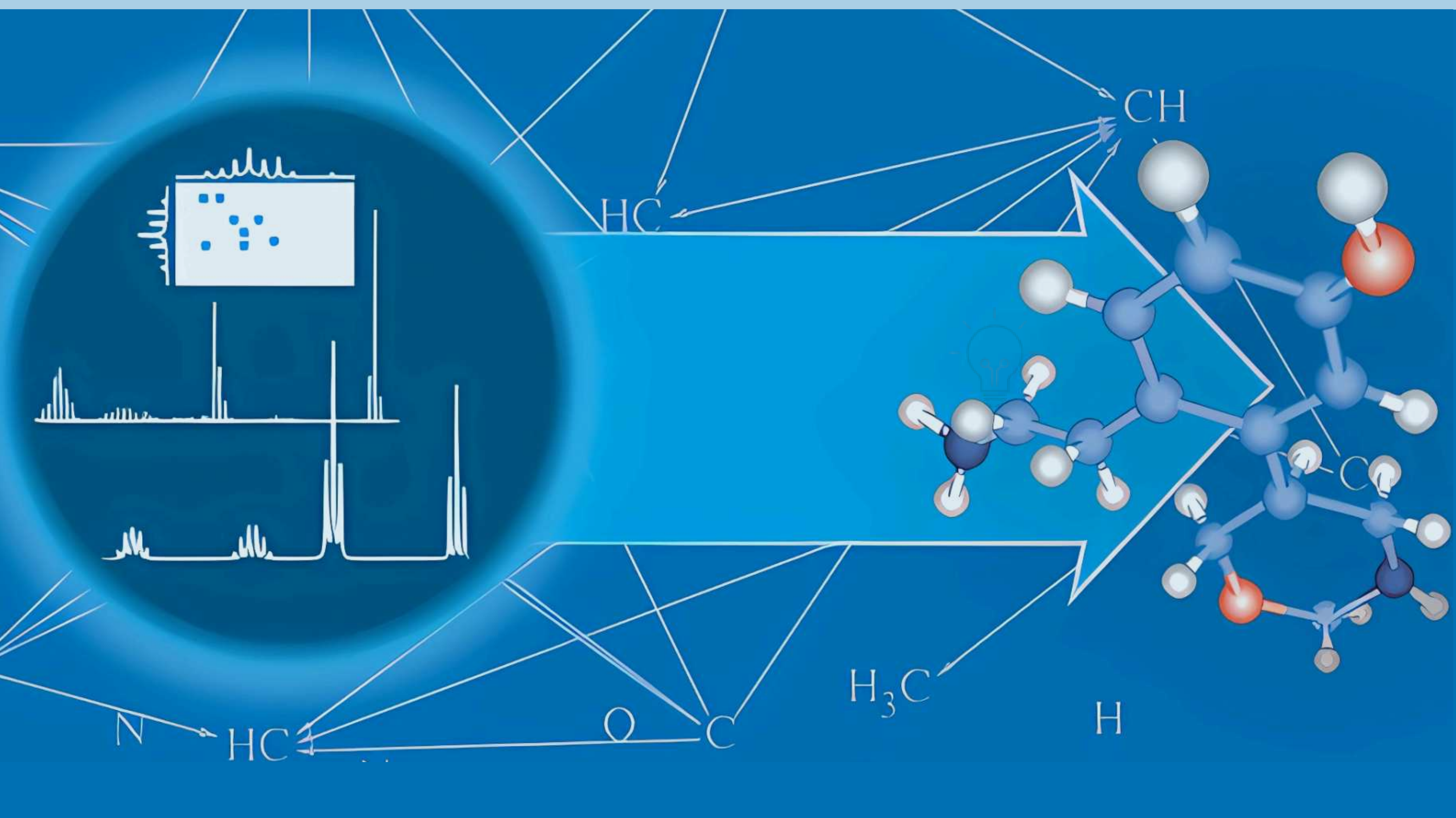


化合物结构解析软件

ACD/Structure Elucidator Suite

功能、应用介绍



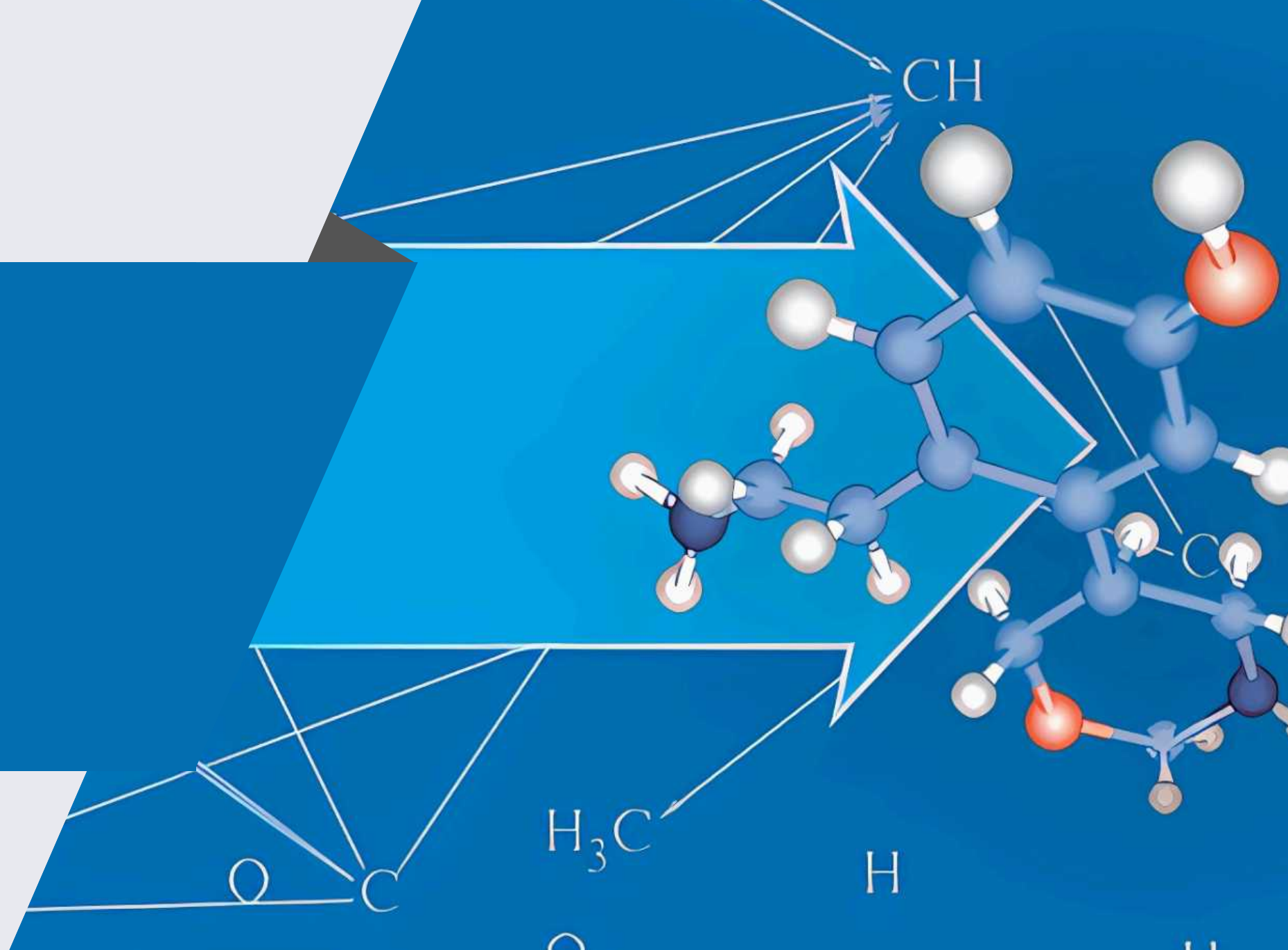
广州凯美科信息技术有限公司

www.chemico.com.cn



目录

content



ACD/SES软件介绍

Software Introduction

1. 功能模块组成及介绍	1
综合谱图处理能力	2
庞大的核磁谱图数据库	3
精准的核磁谱图预测	4
核磁数据高级分析工具	5
高效的未知物从头解析	6
质谱碎片裂解预测工具	11
自动化质谱定性工具	12
规范化的实验数据管理	14
2. 软件应用优势	16
3. 国内部分用户列表	20

公司简介

广州凯美科信息技术有限公司是一家以化学信息学软件为核心业务的企业。公司成立于2019年10月，竭诚为国内医药、化工、食品等领域用户提供高质量的化学信息学软件解决方案和技术服务。作为加拿大ACD/Labs公司在国内的合作伙伴，我们在化合物结构鉴定、化学信息管理、色谱方法开发、化合物成药性评价、分子模拟等方面累积了丰富的服务经验，并且得到广泛好评。

化学界中的未知化合物，如天然产物，药物杂质、降解物等未知化合物的发现与结构鉴定，通常需要整合不同的分析技术，如核磁共振，质谱，色谱等。直至今日，化学中最大的挑战之一，是通过有效的信息进行高效、准确地解析未知化合物结构。

ACD/Structure Elucidator Suite（简称ACD/SES）作为业界领先的化合物结构解析软件平台，通过庞大的数据库及高级算法，为科学家在研究天然产物结构、药物杂质等领域提供全面的解决方案。



