

ACD/Labs製品カタログ



ACD/Labs社の研究業務支援ソフトウェア

Advanced Chemistry Development社（ACD/Labs、カナダ）は25年以上に亘り、低分子化合物の研究における分析データ解析やナレッジの管理を行う革新的なソフトウェア・ソリューションを提供しています。

ACD/Labs社が提供するソフトウェア・ソリューションは分析データと化学情報を明確に関連付けることで組織的な研究開発の価値を引き出し、維持させ、プロジェクトに影響するビジネス判断を加速させます。

高度な化学情報処理アルゴリズムや効果的なナレッジマネジメントシステムを提供することで研究データの蓄積を促進し、お客様がより生産的かつ効果的に業務を推進できるように支援します。

ACD/Labs社のソフトウェアは個人単位や小規模な研究グループ・部門での利用から全社的な利用まで、様々な規模・用途にてご利用頂けます。

ACD/Labs製品マップ

スペクトル解析	総合解析ソフト	ACD/Spectrus Processor	2
		ACD/ChemAnalytical Workbook	5
		ACD/Spectrus Workbook*	-
	NMR高度解析ソフト	ACD/NMR Workbook	7
		ACD/NMR Predictor Suite	9
		ACD/NMR Workbook Suite	11
		ACD/Known Structures Search Add-on	12
		ACD/Structure Elucidator Suite	13
	MS高度解析ソフト	ACD/MS Workbook Suite	15
		ACD/MS Fragmenter	17
ACD/MS Structure ID Suite		18	
メソッド開発	Chromatogram 高度解析ソフト	ACD/Method Selection Suite	19
		ACD/AutoChrom	21
自動化処理	ASソフト	ACD/Automation Server	23
データベース	DBソフト	ACD/Database	24
化学構造描画	ChemSketchソフト	ACD/ChemSketch	25
化合物命名	Nameソフト	ACD/Name	27
物性・ADME・毒性予測	Perceptaソフト	ACD/Percepta Suite	29
代謝物解析管理		ACD/MetaSense	33
不純物管理	解析管理ソリューション	ACD/Luminata	35
ハイスループット実験管理		ACD/Katalyst	37
ブラウザベースソフトウェア	NMR、xC/UV/MSデータ解析	ACD/Spectrus JS	39
サポートデータフォーマット			42
動作環境			48
製品機能比較			50

* ACD/Spectrus Workbookは、ChemAnalytical Workbook、NMR WorkbookおよびMS Workbook Suiteが統合された製品です。

ACD/Spectrus Processor

NMR、LC/MS、GC/MS、IR、Ramanなどの主要な分析化学データの処理・解析・レポート作成・解釈をすべて1つのインターフェースで可能にしたソフトウェアです。

日常的な構造検証やスペクトルデータベースへのアクセスを支援します。

特長

分析データフォーマットへの対応

このソフトウェアは、ほとんどの主要機器ベンダー、業界標準フォーマット、オープンソースフォーマットをサポートしています。Spectrus Processorにデータを直接読み込みます。

“Spectrus Processorは、NMR、MS、IR、クロマトグラフィデータを処理するための非常に強力なツールです。非常に使いやすく直感的です。大きな強みの一つは、機器メーカーから独立していることです。”

Dr. Rainer Ebel (University of Aberdeen)



解析環境の自由化

機器から離れた場所で分析データを処理する場合に最適です。1つのソフトウェアインターフェースですべての分析データを処理できるため、時間と労力を節約できます。

在宅ワークにも最適なツールです。

“様々なベンダーのLC/MS、LC/UVおよびNMR装置を研究者に提供しています。5つ以上のデータを1つのツールを使用することで、確実に私のグループの作業は合理化されています。”

Dr. Amin Mirza (Institute of Cancer Research)



デスクでデータを処理、分析したい

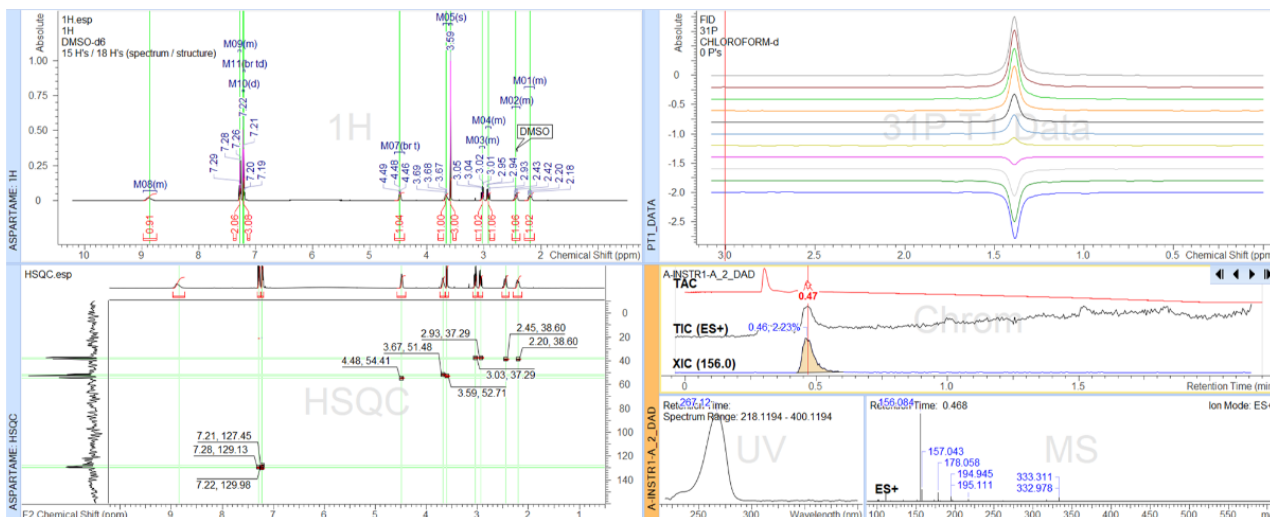
機器の稼働時間を確保したい

あらゆる分析データの視覚化

サンプルの特性解析や化学構造の同定には、複数の分析データが用いられます。

Spectrus Processorは、関連する分析情報と化学情報を1つのインターフェースにまとめることができます。

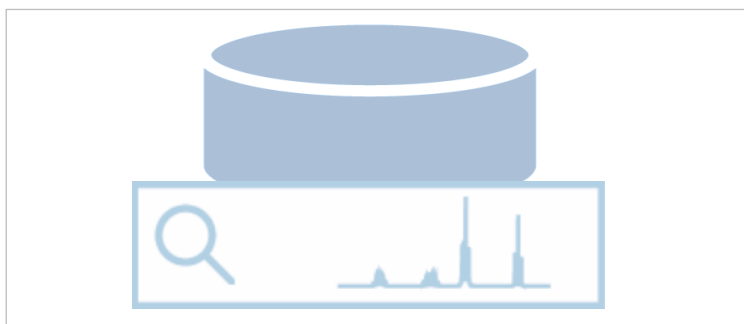
迅速な意思決定をもたらすための便利な視覚化を提供しています。



データベース検索機能によるデータ分析の高速化

Spectrus Processorは、スペクトル解析を支援するため、データベース（自社および市販）を検索するための様々なパラメータを提供しています。検索には、構造式、スペクトル、テキストベースのパラメータを使用します。

検索結果は、シグナル信号の一致がハイライト表示され、容易に解釈できるようになっています。



レポート作成の簡便化

1回のクリックで次のような総合的なレポートを作成できます。

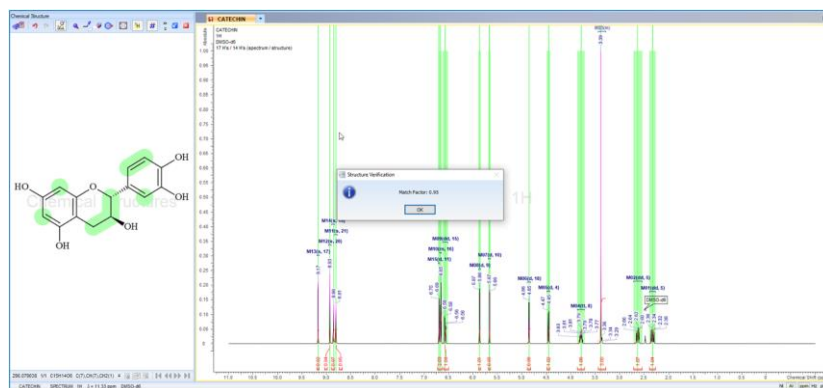
- ・スペクトルとクロマトグラム（注釈付き、拡大画面）
- ・ピークテーブル
- ・結果に対する解釈やコメント
- ・化学構造式、反応式

テンプレートを作成することにより、カスタマイズも可能です。PDFへのエクスポート、Microsoft WordやPowerPointへのコピー/貼り付けもできます。



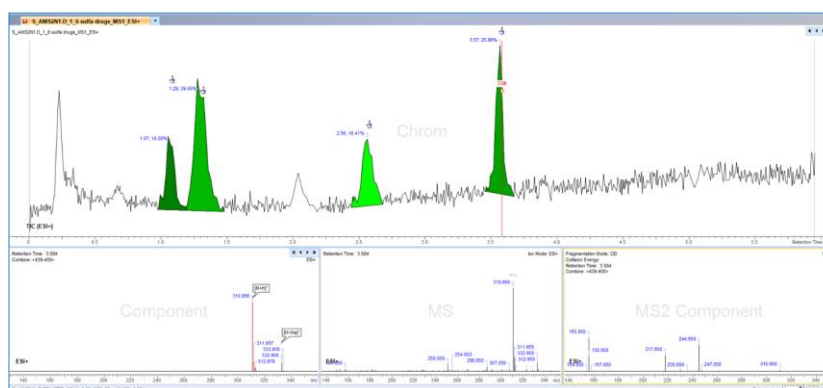
機能 | NMRデータの処理および解析

- 1D NMRデータ (^1H 、 ^{13}C 、DEPTなど) および2D NMRデータ (COSY、TOCSY、HMQC/HSQC/HMBC、NOESY、HETCORなど) の読み込み (対応装置: Bruker、JEOL、Agilent/Varianなど)
- フーリエ変換、補正、ピークピッキング、積分、多重度などの手動/自動データ処理の実行
- スペクトル解析
 - ・化学構造式中の原子とピークの手動/自動帰属
 - ・一致度によるスペクトル/構造の整合性評価
 - ・市販スペクトルライブラリへの検索
- ワンクリックでレポートを容易に生成
 - ・帰属表記フォーマット形式を選択可能



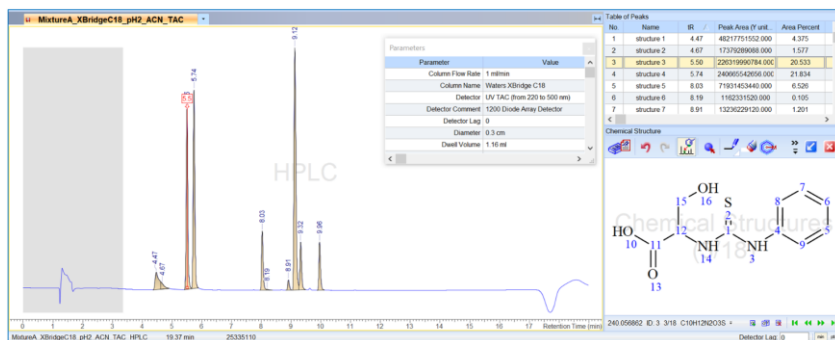
機能 | MSデータの処理および解析

- LC/MS、LC/UV/MS、GC/MSデータの読み込み (対応装置: AB SCIEX、Agilent、Bruker、LECO、PerkinElmer、Shimadzu、Thermo、Watersなど)
- ピーク検出 (抽出イオンクロマトグラム: XIC、全イオンクロマトグラム: TIC、全吸収クロマトグラム: TAC) などのデータ処理
- スペクトル解析
 - ・構造式/分子式/質量からのクロマトグラム抽出
 - ・質量および分子組成の自動確認
 - ・化学構造式のピークへの帰属
 - ・市販スペクトルライブラリへの検索
- ワンクリックでレポートを容易に生成
 - ・注釈付きのクロマトグラムやスペクトルも含む



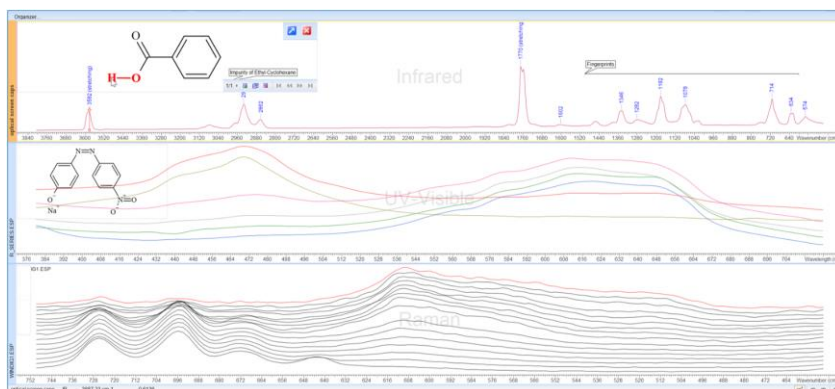
機能 | Chromatographyデータの処理および解析

- Chromatographyデータの読み込み
(対応装置 : Agilent、AB Sciex、Bruker、Shimadzu、Thermo Scientific、Perkin Elmer、Watersなど)
- ピーク検出、スムージング、ベースライン補正、積分などの手動/自動データ処理の実行
- クロマトグラムの重ね書き
- スペクトル解析
 - ・ピーク面積の自動計算
 - ・化学構造式のピークへの帰属
 - ・搭載ライブラリへの検索
- レポート生成 (以下内容含む)
 - ・構造式帰属、メソッドパラメータ、ピークテーブル、注釈、クロマトグラムなど



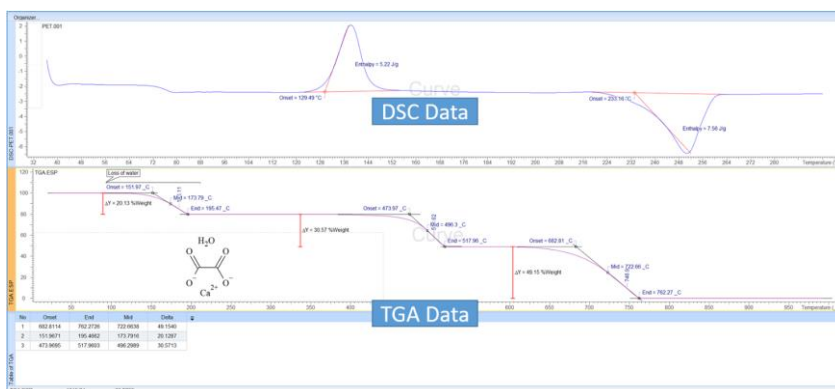
機能 | Opticalデータの処理および解析

- 赤外 (IR、NIR、FIR、MIR UV-Vis)、吸収、ラマン、反射、蛍光、りん光、円二色性 (CD)、分光偏光などの読み込み
(対応装置 : Bruker、JASCO、Perkin Elmer、Shimadzu、Thermo Scientificなど)
- ピーク検出、スムージング、ベースライン補正などの手動/自動データ処理の実行
- クロマトグラムの重ね書きによる視覚化
- スペクトル解析
 - ・フラグメント構造のピークへの帰属
 - ・ナレッジベースや搭載ライブラリを用いた構造検証
 - ST Japan IR DEMO Library
 - IR Assigned Polymers
 - IRDEMO
 - Raman Assigned Amino Acis
- レポート生成



機能 | その他分析データの処理および解析

- 次のような幅広いデータを処理
EELS (電子エネルギー損失分光)、熱解析 (DSC、DTA、TGA)、動的粘弾性 (DMA)、熱量計、滴定、ボルタンメトリー、X線法 (粉末回折、蛍光、光電子)、電子スピン共鳴分光 (ESR)、反応速度論
- X軸とY軸の変換処理
- 曲線への化学構造式の帰属
- 関連スペクトルの重ね書きによる視覚化
- スペクトルベースのデータベース検索
- レポート生成



ACD/ChemAnalytical Workbook

分析データの処理・解析を行うためのオールインワンソフトウェアパッケージだけでなく、自社データベースを構築できるナレッジマネジメントツールを備えており、包括的なデータの収集、保管、共有を可能とします。データストレージを超えた共同プロジェクト環境を構築し、組織全体に利益をもたらします。

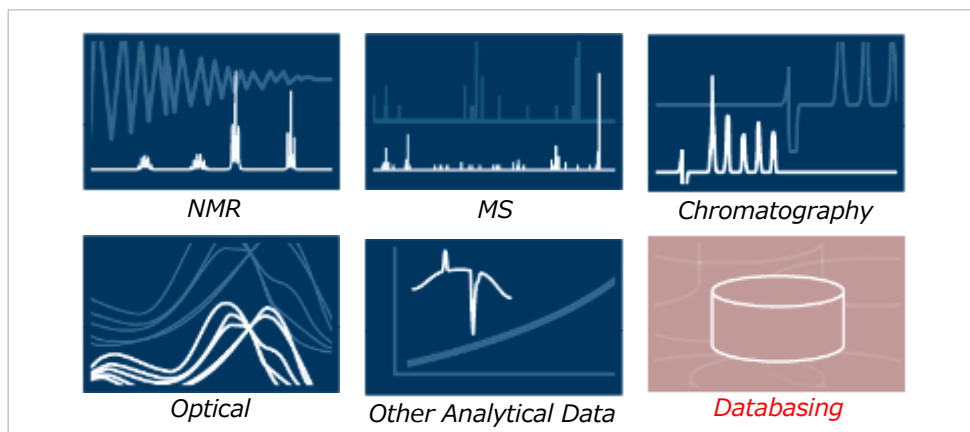
特長

オールインワンのソフトウェアパッケージ

NMR、MS、クロマトグラフィー、IRおよび他の分析データを一つの強力なインターフェイスで処理・解釈・分析・レビューすることが可能なACD/ChemAnalytical Workbookは、すべての主要分析機器ベンダーのデータフォーマットをサポートしています。

堅牢なデータベース作成

ACD/ChemAnalytical Workbookを用いて、スペクトル、構造式、メタデータ、メモなどのライブデータを含むデータベースを作成し、過去・現在・未来にわたり、プロジェクトの知識保存を促進します。社内データベースを効率的に構築したり、多数の市販スペクトルライブラリー（例:NIST）を利用できます。スペクトル、構造式、テキストベースのパラメータを使用して、社内/社外のデータベースを簡単に検索できます。また、データ共有化により、関係者間の共同作業が容易になります。

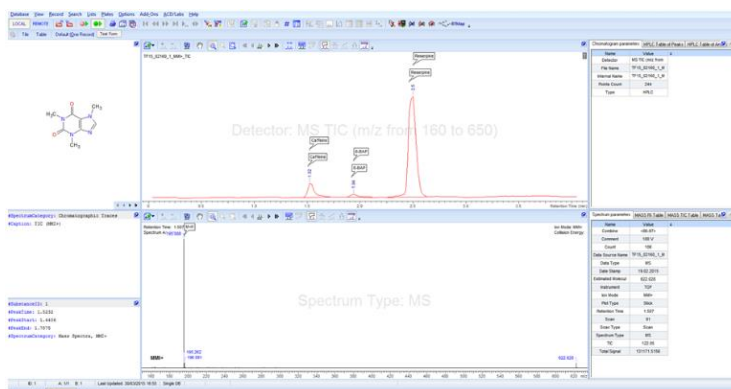


機能 | Spectrus DB

データの共有化と迅速な意思決定のためのライブデータおよび関連ファイルの統合管理

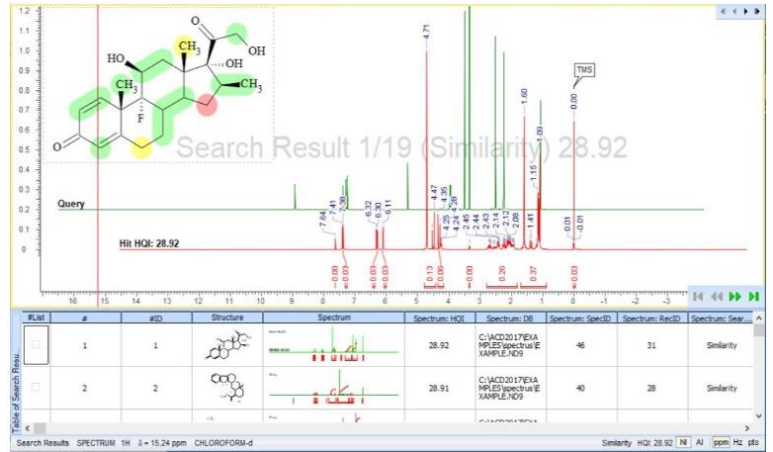
包括的にデータを収集、保管、共有するには、強力なデータベース作成機能と保管機能を備えたソフトウェアが必要です。ACD社のこの独自のデータ管理戦略は、10年以上にわたるマルチテクニック、マルチベンダー・スペクトル解釈の専門知識に基づいて構築されており、企業が生み出した膨大なデータを保存し、利活用を可能とします。

- あらゆる分析データを単一の環境に集約
- 分析データや化学情報に知的な関係を確立し、可視化
- 意思決定過程で得られた解釈も管理
- スペクトルや構造式、メタデータによる検索が可能
- 閲覧フォームのカスタマイズによる視覚化の向上
- 既存のシステムとの統合



検索機能

- スペクトル検索機能（ピーク/波形）
- NMRスペクトルの混合物検索
- 構造による検索（部分構造/類似構造も含む）
- テキストまたは数値による検索
- 複数のデータフィールドの同時検索
- 複数データベースの同時検索
- 実行された検索履歴情報の保持（監査証跡）



エンタープライズ版での利用

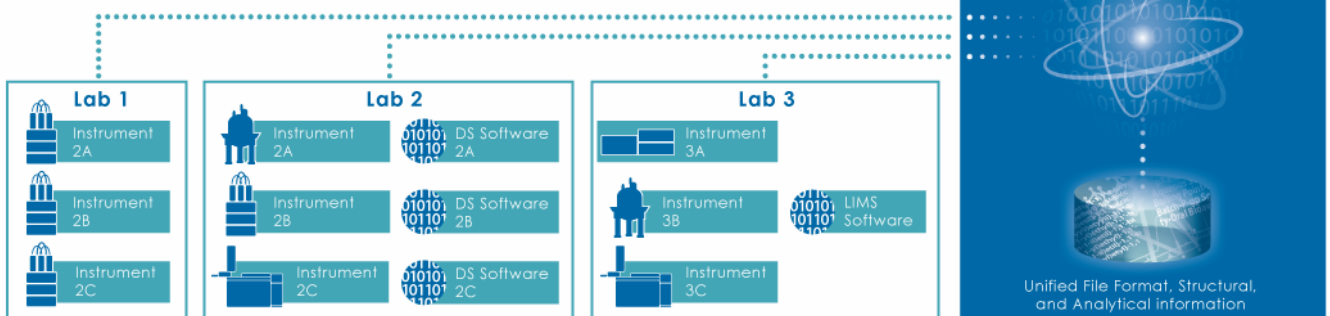
エンタープライズレベルの機能

Spectrus DBは、化学情報と分析情報を1つのデータベースに保存できる階層的なデータ構造を持っています。3層アーキテクチャ（クライアント、アプリケーション・サーバ、データベース・サーバ）で構築され、柔軟な階層データ構造を採用しているため、データベース管理を容易に行うことができます。

