- Легко обменивайтесь аналитическими данными, такими как форматированные спектры, химическая структура или любая другая сопутствующая им аналитическая информация. Максимально быстро представляйте аналитические данные в удобном формате без затрат усилий и времени химиков-лаборантов или экспертов.
- Повысьте эффективность использования инструментального оборудования и пропускную способность лабораторий (контроль качества, сертификация), за счет предложения химикам единой платформы для ручной и автоматической обработки данных, удаленного доступа ко всем аналитическим результатам, а также программ для предсказания спектров и контроля их качества и соответствия. Единый уникальный программный комплекс позволяет существенно снизить затраты и время, необходимые на экспертный анализ.





## ЯМР Лаборатория

Как ведущая компания в разработке программного обеспечения, нейтрального к производителям ЯМР оборудования, мы стремимся постоянно пополнять наше понимание требований ЯМР лабораторий. Наша широкая линейка ЯМР продуктов служит нуждам многих спектроскопистов из различных отраслей по всему миру. В течение 15 лет мы разрабатываем несколько инструментов и решений, которые дополняют разнообразную и развивающуюся природу современных лабораторий, и продолжаем внедрять значительные усовершенствования в наших программах на ежегодной основе.



ACD/Labs предлагает программное обеспечение для ЯМР, которое может обрабатывать, предсказывать и сохранять в базах данных спектры, а также помочь с их интерпретацией и выяснением химической структуры, что заметно увеличивает производительность ЯМР лабораторий.

- Расширьте доступ к оборудованию за счет перемещения обработки и сохранения данных с компьютера, управляющего инструментом на персональный компьютер аналитика. Импортируйте данные с различных инструментов, аккумулируя для анализа файлы различных форматов в едином программном пакете.
- Автоматизируйте сбор данных, обработку, создание отчетов и пополнение баз данных. Интегрированная система может напоминать, когда образцы готовы для просмотра и даже оценивать соответствие между полученными ЯМР спектрами и химической структурой.
- Примените высокопроизводительные (high-throughput) обработку, анализ и контроль на плашках данных.
- Уменьшите количество узких мест при интерпретации 1D и 2D ЯМР спектров при помощи системы компьютерной проверки и подтверждения молекулярной структуры и ЯМР-предикторов.
- Улучшите интерпретацию менее общих ( $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$  и  $^{31}\text{P}$ ) ЯМР методик с использованием интегрированного пакета, который предлагает экспериментальную настройку, обработку и процедуру анализа для этих типов экспериментов.
- Определите молекулярную структуру непосредственно из экспериментальных спектров неизвестных веществ с использованием экспертной системы компьютерного определения химической структуры: *Computer-Assisted Structure Elucidation (CASE)*. Структура устанавливается в первую очередь на основе 1D и 2D ЯМР данных, а также молекулярной формулы и других сопутствующих данных, которые могут быть получены на основе MS, Хроматографии или ИК.
- Упростите процесс доступа к данным, создавая компьютерные ЯМР базы данных и делая их доступными для ваших сотрудников с соответствующими правами доступа через интернет.

## Исследование и Разработка Новых Материалов

Будь то особые полимеры для изоляционных систем, или полупроводники для создания меньших чипов, или новые электронные чернила для цифровых дисплеев или принтеров – высокотехнологичные отрасли постоянно требуют создания новых материалов со специфическими свойствами. Процесс исследования и разработки требует использования различных аналитических методов для полной характеристики материалов и их свойств. Ручное управление и обмен данными для таких образцов становятся нетривиальной задачей.



Программное обеспечение от ACD/Labs предоставляет передовые инструменты для обработки и управления данными как для единичных экспериментов, проводимых вручную так и для автоматизированных процессов. Эти инструменты позволяют существенно упростить оценку и выбор подходящих материалов для высокотехнологичных и обрабатывающих отраслей.