ACD/SES软件功能模块组成

计算机辅助结构解析

Computer Assisted Structure Elucidation

历经20多年的技术打磨，被行业推崇的结构解析专家系统！

核磁高级分析模块

NMR Workbook

助您高效完成核磁谱图处理、验证归属及同分异构体确认！

核磁谱图预测模块

NMR Predictors

基于经验算法进行核磁谱图预测的行业标杆！

核磁数据库模块

NMR Databases

提供业界最庞大的核磁谱图数据库供您检索！

质谱定性分析套件

MS Structure ID Suite

一站式的质谱数据处理、分析和管理平台，助您快速识别、确认组分结构！

质谱碎片预测模块

MS Fragmenter

由文献建立的质谱断裂规则来预测化合物离子碎片，具有良好的预测精度！

数据库构建模块

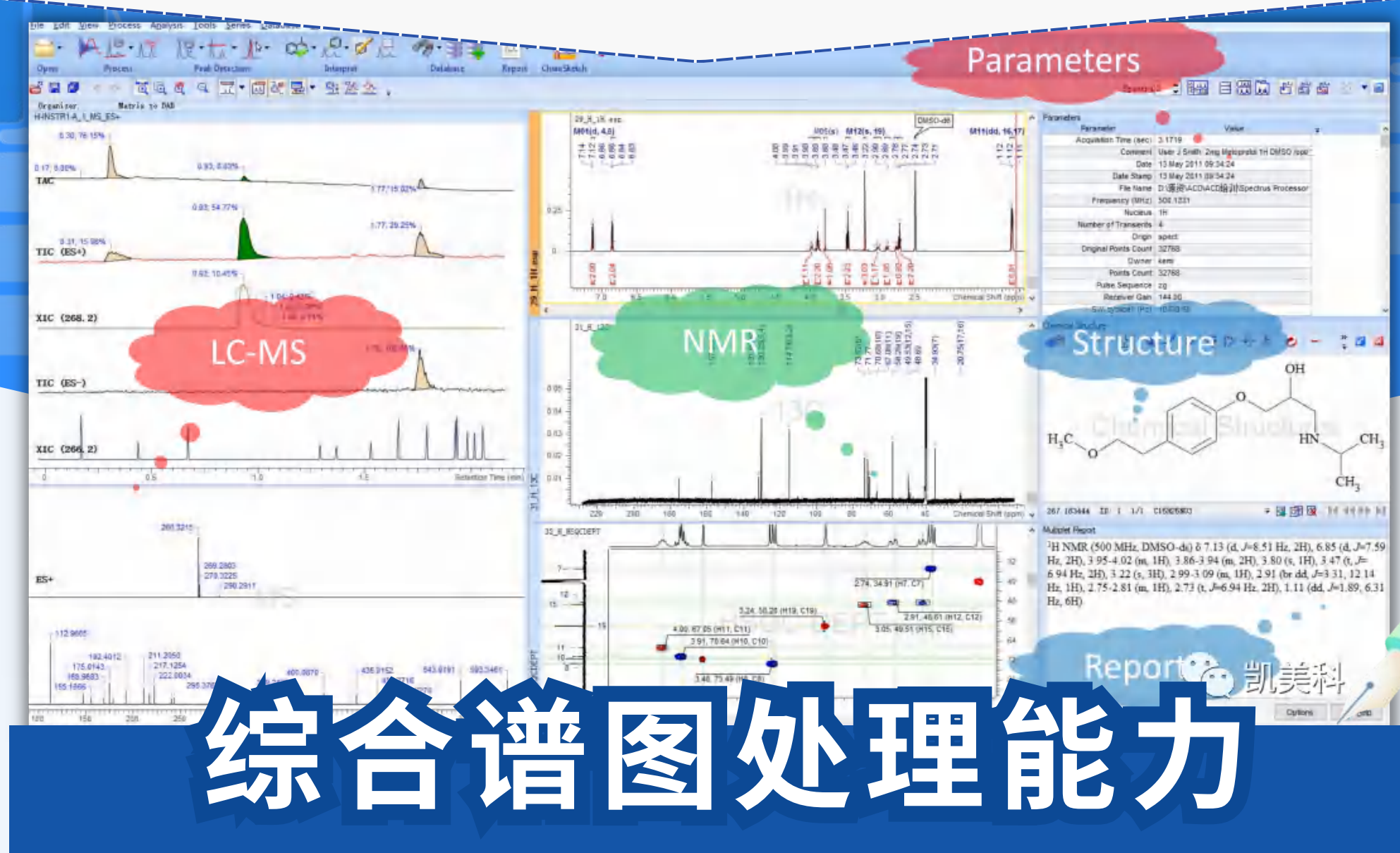
ChemAnalytical Workbook

ACD/Labs 分析数据整合管理系统，助力实验室化学数据规范存贮及信息智能共享！

综合谱图处理模块

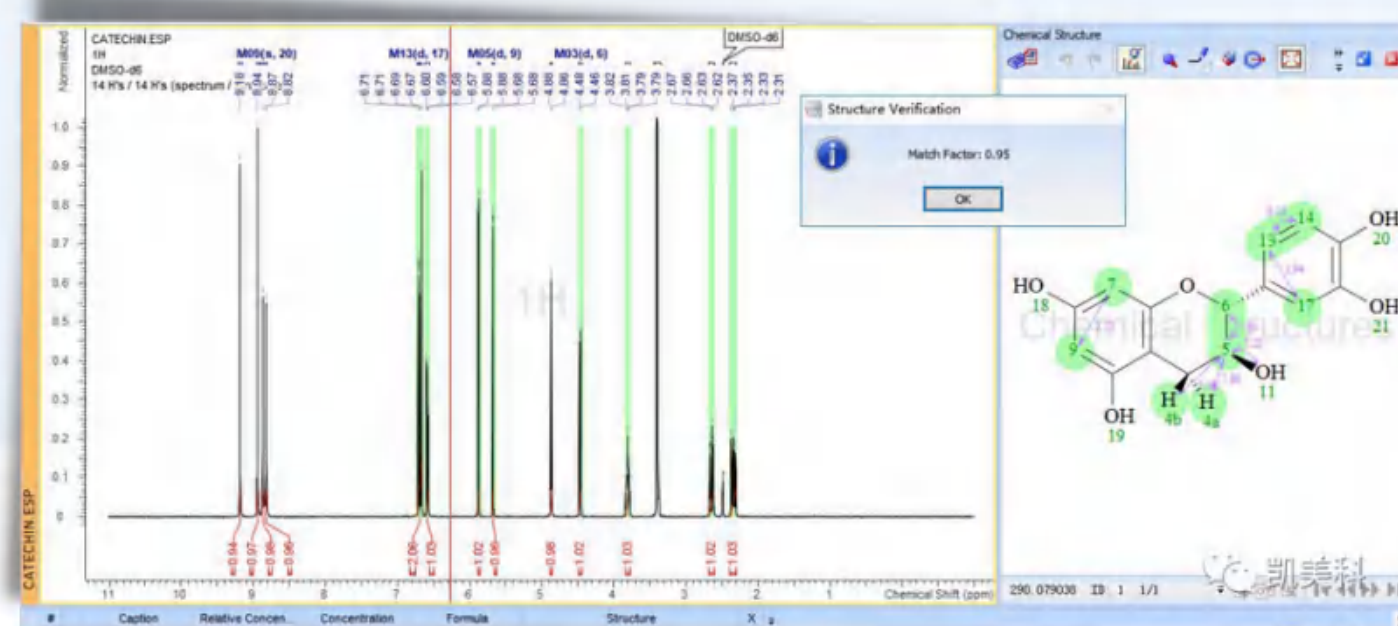
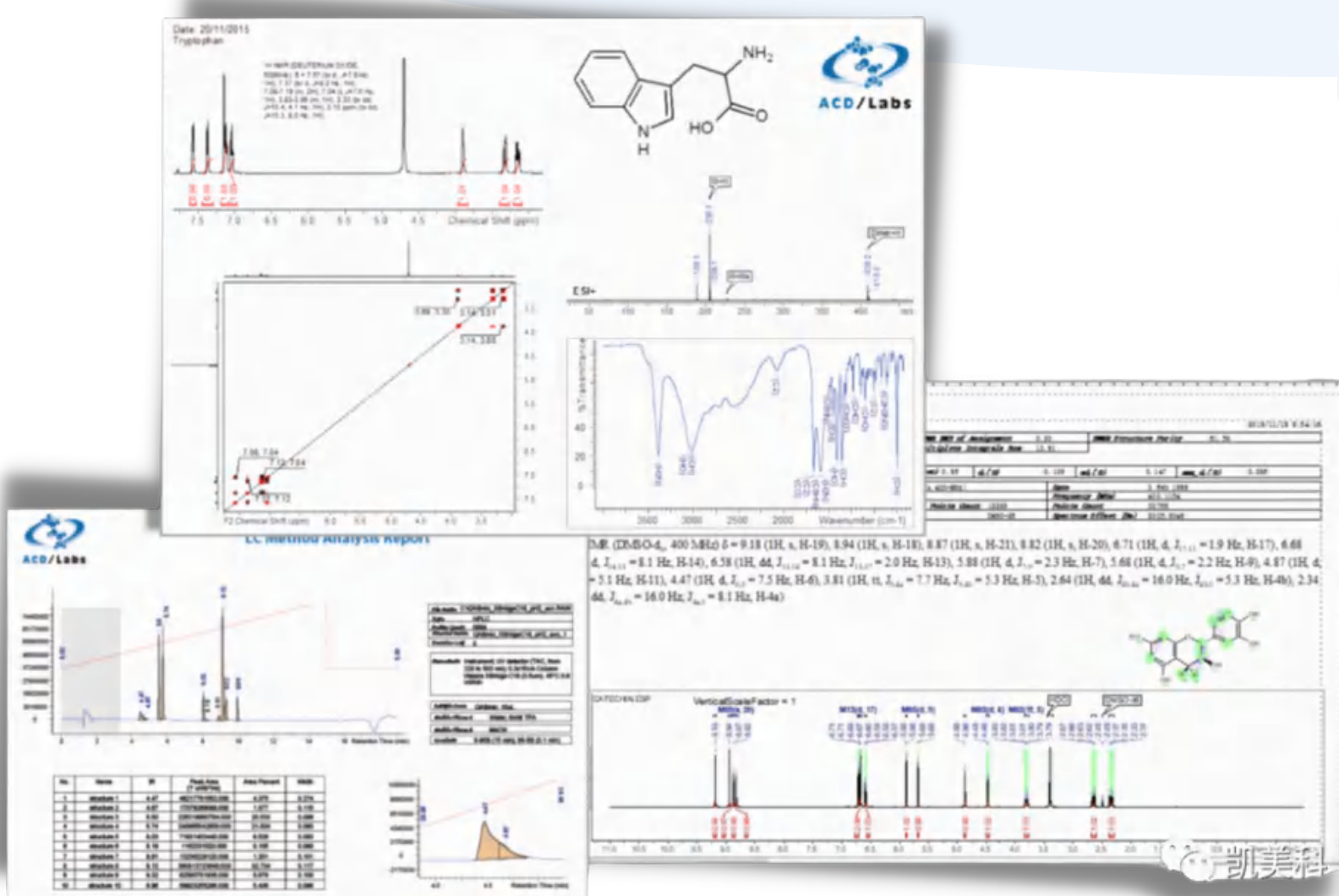
Spectrus Processor