また、Spectrus DBは非常にカスタマイズに柔軟に対応可能であり、他のサードパーティのソフトウェア製品と統合することで、他のデータベースの化学情報を利用することもできます。

OracleデータベースとPostgreSQLデータベースの両方をサポートしています。

- データベース内でデータを登録し、ユーザーによるアクセスを制御できます
- 個々のユーザー、またはグループのアクセスレベルを定義し、データベース、レコード、プロジェクト内におけるデータの表示、追加、削除および変更を制限します
- ローカルデータベースとリモートデータベースへの検索が可能です
- クライアントから同時にアクセスできます
- セキュリティも強化されます



各部署のデータを集約し、横断形式でデータ保管、共有、検索が可能になります

共有およびコラボレーションをより簡単に

Spectrusプラットフォームは、使用する機器、ソフトウェア、技術に関係なく、研究者が他の部門やサイトのパートナーや同僚と共同作業できる環境を提供します。情報へのアクセスを容易にし、R&Dプロセスを加速し、生産性と効率の向上を提供します。



ACD/NMR Workbook

構造解析のためのNMRソフトウェアです。

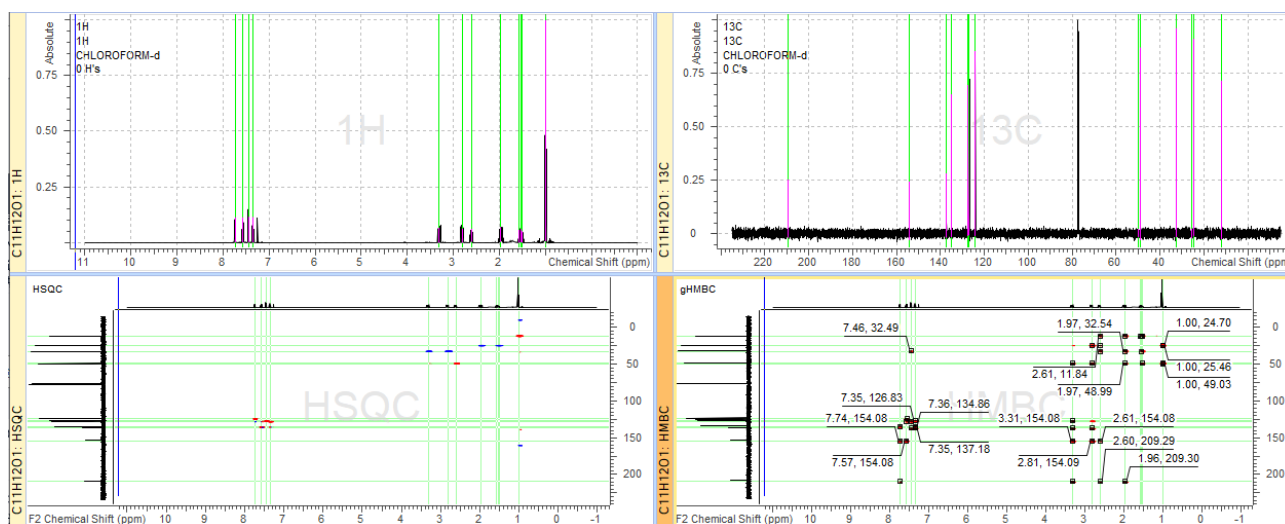
主要機器ベンダーフォーマットの1Dおよび2Dデータを処理できます。

特長

NMRSync機能 ～NMRデータの同期解析～

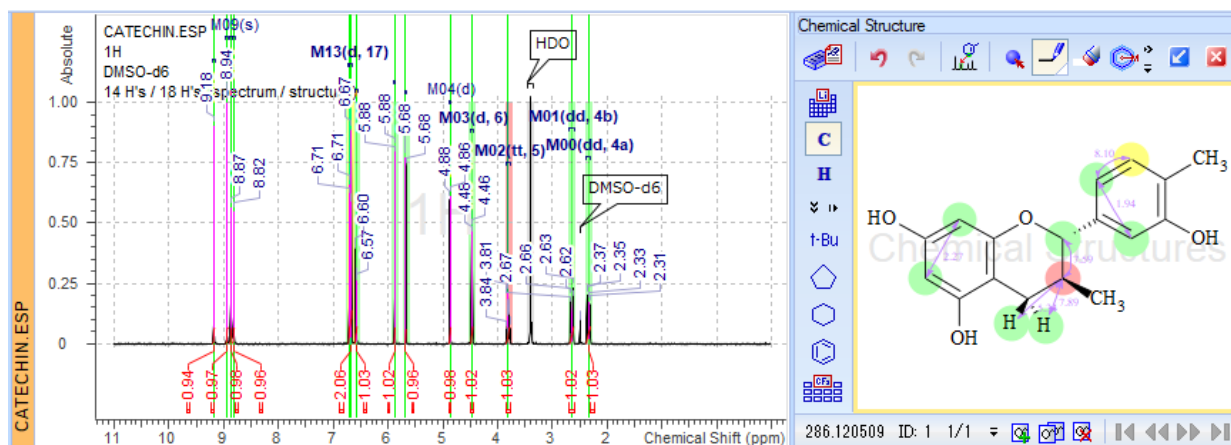
NMRSyncは、業界最速のピークピッキングと帰属のワークフローを誇る画期的なテクノロジーです。単に、 ^1H スペクトルのピークを積分するだけで、1Dおよび2D NMRスペクトルの他のすべての関連するピークが迅速に同定され、連動して処理されます。

任意のNMRスペクトルの任意のピークから実行することができ、2D NMRデータから重複する ^1H ピークおよび ^{13}C ピークを分離するのに役立ちます。



NMRスペクトルピークと構造式の帰属

マウスをピークの上に置くだけで、最適な帰属に関するフィードバックが即座に表示されます。帰属結果は色分けされており、（緑●>黄●>赤●）一目で分かるようになっています。このプレビューは、NMRSyncからリンクされたピークに基づいており、ACD/Labs社のNMR予測ベースのアルゴリズムを使用して、識別を行っています。



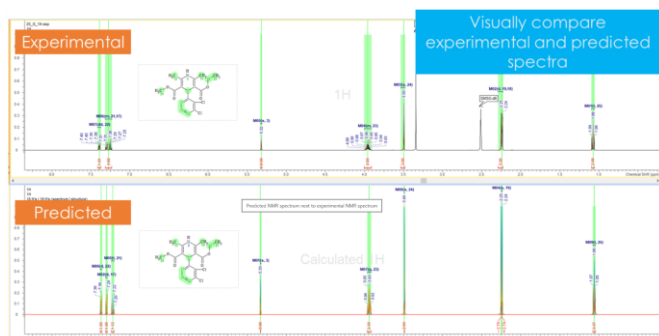
ACD/NMR Predictor Suite

化学構造から ^1H 、 ^{13}C 、 ^{15}N 、 ^{19}F 、および ^{31}P のNMRスペクトルを迅速かつ正確に予測します。より効率的な構造検証のために、予測されたNMRスペクトルと実験されたNMRスペクトルを同じ画面で視覚的に比較できます。

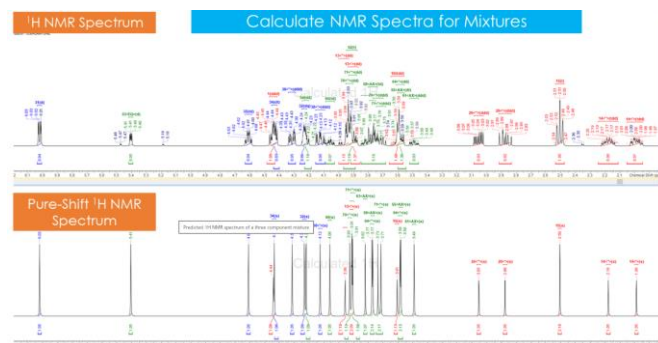
特長

データファイルから目的の構造をインポートするか、構造を検索するか、またはインターフェイスで構造を描画して、NMRスペクトル、化学シフト、および結合定数を秒単位で計算します。以下の機能を備えています。

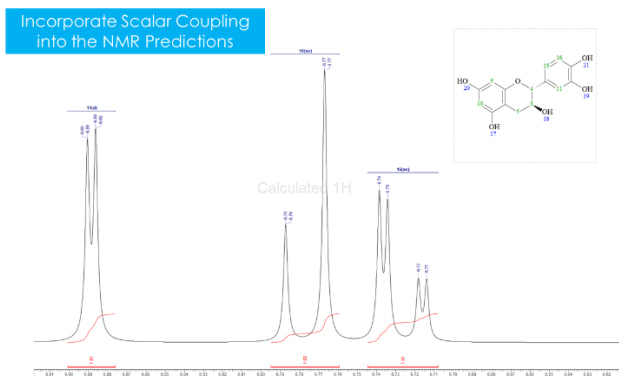
- ^1H 、 ^{13}C 、 ^{15}N 、 ^{19}F 、および ^{31}P の核種について、NMR化学シフトおよび結合定数を計算します
- 2D NMRスペクトル（HSQC、HSQC-TOCSY、HMBC、COSYなど）を予測します
- デカップリングされた ^1H NMR（ピュアシフト）スペクトルを予測します
- 異なる成分比を持つ混合物のNMRスペクトルを予測します
- 実験データでNMR予測をトレーニングすることにより、予測精度を向上させます
- ニューラルネットワークとHOSEコードアルゴリズムを使用して最も正確なNMRシグナルを計算します
- 予測に使用された実験NMRデータを確認するには、ACD/NMR Database Suiteが別途必要となります。



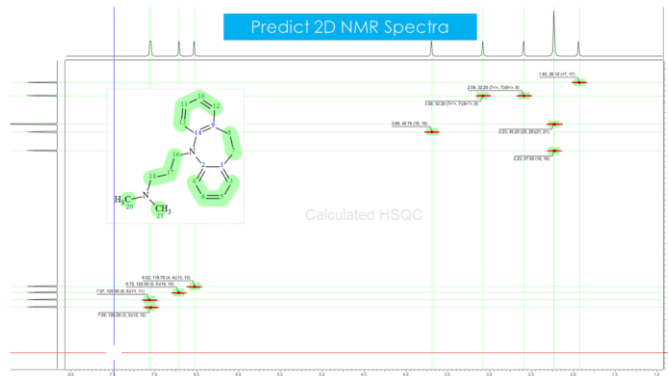
実験NMRスペクトルと予測NMRスペクトル



3成分混合物の ^1H NMRスペクトルの予測



スカラーカップリングを示す予測 ^1H NMRスペクトル



2D NMRスペクトル予測

ラインナップ

NMR予測ソフトウェアは3つのパッケージで利用可能です。必要な核種を選択できます。



[\$^1\text{H}\$ and/or \$^{13}\text{C}\$ NMR Predictors](#)



[XNMR Predictors](#)
 ^{15}N , ^{19}F , and ^{31}P Predictors



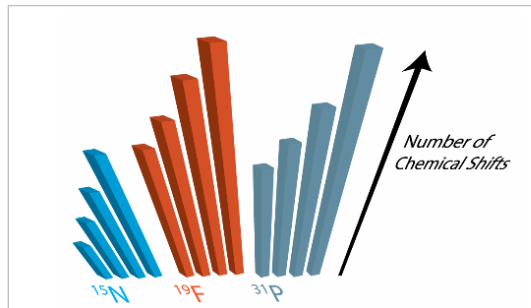
[NMR Predictor Suite](#)
1D NMR Predictors (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , and ^{31}P)
2D NMR Predictors (^1H - ^{13}C and ^1H - ^{15}N)

¹H and/or ¹³C NMR Predictors

- 実験条件（相対成分濃度、周波数範囲、ライン幅）におけるNMRスペクトルを予測します
- ¹Hおよび¹³Cの溶媒固有のNMRスペクトルを予測します
- NMR予測の前に互変異性体を認識します
- 実験で得られた化学シフトを用いてカスタマイズしたトレーニングデータベースにより、予測精度を向上させます

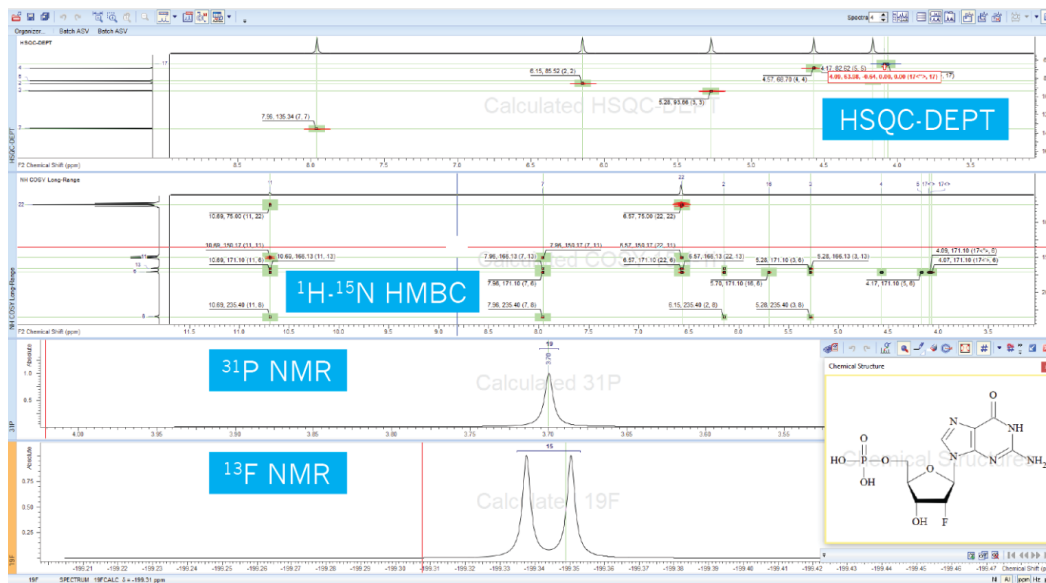
XNMR Predictors

- ¹⁵N、¹⁹F、³¹P NMRスペクトルを予測します
- ¹⁵Nケミカルシフトを推定し、幅広い実験データ取得範囲を絞り込むことにより、¹⁵N実験の機器時間を短縮します
- 継続的にNMRデータベースは更新されます
 - ・ ¹⁵N、¹⁹F、³¹Pを含む構造：70,000以上
 - ・ ¹⁵N、¹⁹F、³¹Pを含む化学シフト：115,000以上



NMR Predictor Suite ~1Dおよび2DNMR予測の究極のパッケージ~

- 以下の2D NMRスペクトルを予測します。
 - ・ ¹H-¹H COSY (2J-3Jおよびロングレンジ)
 - ・ ¹H-¹³C HSQC、HSQC-DEPT、HMQC、HMBC、HSQC-TOCSY
 - ・ ¹H-¹⁵N HMBC (直接およびロングレンジ)
 - ・ ¹³C-¹³C COSY / HSQC-TOCSY (2J-3Jおよびロングレンジ)
 - ・ ¹³C-¹³C COSY (INADEQUATE) (直接およびロングレンジ)
 - ・ ¹H-¹H Jres (2J-3Jおよびロングレンジ)
 - ・ ¹H-¹³C Jres (2J-3Jおよびロングレンジ)



業界最高の予測製品です。
Freie Universität BerlinがNMR予測精度について、他製品との比較を発表しています。



NMR予測ソフトウェアは、教育現場における優れたツールです。
NMR装置にアクセスできない場合や、NMR分光法の高度な概念を説明する場合に役立ちます。
特定構造の特徴的な1Dおよび2D NMRデータセットを予測することにより、NMRを使用した構造解析を教えます。

ACD/NMR Workbook Suite

構造検証を迅速に行うことを目的としたNMR分析者向けの高度な処理および解釈ツールを提供します。ACD/NMR WorkbookおよびACD/NMR Predictor Suiteの機能が搭載されています。これら機能に加えて、構造検証のための強力な機能が追加されています。

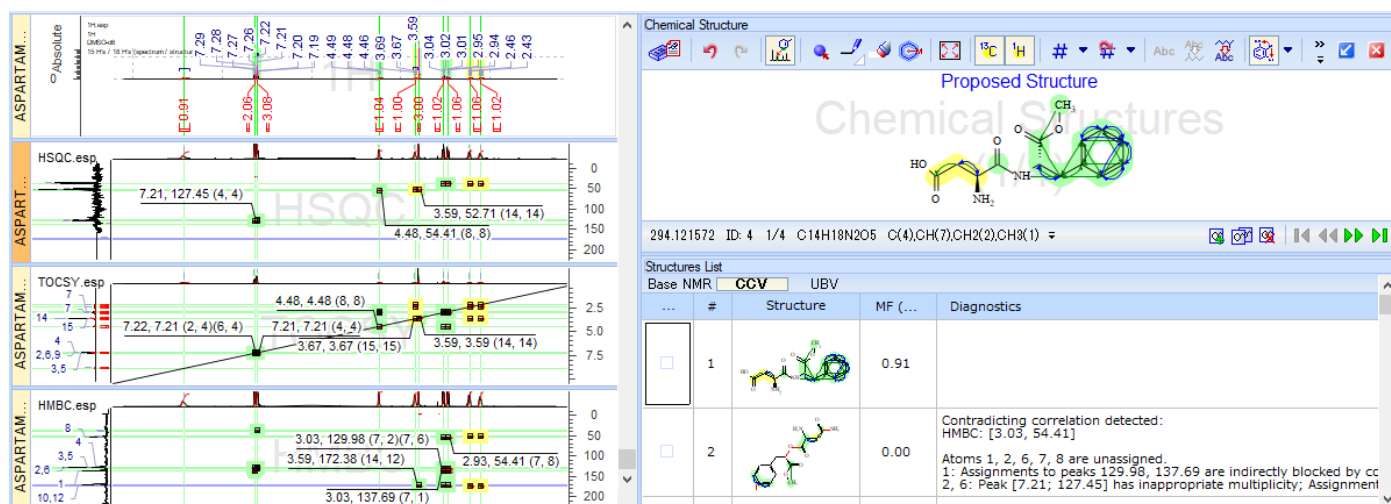
機能

構造検証 ～Combined Concurrent Verification (CCV)～

構造帰属の信頼性をさらに高めるために、NMR Workbook Suiteには、Combined Concurrent Verification(CCV)機能が含まれています。異性体構造を生成および評価をすることにより、構造検証の信頼性を高めます。

- ・ 手動による解釈よりもはるかに少ない時間と労力でテストします。
- ・ ユーザー定義の提案された構造に基づいて、異性体構造（ネガティブコントロール）を自動的に生成します。
- ・ 異性体構造が実験データと非常に一貫していることが判明した場合、ユーザーに通知します。

この検証テストに合格した構造は、どちらが最適な構造であるかを判断するために、さらに調査が必要であることを示しています。逆に、異性体がテストに合格しない場合、提案された構造が正しいものである可能性が高くなります。CCVを使用すると、構造検証結果をより信頼できるようになります。



さらなる構造検証 ～Unbiased Verification (UBV)～

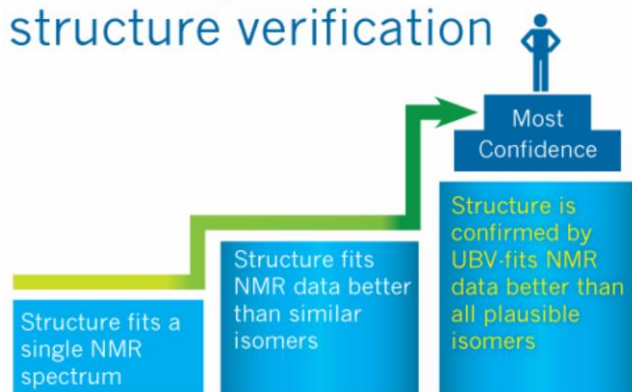
Combined Concurrent Verification(CCV)検証機能より、さらに網羅的に構造を検証します。

与えられた構造の異性体だけでなく、類似構造の検証も行います。

UBV機能を使用するには、以下の制限があります。

- ・ 構造式が1つ必要です。
- ・ 炭素原子は20未満です。
- ・ 合計で22未満の炭素原子と窒素原子となります。
- ・ 分子量は800未満でなければなりません。
- ・ ^1H 、HSQC、HMBCのすべてのスペクトルデータが必要です。
- ・ ^{13}C スペクトルはオプションとなります。

Removing user "bias" from structure verification



ACD/Known Structures Search Add-on

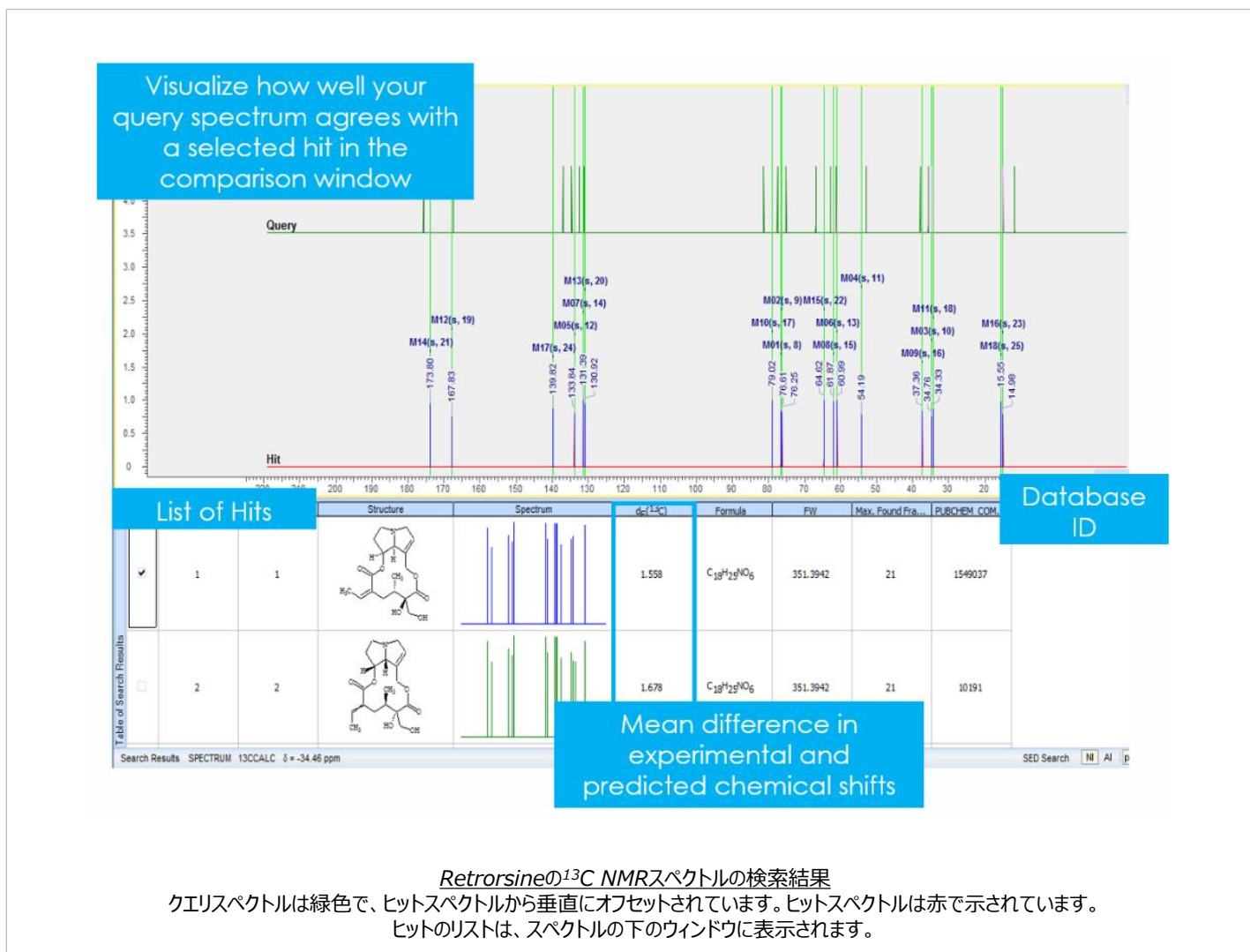
約1億件の既知化合物の構造式データベースから ^{13}C NMRスペクトルで検索を行い、未知化合物の同定作業を支援します。