- Обрабатывайте и храните EPR, рентген, УФ, а также данные термального анализа совместно для каждого из ваших образцов на единой программной платформе для более эффективного использования полученных знаний о вашем материале.
- Находите и идентифицируйте примеси и продукты распада быстрее и проще, используя мощный комплекс хемометрических алгоритмов, которые могут быть применены всего лишь нажатием одной кнопки.
- Автоматизируйте исследование материалов и облегчите процесс принятия решений при помощи изменяемых форм представления данных и управления файлами.
- Презентуйте и публикуйте результаты, полученные из разных источников, координируя различные типы данных в единой системе, увеличивая скорость изготовления и согласованность отчетов.
- Поделитесь или найдите всю необходимую аналитическую информацию внутри лаборатории или на более масштабном уровне, во избежание дублирования работы и принятия более взвешенных решений.
- Создавайте систематические названия химических соединений для облегчения изучения литературы, а также для усиления позиций в собственных патентных претензиях.





## Агрохимические Исследования

Разработка химических веществ для защиты урожая требует сложных методов и инструментов. Агрохимикаты должны быть высокоэффективными: направленными на борьбу с определенными вредителями, заболеваниями или сорняками, но в тоже время применяемыми в минимальных дозах. Новые соединения должны также быть безопасны как для людей, так и для растений и животных, и наносить минимально возможный вред окружающей среде.

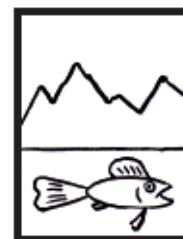


Программное обеспечение от ACD/Labs предоставляет передовые инструменты для оптимизации агрохимических соединений и разработки более эффективных библиотек, а также предлагает систему управления аналитическими данными, которая ускоряет исследования и сокращает время коммерциализации новых веществ и появление их на рынке.

- Уменьшите стоимость скрининга, устранив из планов реакций молекулы с несвойственными для агрохимикатов характеристиками на основе предсказания их свойств. Оцените воздействие на окружающую среду, транспортные механизмы, а также процессы трансформаций с использованием предсказанных молекулярных свойств, таких как давление пара, logP, logD, pKa, Cos, BCF и водная растворимость.
- Ускоряйте и АВТОМАТИЗИРУЙТЕ идентификацию соединений с использованием поиска в MS, GC/LC/MS, ЯМР, и ИК-спектральных библиотеках.
- Оптимизируйте характеристики, свойственные для агрохимикатов, с помощью программы для структурного дизайна, которая предлагает химические модификации для получения соединений с желаемыми свойствами.
- Легко находите и идентифицируйте продукты распада и микроскопические примеси с использованием мощных хемометрических алгоритмов.
- Воспользуйтесь компьютерной системой выяснения, расшифровки и контроля химической структуры для выявления перспективных натуральных продуктов и подтверждения идентичности вещества.
- Управляйте и эффективно обменивайтесь химическими знаниями, объединив всю аналитическую информацию в единой программной системе. Используйте ранее полученные результаты при планировании новых экспериментов, а также наблюдайте за развивающимися тенденциями, имея легкий доступ к архивным данным.
- Публикуйте результаты, полученные из разных источников, в едином формате, увеличивая скорость изготовления и согласованность отчетов.
- Создавайте систематические названия химических соединений для облегчения изучения литературы, а также для усиления позиций в собственных патентных претензиях.

## Химия и Экология

Химики, работающие в области защиты окружающей среды, как правило, находятся в тесном контакте с биологами, токсикологами, геологами, почвоведомы, и экспертами во многих других дисциплинах. Они также применяют многочисленные методы для оценки того, каким образом будут себя вести в окружающей среде различные химические вещества.



Программное обеспечение от ACD/Labs может помочь в оценке, аналитическом тестировании, а также накоплении знаний в экологической химии.