一站式完成各种类型分析数据的处理、分析和报告！



Spectrus Processor是ACD/Labs软件的基础模块，具有1D&2D NMR，MS，HPLC，LC/MS，GC/MS，UV-IR，TGA，DSC等波谱数据处理功能。

- 兼容Bruker、Varian、Agilent、Thermo、岛津、JEOL、AB、Waters等主流仪器厂商数据；
- 软件同时支持对所有数据的分析及解释；
- 辅助研究者进行化学结构与谱图间的自动归属验证；
- 化学结构绘制与编辑；
- 专业报告一键生成等。



庞大的核磁谱图数据库

ACD/Labs核磁数据库是目前收录化合物核磁数据最多且功能最强的一款数据库，用户可基于核磁谱图进行便捷的数据库检索，快速获得候选物结构信息，实现已知物的高效排重；也为复杂结构或未知物提供骨架类型或基团片段的关键性参考，大大提高结构确认效率。

通用库

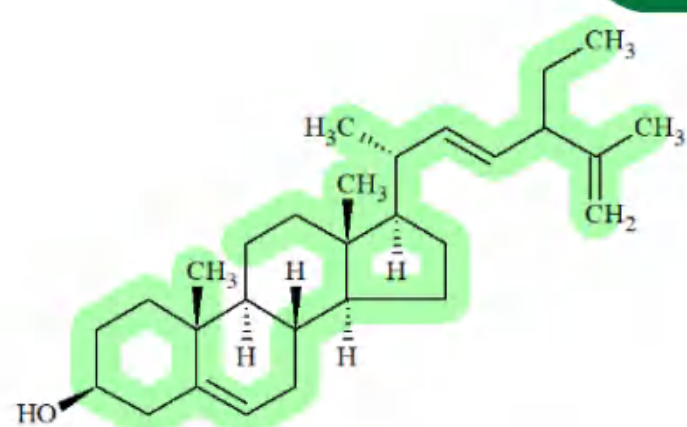


- 包含来源于文献报道的超过40万化合物的实验核磁数据
- 包含来源于PubChem超过1亿个化合物的预测核磁数据

● ● ● 天然产物库 ● ● ●



- 针对天然产物领域提供专门的天然产物核磁库供检索，目前大约收录约100万个结构和预测核磁数据，数据定期更新。



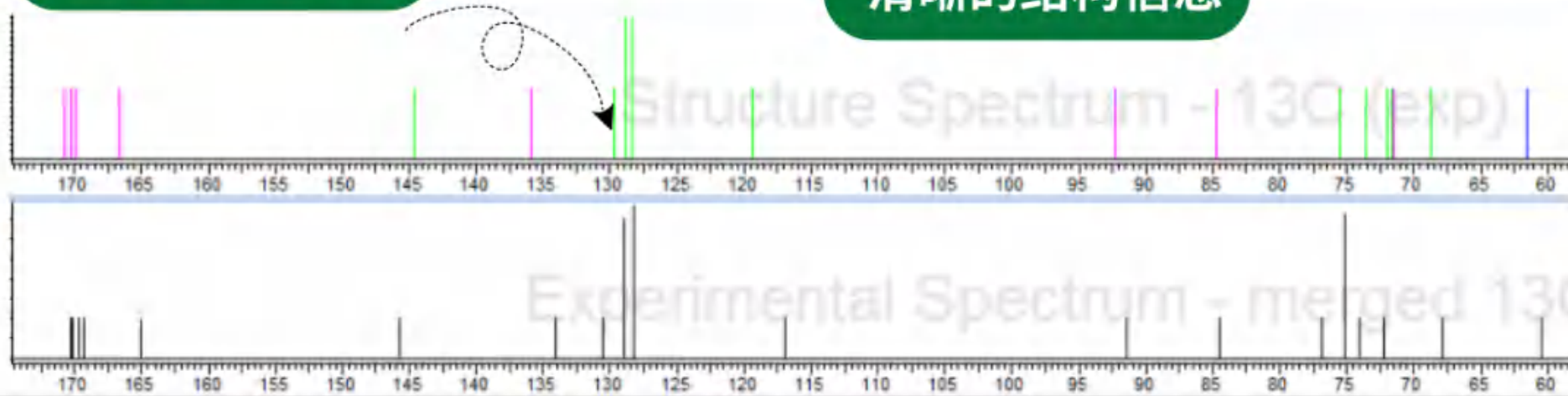
分子式: C₂₉H₄₆O
分子量: 410.6749

文献来源:
J. Braz. Chem. Soc./2004/15/-/608

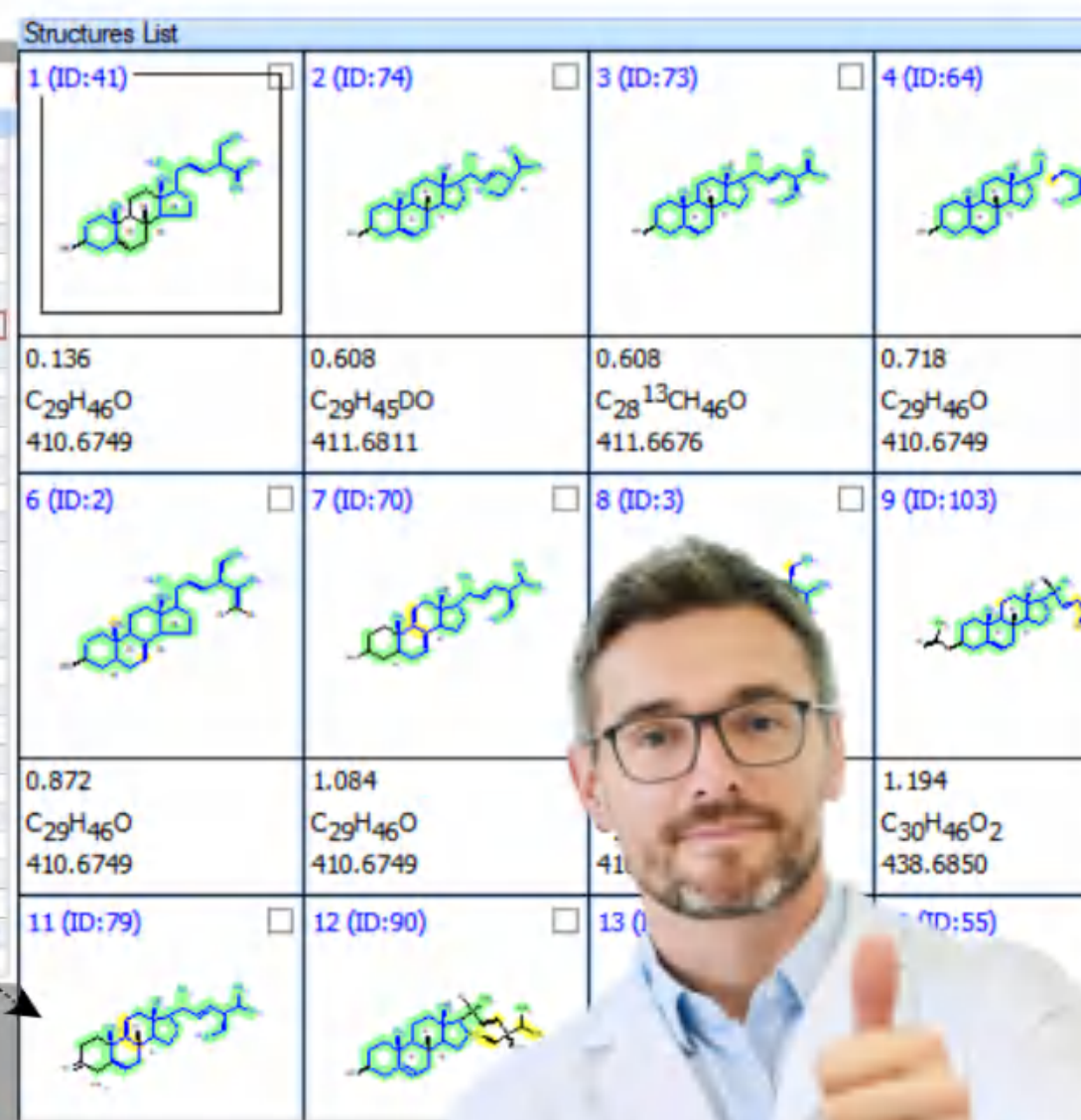
详细的谱峰比对信息

						Difference	Atto	XHn
2	6	31.600	0.000			-0.068	1	CH2(t)
3	5	71.800	0.000			-0.067	1	CH2(t)
4	3	42.300	0.000			-0.022	1	CH(d)