* ACD/Spectrus Processor、ChemAnalytical Workbook、NMR Workbook、NMR Workbook Suiteに追加できます

特長

化合物の実験データ (^{13}C NMRスペクトル) が既知構造の予測スペクトルと一致するかどうかを判断することにより、未知の化合物の同定や既知構造排除の作業を簡素化します。ACD/Labsをリードする独自のNMR予測ニューラルネットワークアルゴリズムを使用しています。

- ・ オープンデータベース (PubChemなど) から収集された約1億件の既知構造のデータベースを使用します。
- ・ プロジェクト内の ^{13}C 、 ^1H - ^{13}C HSQCおよび ^1H - ^{13}C HMBC NMRスペクトルの任意の組み合わせ、または、個別の ^{13}C 、HSQC、HMBC NMRスペクトルを使用し、高速で検索します。
- ・ 実験スペクトルと予測スペクトルの平均化学シフト偏差、およびそれらの構造とデータベースIDに関する結果が表示されます。



^{13}C NMRスペクトルを使用したACD/Known Structures Search Add-onは、未知構造が以前に特定されたかどうかを判断するのに費やす時間を大幅に削減できるため、非常に強力な方法です。正確に予測された ^{13}C NMRスペクトルのデータベースは既知構造の排除の非常に強力なリソースであり、PubChemは報告された構造の非常に貴重な情報源であることがわかります。

ACD/Structure Elucidator Suite

NMRスペクトルデータから、複雑な未知化合物の構造解明を実行できます。
ACD/Labs社が提供するスペクトル解析の最上位ソフトウェアとなります。

特長

ACD/Structure Elucidator Suiteを使用すると、迅速なデレプリケーション、高度な検証、複雑な未知構造を解明することができます。デレプリケーションでは、構造ライブラリ（PubChemデータベースを含む）を用い、帰属済みのスペクトル情報から、構造式をすばやく見つけて検証できます。データベース内で構造が特定されないような複雑な構造の場合は、de novo構造解明を可能にし、実験データで観察された相関に適合するあらゆる構造式を生成します。また、分子式などの分析情報を使用して構造式の可能性を絞り込み、迅速かつ効率的に解決するのに役立ちます。

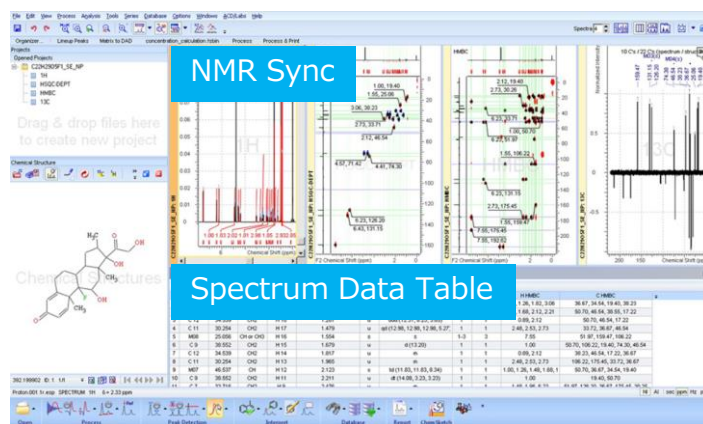
解析フロー

手順1 | NMR Sync機能を用いたデータ処理

データをドラッグ&ドロップすることにより、簡単にプロジェクトに組み込むことができます。

候補となる構造がある場合、それを含めることができます。

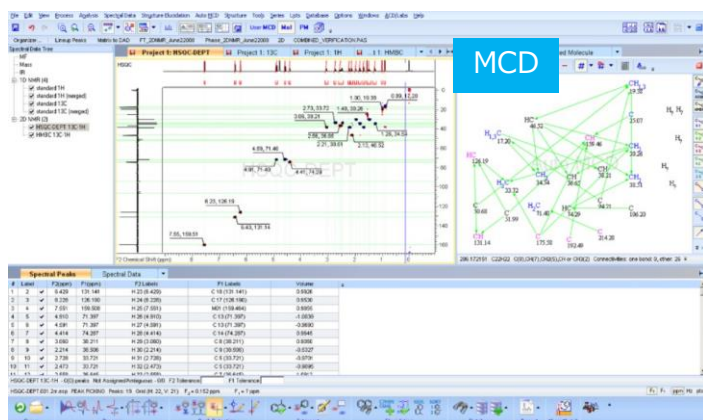
ピークピッキングは、NMR Sync機能を使用して、プロジェクト内のすべての関連するスペクトルを介して自動的に行うことができます。スペクトルデータテーブルは、プロジェクトのすべての要素を追跡できるようにテキスト形式でテーブル表示されています。



手順2 | 構造骨格の自動生成～Molecular Connectivity Diagram: MCD～

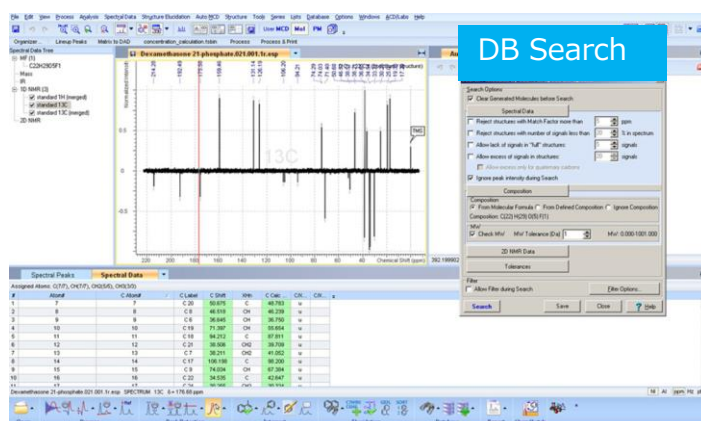
MSデータより分子式情報を入力します。

Molecular Connectivity Diagram (MCD) は、NMRデータで検出された相関関係と分子式から新規に作成されます。



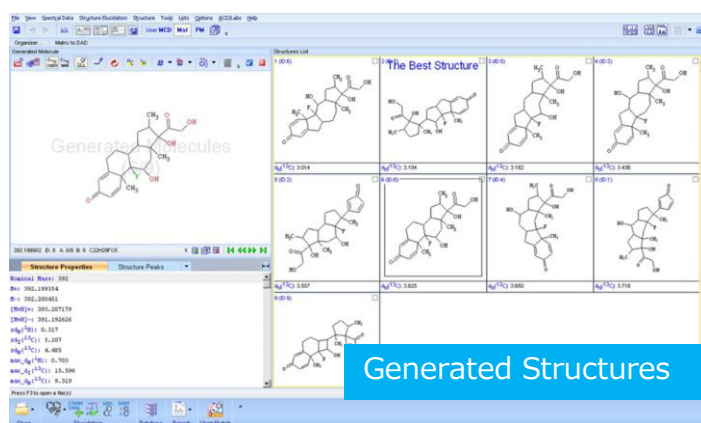
手順3 | PubChemデータベース検索による構造同定

多くの化合物が既に同定され、公開されているため、構造解析という困難な作業に入る前に、利用可能なナレッジを検索するのが賢明です。ACD/Structure Elucidator Suiteは、PubChemデータベースのスペクトル検索、または自社データベースへの検索を可能にします。



手順4 | 候補構造の自動生成とランク付け

候補構造を生成した後、ACD/Structure Elucidator Suiteは、比較と意思決定支援を容易にするために構造をランク付けします。詳細なレポート、化学データベースおよびスペクトルデータベースへの新規追加などを引き続き行うことが可能です。



主な機能

- ACD/Structure Elucidator Suiteには、ACD/NMR Workbook SuiteおよびACD/MS Structure ID Suiteの高度な処理および解釈機能とアルゴリズムがすべて含まれています。
- NMR Sync機能 | データセットのすべてのスペクトルにわたってピークピッキングと帰属を自動的に同期します
- デレプリケーション | 内部および外部ライブラリを使用して、既存構造を検索します
ACD/Structure Elucidator Suiteの内部ライブラリには、約425,000の化合物からの200万を超える構造フラグメントが含まれており、ソフトウェアはPubChemデータベースにもアクセスできます。これらの広範なデータベースを検索することにより、分析データと一致する既知のフラグメントを識別する時間を節約できます。
- 構造評価 | 予測されたNMRスペクトルと実験のNMRスペクトルを自動的に比較し、一致度を確認できます。
- データベース構築 | 実験スペクトル、化学構造、分析結果、ユーザーデータ、メモを登録できます。
- 相対立体化学の決定 | 3Dで構造を最適化し、NOESYおよび/またはROESYデータを使用して構造の立体化学を決定します
- PubChemデータベース | ACD/Labsは、PubChemと協力して、PubChemデータベースを配布できるようにしました。
データベースには、ACD/Labs予測NMR化学シフト、構造、PubChem ID番号が含まれています。



市場で最もピアレビューされたソフトウェア

20年以上に渡る開発を経て、ACD/Structure Elucidator Suiteは、コンピューターによる構造解析に関する1000以上の査読付き論文で取り上げられています。

ACD/MS Workbook Suite

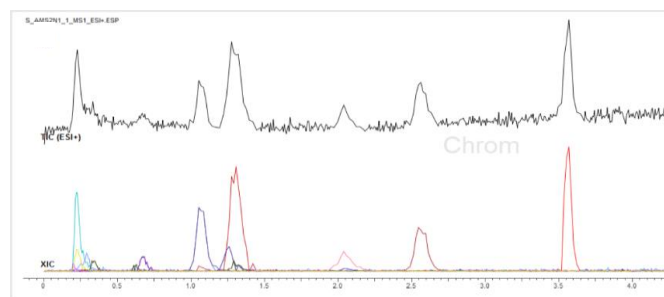
LC/MSおよびGC/MSデータ中の成分ピーク検出、識別、特性評価のための究極のパッケージです。成分分析やマススペクトルと構造式の自動帰属などの機能により、解析を支援します。

特長

成分ピーク抽出

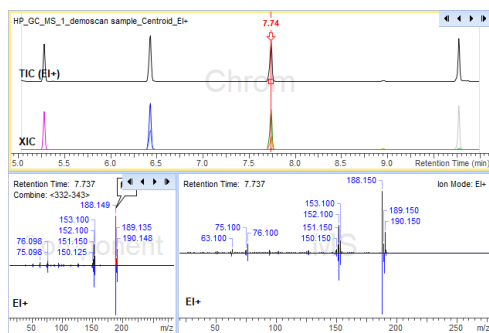
強力なIntelliXtractアルゴリズムを採用し、独自のイオンスレッド技術により、関連するすべてのクロマトグラフィー成分ピークを確実に抽出します。

- ノンターゲットスクリーニングおよびデプレケーションの効率が向上します
- 共溶出ピークを区別します
- 同位体、付加体、多量体、フラグメントイオン等の重要なスペクトル特徴を容易に付加できます



同定解析

既知化合物スクリーニングのためのIntelliTargetアルゴリズムを利用して、濃度または試料の複雑さにかかわらず、成分を同定します。また、IntelliXtractアルゴリズムにて成分ピークを迅速に識別し、自社または市販スペクトルライブラリ（Wiley&NIST）に検索をかけ、GCMSやLCMSMSデータ中の成分を同定します。

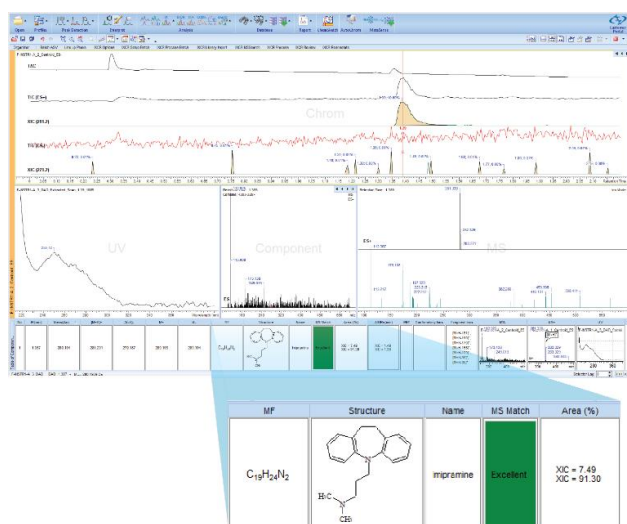


S...	trR(...)	Mass(Ao)	M+.	Mass Di...	MF	Structure	Name	MS Match
✓ 1	5.278	184.219	184.219		C ₁₃ H ₂₈	<chem>CCCCCCCC(C)CCCC</chem>	4,7-Dimethylundecane	
✓ 2	6.431	154.078	154.078	0.022	C ₁₂ H ₁₀	<chem>c1ccc(cc1)-c2ccccc2</chem>	1,1'-Biphenyl	
✓ 3	7.737	188.039	188.039	0.110	C ₁₂ H ₉ Cl	<chem>Clc1ccc(cc1)-c2ccccc2</chem>	1,1'-Biphenyl, 4-chloro-	Excellent
✓ 4	8.955	253.071	253.071	0.007	C ₁₃ H ₁₀ F ₃ NO	<chem>COC(=O)c1ccc(cc1)-c2ccccc2</chem>	(3E)-1,1,1-trifluoro-3-(1-methyl-2-	Good
✓ 5	9.772	270.256	270.255	0.044	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	<chem>CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O</chem>	Hexadecanoic acid, methyl ester	Excellent

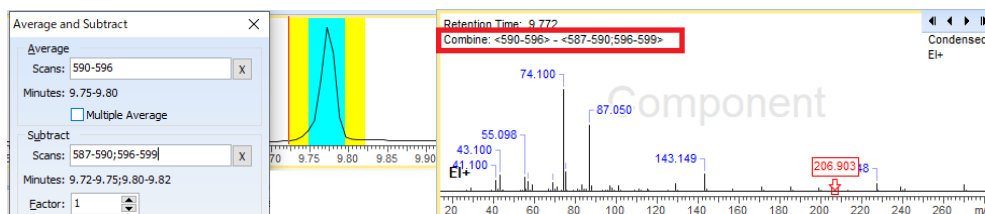
ピークの評価

構造式候補のヒットと実験データの適合を検証するために、分子式を生成し、質量フラグメントを予測する組み込みツールを使用して成分を特徴付けます。

- 構造式、分子式または質量をTable of Componentsに手動で追加して、一致するイオンクロマトグラムを自動的にスキャンします
- 色分けされたMS Matchカテゴリ（Excellent、Good、Poor）は、モノアイソトピックおよびアイソトピックピークと実験データの整合性を示します



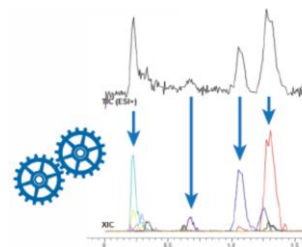
- ほとんどの主要な機器ベンダー形式のデータをインポートできます
- すべての分析データ（MS、クロマトグラフィー、UV/IR、NMR、ラマンなど）を同じインターフェイスで処理、表示、解釈します
- データのインポート時にクロマトグラフィーのピークを自動的に検出します
- 手動でクロマトグラムを抽出し、ピーク検出と積分を調整します
- 手動または自動平均減算により質量スペクトルを生成します
- ターゲット質量の組成を推定します
- 構造式からマススペクトルをシミュレーションします



手動による減算スペクトル

効率的なMS自動化およびスクリプトオプション

- ルーチンのデータ処理、ファイルの移行、予測される物理化学的特性を備えた構造データベースの作成を自動化することにより、MSワークフローを合理化します。
- ACD/MS Workbook Suiteを他のアプリケーション（ラボラトリ情報管理システム：LIMSなど）と統合して、分析化学機能を強化したシステムを構築します。

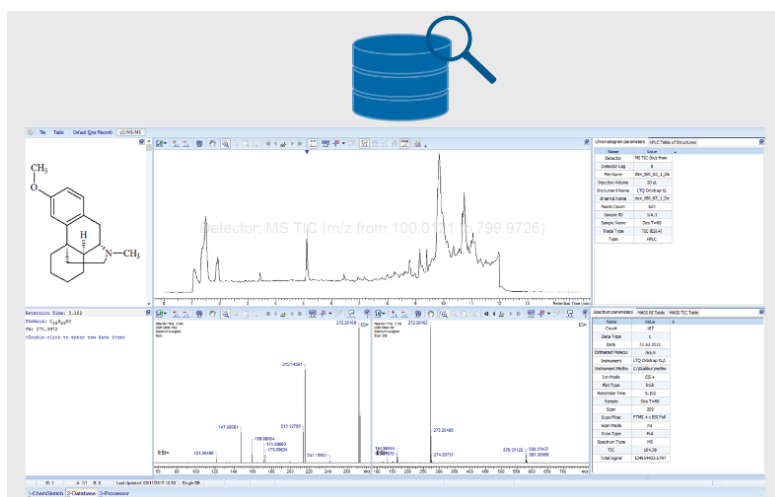


革新的な知識管理 | ライブマススペクトルDBを作成

ACD/MS Workbook Suiteを使用して、構造式の割り当て、注釈、その他の関連データとともに、マススペクトル、クロマトグラム、UVスペクトルの検索可能なライブDBを作成します。

データをキャプチャするだけでなく、スペクトルと構造の関係を含む分析的解釈を行うことにより、組織全体で効果的に知識を共有します。

- 注釈を付けて分析したデータを簡単に保存、検索、取得でき、スペクトル、クロマトグラム、構造、テキスト、画像、レポート、またはスプレッドシートへのリンクも可能です
- 構造、スペクトル、テキストのさまざまなパラメーターでデータベースを検索します
- 組織の理解を深めるために、データの専門家の解釈を共有できます
- 分析の重複を避けることにもつながります
- 科学的研究開発のための共同プラットフォームを提供します



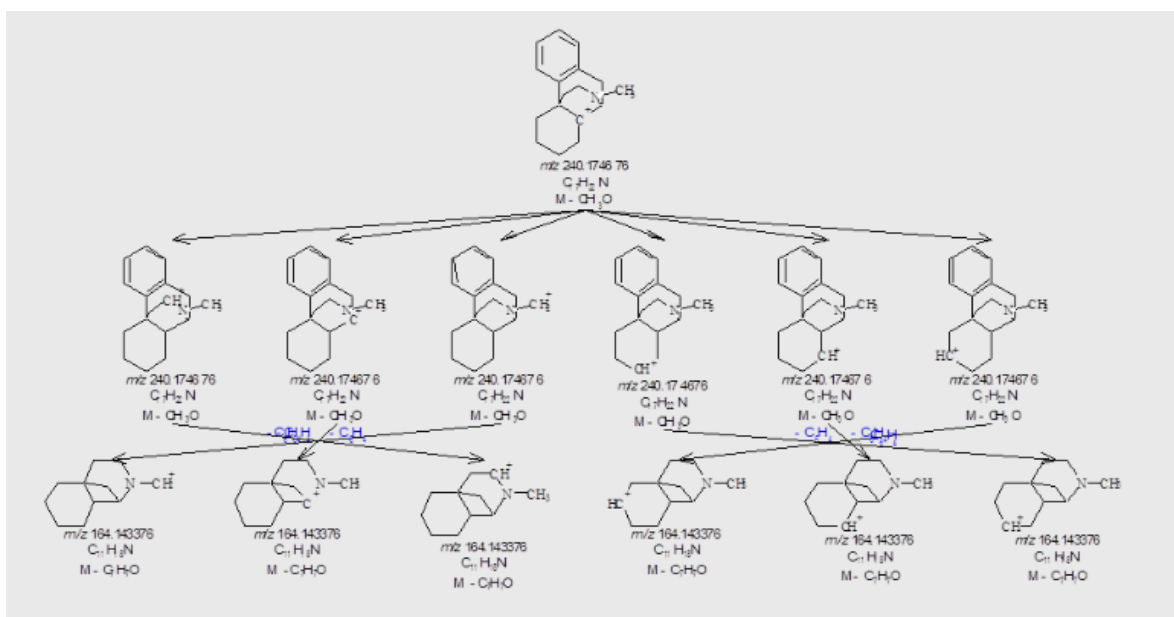
ACD/MS Fragmenter

構造式からフラグメントイオンを予測します。
マススペクトルと構造部位を自動で帰属します。

特長

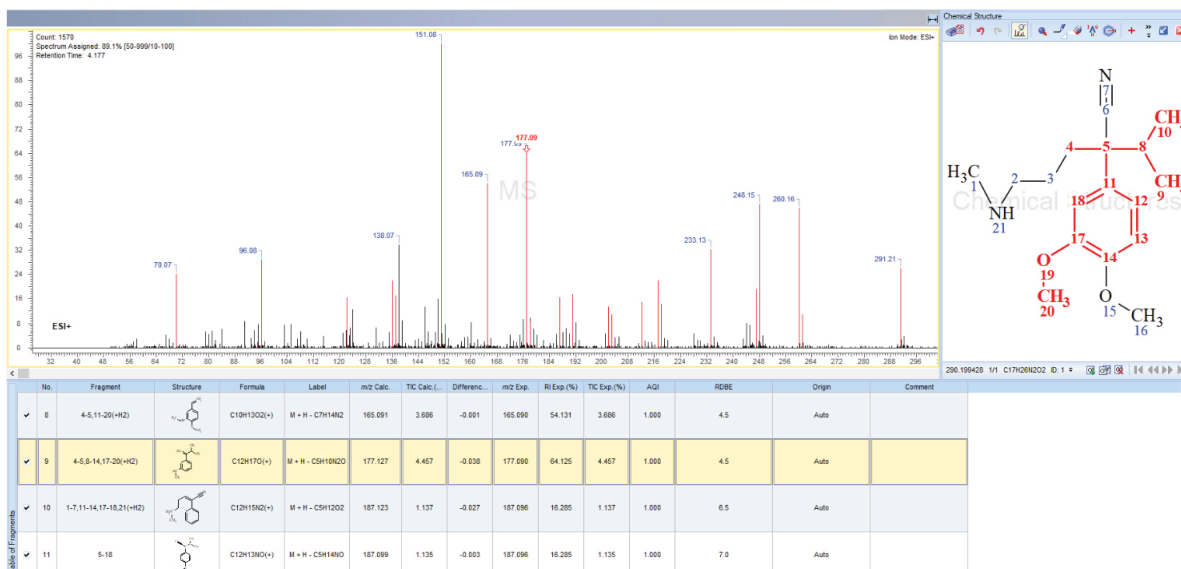
フラグメントイオン予測

搭載されているフラグメント開裂ルールを基に、入力構造式から可能性のあるMSフラグメント（ポジティブ/ネガティブ）を網羅的に予測します。予測されたMSフラグメントはフラグメントスキームと共に表示されるため、フラグメント予測の妥当性の検討も手軽に行えます。