- Оцените судьбу химических веществ в окружающей среде и их возможное распространение на основе моделирования физико-химических свойств, таких как температура кипения, давление пара, коэффициент распределения между водой и октанолом (мера гидрофобности), pH-зависимая растворимость в воде, коэффициент адсорбции и биоконцентрационный фактор.
- Предсказывайте ADME свойства молекул (BBB Penetration, Absorption, Bioavailability, Distribution, Pgp-substrate and inhibition specificity, параметры Absolv)
- Предсказывайте различные виды токсичности (Genotoxicity и hERG-inhibition, Acute Toxicity и Health Effect).
- Упростите аналитическую работу с применением передовых методов обработки, контроля, анализа, хранения в базах данных и отчетности.
- Выберите подходящие методы разделения и анализа до того, как вы начнете эксперимент, с помощью программного обеспечения для хроматографии.
- Используйте разнообразные инструменты, которые сочетают универсальную аналитическую обработку данных и их представление для отчетности. Эти инструменты непосредственно интегрированы с программами Microsoft Office, что позволяет существенно сократить время для написания и форматирования отчетов.
- Храните ранее накопленные химические и аналитические данные, запрашивайте и находите нужные данные с помощью разнообразных поисковых технологий, включающих структурный и подструктурный поиск молекул, поиск в текстовых полях, поиск по названиям молекул, поиск по ключевым словам.
- Поделитесь своими результатами в интернете, используя удобные инструменты для хранения данных и Web-интерфейс для доступа к данным. Это особенно актуально для государственных лабораторий, которым требуется простой способ обмена данными с членами научно-исследовательского сообщества.



## Исследования в области Вкусов, Ароматов и Запахов

Новые вкусы и ароматы являются мотором потребительского спроса на продукты питания, напитки, продукцию бытовой химии и косметической промышленности. Следовательно, химики, работающие в этой области, находятся под постоянным давлением с целью создания новых соединений и смесей, обладающих новым чувственным воздействием на человека. ACD/Labs предлагает программное обеспечение для управления аналитическими данными, идентификации химической структуры, и оптимизации молекулярных физико-химических свойств, что ускоряет процесс разработки новых изделий в отраслях, работающих со вкусами и ароматами.



- Управляйте аналитическими данными в рамках единого программного пакета. Зачитывайте, обрабатывайте, храните, осуществляйте поиск, а так же наглядно представляйте экспериментальные спектры, хроматограммы и химические структуры на одной программной платформе.
- Ускоряйте и АВТОМАТИЗИРУЙТЕ идентификацию соединений, полученных из натуральных продуктов и других источников с использованием поиска в MS, GC/LC/MS, ЯМР, и ИК-спектральных библиотеках.
- Используйте автоматическое установление химической структуры неизвестных веществ с помощью компьютерной экспертной системы.
- Заблаговременно предскажите ТОКСИЧНОСТЬ компонентов разрабатываемого продукта.
- Сфокусируйтесь на желаемых соединениях и добавках с помощью точных предсказаний гидрофобности (logP, logD), констант диссоциации (pKa), давления пара и водной растворимости во избежание синтеза соединений с нежелательными характеристиками.
- Примените современные хемометрические алгоритмы для поиска следов примесей или продуктов разложения, которые могут оказать большое влияние на срок годности и коммерческой жизнеспособности продукта.
- Создавайте высококачественные отчеты в желаемом формате, которые легко могут быть вставлены в документы общепринятых стандартов, таких как Microsoft Office, или экспортированы в Adobe PDF файл.
- Отслеживайте и управляйте уникальными соединениями, созданными внутри компании, вкусами и ароматами смесей, их свойствами, а также химическими реакциями в удобной для использования структурной базе данных.
- Генерируйте систематические названия химических структур для облегчения поиска в литературе, а так же обоснования своих патентных претензий.

## Судебная Экспертиза

Химики, занимающиеся судебной экспертизой, обязаны обнаружить и идентифицировать следы наркотиков, ядов, полимеров, тяжелых металлов, взрывчатых веществ и многое другое. Для этих целей необходим обширный опыт химической экспертизы, а также большой арсенал различных аналитических методов, позволяющих предоставить окончательные результаты в течение короткого промежутка времени.



Программные продукты от ACD/Labs известны своими возможностями по работе с химической структурой, универсальностью по отношению к производителям аналитического оборудования, а также возможностью обработки, хранения и презентации аналитических данных. Кроме того, предлагаемое программное обеспечение может существенно упростить и ускорить процесс анализа полученных данных.