5	1	140.700	0.000			0.041	1	CH2(t)
6	7	121.700	0.000			-0.061	1	C(s)
7	8	31.900	0.000			-0.003	1	CH(d)
8	10	31.900	0.000			0.001	1	CH(d)
9	9	50.100	0.000			-0.055	1	CH(d)
10	2	36.500	0.000			-0.021	1	C(s)
11	11	21.100	0.000			0.026	1	CH2(t)
12	12	39.600	0.000			-0.083	1	CH2(t)
13	14	42.300	0.000			-0.007	1	C(s)
14	15	24.300	0.000			-0.032	1	CH2(t)
15	17	28.700	0.000			-0.013	1	CH2(t)
16	20	12.100	0.000			0.038	1	CH3(q)
17	21	40.200	0.000			-0.005	1	CH(d)
18	19	19.400	0.000			-0.013	1	CH3(q)
19	22	137.200	0.000			-0.014	1	CH(d)
20	24	130.000	0.000			-0.040	1	CH(d)
21	25	52.000	0.000			-0.009	1	CH(d)
22	26	148.800	0.000			-0.033	1	C(s)
23	28	109.500	0.000			-0.029	1	CH2(t)
24	29	25.700	0.000			-0.020	1	CH2(t)
25	30	12.100	0.000			-0.051	1	CH3(q)
26	13	56.740	0.000			-0.116	1	CH(d)
27	16	56.510	0.000			0.625	1	CH(d)
28	23	19.920	0.000			-0.311	1	CH3(q)
29	27	20.950	0.000			0.141	1	CH3(q)