マススペクトルと構造式との自動帰属

候補構造の予測フラグメントイオンを実験MSスペクトルと比較して、帰属結果を評価します。自動帰属後のフラグメント、ピーク、部分構造が連動してハイライト表示されるので、推定構造式の検証やスペクトルの解釈も一目で確認できます。



ACD/MS Structure ID Suite

精密質量を使用して分子式を予測することで未知の成分を効率的に識別し、このデータを使用して標準搭載されたPubChem構造データベースを検索します。データベースのヒット化合物に対して、保持時間フィルタリング、およびフラグメント自動帰属を実行し、上位構造候補を評価します。

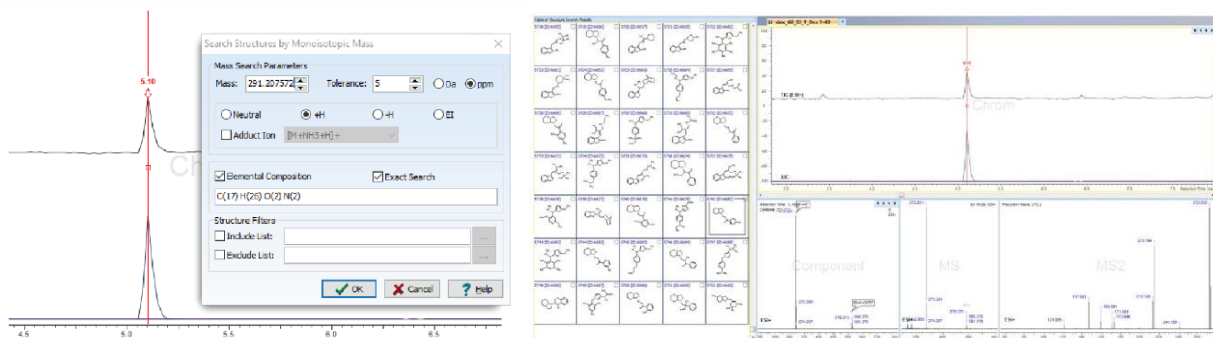
特長

構造解析のための最先端のMSツールセット

ACD/MS Structure ID Suiteは、ACD/MS Workbook Suiteで利用可能なすべての解析処理、解釈、特性評価機能に、MSデータの構造識別および検証を拡張する追加ツールを組み合わせたものです。

以下の機能を使用して、未知の成分を簡単に特定します。

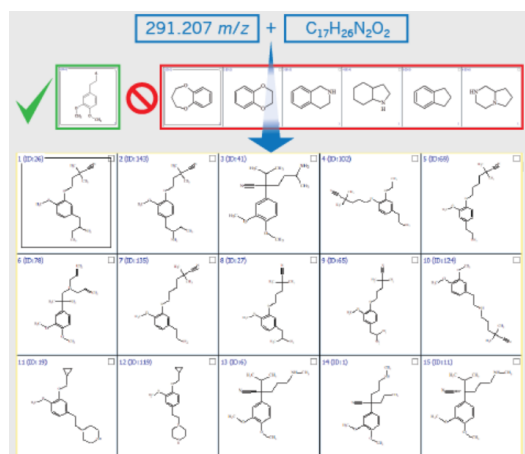
- PubChemデータベーススクリーニング（精密質量および/または組成式による）
- 構造フィルタリング
- フラグメントパターンおよび/または保持時間の予測による候補リストのランキング



シンプルで効率的なワークフロー

ACD/MS Structure ID Suiteを使用して、2段階または3段階のプロセスでターゲット精密質量の構造を特定します。

1. ターゲットの精密質量および/または推定組成を使用して、ローカルにインストールされたPubChem構造データベースにクエリを実行します
2. 各構造候補の予測されたフラグメントイオンと実験スペクトルとの帰属によってランク付けされた構造ヒットリストを調べ、部分構造の包含/除外リストを送信して、結果数を減らします。
3. または、予測されたLC/MSまたはGC/MSの保持時間で構造候補をランク付けします



MS Structure ID Suiteのメリット

- PubChemデータベースに含まれる1億を超える構造へのアクセスが可能です
- 広範囲に関連性のある構造候補リストを生成します
- ターゲット成分のMSスペクトル（予測フラグメンテーションに基づく）との帰属、または保持時間に依りてヒットをランク付けします
- Known-unknownの構造特性評価のプロセスを大幅に合理化します

ACD/Method Selection Suite

物理化学的特性の予測とメソッド最適化ツールを組み合わせ、堅牢な分離を効率的に生成することにより、メソッド開発を合理化します。

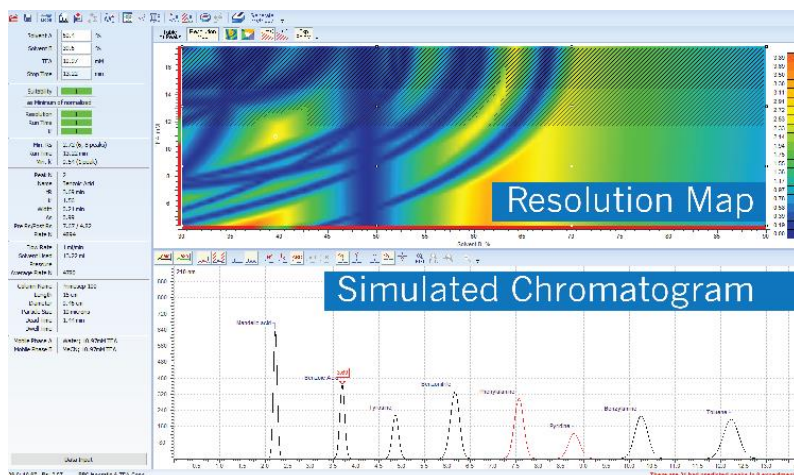
特長

より短い時間でより良いクロマトグラフィー手法を開発

- 成分の物理化学的特性を推定して、優れた開始条件を定義します
- Quality by Design (QbD) の原則（最適化、デザインスペースの拡大など）に従ってメソッドを改善するために、さまざまな実験条件をシミュレーションします
- 定義済みのさまざまなモデル（タンパク質、HILICなど）を使用して分離を最適化するか、独自のモデルを構築します

HPLCおよびGCメソッドの開発、最適化、シミュレーション、および検証

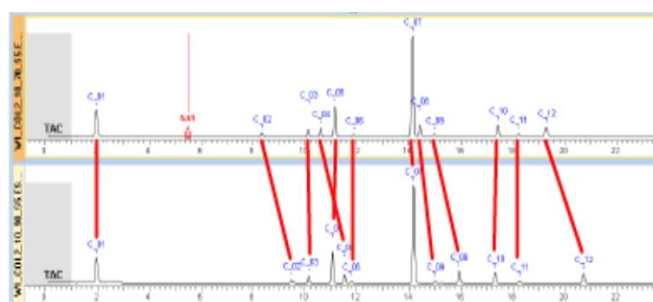
- LC (pKa, logPなど) およびGC (沸点など) 分離のためのターゲット化合物の関連する物理化学的特性を正確に予測します
- 構造的に類似した分子のグループを使用して、ターゲット化合物の保持時間を予測します
- ベンダーとユーザーが生成したカラムリストを含むColumn Selectorツールを使用して、実験に最も最適なカラムを特定します
- pH、温度、勾配、溶媒比などの分離パラメーターを最適化し、実行時間、保持係数、分離能など定義された基準を満たします
- スペクトル類似性を使用してLC/UV (DAD、PDA) データセット間のピーク追跡を合理化します



メソッドの成功基準、シミュレートされた分離度マップおよびクロマトグラムを含むACD/Method Selection Suiteインターフェイス

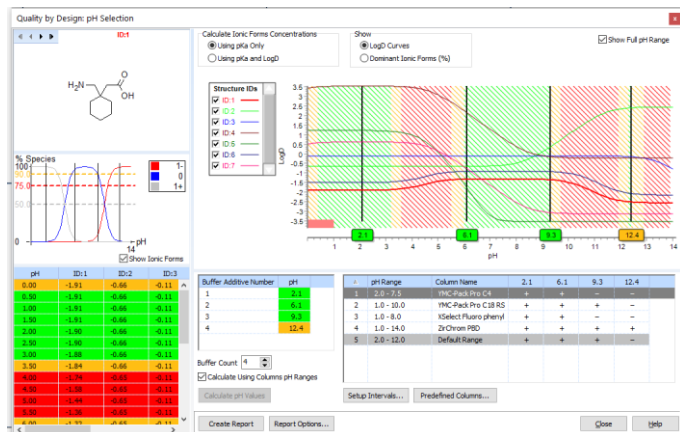
ACD/Method Selection Suiteのメリット

- より少ない注入、より短い時間で高品質のメソッドを開発
- 複数の異なる機器ベンダーからのクロマトグラフィーデータのインポートと分析
- 成功したメソッドを検索および共有可能なデータベースに保存し、コラボレーションを改善し、以前のメソッド開発作業の重複を回避
- ピークトラッキングアルゴリズムを使用して、分析間の手動ピークマッチングの負担を軽減

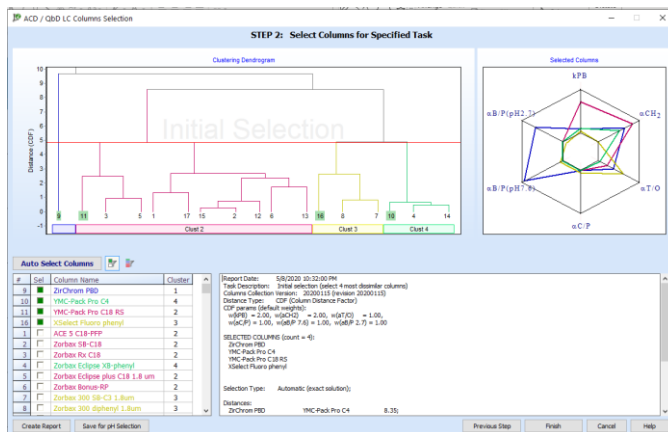


Liquid Chromatographyにおける機能

- 構造からpKaとlogD値を計算します
- 複雑な混合成分の分離を次のパラメータで最適化します
 - ・1D最適化モード（グラジエント溶出プログラム、温度、溶媒比pH、流量、その他のユーザー定義パラメータ
 - ・2D最適化モード（RPアイソクラティック/温度、勾配/温度、3溶媒比、RPアイソクラティック/pH、勾配/pH、ユーザー定義）
- UV相互自動ピークマッチングアルゴリズム（UV-MAP）を使用して、LC/UVデータセット間のピーク追跡を効率化します
分析間のデータから同じピークのUVスペクトルを重ね合わせて精度を確保しています
- 分離度マップと一緒に適合度マップを分析して、すべての基準（実行時間、保持係数など）の品質をまとめて視覚化します



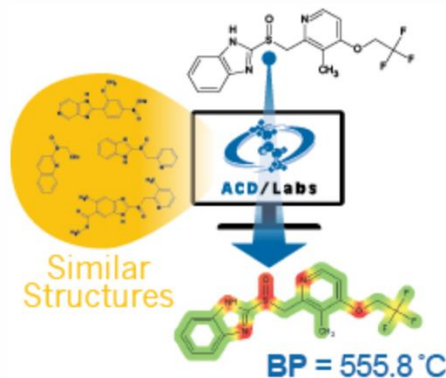
混合物分離に役立つpH Selector



カラム選択に役立つColumn Selector

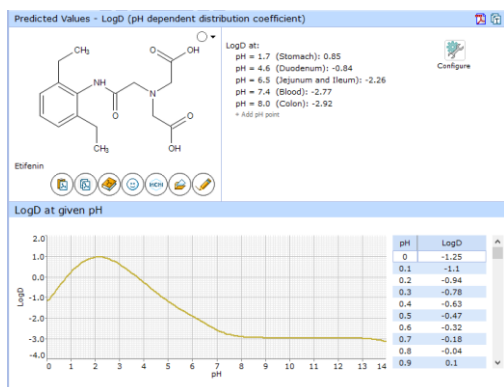
Gas Chromatographyにおける機能

- 構造から沸点値を予測して溶出順を定義します
- 実測の沸点値と保持時間を使用して、分離のための予測式を計算し、新しい混合物の溶出時間を推定します
- 同じ混合物の異なる条件下での2つの実験クロマトグラムを使用して、温度勾配を最適化します



物性予測における機能

- 次のようなさまざまな物理化学的特性を予測します
 - ・LogP、LogD、pKa



Method Selection Suiteで利用可能な物理化学的および分子特性

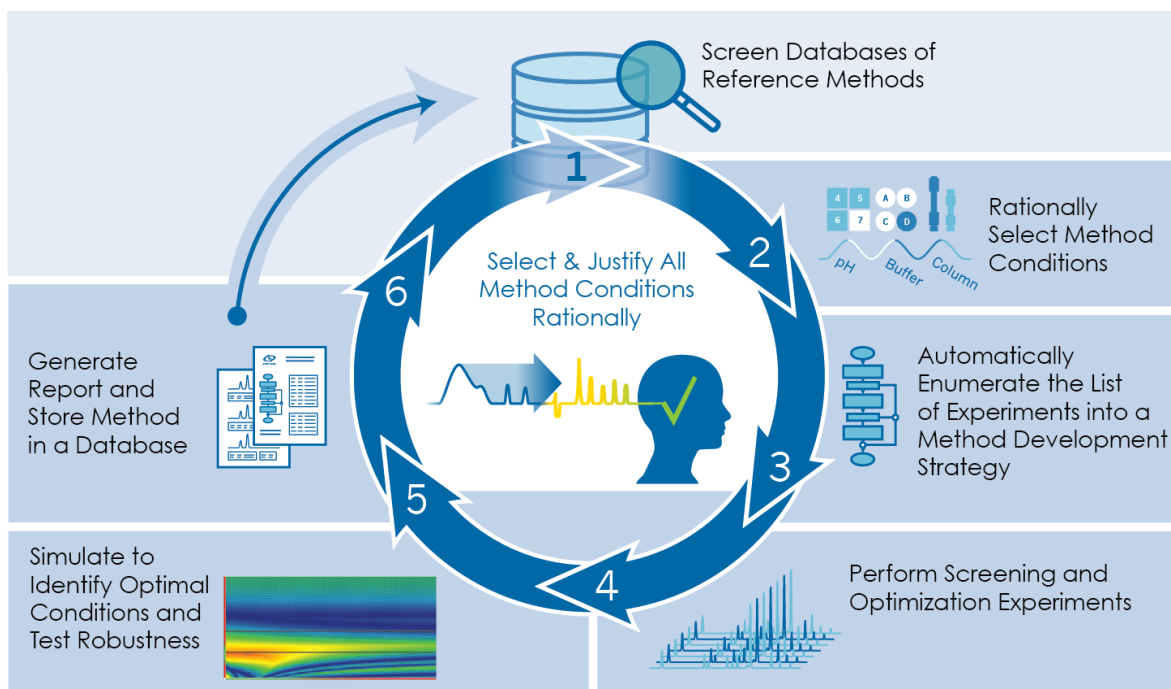
Adsorption Coefficient (K _{oc})	H-Bond Donors & Acceptors	Parachor
Bio-Concentration Factor	Index of Refraction	Polar Surface Area
Density	Molar Refractivity	Polarizability
Freely Rotatable Bonds	Molar Volume	Surface Tension
	Molecular Weight	

ACD/AutoChrom

ACD/AutoChromは、QbD（Quality by Design）の原則に従って、論理的なメソッド開発を促進するソフトウェアパッケージです。

特長

ACD/AutoChromを使用して、最適なLC/MSおよびLC/UV分離を実現します。また、優れた開始点を選択し、インテリジェントな最適化を実行することで、より短時間でより良いメソッドを取得します。ACD/AutoChromのQbDアプローチは、多変量最適化、実験計画（DoE: Design of experiments）スペースの体系的なカバレッジおよびメソッド開発プロセス全体の堅牢性モデリングを提供します。



メソッド開発自動化 | オンラインモードとオフラインモード

ソフトウェアには2つのバージョンがあります。

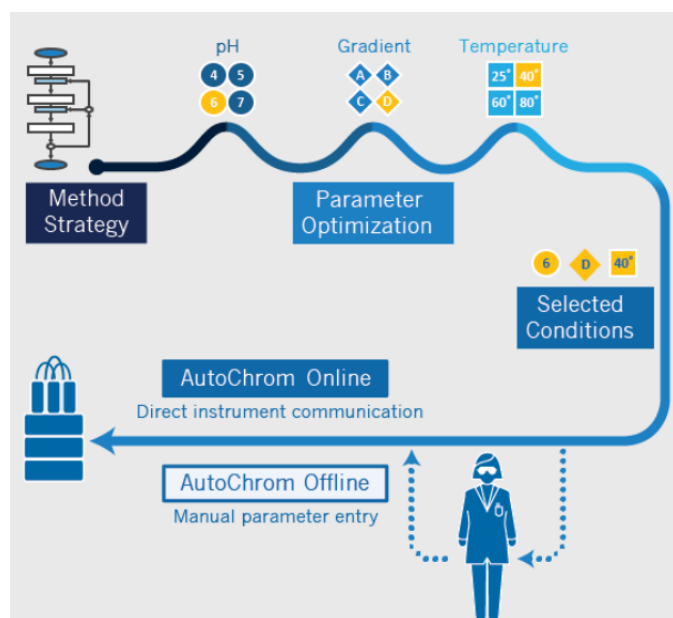
【AutoChrom Offline】

高品質で堅牢な分離の効率的な設計を保證するすべてのメソッド開発機能が含まれています。
すべての機器のデータセットを手動で扱うことができます。

【AutoChrom Online】

全てのメソッド開発ツールとAgilent ChemStationおよびWaters Empower機器を直接操作する機能を組み合わせています。
パラメータを各システムに直接送信可能です。

- 分離パラメーターを定義します
- 実験を実行するように機器に指示します
- データ処理と解釈のガイドをします
- 次に実行する実験を提案します
(追加のデータを組み込むことでより良い分離を達成できる場合)

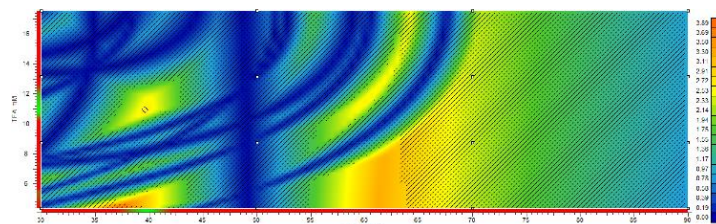


機能

- さまざまな分離条件をスクリーニングして、最適なシナリオを選択します
- 複数のパラメーター（溶媒比、pH、勾配、温度）を簡単に最適化し、必要に応じてユーザーガイダンスを提供します
- 最終的なメソッドの品質を評価するための主要なパラメーターを変化させることにより、堅牢性試験を実施できます
- 分析間で関連するすべてのピークをアルゴリズムで追跡することにより、手動のUVおよびMSピークマッチングを合理化します
- 成功したメソッドを検索可能なデータベースに保存します
- AutoChrom Onlineを使用して、Agilent ChemStationまたはWaters Empower機器と直接通信可能です

堅牢性試験

- 目的の方法から派生した反復実験のリストを自動的に生成
- 流量、温度、勾配、pH、バッファー濃度、溶媒比など、多くの堅牢性変数を簡単に評価
- JMP統計ソフトウェアとの組み込みにより実験条件を評価



解像度マップの適切な領域をさらに探索する反復実験による堅牢性評価

プロジェクト管理

- ダッシュボードを使用してプロジェクトを簡単に管理します
- 各インジェクションとデータ全体の両方からのデータを確認または再処理できます
- 実験テーブルを拡大して、調べたサンプルと実行したインジェクションの階層をすばやく表示します
- すべてのサンプルのクロマトグラムに対して、最適な方法を選択/最適化します
- 実験データとモデル化されたデータを1か所に保存して、実験の根拠を効率的に確認します
- クロマトグラムとUVまたはMSスペクトルをピークテーブルとともに表示します
- すべてのファイルは化学構造と処理結果とともに自動的に保存されます

Experiment	Status	Avg As*	Avg Rs*	#C...	Rejected	Unlabeled	#(TAC)	Data Type
pH 2	Complete	0.99/1...	4.829	1 (...)			11	-
Alizarin Standard	Complete	1.02	1.592	1 (...)			2	-
UV ded1.uv	Complete	0.99	2.039	1 (...)		1		LQ/UV
UV TAC	Complete	0.99	1.428	1 (...)			2	TAC
ded1A.ch	Complete	1	1.444	1 (...)				Trace, 250 nm
Extract of Sweetbitch	Complete	0.97	8.417	1 (...)			4	-
Extract of Mango	Complete	0.99/1...	5.313	1 (...)			5	-
pH 5.00	Complete	0.97	4.928	1 (...)			12	-

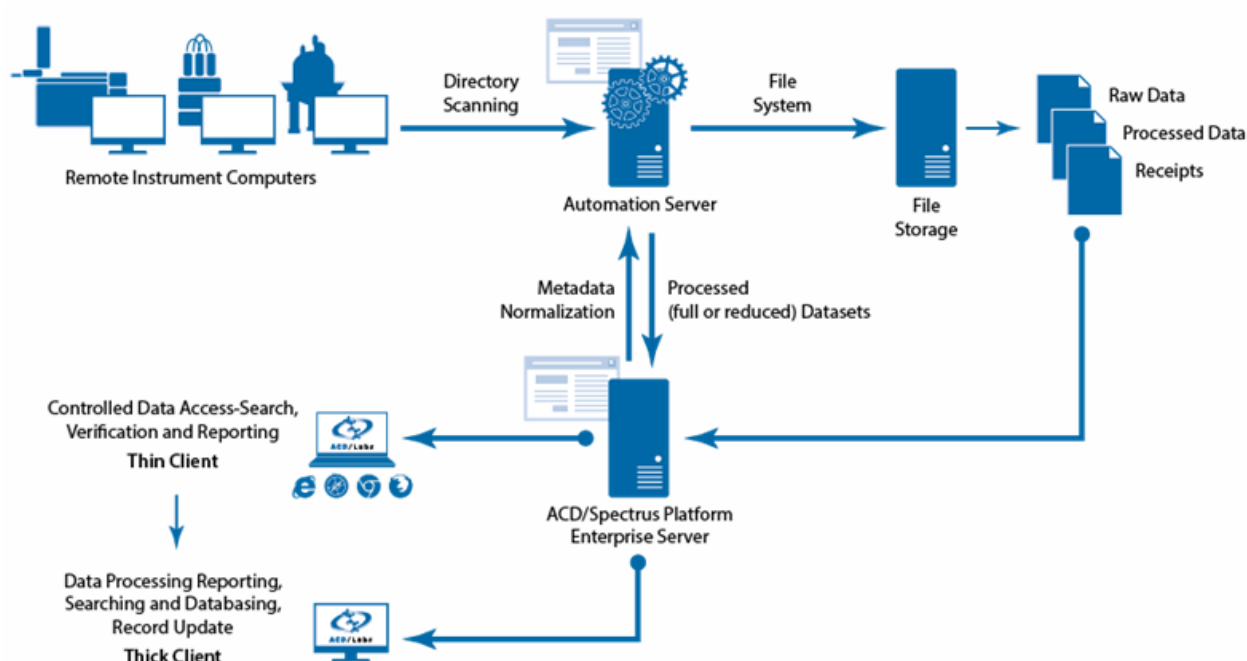
ACD/Automation Server

ACD/Labsは、ラボの日常的なタスクを自動化するためのさまざまなオプションを提供します。これらのオプションは、ソフトウェアを使用して直接、または製品を外部システムと統合することにより、さらに柔軟性を高めることができます。