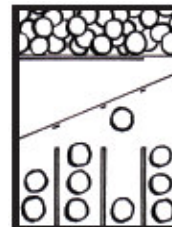
- Ускорьте или полностью АВТОМАТИЗИРУЙТЕ идентификацию соединений, полученных из образцов живых тканей или других материалов с использованием поиска в MS, GC/LC/MS, ЯМР, и ИК-спектральных библиотеках.
- Используйте уникальные патентованные алгоритмы для выделения сигнала из шума и нахождения всех компонентов в сложных смесях с тем, чтобы лучше определить следы интересующих вас химических веществ.
- Найдите совпадения ваших спектров с имеющимися в коммерческих базах данных по ЯМР- и ИК-спектрам.
- Организуйте и храните все полученные химические и аналитические данные, касающиеся выявленных доказательств в одной программной системе. Возможность читать, обрабатывать, хранить, получать и презентовать экспериментальные спектры, хроматограммы, состав материалов, а также идентичность предоставляемой информации повышают способность критически оценивать и обсуждать с коллегами имеющиеся данные. Взаимосвязи с документами и графическими объектами, касающимися данного дела, или взаимосвязи с похожими делами, могут быть установлены за счет внутренних полей или гиперссылок.
- Создавайте убедительные и подробные отчеты и презентации тестов и выводов для судов. Вставляйте химические данные непосредственно в программы Microsoft Office для создания отчетов для следователей, адвокатов и других официальных лиц. Создавайте плакаты и прочие иллюстрации для презентаций в суде.
- Создайте судебную базу данных, которая позволит предоставлять информацию всем заинтересованным лицам внутри лаборатории, департамента, всей организации или между организациями. Контролируемое распределение и управление с помощью безопасных сетей или интрасетей обеспечивают оптимальное использование имеющихся информационных ресурсов.



## Химия Высокой Пропускной Способности (High-Throughput Chemistry)

Высоко-пропускные и комбинаторные подходы обычно приводят к производству большого количества аналитических данных на ежедневной основе. Поскольку образцы обрабатываются с гораздо большей скоростью, чем соответствующие данные могут быть обработаны и проанализированы, требуются специализированные инструменты для быстрой и эффективной обработки данных и помощи в их интерпретации.

ACD/Labs предлагает программы, которые разработаны для автоматизации высоко-пропускного анализа и процессов управления аналитическими данными, связанными с подходами высокой пропускной способности.

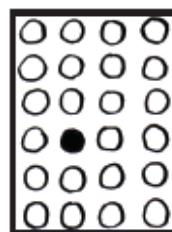


- Упростите обработку и анализ с использованием автоматических процедур, применяя их на больших количествах ЯМР, MS, XRD и Раман данных, произведенных с помощью роботизированных процессов.
- Увеличьте производительность разделения для постоянно используемых хроматографических методов, используя программное обеспечение для выбора лучшего метода перед впрыском образца.
- Снизьте количество узких мест в интерпретации данных через наблюдение за реакциями с помощью автоматизированных технологий проверки и количественной оценки.
- Наглядно визуализируйте данные и быстро принимайте решения с помощью настраиваемых шаблонов представления данных и интуитивного интерфейса навигации.
- Разработайте библиотеки соединений с помощью предсказания физико-химических свойств предполагаемых химических структур. Избегайте затрат на синтез и закупку соединений с нежелательными характеристиками.
- Избегайте повторения экспериментов и прошлых ошибок, обеспечив легкий доступ к архивным данным.

## Идентификация Примесей и Продуктов Разложения

Идентификация и анализ примесей и продуктов разложения имеют решающее значение для контроля над химической реакцией, тестирования стабильности, анализа ошибок в производственном процессе, а также патентной защите. Методикой, используемой для этой задачи, обычно является LC/MS – из-за ее высокой селективности и чувствительности, хотя ЯМР и ИК также могут быть использованы для последующего установления химической структуры.

Программные продукты от ACD/Labs широко используются для помощи в обработке, идентификации, управлении, а также презентации данных о веществах, присутствующих в микроскопических количествах с использованием LC/MS, ЯМР и ИК технологий.