直观的谱图比对



清晰的结构信息

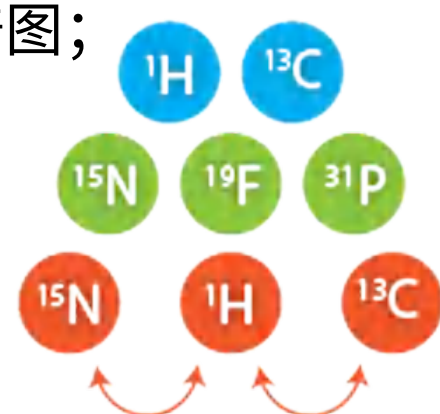




精准的核磁谱图预测

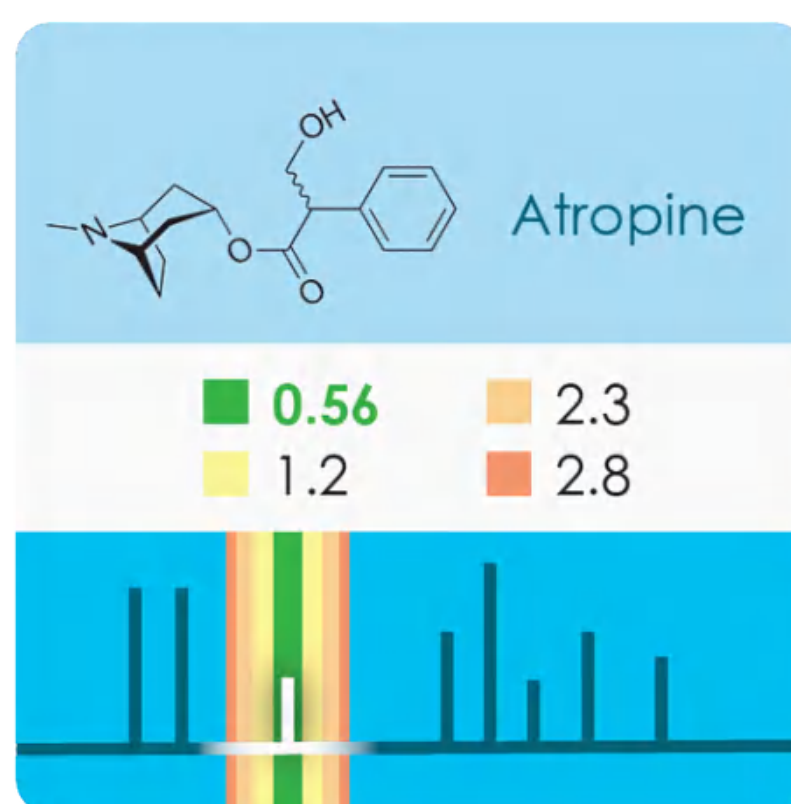
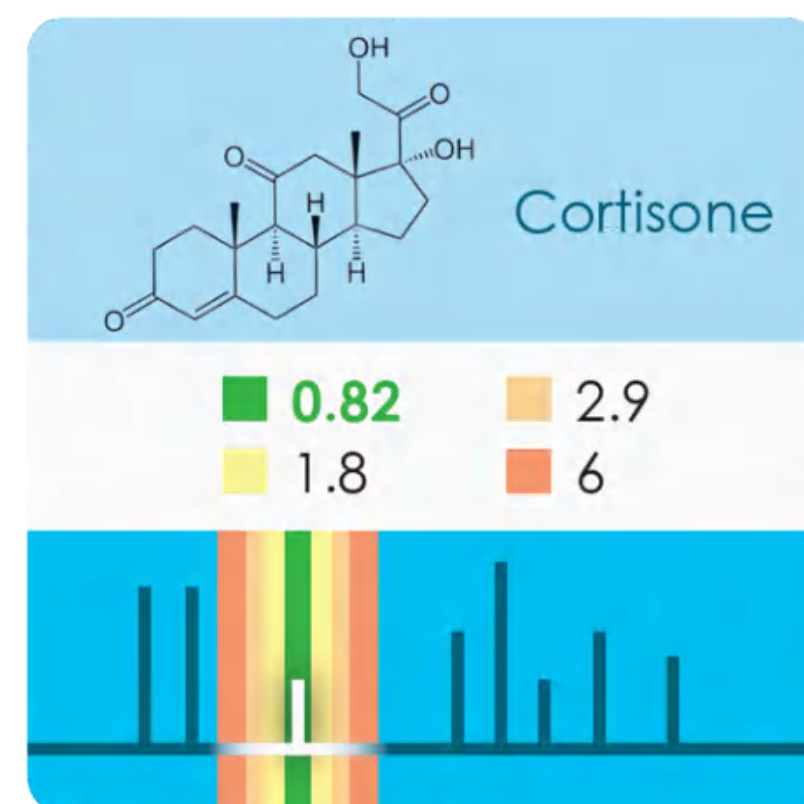
ACD/NMR Predictors基于HOSE算法、神经网络算法及后台庞大的数据库支撑，为研究者提供业界最精准的核磁谱图预测，辅助实现结构快速判定。内容包括化学位移、耦合常数等信息，同时考虑化合物立体构型差异，预测功能支持用户添加实验数据进行自训练，进一步提高计算精度。

- 可预测 H、C、N、F、P及2D NMR谱图；
- 可预测混合物的NMR谱图；
- 考虑不同溶剂环境影响；
- 预测谱图与实验谱图直观对比分析；
- 预测结果被SciFinder、MarinLit等权威数据库及文章广泛引用；