特長

ACD製品によって実行されるほとんどのプロセスは、マクロ、スクリプト、またはカスタマイズを通じて、自動化することができます。分析ワークフローの一部またはすべてを自動化し、構造の名前を付けたり、体系的な名前から構造を作成したり、物理化学的およびADME/Toxプロパティの予測、データベース化やレポートのアクションを実行したり、これらの機能を独自のカスタマイズ可能な方法で組み合わせたりできます。

ACD/Automation Serverソフトウェアは、反復作業の面倒な作業をなくし、高度な分析をバックグラウンドで実行することで価値を提供し、完全に標準化された分析、処理、およびレポートを提供しながら、人的ミスの可能性を減らします。



作業の自動化（分析装置からの自動データ収集、ファイルサーバへのデータ保管、自動解析処理、データベース格納など）
データベースはACD/Spectrusシリーズにて閲覧・検索・解析が可能です。

自動化による付加価値

- 組織全体で完全に自動化されたプロセスの作成
分析機器からのデータ処理とデータベース化を自動化し、LC/UV/MSによる自動純度分析、またはNMRによる自動構造検証を提供します。
- QA/QCを視覚化
サンプルコードをクエリすることにより、すべての関連データをデータベースから読み取ることができます。クエリされたスペクトルと参照スペクトルは、2つのサンプルを簡単に比較できるように、自動的に一緒に表示するか、重ねて表示できます。
- 複数または外部ソースからのデータのインポートと結合
同じサンプルに対して異なる実験手法からのデータを組み合わせる場合、データベースの整合性を維持し、重複を回避することが最も重要です。スクリプトを通じて、既存データベースで一般的なサンプル識別子を探し、一致が見つからない場合にのみ、新しいレコードを作成します。それ以外の場合は、元のレコードに追加されます（上書きされません）。

ACD/Databases

ACDでは各分析手法に対するデータベースも提供しています。

各分析手法のデータベース

ACD/NMR Databases

ACD/LabsのNMRデータライブラリにより、帰属された構造と参照を備えた、綿密に調査された実験NMRデータにアクセスできます。データベースは、 ^1H 、 ^{13}C 、 ^{15}N 、 ^{19}F 、および ^{31}P で利用できます。

各データベースには、化学シフト、文献参照、分子式、分子量、および各構造レコードのIUPAC名が含まれております。NMR Predictor SuiteおよびNMR Workbook Suiteのアドオンになります。

また、サードパーティライブラリも提供しています。データベースにアクセスするにはACD/Spectrus Processorが必要です。

- ACD/Polymer Database (439 records)
- Aldrich NMR Library for ACD/Labs (>35,000 compounds with multiple spectra)

Wiley Mass Spectral Reference Libraries

Wileyとのパートナーシップを通じて、ACD/Labsは複数の質量スペクトルデータベースをネイティブフォーマット (*.cfd) で購入できるようにしています。これらのデータベースには、ACD/MS Workbook Suiteと組み合わせて、さまざまなスクリーニング、同定などを実行できる幅広い種類の化学物質（医薬品、ペプチド、工業用化合物、環境汚染物質など）をカバーする数十万のMSスペクトルが含まれています。

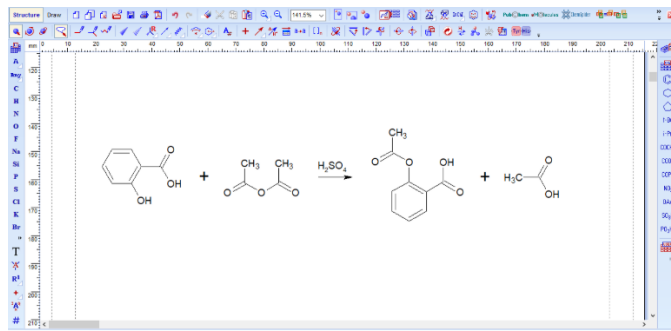
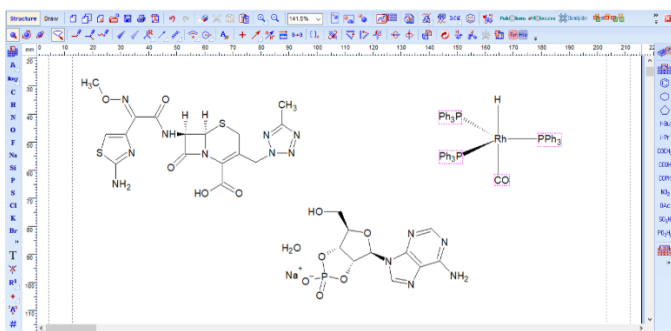
- Wiley Registry of Mass Spectral Data, 11th Edition
- NIST/EPA/NIH EI Mass Spectral Library 2020
- Wiley Registry 12th Edition/NIST 2020 EI Mass Spectral Library

ACD/ChemSketch

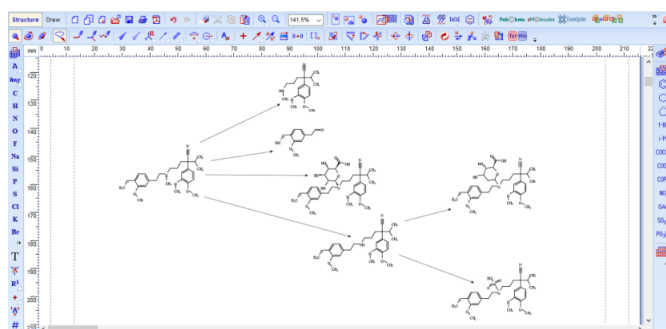
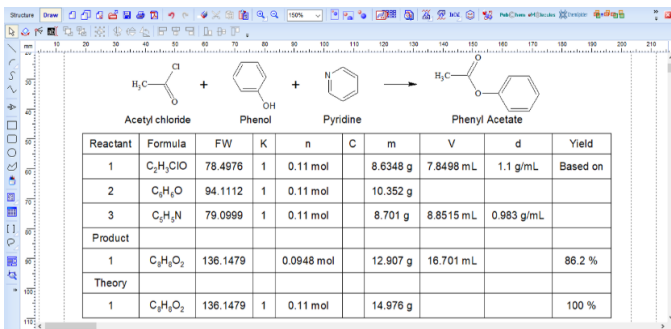
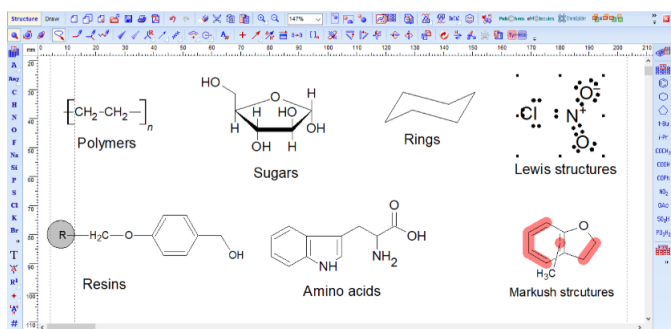
ACD/ChemSketchは使いやすく、化学的にインテリジェントな分子構造描画アプリケーションであり、世界中で多くのユーザーが利用しています。

主な機能

- 化学構造、反応、スキーマを描画し、さまざまなグラフィカルツールとテンプレートにアクセス可能です
- 分子構造から名前を生成する、またはその逆の名前から分子構造を生成することもできます
ChemSketchは、最大50原子の分子の名前を生成できます（より大きな分子の命名については、ACD/Nameが必要です）
- 化学構造から分子特性を計算します
- 専門的なレポート、プレゼンテーション、図を作成します



- InChIまたはSMILES文字列からの構造の生成、ChemDrawからのコピー/貼り付けも可能です
- アミノ酸、芳香族、ステロイド、糖などの描画テンプレートを使用して、簡単に描画できます
- 170,000を超える辞書も搭載されています
- 反応と複雑な化学スキーマ（生体内変化マップを含む）を簡単に描画します
- グラフィカルテンプレートとツールを使用して、化学とケミカルバイオロジーの概念（例：化学結合タイプ、ルイス構造、分子軌道、ニューマン図法、ペプチドシーケンスなど）を描画できます



プロフェッショナルなレポート作成

- 包括的なレポートを作成して、研究内容と科学情報を明確に伝えます
- 便利な構造、スキーマ、およびその他の化学情報をMicrosoft WordおよびPowerPointドキュメントに直接埋め込み可能です

“ACD/ChemSketchソフトウェアは非常に直感的だと思います。さらに、Wordなどの他のMicrosoft Officeプログラムとシームレスに統合されており使いやすいです。”
Thomas J. Siepmann, Attorney; Birch, Stewart, Kolasch, & Birch, LLP



機能紹介

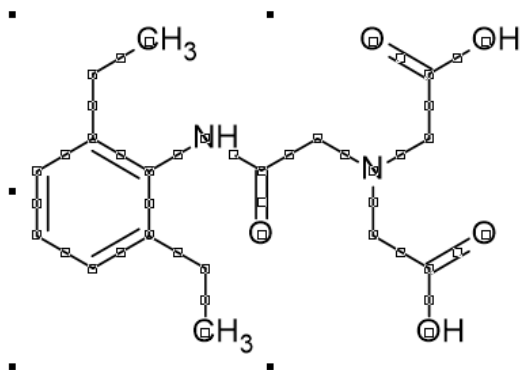
構造の名前の生成

ChemSketchは、ACD/Labsの有名な命名ソフトウェア（ACD/Name）の強力な化学名生成アルゴリズムを使用して、IUPACルールに従って名前を生成します（50個未満の原子と3個の環までの制限あり）。

分子特性の予測

構造からさまざまな分子特性を予測します。

- ・分子量
- ・式量
- ・密度
- ・LogP
- ・割合構成
- ・モル屈折
- ・屈折率
- ・モル体積
- ・密度
- ・パラコール
- ・組成式



Calculation Results	
Molecular Formula:	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₅
Formula Weight:	322.35628
Composition:	C(59.61%) H(6.88%) N(8.69%) O(24.82%)
Molar Refractivity:	85.00 ± 0.3 cm ³
Molar Volume:	250.6 ± 3.0 cm ³
Parachor:	692.6 ± 4.0 cm ³
Index of Refraction:	1.593 ± 0.02
Surface Tension:	58.2 ± 3.0 dyne/cm
Density:	1.285 ± 0.06 g/cm ³
Dielectric Constant:	Not available

検索

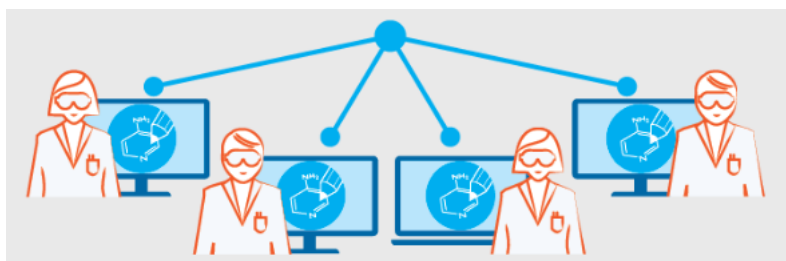
フラグメント構造、完全な構造、または部分的な構造によって、ドキュメント、アプリケーション、およびサードパーティのデータベースに検索します。

検索可能なファイル形式には、ACD/Labs、FASTA、HELM、ChemDraw、BIOVIA、Adobe、およびMicrosoft®Word、Excel、PowerPointが含まれます。また、EPA iCSS、PubChem、eMoleculesデータベースで構造を検索できます。

サイトライセンスの提供

組織全体でChemSketchを活用してみませんか？

多くの組織や教育機関では、何百人ものユーザーのためにChemSketchをサイト全体に配布しています。詳細については、お問い合わせください。

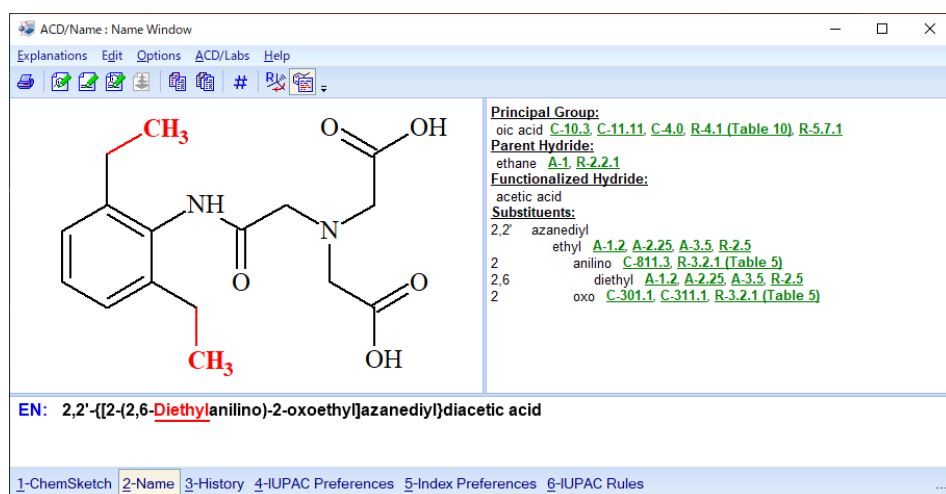


ACD/Name

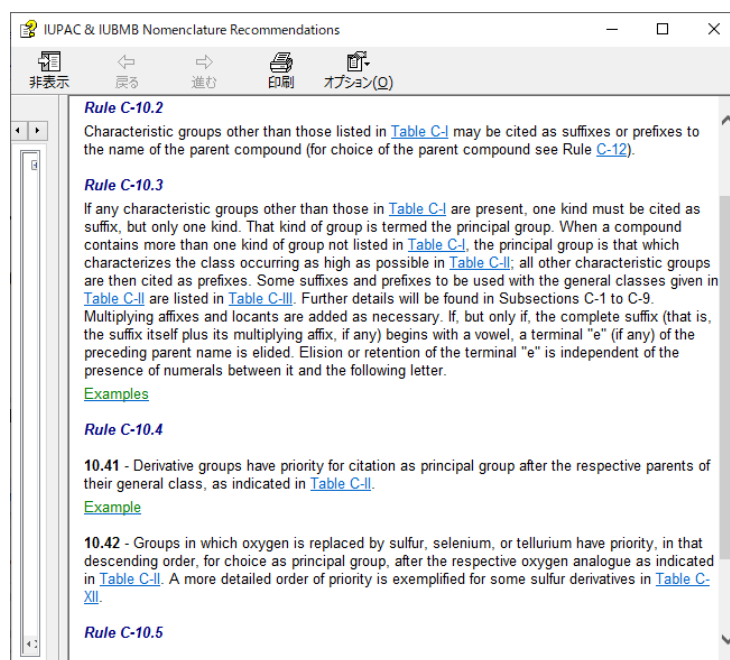
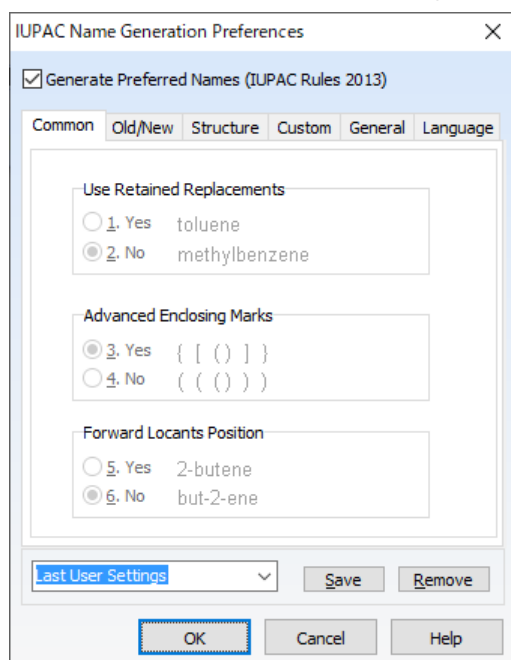
ACD/Nameは、IUPACおよびCASインデックスルールに従って化学名を生成します。
生体分子、有機金属、ポリマーなどの命名法の難しい命名も簡単に処理できます。

機能

- IUPACおよびCASインデックスルールに従って、化学構造の体系的な化学名を生成します。
(最大1024原子および20個の環まで対応、99件まで一括命名可能)

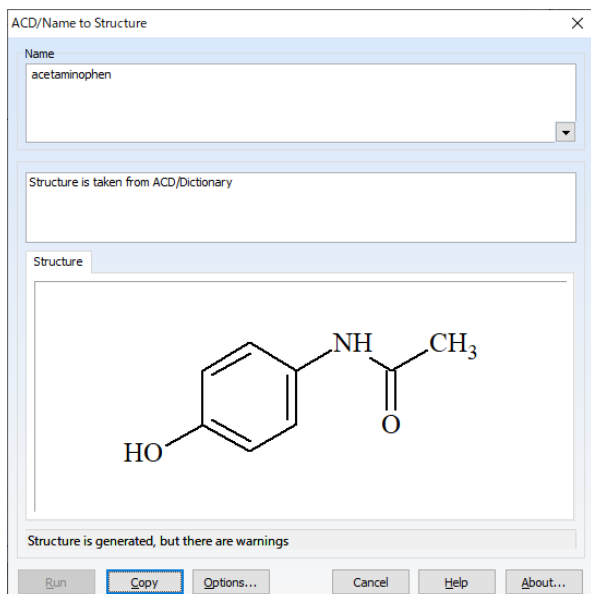


- InChIおよびSMILES文字列を生成します
- IUPACルールを設定を行うことができます
また、各名前のIUPACルールの詳細情報を確認できます



- 21言語で名前を生成します—英語、ブルガリア語、クロアチア語、デンマーク語、オランダ語、フィンランド語、フランス語、ドイツ語、ギリシャ語、ハンガリー語、イタリア語、ポルトガル語、ルーマニア語、スロベニア語、スペイン語、スウェーデン語、ロシア語、ポーランド語、エストニア語、ラトビア語、リトアニア語

- 名前から構造への変換も可能です



メリット

- 出版物、プレゼンテーション、特許に対する高品質な名前を保証する信頼性と正確性を持ち合わせています
- 数秒で単一の化合物の名前をすばやく生成します
- 化合物の命名法がどのように導き出されているかをより深く理解することができます

関連製品とサービス

Name Batch Products

ACD/Name BatchおよびACD/Name to Structure Batchは、化合物のライブラリ全体の正確な化学名または構造を一度に迅速かつ正確に生成します。命名設定、レポート設定を指定できます。

Run Name Generation

Generate
 Name Index Name SMILES InChI OK
Cancel
Help

Source
 File Name: C:\Program Files\ACD\2019*.sdf
 File Format: MDL SDfile (*.sdf) Make Backup Copies
 ID Field (for text):
 Structure Field: Options...

Destination
 File Name: C:\Program Files\ACD\2019*.sdf
 File Format: MDL SDfile (*.sdf) Same as Source
 Put Version to: Put Stereo to:

Name Index Name SMILES InChI
 Name Field: Overwrite Existing Names
 Numbering Field: Preferences...

Put Error Message to
 Field:
 File:

ACD/Name (Chemist Version)

ACD/Name (Chemist Version) は、IUPAC名と名前からの構造をすばやく簡単に生成するための機能を提供します。高度な機能、言語オプション、ルール適用はありません。

化学命名サービス

ACD/Labsでは、構造を提出していただければ、専門家による命名の有料サービスを提供しています。「名前から構造」へのリクエストにも対応しています。

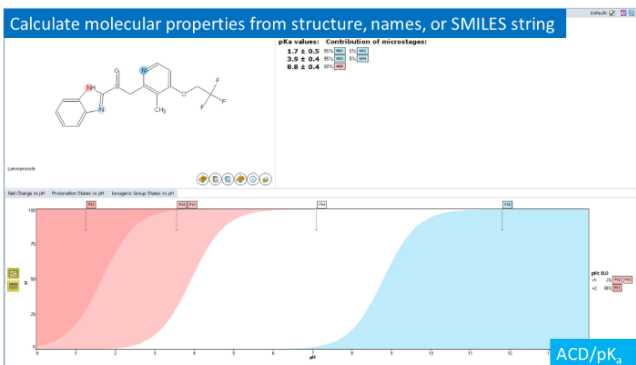
ACD/Percepta Suite

ACD/Perceptaは、化学構造からさまざまな物理化学（PhysChem）プロパティ、ADMEプロパティ、および毒性エンドポイントを予測します。

* ACD/Percepta Suiteには、PhysChem Suite, ADME Suite, Toxicity Suiteが含まれています。
PhysChem Suite, ADME Suite, Toxicity Suiteのそれぞれのセット販売もあります。また、モジュールごとに個別で購入することもできます。

特長

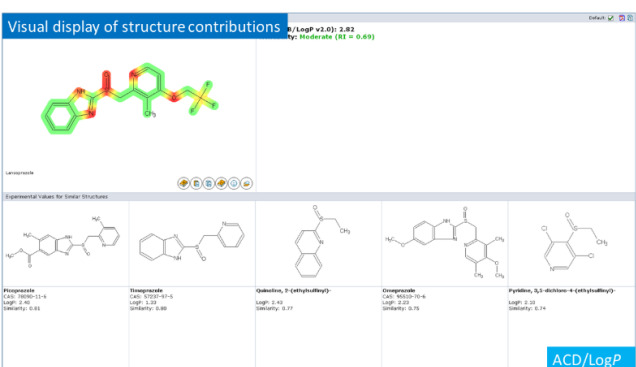
■ 構造、名前、SMILES文字列から分子特性を予測



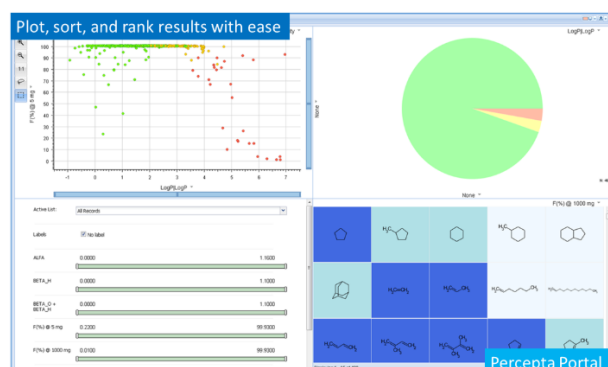
■ 単一のインターフェースにて結果を表示



■ 予測結果を部分構造の強調表示にて視覚的に支援

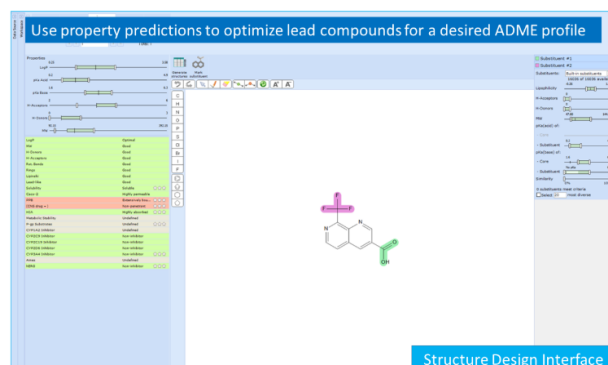
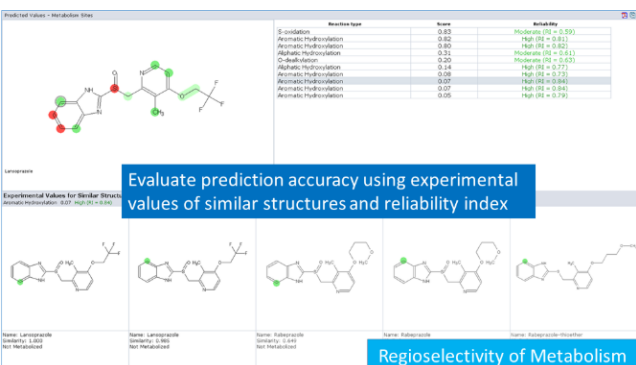