- Ускорьте обработку и интерпретацию LC/MS данных с использованием передовых алгоритмов. Отделите компоненты от шума, установите молекулярный вес, сравните образцы и получите информацию о схеме массовой фрагментации, используя автоматические инструменты.
- Ускоряйте и АВТОМАТИЗИРУЙТЕ идентификацию соединений с использованием поиска в MS, GC/LC/MS, ЯМР, и ИК-спектральных библиотеках.
- Управляйте данными на единой информационной платформе. Зачитывайте, анализируйте, идентифицируйте, храните, запрашивайте, а также представляйте данные, включая хроматограммы и спектры, химические структуры и фрагменты, а также текст.
- Усовершенствуйте процесс принятия решений и поделитесь своими результатами с коллегами по лаборатории или же с заинтересованными лицами в других частях света.
- Создавайте отчеты и публикуйте результаты, полученные из различных источников, координируя данные разных типов в единой высококачественной издательской платформе, совместимой с продуктами Microsoft Office и Adobe Acrobat.
- Составьте карты реакций в структурной базе данных. Установите визуальные и логические связи между структурами продуктов реакций и найденными примесями и продуктами разложения. Поместите в базу данных другую информацию, такую как скорость реакций, детализированные условия эксперимента, систематические имена и физико-химические свойства.
- Сократите количество повторений экспериментов и предотвратите простой оборудования, используя интуицию, предоставленную всеобъемлющим программным продуктом, предназначенным для разработки хроматографического метода.



## Химия Лекарств

Опытные химики, разрабатывающие лекарства, как правило, сочетают в себе мастерство химиков-синтетиков и химиков-спектроскопистов с обширными познаниями о физико-химическом поведении химических веществ в биологических системах. Все эти навыки могут быть дополнены современным программным обеспечением, которое может управлять и интерпретировать аналитические данные для тысяч веществ-кандидатов, а также предоставить информацию, необходимую для предсказания и синтеза аналогов с наилучшими (drug-like) свойствами.



ACD/Labs предлагает широкую линейку программ для обработки аналитических данных, спектроскопической проверки и подтверждения химической структуры, химической номенклатуры, физико-химических предсказаний, а также молекулярного дизайна, которые позволяют ускорить процесс разработки перспективных веществ с лекарственными свойствами.

- Разработайте библиотеки с наилучшими соединениями и сократите расходы на скрининг (проверку) за счет раннего устранения молекул с заведомо не лекарственно-подобными свойствами на основе их предсказания. Вещества с “плохими” предсказанными свойствами, могут быть отфильтрованы.
- Предскажите фармакокинетику исследуемого вещества.
- Предсказывайте Физико-химические (Растворимость в воде и DMSO, logP, logD, pKa, BP и др.) и ADME свойства (BBB Penetration, Absorption, Bioavailability, Distribution, Pgp-substrate and inhibition specificity, параметры Absolv) молекул, а также различные виды токсичности (Genotoxicity и hERG-inhibition, Acute Toxicity и Health Effect).
- Оптимизируйте свойства перспективных молекул-кандидатов при помощи молекулярного дизайна, основанного на физико-химических свойствах. Используйте программное обеспечение, чтобы предложить химическую модификацию, которая приведет к оптимальному набору свойств и ряда ADME (Абсорбция, Распределение, Метаболизм, Выведение)-параметров.
- Управляйте всей информацией о разработке лекарственных веществ в едином программном пакете, который читает, анализирует, идентифицирует, хранит, извлекает и позволяет предоставлять в удобном виде спектры, хроматограммы, химические структуры, а также информацию о свойствах в едином виде.
- Упростите интерпретацию аналитических данных при помощи встроенных оценочных алгоритмов.
- Увеличьте скорость и логичность представления различных аналитических данных, используемых в процессе разработки лекарственных веществ.
- Облегчите патентный и литературный поиски, получая систематические химические названия (IUPAC, Index (CAS), IUBMB) из структуры, или же структуры из названий, в течение нескольких секунд.

## Разработка Оптимальных Форм Лекарственных Препаратов (Preformulation)

Разработка подходящей лекарственной формы является сложным процессом, в котором химики пытаются постоянно оптимизировать различные факторы, такие как, например, растворимость, степень кристаллизации, гигроскопичность, или стабильность твердой фазы. Эта оптимизация основана на управлении и использовании большого количества аналитических данных и может быть существенно ускорена с использованием специализированного программного обеспечения.