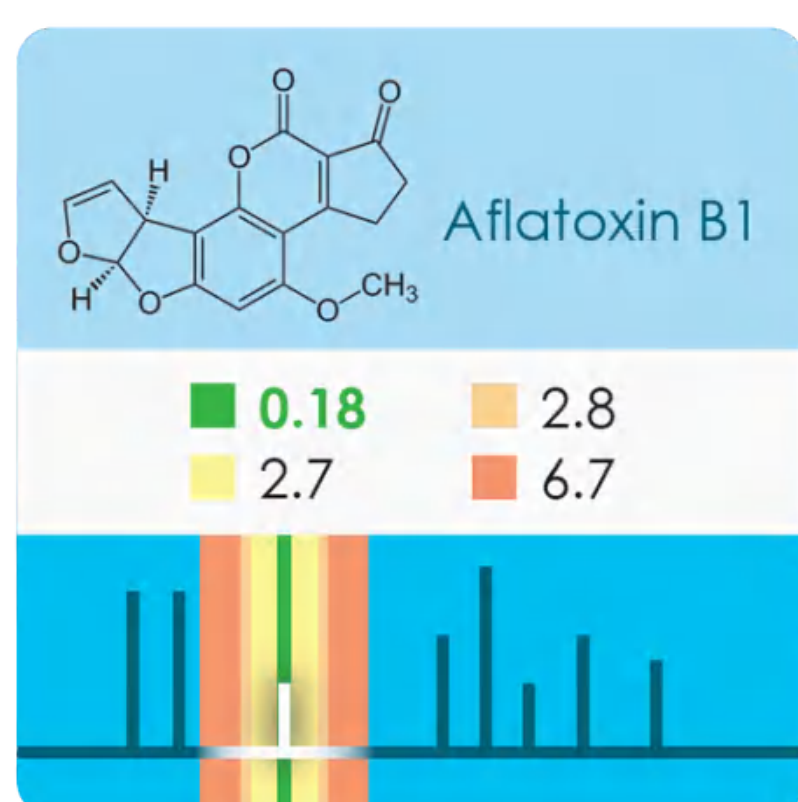
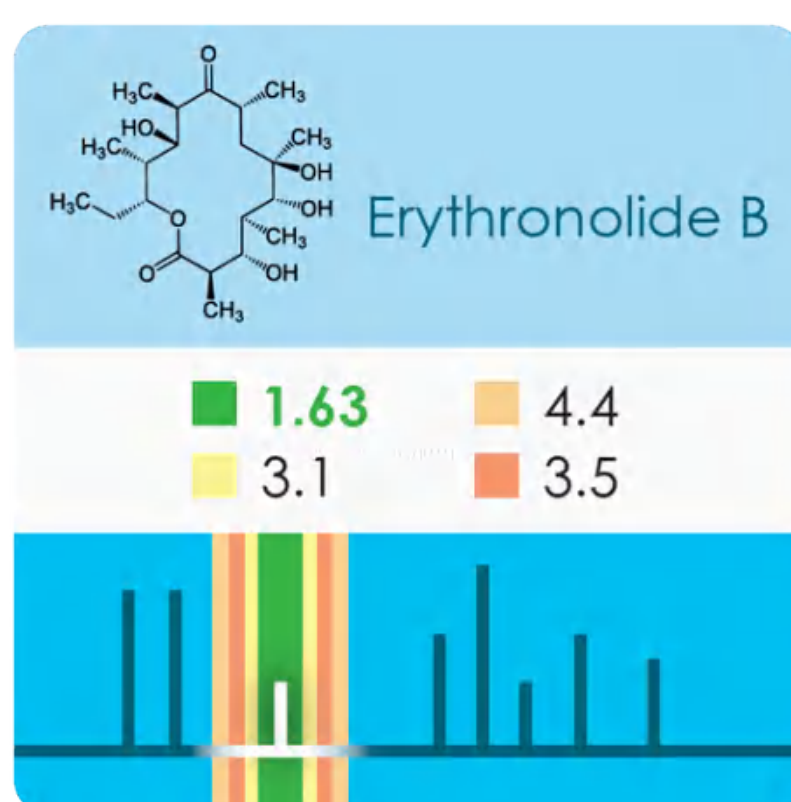
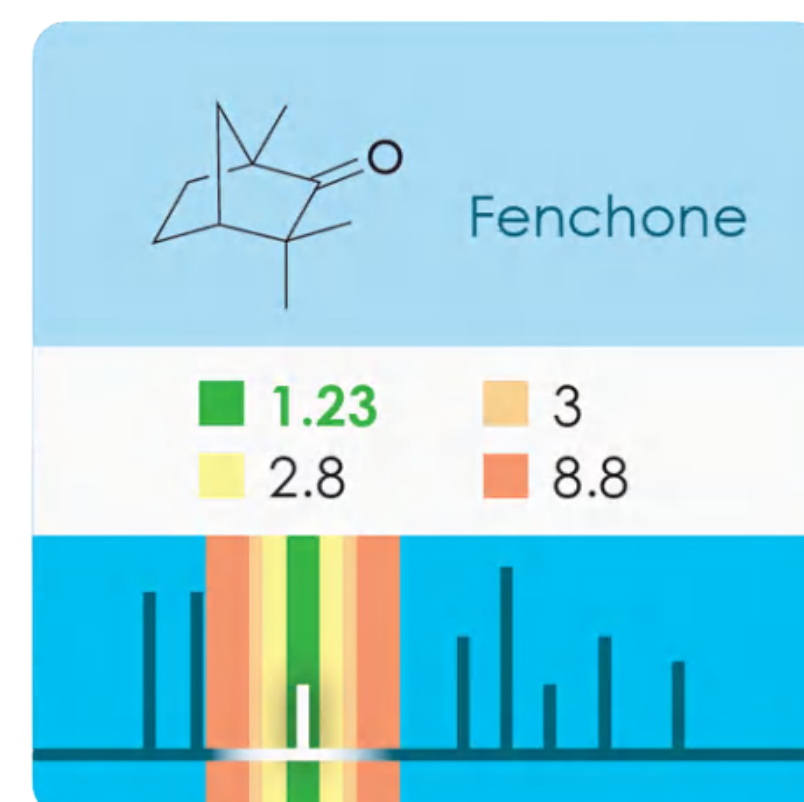