■ 結果のプロット、並べ替え、ランク付けを簡単に



機能

- 物理化学、ADME、および毒性の予測結果を簡単に評価します。各モジュールは予測結果を提供し、構造の強調表示や計算プロトコルなどの特定の情報とツールを提供します。強力なグラフィ化、ソート、フィルタリングツールは、予測結果の評価をさらに支援します。
- 信頼性指標、確率、および/またはトレーニングセットの構造を使用して、予測結果の信頼性とプロジェクトとの関連性を評価します。
- 計算された分子特性データを適用して、構造の変更/リードの最適化を調査し、目的のプロファイル（吸収、分布、代謝、排泄）にデザインします。
- 実験データでトレーニングし（独自のケミカルスペースを適切に反映）、組込の機械学習機能を使用して予測精度を向上させます。



信頼性指標や類似構造の実験値などを使用し、予測精度を評価

最適な特性プロファイルのためにリード構造を修正

Aqueous Solubility †

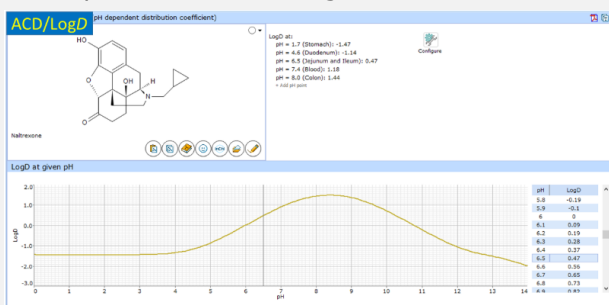
pH依存の水溶性、固有溶解度、および25°Cでイオン強度がゼロの純粋な水に溶解した化学物質の溶解度を計算します。

Boiling Point/Vapor Pressure

指定された圧力での有機化合物の沸点、および指定された温度での有機化合物の蒸気圧を予測します。

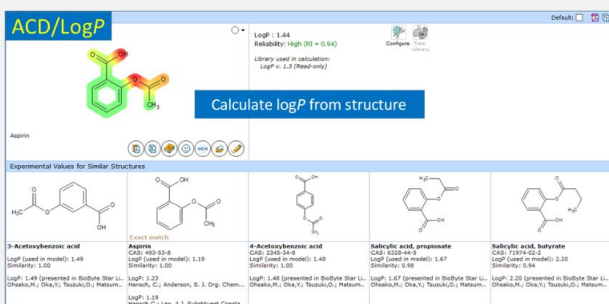
LogD †

構造からlogD（イオン化可能な化合物のpHに基づく親油性）を計算します。
個別のpH値でのリストとしてlogD結果を表示するか、対象のpHでlogDのプロットをナビゲートします。



LogP †

構造からオクタノール-水分配係数を計算します。



pKa †

構造からpKa値（酸解離）を計算します。

Sigma

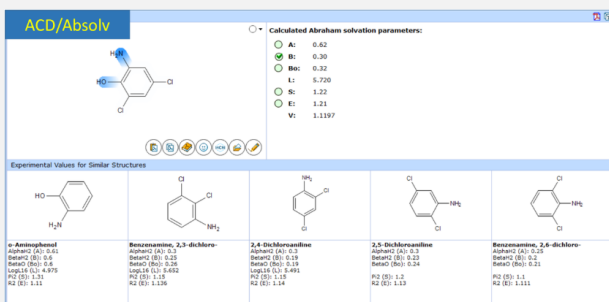
分子の選択されたフラグメントの置換基固有のパラメーターを計算します。
電子定数（Hammett Sigmas）、立体定数（モル体積、モル屈折率）、疎水性定数（Hansch Pi）

Other PhysChem Descriptors

以下の分子特性の計算も可能です。
Density, Freely Rotatable Bonds, H-Bond Donors and Acceptors, Index of Refraction, Molar Refractivity, Molar Volume, Molecular Weight, Parachor, Polar Surface Area, Polarizability, Rule-of-5, Surface Tension

Absolv †

構造からAbraham溶媒和パラメーターを計算します。
このソフトウェアは、Abraham溶媒和モデルの作者であるM. H. Abraham教授と共同で開発されました。



† トレーニング可能な（機械学習）モジュールであることを示しています。
‡ PhysChem Suiteには含まれておりません。個別モジュールとして購入できます。

ADME Suite

Blood Brain Barrier Permeation

血液脳関門（BBB）浸透モデルは、候補化合物の浸透ポテンシャルの包括的な評価を提供します。次の情報に基づいて、BBBを通過する受動輸送に従って化合物をランク付けできます。受動拡散/透過率（logPS）、BBB浸透の程度（logBB）、脳/血漿平衡率（PS * fu, brain）

Cytochrome P450 Inhibitors †

2つの異なるIC50しきい値で、化合物が5つの主要な代謝酵素（CYP3A4、CYP2D6、CYP2C9、CYP2C19、CYP1A2）のいずれかの阻害剤になる確率を計算します。
IC50 < 50 μM（一般的な阻害）、IC50 < 10 μM（効果的な阻害）

Cytochrome P450 Substrates †

化合物が主要な代謝酵素（CYP3A4、CYP2D6、CYP2C9、CYP2C19、およびCYP1A2）の基質になる確率を計算します。

Distribution †

ヒト血漿タンパク質への薬物結合の強さを、血漿中の全体的な結合%、またはヒト血清アルブミンへの親和定数として推定します。%PPBモデルとlogKa（HSA）モデルの両方がユーザーデータでトレーニング可能です。分布容積（Vd）を予測します。

Maximum Recommended Daily Dose

最大推奨1日投与量を予測します。クリニックで使用できる薬物の最大経口用量を換算します。

Oral Bioavailability

経口バイオアベイラビリティモデルは、確率論的および機械論的モデリング手法を組み合わせることで構造から経口バイオアベイラビリティを予測します。結果は、ユーザーが定義した用量の経口投与（%F）後のバイオアベイラビリティの定量的予測として提供されます。経口バイオアベイラビリティに影響を与えるいくつかのエンドポイントを予測します。

- ・溶解度（用量/溶解度比）
- ・酸性媒体での安定性
- ・受動的または能動的輸送による腸膜透過性
- ・P-gp流出
- ・肝臓での初回通過代謝

Passive Absorption

人間の腸管吸収（HIA）と溶解性は、経口バイオアベイラビリティに影響を与える2つの重要な要素です。受動吸収モデルは、経細胞経路と傍細胞経路、および透過率のイオン化固有の違いを考慮に入れて、薬物のヒト腸透過性を予測します。モデルは次の計算されたパラメーターを出力します。

- ・腸全体の受動輸送に関するヒト腸吸収（HIA）の範囲、経細胞および傍細胞経路からの寄与率を示します。
- ・空腸上皮を通過する受動透過性および吸収率も示します。
- ・経細胞および傍細胞経路からの寄与率を含む、Caco-2細胞単層全体の受動透過性を示します。

P-gp Specificity †

P-糖タンパク質（P-gp）は、多種多様な細胞から化合物を押し出す排出トランスポーターです。P-gp特異性モデルを使用して、P-gp基質および/または阻害剤である薬物候補の迅速な同定が可能です。P-gp特異性モデルは、P-gp ATPase活性測定に基づくスクリーニングテストに取って代わり、P-gp発現細胞単層およびP-gpノックアウト動物による高価な実験を部分的に置き換えることができる最初のスクリーニングとして役立ちます。

PK Explorer

化合物の薬物動態プロファイルを決定するパラメーターを推定します。
Cp（T）、TmaxおよびCp（max）、経口および静脈内投与後のAUC、経口バイオアベイラビリティ

Regioselectivity of Metabolism

CYP位置選択性モデルは、実験情報がほとんどないか、まったくない場合、創薬プロセスの早い段階で化合物の代謝プロファイルに関する貴重な洞察を提供できるモデルです。次の方法で、代謝のソフトスポットを予測します。

- ・ヒト肝ミクロソーム（HLM）
 - ・5つの主要なシトクロームP450酵素（CYP3A4、CYP2D6、CYP2C9、CYP2C19、およびCYP1A2）
- 化学物質の代謝部位を特定することができ、代謝特性が改善された化合物の合成のガイドにもなり、可能性のある代謝物構造の特定と解明に役立ちます。

† トレーニング可能な（機械学習）モジュールであることを示しています。

Toxicity Suite

Acute Toxicity †

異なる投与経路後のげっ歯類2種（マウス、ラット）の定量的LD50値を予測します。

・マウス（経口投与、静脈内投与、腹腔内投与、皮下投与）

・ラット（経口投与、腹腔内投与）

定性的なOECDハザードカテゴリを推定します。

エキスパートシステムは、毒性作用の潜在的な原因となる危険な構造を特定します。

Aquatic Toxicity †

2つの水生生物、ファットヘッドミノー（P. promelas）とミジンコ（D. magna）の化合物のLC50値を予測します。

Endocrine System Disruption

生殖毒性と癌の可能性に関連するエストロゲン受容体に対する化合物の相対的結合親和性を予測します。

Mutagenicity †

Amesテストで肯定的な結果が出る確率の予測を提供します。

Health Effects

さまざまな種と投与経路を含む長期臓器特異的毒性研究に基づいて、特定の臓器または臓器系に対する化合物の予想される悪影響を予測します。次の臓器および臓器系が考慮されます。

- ・血液
- ・心臓血管系
- ・消化器系
- ・腎臓
- ・肝臓
- ・肺

hERG Inhibition †

human ether-a-go-go（hERG）チャンネルとの薬物相互作用に関連する心毒性について化合物を評価します。

Irritation

Draizeテストに従って、化合物が中程度またはより強い目と皮膚の刺激を引き起こす可能性を計算します。

Impurity Profiling ‡




FDAとの協力の結果、このモジュールでは、以下を含む有害作用の様々なメカニズムを反映する21の毒性エンドポイントに関する洞察を提供しています。

- ・変異原性（Amesテスト、マウスリンパ腫アッセイ、およびその他の標準的なアッセイ）
- ・染色体異常誘発性（小核試験、染色体異常）
- ・DNA損傷（予定外のDNA合成）
- ・発がん性（FDAげっ歯類発がん性データ）
- ・内分泌かく乱メカニズム（エストロゲン受容体結合）

† トレーニング可能な（機械学習）モジュールであることを示しています。

‡ Toxicity Suiteには含まれておりません。個別モジュールとして購入できます。

Batch製品

Batch						
	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	—	—

ユーザーの介入を最小限にして数万の化合物に対して、予測を実行することが可能となります。Microsoft WindowsおよびLinuxオペレーティングシステム（OS）と互換性があります。

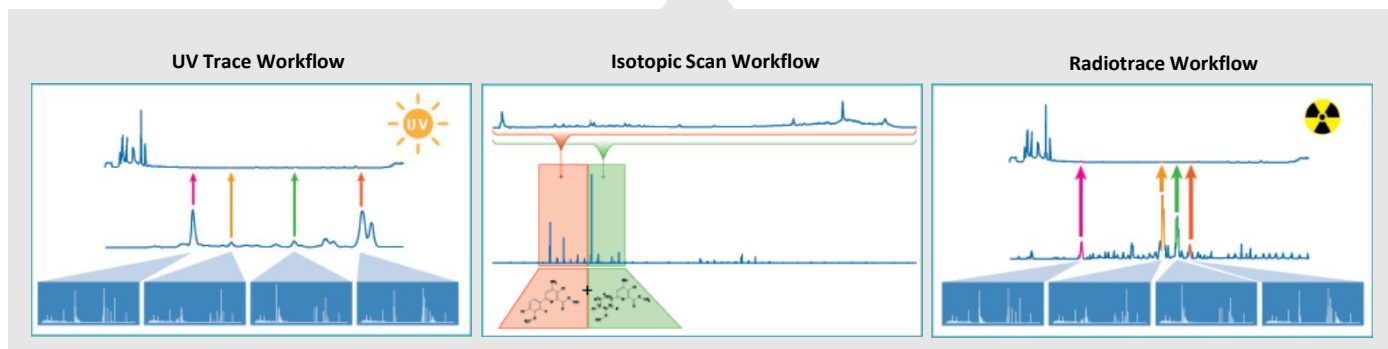
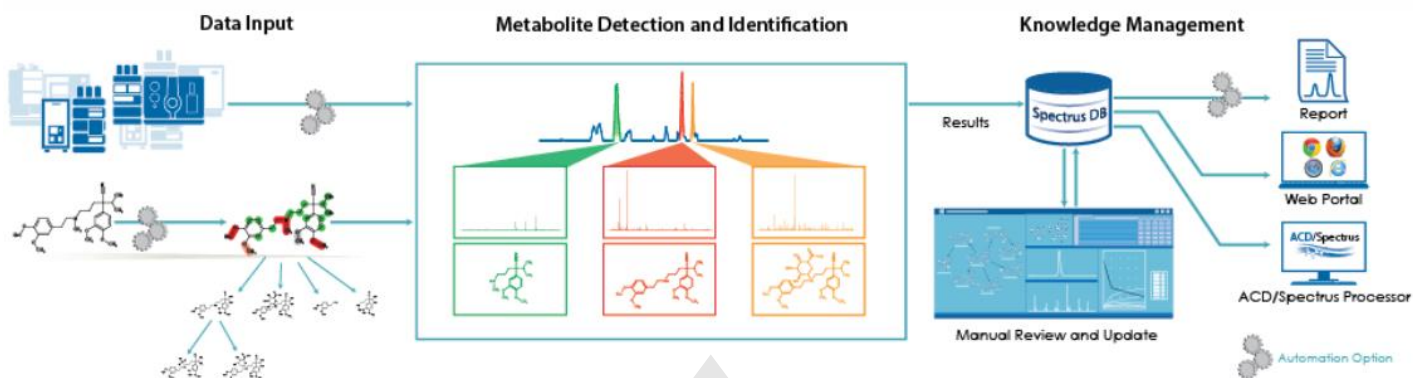
ACD/MetaSense

代謝物の予測・検出・同定・データベース登録および管理の全てを1つのプラットフォームで担うことが可能です。

特長

ACD/MetaSenseを使用することで、従来の代謝物解析の課題を克服しながら、時間を節約し、コラボレーションを強化できます。代謝物解析ワークフローに次のような大きな変革をもたらします。

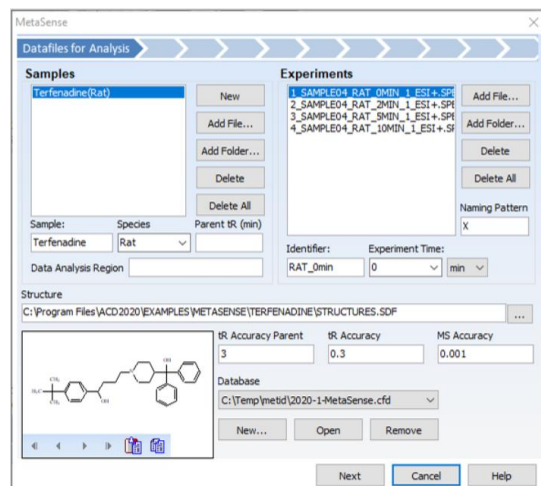
- 代謝物の自動予測および同定
- LCMSMSデータから放射性物質、UVトレース、または同位体スキャンも合わせた代謝物同定
- 代謝マップとレポートの自動生成
- 代謝物解析データを検索可能なデータベースへコンパイル
- ACD/MetaSenseによるレポートへの容易なアクセス



主な機能

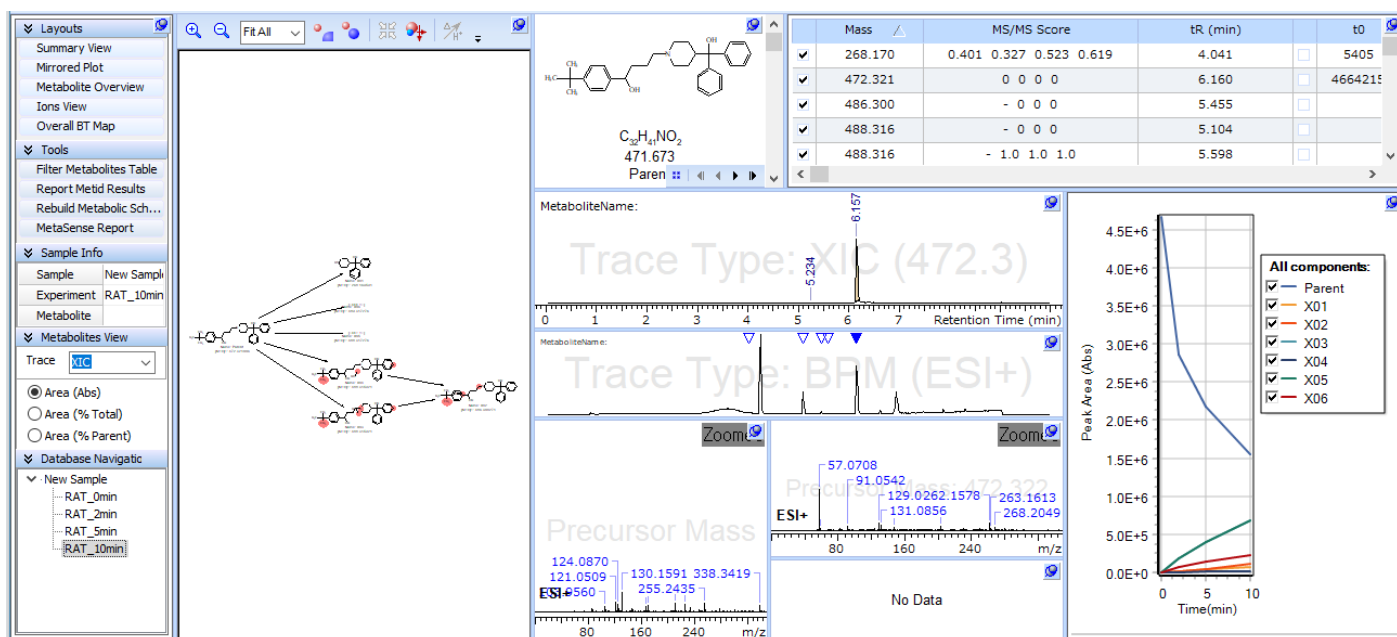
解析処理

- 主要機器ベンダーのファイルに対応します
- セットアップウィザードを使用することにより、関連する一連のインキュベーション研究データをバッチ処理できます



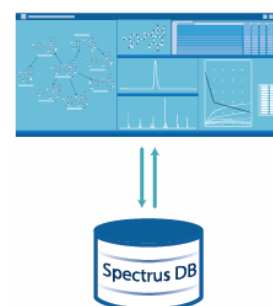
解析処理

- 各潜在的部位で起こる代謝反応の可能性を知識ベースで推定します
- 第I相および第II相代謝物に基づいて代謝物を選別でき、アミド加水分解などの特異的反応型の選択にも対応します
また、ユーザー定義の反応を追加することが可能であり、ユーザー定義反応による代謝物を生成し、それらを代謝マップに加えます
- MetaSenseで予測された代謝物以外の非標的代謝物もマスデフェクター機能により検出します
- MS2スペクトルとlogD予測の組み合わせによる検証を行います。
- 代謝マップを自動的に生成します
- 原薬および代謝物の安定性・速度論的プロットを自動的に作成します
- データセット全体でユーザーが作成した代謝物をシームレスに更新します
- 異なる種(ヒト、マウス、ラット、イヌ)からのデータと種を横断して検出されたすべての成分を含む全体的な代謝マップを生成します
- 1つの時点で代謝物を手動で同定し、その後、全試験を通してそれらを自動的に探索できます



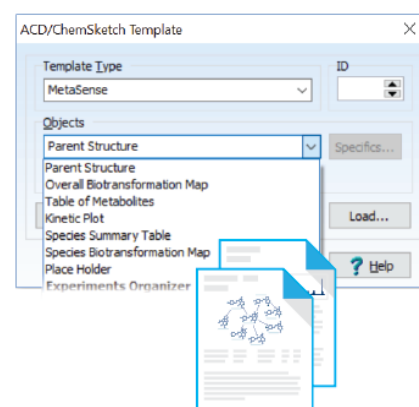
データのレビュー

- 代謝物データのさまざまな視点で視覚化できます
 - ・ダッシュボードビューを使用して生物代謝マップを視覚化します
 - ・MSスペクトルの鏡像化表示による比較が可能です
 - ・MS上のフラグメント構造を表示します
 - ・インキュベーション試験全体にわたる全代謝物の動態プロットを表示します
- SpectrusDBから編集のために処理ウィンドウにてデータを開くことができます



レポート作成

- さまざまな形式で詳細なプロジェクトレポートを作成します
 - ・Microsoft Word
 - ・Adobe PDF
 - ・*.sk2 files
- レポート用にカスタマイズされたChemSketchテンプレートを簡単に作成できます
- ChemSketchテンプレートに含めるプロジェクト要素を選択できます
 - ・全体的な代謝マップ
 - ・動態プロット
 - ・種ごとのテーブル情報



Luminata®は、CMC（Chemistry, Manufacturing and Control）のための情報管理ソリューションです。この意思決定支援ツールを使用することにより、製品開発チームは最新の包括的なプロジェクト関連情報を即座に利用することができます。

特長

プロセスデータ、化学データおよび分析データを1つのインターフェイスで簡単に共同作業を行うことができます。

- プロセス化学者や製造グループのために、プロセスマップと分析データを視覚的に表示させることによって、効率的なスキーム開発、不純物マッピング、バッチ追跡を可能とします。
- 分析化学者は、最新の合成スキーム情報、並びに不純物の生成と除去および安定性試験を含むすべての分析データを容易に管理できます。
- 効果的な管理戦略の策定、サプライチェーン全体にわたるバッチ分析データの容易な評価など、プロジェクトチームリーダーのために、効率的に規制当局へ提出するためのデータを収集します。