Программное обеспечение от ACD/Labs автоматизирует импорт данных из различных источников и управляет ими таким путем, который ускоряет как единичный, так и высоко-пропускной (high-throughput) скрининг и выбор различных форм лекарств до 80% для фармацевтической отрасли.

- Избегайте ненужных экспериментов, получая широкий набор точных теоретических физико-химических предсказаний, перед тем как проводить любые эксперименты с новыми лекарственными формами. Предугадайте растворимость и поведение солей лекарственного вещества, используя предсказания pKa, logD и водной растворимости, и с их помощью выбирайте лишь перспективные эксперименты.
- Ускорьте скрининг и выбор солей с помощью удобной и унифицированной системы, позволяющей управлять всеми получаемыми данными, а также обрабатывать, визуализировать и архивировать их.
- Облегчите высоко-пропускные (high-throughput) эксперименты при помощи удобного инструмента управления плашками, используя цветовую разметку в соответствии с параметрами и свойствами.
- Автоматически чистите файлы, полученные от инструмента, осуществляйте предварительную обработку данных, а также координируйте взаимосвязанные рабочие процессы и результаты.
- Соотносите солевые формы спектрально и классифицируйте их при помощи поисковых алгоритмов. Используйте усовершенствованную обработку для выделения максимального количества информации из полученных сырых данных.
- Поделитесь аналитическими знаниями через корпоративную сеть, предоставляя локальные или глобальные права доступа, наилучшим образом соответствующие нуждам пользователей.



## Химия Полимеров

Когда вдруг оказывается, что продукты промышленного предприятия не соответствуют утвержденным спецификациям материалов; когда новые продукты конкурентов, возможно, нарушают ваш патент; когда вы хотите обновить ваши полимерные продукты – вам необходим быстрый доступ ко всей информации о ваших полимерах в наиболее удобной форме.

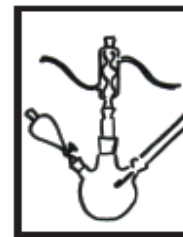


Программное обеспечение от ACD/Labs предлагает интеграцию аналитических данных непосредственно с полимерной структурой, что облегчает патентные исследования, а также сохранение и повторное использование знаний в полимерной индустрии.

- Объедините аналитические данные, связанные с полимерным образцом в гибкой системе управления, которая собирает, анализирует и извлекает информацию из спектров и хроматограмм и объединяет различные типы инструментально-программных данных внутри лаборатории или организации.
- Используйте мощную и удобную обработку данных и хемометрические алгоритмы.
- Минимизируйте время, затраченное на интерпретацию ЯМР, ИК, УФ и Раман спектров через сравнение со спектрами из коммерческих полимерных и спектральных библиотек или ваших внутренних спектрально-полимерных баз данных, включающих информацию о мономерах, добавках, красителях и прочее.
- Создавайте высококачественные профессиональные отчеты, содержащие спектры, хроматограммы, химические структуры, таблицы и текст. Вставляйте содержимое отчетов непосредственно в документы MS Office.
- Организуйте детализированные библиотеки о синтезе полимеров, которые основательно описывают каждый шаг синтеза и все связанные с ним детали, включая химические структуры.
- Спланируйте наилучший полимерный или эмульсионный синтез с помощью предсказаний, предоставленных модулями для оценки физико-химических свойств молекул.
- Ускорьте анализ ошибок или исправьте рабочий процесс с помощью интуитивных инструментов, которые облегчают обнаружение и идентификацию даже следов примесей, компонентов и продуктов разложения.
- Автоматически создайте название для ваших полимеров по номенклатурным правилам IUPAC для ускоренного оформления патентов, публикаций и литературного поиска.

## Химический Синтез

Способность быстро находить все необходимые детали, касающиеся подходящих реагентов, оборудования и процедур, могут непосредственно влиять на результат и общий успех эксперимента. Создав хранилище, в которое и из которого легко будет вносить и извлекать данные, вы сможете существенно сэкономить время и ресурсы. При более масштабном рассмотрении, способность организации создавать, хранить и извлекать объекты их химической интеллектуальной собственности является одним из ключевых конкурентных преимуществ.