Luminataは、以下のパートで研究分野の製品開発をサポートします。

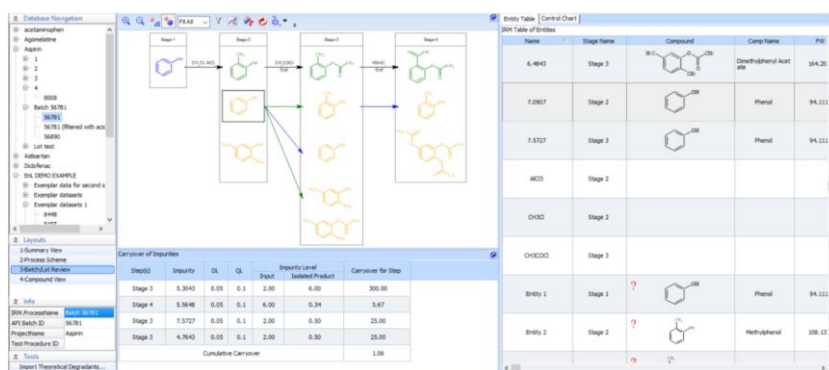


各パートについて

Route Scouting & Process Development Mapping

Luminataを使用して、すべての重要な製品開発情報を1つの場所に統合し、必要な分析データとルートスキームを組み合わせて、多段階反応プロセスを完全に把握できるようにします。

- LC/UV/MSデータをインポートしたり、リファレンスDBから既存の化合物を選択したりして、包括的なプロセスマップを設計します。
- プロセススキームを出発物質、中間体、原薬、不純物、分解物、溶媒又は試薬として自動的に分類します。
- 属性マップ（プロセス、処方、安定性など）に対応する出力テーブルを自動生成します。
- 同一インターフェイスでの便利な可視化とグラフ化によって、動的リスクアセスメントも実施可能となります。



Impurity Tracking, Fate and Purge, and Control

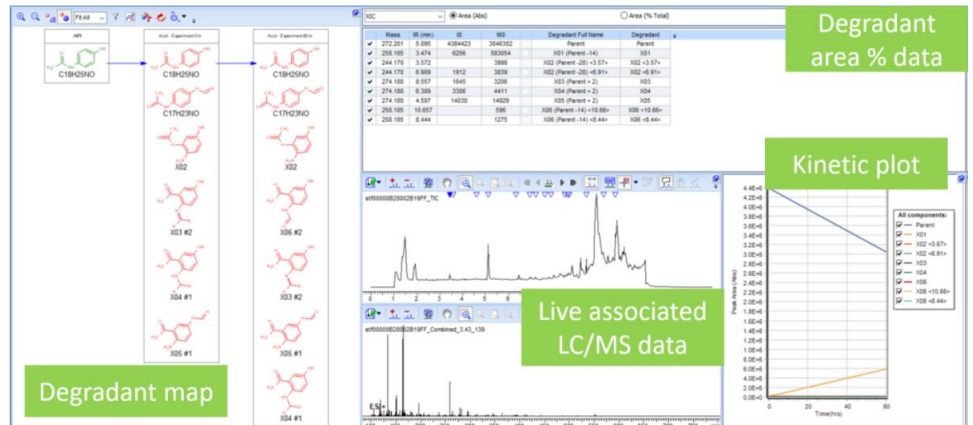
Luminataを使用して、ライブスペクトルデータとスキームに基づいて効果的なプロセスおよび不純物制御戦略を確立します。

- 解析された分析データを化学構造とリンクさせ、不純物マップを自動的に構築します。
- ロット間およびロット間のプロセス変動を追跡し、各段階の不純物プロファイルと比較します。
- LC/UV/MSデータから直接不純物のキャリーオーバーを自動計算します。
- 不純物プロファイルと管理戦略のテーブルを作成します。
- ワンクリックでの報告機能を搭載しており、規制当局への提出にも容易に対応します。

Drug Product & Drug Substance Stability Data Management

Luminataを使用して、さまざまな条件下でAPI強制分解スキームを直感的に表現できます。分解マップ（構造を色分けして、対応するストレス状態と分解生成物を視覚化）、関連する分光学的特性解析データ、および速度論的プロットを容易に組み立てることが可能です。

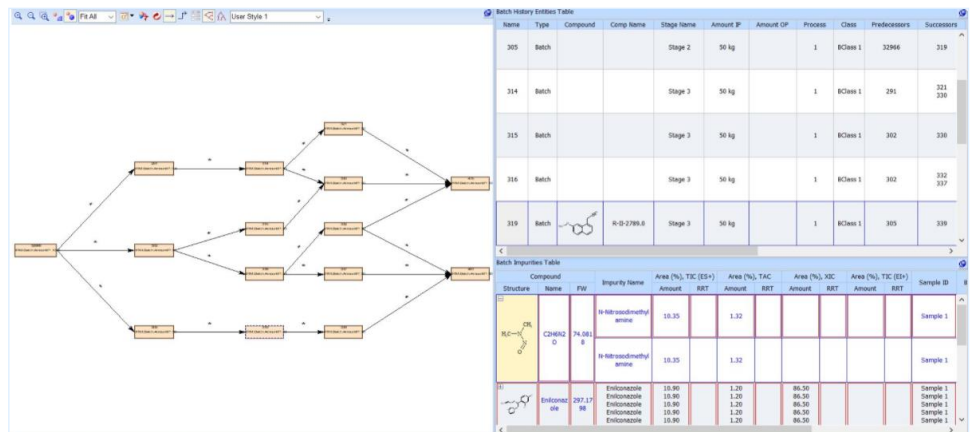
- 異なる時点でのLC/MSデータセットのインポートとバッチ処理が可能
- 強制分解マップと速度論的プロットを自動的に作成
- 既知の分解物の特定
- 分解物情報をDBに追加登録
- 複数の系列のクロマトグラムを迅速に重ね合わせることで安定性試験のストリームラインデータ比較



Manage Formulation Development

合成経路の最適化後、製剤開発を管理するためにLuminataを適用します。単一の知識ベースに分析データと工程データを統合することにより、原薬から製剤生産への移行を加速します。

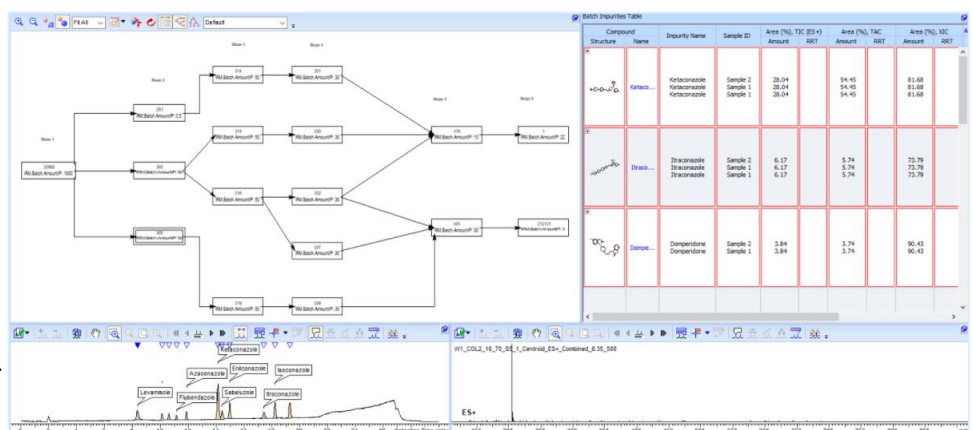
- 原薬の化学的製剤設計
- 製剤合成の全段階の追跡
- 薬物賦形性試験及び試験製剤の実施
- 結晶化実験中のバッチの組成を視覚的に追跡するためのバッチ履歴テーブルの追加



Supply Chain Management

Luminataのサプライチェーン管理は、バッチ系統機能を通じて提供されます。所定のプロセスに対して作成された各バッチを追跡し、バッチ間評価、およびリアルタイムの意思決定のために、対応しているバッチ分析データ（クロマトグラム、質量スペクトルなど）を容易に添付できるようになっています。

- 特定のバッチについて包括的なツリーを作成し、テーブルを使用してバッチを数値的に追跡します。
- クロマトグラムを視覚的に対比します。
- プロセススキームに追加する際に、参照データベースから作成された自動リンクを使用できます。
- サプライチェーン全体を把握するために、作成されたバッチをすべて統合します。



1つのインターフェイスで、ハイスループット実験の計画、実行および分析を自動化するWebベースのソフトウェアアプリケーションです。

その結果、リアルタイムの分析データにより、包括的なプロセスの開発と実行が可能になります。

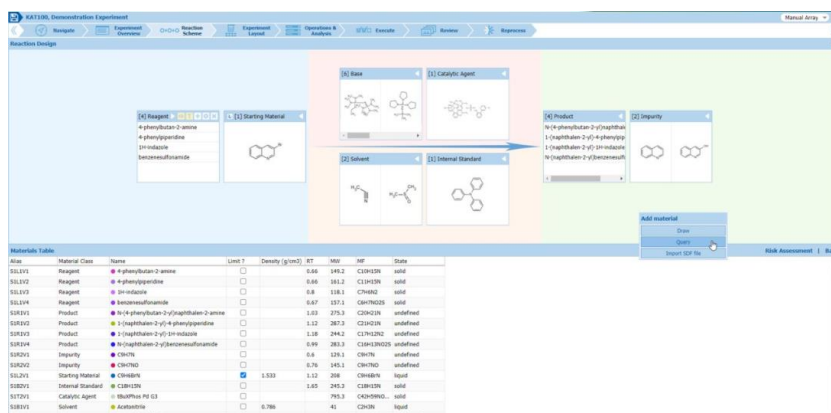
特長

- Katalystは、手作業のタスクを自動化します。
 アレイベースの化学合成などのハイスループットおよび並列実験を計画して実行するために現在使用している複数のシステム間の転写の作業を排除します。
- Katalystは、1つのインターフェイスでハイスループットおよび並列実験のワークフロー全体を自動化および分析することを目的としています。ラボの自動化機能（情報システムとラボの実験装置）と統合することにより、アレイベースの実験の設計、計画、実行を支援します。
- Katalystは、すべての分析データを自動的に分析し、1つの場所に集めます。1つのアプリで、デザインから意思決定まで総合的に支援します。

仕組みについて: Design – Plan – Execute – Analyze – Decide

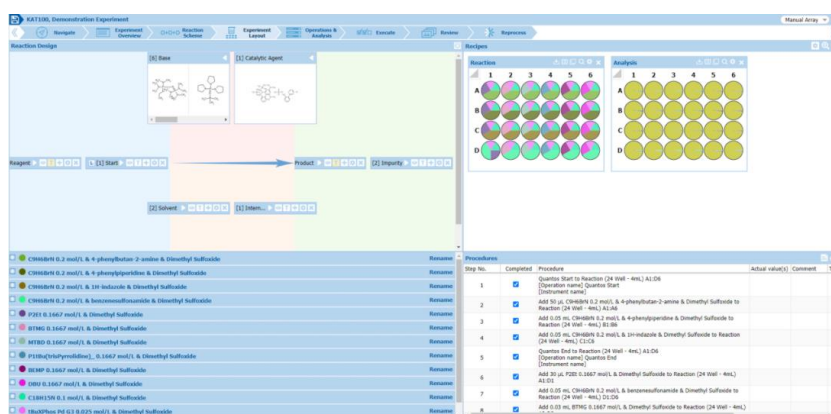
Design: 数分でハイスループットおよび並列実験をデザイン

登録済みの材料（試薬、触媒、配位子、溶媒など）を反応スキームにドラッグ&ドロップするだけで、実験デザインを作成できます。デザインをテンプレートとして保存して共有すると、次の作業を効率よく開始できます。



Plan: 効率的にハイスループット実験のプランを立てる

ラボの自動化機器（反応容器、分注装置）とユニット操作を指定できるため、実験計画はドラッグ&ドロップで行うことができます。材料を調達したら、ストックソリューションおよび反応配列の材料の位置、数量および濃度を定義します。アレイベースのビジュアルレイアウトと実験工程が示された指示リストを使用して、実験計画を簡単に確認できます。



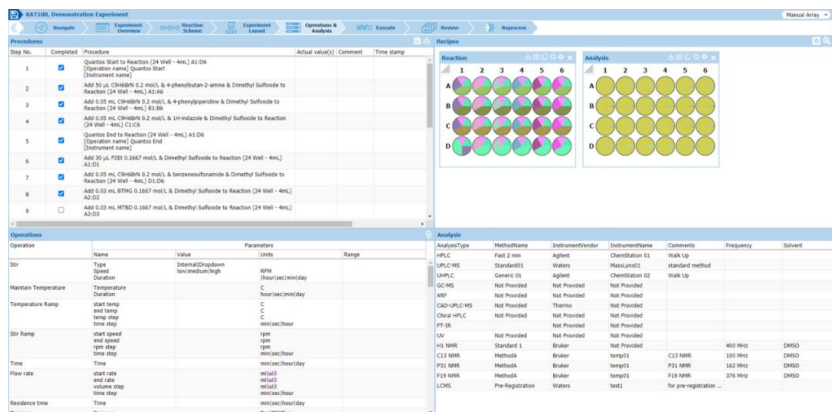
Execute: ハイスループット実験を容易に実行

Katalystは、ネットワークハードウェア、ラボ実行システム、ラボ自動化機器と統合するように構成できます。

つまり、機器ソフトウェアにインポートするための機械可読ファイルを作成したり、機器に直接指示を送信したり、材料の計量や試薬ストック溶液の準備に関する段階的な指示を記載したレポートを作成します。

合成が完了すると、分取クロマトグラフィーおよびハイスループット分析のためのサンプル調製の計画にも役立ちます。

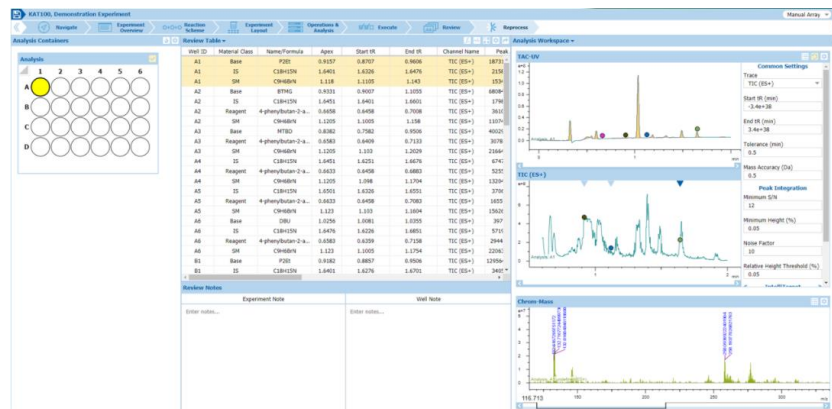
Katalystは、分析機器のインストラクションリストを作成し、ハイスループット実験の各ウェルに結果を関連付けます。



Analyze: 分析支援 ~ハイスループット分析のボトルネックを解消~

Katalystは、分析データの処理、解釈を行い、デザインしたアレイ設計への結果の関連付けを自動的に実行します。従って、最適な条件や傾向など、実験で求めている答えを簡単に見つけることができます。自動処理されたデータをさらに編集する必要がある場合に備えて、Katalystはオンデマンドで分析データを再処理する機能（ACD/Spectrus Platform）を提供します。

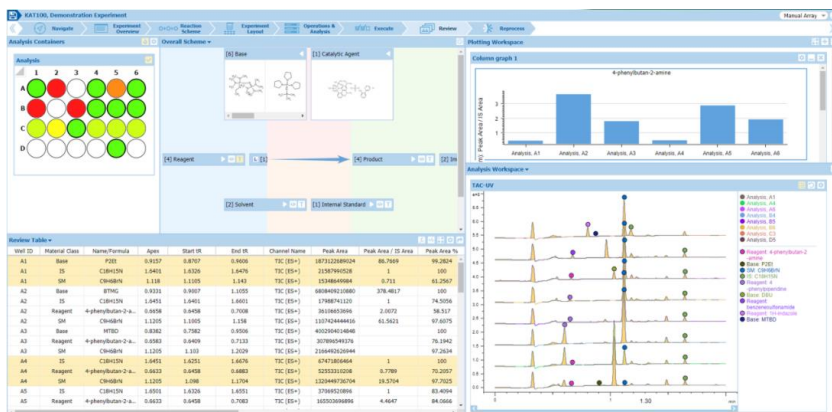
Katalystは、HPLC、UHPLC、LC/MSおよびNMR分光計と接続することも可能です。



Decide: ライブ分析データを用いることで自信を持って意思決定可能

ハイスループット実験において、容器またはウェルプレートの位置にリンクした解析結果を簡単に視覚化できます。同一インターフェイスにおいて、種々の並列合成実験結果のクロマトグラム、スペクトルおよび他の分析データの比較が可能です。

さまざまなドキュメント形式（PDF、Microsoft Office Word/Excel/PowerPoint）で出力できます。



ACD/Spectrus JS

Spectrus JSを使用すると、ソフトウェアのインストールや更新に煩わされることなく、任意の場所からお気に入りのブラウザで1D、2DNMR、LC/UV/MS、GC/MSデータを解析できます。

概要

Spectrus JS (JavaScript) はブラウザベースの1D、2DNMR、LC/UV/MS、GC/MS処理および解析ソフトウェアです。このアプリケーションは、Windows、macOS、Linuxオペレーティング・システムをサポートしています。

お好きなブラウザからいつでもNMRおよびLC/UV/MS、GC/MS処理ツールにアクセスできます。どこでも解析できます！働き方がどんどん多様化する中、働く場所の自由化を推進することも重要です。



特長

■ 科学領域もリモート対応に

快適なデスク環境（居室、自宅、カフェなど）でNMRやLC/UV/MS、GC/MSデータを解析します。Spectrus JSはインターネット接続があればどこでも使えます。

■ すぐに始められます

個々のユーザーがソフトウェアのセットアップを行うために必要なダウンロードやインストール作業は必要ありません。

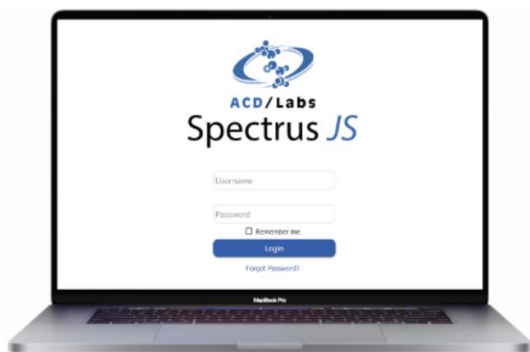
■ あらゆるOS、あらゆるデバイスで使用可能

Spectrus JSは互換性を最大限に高めるためにブラウザベース（Chrome, Safari, Edge）になっています。Windows、Mac、またはLinuxから作業できます。

■ あらゆるレベルの専門知識を持つユーザーをサポート

大学生から分析の専門家まで、どんな科学者でも、ACD/Labsの実績あるNMRやx²C/UV/MSツールを使ってデータを分析することができます。

操作は非常に簡単！



1. ブラウザウィンドウを開き、URLを入力します。
アカウントにログインします。
2. データの読み込みと処理を行います。
正確な変換、ピーク選択、スペクトルと構造の帰属、溶媒選択、複数領域の定義など。
3. 分析用の包括的なPDFレポートを作成します。

SpectrusJSでのデータ表示

使いやすいインターフェースには、ACD/Labsのデータ処理ツールが収められており、SpectrusJSは初心者ユーザーにもエキスパートにも最適です。

ワークフローに合わせてインターフェースを設定できます。
業界トップの予測に基づいた帰属により、分析を迅速化します

より分析を有意義にするために
化学構造式の入力も可能

1回のクリックでレポートを作成

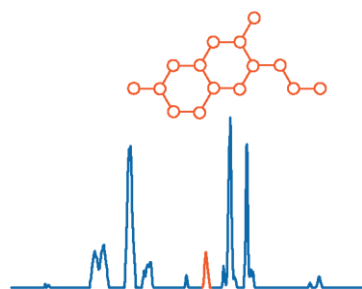
主要な装置ベンダーからの
データのインポート

Label	Shift (ppm)	Assigned Atoms	Nuclei	Type
1	M01	1.08	21	3 t
2	M02	2.24	15, 16	6 d
3	M03	3.50	25	3 s
4	M04	3.96	20	2 m
5	M05	5.32	7	1 s
6	M06	7.25	1	1 t
7	M07	7.30	2	1 dd
8	M08	7.39	3	1 dd
9	M09	8.93	12	1 s

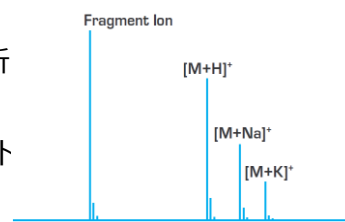
Retention Time (min)	Peak Name	Peak Area (yr unit ² /min)	Width (min)	Asymmetry	S	
1	0.34	unknown	1379702.88	0.14	3.95	30
2	1.23	unknown	470980.94	0.07	1.42	15
3	1.80	Felodipine	3316913.50	0.07	1.22	11

クライアントコンピュータにソフトウェアをインストールする必要がないため、ITの問題やシステム管理に費やす時間が短縮されます。実験時間を邪魔されることもありません。

リモートでのチーム作業やコラボレーションが容易になります。
1人のユーザーがスペクトルに加えた変更を他の画面で瞬時に表示して、プロジェクトグループ内でのリモートチーム作業を容易にしたり、簡単にデモンストレーションしたりできます。

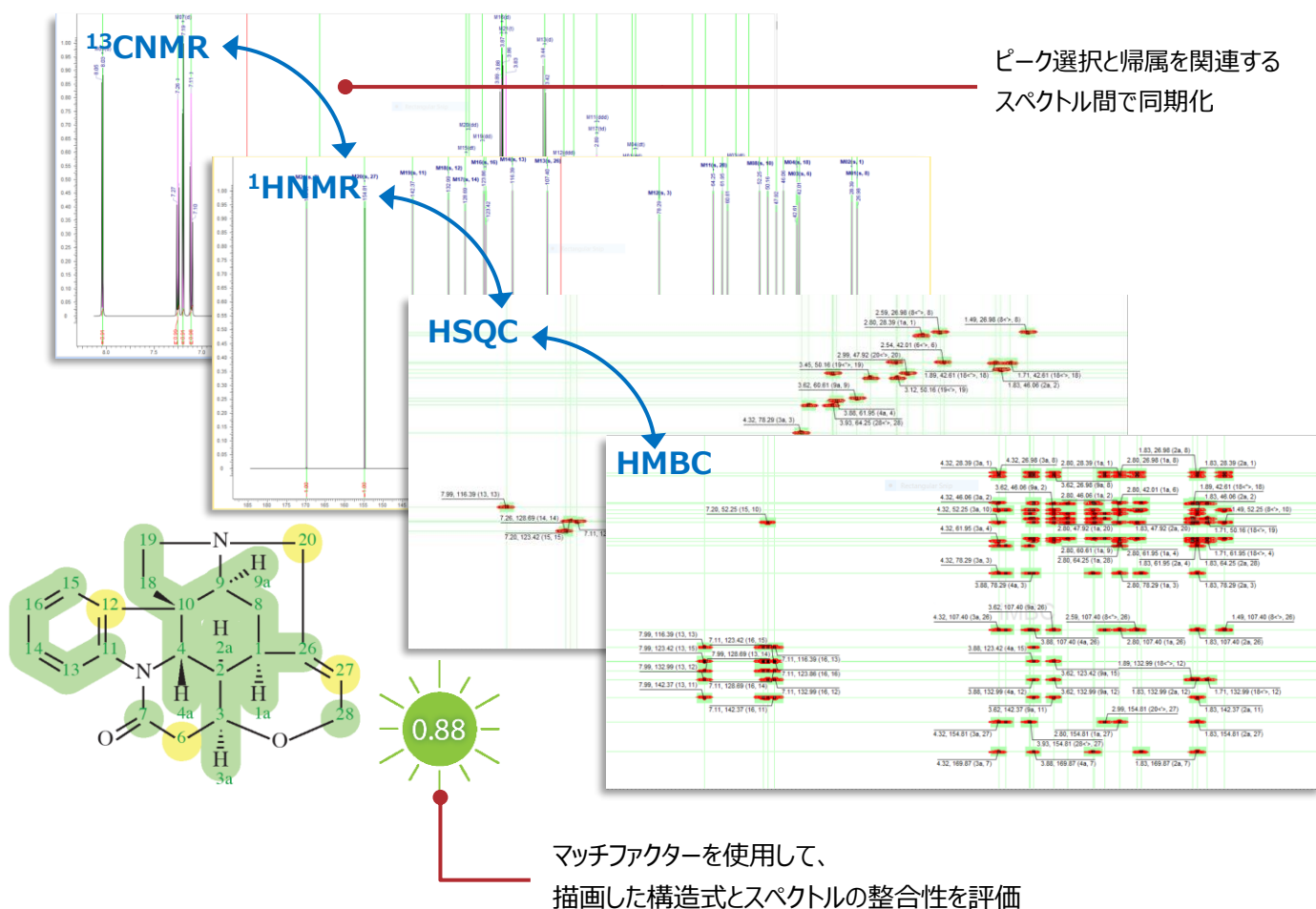


- クロマトグラムピークを手動または自動で検出・積分
- 抽出イオンクロマトグラム (XIC) とUVスペクトルを分析
- 化学構造を帰属し、成分ピークを追跡
- 完全なメタデータと監査証跡により、化学的コンテキストデータの整合性を維持

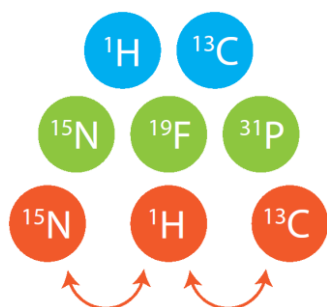


NMRデータ解析

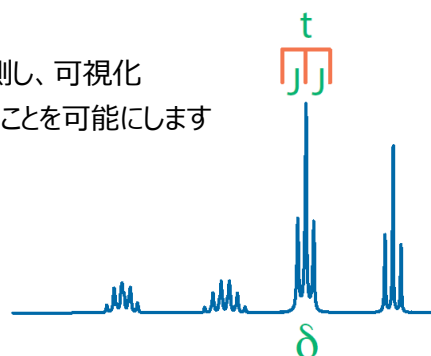
手動および自動フーリエ変換、位相補正、多重度解析などをすべてブラウザから実行できます。



NMR予測アドオン : Prediction Add-Ons業界トップの精度で1Dおよび2DNMRスペクトルを予測



- 1H、13C、15N、19F、31Pスペクトルを予測し、可視化
- ACD社の正確で信頼性の高い予測は、次のことを可能にします
 - データの解釈を高速化
 - より良い実験を設計
 - より正確な結果を表示



サポートデータフォーマット

Spectrusは、さまざまな分析技術とベンダーのファイル形式のデータを1つのソフトウェアプラットフォームでサポートします。業界標準およびオープンソース形式に加え、ほとんどの主要機器ベンダー形式をネイティブでインポートします。ACD/Labsは機器ベンダーと密接に協力し、テクノロジーの進化に合わせて新しいフォーマットがサポートされるようにしています。

NMR

Vendor	Data Format	Required Parameter Files	Optional Parameter Files
ACD/Labs	*.spectrus, *.gnr, *.esp, *.txt, *.smp		
Acorn NMR, Inc.	*.fid, *.nmr, *.2d		
Agilent (Varian)	data, *.fdf, fid0001.fdf, *.txt, fid, phasefile, data* (VNMR, VnmrJ, SpinSight)	acq, proc, procpa	acq_2, text
ASCII ^a	*.txt; *.prn, *.csv, *.asc		
Bruker	*.ser, *.rr, *.fid, *.1r, *.1i, *.2rr, *.* (DISNMR, UXNMR, XWINNMR, WinNMR, TopSpin)	acqu, procs, acqu2, proc2s, *.fqs, *.fa1, *.fa2, *.fp1, *.fp2	title, intrng, *.tit, *.ti2
Felix	*.*		
Galactic	*.spc		
Gaussian Output	*.log, *.out		
GE	*.raw, *.* (Nicolet) *.* (Omega)		
JCAMP	*.dx; *.jdx		
JEOL Ltd.	*.als, *.jdf, *.nmfid, *.nmf, *.bin, *.nmdata, *.nmd, *.gxd, *.* (Alpha, Generic, Delta, Lambda)	*.gxp, *.hdr	exp.param, exp.par
Lybrics	*.*		
Magritek	*.1d; *.2d		
MSI Felix	*.*		
Nanalysis	*.dx		
Nicolet	*.dat		
NUTS	*.*		
Oxford Instruments	*.fid		
QOneTec	*.nmr		
Tecmag	*.tnt, *.* (MacNMR)		
Thermo Scientific ^a	*.spc picoSpin (*.jdx)		

^a ファイルの出力もサポートされています。(JCAMPは1D NMRのみ)

Mass Spectrometry

Vendor	Data Format	Extension	Comments
ACD/Labs	ACD/Spectrus ACD/SpecManager	*.spectrus *.esp	
Agilent	1100 Series LC/MSD Quad and Ion Trap Systems	*.ms, *.yep	DAD data and single wavelength chromatograms. Splitter available
	ChemStation	*.ms	Splitter available
	LC TOF	*.wiff	
	MassHunter (6000 series)	*.bin	Entire *.D folder should be used. Agilent component requires Microsoft .NET version 2. DAD can be imported and MS/MS split controlled.
	OpenLab Rev. C.01.07, C.01.08, C.01.09	*.D	UV, LC-UV and LC-MS. Entire *.D folder should be used *.ms, *.ch, *.uv
Applied Biosystems	Mariner Data Explorer ASCII LC/MS	*.txt	LC-MS data only
Bruker and Agilent	Agilent or Bruker LC/MS Ion Trap	*.yep	LC-MS and DAD data
Bruker	Compass (accurate mass data)	*.d	Entire *.D folder should be used. Bruker component requires Microsoft .NET version 3.5. Possible issue noted for MaXis Impact data.
Hitachi	LIT-TOF	*.dat	Import no longer supported
	M-8000 and D-7000	*.msd, *.dad	LC-MS and DAD data
JEOL (Japan)	JEOL-DX	*.jsp, *.jpf, *.jmc	Single mass spectra and chromatogram curves
	JEOL K9	*.spe	LC(GC)-MS data
	JEOL XMS	*.dat	GC-MS data
LECO Corporation	ChromaTOF-HRT™ for Citius™ (LC) and Pegasus® (GC) HRTs	*.smp	GC/MS or LC/MS data; LC/MS with in-source CID provides separate precursor and fragment ion (isCID) channels; LECO GC-TOF MS data is supported.
Matlab/Eigenvektor Research	DSO format ^a	*.mat	Single mass spectra and LC(GC)-MS data
National Institute of Standards and Technology	NIST MS Software	*.msp	Uses Lib2NIST to convert .msp to supported format (.hpf or .sdf)
	NIST SDF Library	*.sdf	Splitter available
Open Source	ASCII ^a	*.txt	Single MS only
	JCAMP ^a	*.dx, *.jdx	Splitter available
	mzML		
	netCDF ^a	*.cdf, *.nc	Single MS and LC(GC)-MS data
PerkinElmer	TOFData	*.tofdata*	
	TOFData Centroid	*.tofile	

^a ファイルの出力もサポートされています。

Mass Spectrometry

Vendor	Data Format	Extension	Comments
SCIEX	Analyst	*.wiff, *.wiff.scan	Single mass spectra, LC-MS and most LC-MS ⁿ imported. Splitter available. UV data not currently imported. LightSight—Spectra are supported via export to NetCDF.
	Analyst QS	*.wiff	Single mass spectra, LC-MS and most LC-MS ⁿ imported. Splitter available.
	Analyst TF	*.wiff	
	PE SCIEX API to Piff	*.~pi, *.~piff	
Shimadzu Corporation	GCMSsolution	*.qgd	GC-MS data
	LabSolutions	*.lcd, *.qgd	ioModule supports QTOF data and TIC or SIM traces
	LCMS-IT-TOF	*.lcd	LC-MS and LC-MS ⁿ data only. Requires vendor software on same computer.
	LCMSsolution	*.qld	DAD data and single wavelength chromatograms. May require vendor software on same computer.
Thermo Scientific	Galactic	*.spc	Export is available for single MS only
	Xcalibur	*.raw	Data splitting by Scan Filter parameters is available
Unidata	netCDF	*.cdf, *.nc	Splitter available
Varian	1200	*.dat	Splitter available
	Saturn 2000	*.sms	Splitter available
	XMS	*.xms, *.sms	Splitter available
Waters Corporation	Empower 2 and 3 (2D and 3D PDA data)		Via Connect to ¹ or with help of ACD/Empower Add-on
	Empower 2 and 3 (3D MS data)		LC-MS data. Via Connect to ¹ or with help of ACD/Empower Add-on
	MassLynx	*.raw	All files in the folder containing the _functns.inf file are necessary for data import. Splitter available.
	Micromass OpenLynx	*.rpt	Splitter available
	UNIFI v1.9.4		Via Connect to ¹

¹ユーティリティに接続するには、同じコンピュータ上にベンダーのソフトウェアが必要です。Citrixでは動作しません。

Chromatography

Vendor	Data Format	Extension	Comments
ACD/Labs	ACD/Spectrus ACD/SpecManager	*.spectrus *.esp	
	Matrix ^a	*.txt	
Agilent	1100 Series LC/MSD Quad and Ion Trap Systems	*.ms, *.yep	UV, LC-UV and LC-MS
	ChemStation, OpenLab ChemStation Edition	*.D	UV, LC-UV and LC-MS Entire *.D folder should be used, may include ms, *.ch, *.uv files
	EZChrom	*.dat	UV traces only. Requires vendor software on same computer.
	OpenLab CDS		Data can be imported via Connect to ² , or using an ACD/OpenLab CDS Add-on
Bruker and Agilent	Agilent or Bruker LC/MS Ion Trap	*.yep	LC-UV and LC-MS
Bruker	Compass (accurate mass data)	*.D	LC-MS, LC-UV, UV Entire *.D folder should be used
MATLAB	DSO ^a	*.mat	
Open Source	ASCII ^a	*.txt; *.prn; *.csv; *.asc	
PerkinElmer	TotalChrom™	*.raw	Import was supported via Connect to ¹ until ACD/Labs products v. 2018
Pic Solution		*.dat.csv	LC traces
SCIEX	Analyst	*.wiff	LC-UV and LC-MS
Shimadzu Corporation	LabSolutions CDS		Data can be imported via Connect to ² , or using an ACD/LabSolutions CDS Add-on
	LCMS-IT-TOF	*.lcd	LC-MS and LC-UV ¹ Requires vendor software on same computer
	LCMSsolution	*.qld	LC-MS, LC-UV and UV traces May require vendor software on same computer
Thermo Scientific	Atlas		PDA and DAD traces via Connect to ² , or using an ACD/Atlas Add-on
	Chromeleon 6 and 7		UV and LC-UV, via Connect to ² , or using an ACD/Chromeleon Add-on
	Generalized Analytical Markup Language Hierarchy (GAML)	*.gaml	LC-UV and LC-MS data
	Xcalibur	*.raw	LC-MS, LC-UV and UV traces
Unidata	netCDF	*.cdf, *.nc	LC-MS, LC-UV and UV traces
Waters Corporation	Empower 2 and 3		UV, LC-UV and LC-MS traces, via Connect to ² or using an ACD/Empower Add-on
	Empower LCUV data	*.arw	LC-UV
	MassLynx	*.raw	LC-UV and LC-MS
	Micromass OpenLynx	*.rpt	LC-UV and LC-MS
	UNIFI		via Connect to ²

^a ファイルの出力もサポートされています。

¹バージョン5.42 SP2からlcdファイルをインポートするには、ベンダーのソフトウェアを同じコンピュータにインストールする必要があります。

²CitrixではConnect toユーティリティは動作しません。

Optical Spectroscopy

Vendor	Data Format	Extension	Comments
ACD/Labs	ACD/Spectrus ACD/SpecManager	*.spectrus, *.esp	
Agilent	ChemStation ^b	*.uv	
	HP 84552A	*.wav	
Agilent (Varian)	Cary UV	*.b*; *.d*	
ASCII single, dual and multicolumn		*.txt; *.prn; *.csv; *.asc	
Bruker	OPUS	*.*	
DeltaNu		*.spc	
Dionex	Chromeleon ^b		Via Connect to ¹ or using an ACD/Labs Chromeleon Add-on
Foss NIRSystems		*.da	
JASCO Corporation	J-700	*.jws	
JCAMP, JCAMP multispectra		*.dx; *.jdx	
LabControl		*.uvd; *.irs	
MATLAB	DSO ^b	*.mat	
Ocean Optics		*.*	
PerkinElmer Instruments		*.sp	
Shimadzu Corporation	IR	*.irs	
Thermo Scientific	Galactic	*.spc	
	Mattson	*.*	
	Nicolet OMNIC	*.spa; *.spg	
Waters Corporation	Empower 2 and 3		Via Connect to ¹ or using an ACD/Empower Add-on
	MassLynx	*.inf	

^b ダイオードアレイ検出器 (DAD) によるハイフレーションデータはサポートされています。

¹ CitrixではConnect toユーティリティは動作しません。

Open Source

Vendor	Data Format
ASCII ^a	*.txt; *.prn, *.csv, *.asc
JCAMP ^a	*.dx; *.jdx
Pistoia Alliance	*.helm; *.xhelm

^a ファイルの出力もサポートされています(JCAMPの場合は1DNMRのみ)

ACD/Labsでは、AnIMLなどの将来の分析データ形式の標準化の取り組みをサポートするよう努めています。
ACD/Labsは、Allotropeパートナーネットワークのメンバーであり、Allotropeフレームワークの作成に参加しています。

Curve

Vendor	Data Format
ACD/Labs	*.spectrum, *.esp
ASCII single, dual and multi column	*.txt; *.prn; *.csv; *.asc
Bruker DIFFRAC-AT	*.raw
Bruker DIFFRAC-PLUS	*.raw
Galactic	*.spc
Gatan	*.dm3
JCAMP, JCAMP multispectra	*.dx, *.jdx
PANalytical XRDML ^c	
PowDLL ^d	*.*
Sirius Analytical Instruments	
STOE XRPD	*.raw
TA Instruments	*.*

^c 古いフィリップスX線機器のRDとUDF形式は、PANalyticalが提供する変換ソフトウェアを使用してPANalytical XRDML形式に変換できます。

^d XRPDファイル用のNETコンバーターです。

ChemSketch

Vendor or File Format	Data Format	Comments
<u>Chemical Drawings</u>		
ACD/Labs	*.sk2	
ChemAxon Marvin Sketch	*.mrv	Input only
Dassault Systèmes BIOVIA Draw	*.skc	Formerly ISIS Sketch, MDL Draw, Symyx Draw, and Accelrys Draw
Revvity Signals Software	*.cdx, *.cdxml, *.chm	Input only for cdxml files
Adobe Acrobat	*.pdf	Output only
<u>Chemical Structures and Reactions</u>		
Chemical Markup Language	*.cml	Output only
FASTA formats	*.fasta and other	Peptide sequences
InChI	Text string	
InChIKey	Text string	Output only
MOL files	*.mol	
Pistoia Alliance HELM	*.helm, *.xhelm	Peptide sequences, input only for xhelm files
Reaction Files	*.rxn	
SMILES	Text string	
<u>Images</u>		
GIF image format	*.gif	
JPG image format	*.jpg	Input only
Paintbrush	*.pcx	Output only
PNG image format	*.png	
TIFF Bitmap	*.tif	Output only
Windows Bitmap	*.bmp, *.dib	
Windows Metafile	*.wmf	

動作環境

ACD/Labsのアプリケーションとソリューションを効率的に実行するために推奨されるハードウェアおよびソフトウェアの仕様を以下に示します。

デスクトップソフトウェア製品

OS	<ul style="list-style-type: none">•Microsoft Windows 10 (64bit)•Microsoft Windows 11•Microsoft Windows Server 2016 Standard•Microsoft Windows Server 2019•Microsoft Windows Server 2022
ハードウェア	<ul style="list-style-type: none">•Microsoft Windows compatible PC (minimum 2-core CPU)•8 GB RAM or more (4 GB RAM minimum for some programs)•Hard disk minimum 100 GB
ソフトウェア	<ul style="list-style-type: none">•.NET Framework Version 2.0, 3.5, 4.5.2 <p>一部のファイルタイプのインポートに必要となります。</p> <ul style="list-style-type: none">•.NET Framework Version 2.0 Agilent LCMS 6000ファイルをインポートし、XRPDファイル用のPowDLLコンバータを使用•.NET Framework Version 3.5 Bruker CompassXtractファイルをインポート•.NET Framework Version 4.5.2 .NETアセンブリを使用するスクリプトエンジンをサポート

Spectrus DB Enterpriseアプリケーションサーバ

OS	<ul style="list-style-type: none">•Microsoft Windows Server 2016 Standard•Microsoft Windows Server 2019•Microsoft Windows Server 2022
ハードウェア	<ul style="list-style-type: none">•Suitable Microsoft Windows Server with minimum 8-core CPU (more users will require more cores)•16 GB or more RAM (~ 2GB per core)•Hard disk minimum 100 GB + space for log files on hard drive•Fast internet connection with database server (1 Gb+)
ソフトウェア	<ul style="list-style-type: none">•Oracle Client 18c/19c (x64)•PostgreSQL ODBC driver version (psqlODBC 12.1.0.0 included with delivery)•.NET Framework version 4.5.2

データベースサーバ

OS	<ul style="list-style-type: none">•Microsoft Windows Server 2016 Standard•Microsoft Windows Server 2019•Microsoft Windows Server 2022•Red Hat Enterprise Linux 6.4 (Red Hat Enterprise Linux 6.4は、Oracle Serverでのみサポートされています。)
ハードウェア	<ul style="list-style-type: none">•Suitable Server to run operating system and database software (Oracle/PostgreSQL)•16 GB or more RAM•Hard disk minimum 100 GB (for data). Estimation for disk space is approximately 3 times the size of raw data files•Fast network connection with ACD/Spectrus Enterprise Server (1 Gb+)
ソフトウェア	<ul style="list-style-type: none">•Oracle Server 18c/19c (x64)•PostgreSQL 12 or above (Version 12.2 included)

ライセンスサーバ

OS	<ul style="list-style-type: none"> •Microsoft Windows Server 2016 Standard •Microsoft Windows Server 2019 •Microsoft Windows Server 2022
ハードウェア	<ul style="list-style-type: none"> •Suitable Microsoft Windows Server to run operating system •4 GB or more RAM •Hard disk recommended 100 GB space for log files on hard drive (minimum 4 GB) •TCP/IP protocol installed, and Fixed IP address assigned •Fast internet connection (1Gb+)

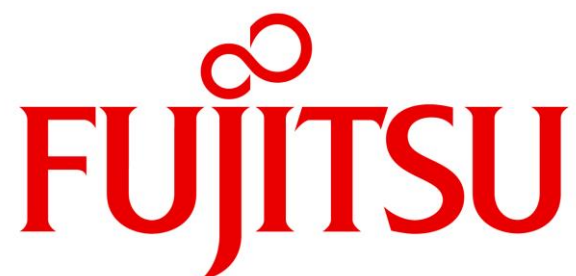
Automationサーバ

OS	<ul style="list-style-type: none"> •Microsoft Windows Server 2016 Standard •Microsoft Windows Server 2019 •Microsoft Windows Server 2022
ハードウェア*	<ul style="list-style-type: none"> •Multicore (minimum 2 cores) processor with maximum possible CPU speed •4 GB or more RAM (4 cores would require 8 GB of RAM) •Hard disk minimum 100 GB •Fast internet connection (1 Gb+)
ソフトウェア	<ul style="list-style-type: none"> •NET Framework Version 2.0, 3.5, and 4.5.2 一部のファイルタイプのインポートに必要となります。 •.NET Framework Version 2.0 Agilent LCMS 6000ファイルをインポートし、XRPDファイル用のPowDLLコンバータを使用 •.NET Framework Version 3.5 Bruker CompassXtractファイルをインポート •.NET Framework Version 4.5.2 .NETアセンブリを使用するスクリプトエンジンをサポート <p>Apache ActiveMQ™メッセージ・ブローカーをACD/Automation Serverソフトウェアとともにインストールする場合は、まずJava Runtime Environment (JRE)またはJava Development Kit (JDKの場合)バージョン8以降をサーバー・コンピュータにインストールする必要があります。</p>

* 注意：プロセッサとディスク容量の要件は、アプリケーションと用途によって異なります。

製品機能比較

	Spectrus Processor	ChemAnalytical Workbook	Spectrus Workbook	NMR Workbook	NMR Predictor Suite	NMR Workbook Suite	Structure Elucidator Suite	MS Fragmenter	MS Workbook Suite	MS Structure ID Suite	Method Selection Suite	AutoChrom Offline	AutoChrom Online	SpectrusIS
基本処理	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○	○ NMR, xCUVMSのみ
データベース構築	△ 検索・閲覧のみ	○	○	○	△ 検索・閲覧のみ	○	○	△ 検索・閲覧のみ	○	○	○	○	○	△ SpectrusDBに接続できれば、更新可能
NMR処理	×	△ 1H, HSQC間のみ	○	○	×	○	○	×	×	×	×	×	×	○
	×	○	○	○	×	○	○	×	×	×	×	×	×	×
	×	×	×	×	○	○	○	×	×	×	×	×	×	△ アトオンが必要
	×	×	×	×	×	×	○	×	×	×	×	×	×	×
	×	×	×	×	×	×	○	×	×	×	×	×	×	×
MS処理	△ (手動)	△ (手動)	○	△ (手動)	△ (手動)	△ (手動)	○	○	○	○	△ (手動)	△ (手動)	△ (手動)	×
	×	×	○	×	×	×	○	○	○	○	×	×	×	×
	×	×	○	×	×	×	○	×	×	○	×	×	×	×
	×	×	○	×	×	×	○	×	×	○	×	×	×	×
	×	×	○	×	×	×	○	×	×	○	×	×	×	×
クロマト処理	×	○	○	×	×	×	○	×	×	○	○	○	○	×
	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	○	○	○	×
	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	○	○	○	×
	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	○	○	○	×
	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	○	○	×



お問い合わせ先

富士通コンタクトライン（総合窓口） 0120-933-200

受付時間 9時～12時および13時～17時30分（土曜・日曜・祝日・当社指定の休業日を除く）

富士通株式会社

ソーシャルソリューション事業本部 Healthy Living Life Science事業部

ACD/Labs担当

E-Mail contact-acdlabs@cs.jp.fujitsu.com

HP <https://www.fujitsu.com/jp/acdlabs/>