Многие химики прибегают к помощи программных инструментов от ACD/Labs для управления их работой с использованием Системы Управления Химическими Данными, которая организует химические структуры, реакции, графические объекты и другие данные. Помимо этого, анализ спектральной информации может быть оптимизирован за счет использования современных алгоритмов предсказания и контроля спектров.

- Храните и извлекайте карты реакций, экспериментальные условия, а также результаты при помощи программного обеспечения, которое объединяет все компоненты химического синтеза в единую базу данных со структурным поиском, и обеспечивает прочную основу для будущих экспериментов.
- Упростите и рационализируйте интерпретацию аналитических данных, полученных на различных инструментах и с применением различных аналитических методик, с применением специализированного спектроскопического и хроматографического программного обеспечения, которое позволяет химикам обрабатывать и интерпретировать данные на их собственных компьютерах.
- Облегчите отчетность с помощью удобных инструментов для изготовления настраиваемых презентаций химических данных, позволяющих достичь желаемого результата нажатием всего лишь одной кнопки.
- Обеспечьте правильное химическое название ваших молекул, а также ускоренное оформление патентов и публикаций с помощью надежного программного обеспечения по химической номенклатуре.
- Найдите подходящие методы очистки и разделения с помощью существующих баз данных.
- Получите доступ к предсказаниям спектров и молекулярных свойств веществ через Web или внутреннюю сеть.





## Химическое Образование и Обучение

Вызовом для учебных заведений является обеспечение максимально возможного уровня химического образования и научных стандартов. Многие университеты, колледжи и академические институты по всему миру используют современные программные средства для успеха своих научных исследований, обучения химическим концепциям и подготовки профессиональных публикаций.



ACD/Labs предлагает множество программных инструментов, которые могут способствовать как химическому обучению, так и исследовательской деятельности выпускников: бесплатный пакет для рисования химической структуры, программы называния молекул в соответствии с химической номенклатурой, программы предсказания физико-химических свойств молекул, программа предсказания масс-фрагментации, программы предсказания ЯМР-спектров и хроматографических параметров. Этот уникальный ряд предсказательных программных продуктов облегчает академические исследования и делает процесс обучения более интерактивным, запоминающимся и интересным.

- Предоставьте студентам современные инструменты, используемые в ведущих мировых компаниях, для того, чтобы они могли подтвердить или опровергнуть свои экспериментальные данные.
- Расширьте библиотеку научных ресурсов с помощью подписки на интернет-сервис, которая обеспечит доступ ко всем ACD/Labs предсказаниям, базам данных и номенклатурным инструментам. Базы данных могут быть использованы для поиска ссылок на научные результаты, в то время как предсказательные и номенклатурные инструменты внесут современный дух в используемые академические учебные программы.
- Наши программы помогут студентам обучиться основам аналитической и физической химии через использование предсказательных инструментов, которые помогают при интерпретации экспериментальных спектров, физико-химических свойств и хроматограмм.
- Снизьте нагрузку на аналитиков-экспертов, предоставляя студентам и аспирантам программные продукты для обработки и анализа их данных.
- Тратьте меньше времени на выполнение таких утомительных задач, как подготовка и форматирование заданий, презентаций и документов. Предоставьте учителям, преподавателям и студентам программные инструменты, которые позволяют включить химическую структуру, спектры, хроматограммы, рисунки и тексты непосредственно и без усилий в Microsoft Office документы.
- Храните все синтетические и аналитические результаты в единой структурной базе данных для сохранения накопленных студентами и аспирантами знаний.

Дополнительная информация доступна на нашем веб-сайте [www.acdlabs.com/educators/](http://www.acdlabs.com/educators/).  
Каждый наш продукт, предназначенный для промышленного использования, также доступен и для академических исследователей и предлагается им с существенной скидкой.

### 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 1200 MB, в зависимости от приобретаемых модулей
4. Microsoft® мышь или полностью совместимое устройство
5. Windows® 2000 SP4, или XP Professional SP2 с оперативной памятью RAM - 128 MB или более



### Контакты в России

Телефон: +7 (499) 503-1-035

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

Internet: [www.chemlabs.ru](http://www.chemlabs.ru)