简评

ACD/Labs →
Mnova →
DFT177 →
Chemdraw →



与其他流行工具相比，ACD/Labs的NMR预测算法为五种天然产物提供了更精确的 ^{13}C NMR化学位移预测

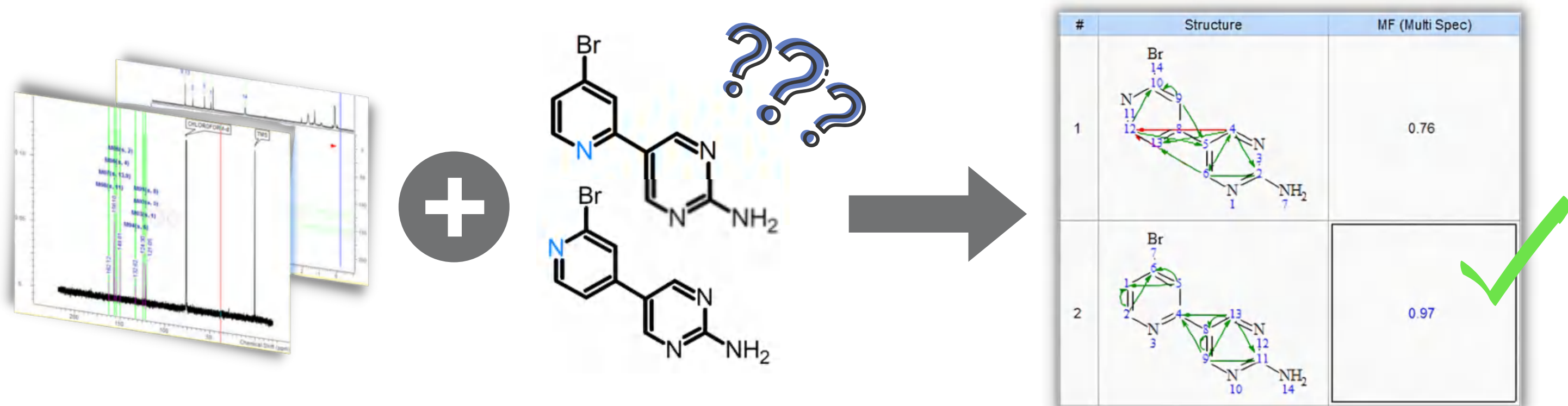


核磁数据高级分析工具

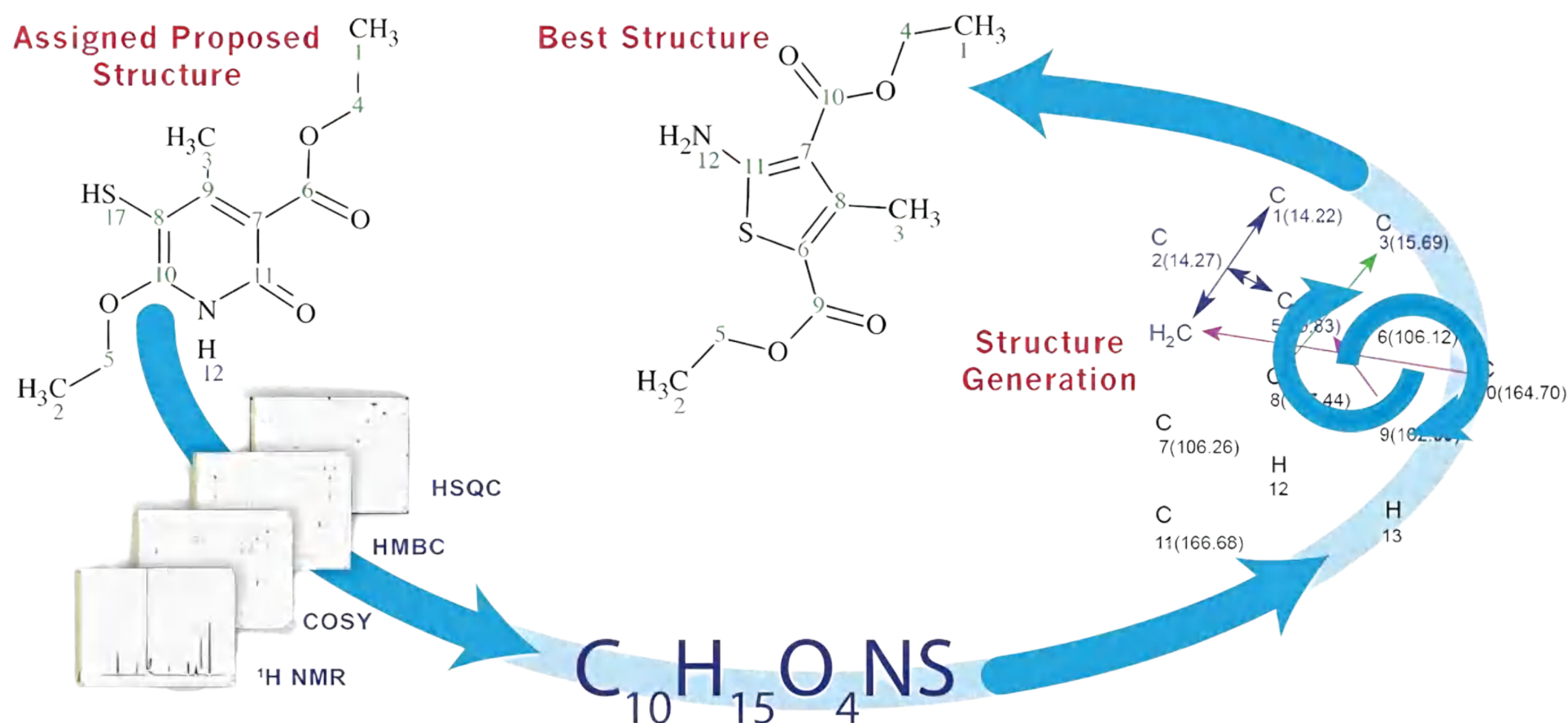
如果一个化合物对应有一套的核磁谱图，比如包括氢谱、碳谱、DEPT谱、COSY、HMBC、HSQC等等，如何能够更加快速的对整套核磁谱图进行处理、信号归属验证？如果一套谱图可能对应多个同分异构体结构，如何进行快速确认？

ACD/NMR Workbook 模块可以很好地解决以上问题,为核磁解析的研究者大大提升工作效率！

- 基于多谱图同步处理技术(NMR Sync)，软件可帮助我们更快地对整套谱图进行标峰处理；
- 基于Combined Concurrent Verification (CCV)技术可实现同分异构体的快速确认；



- 基于Unbiased Verification(UBV)技术实现无偏向性结构生成及结构确认；

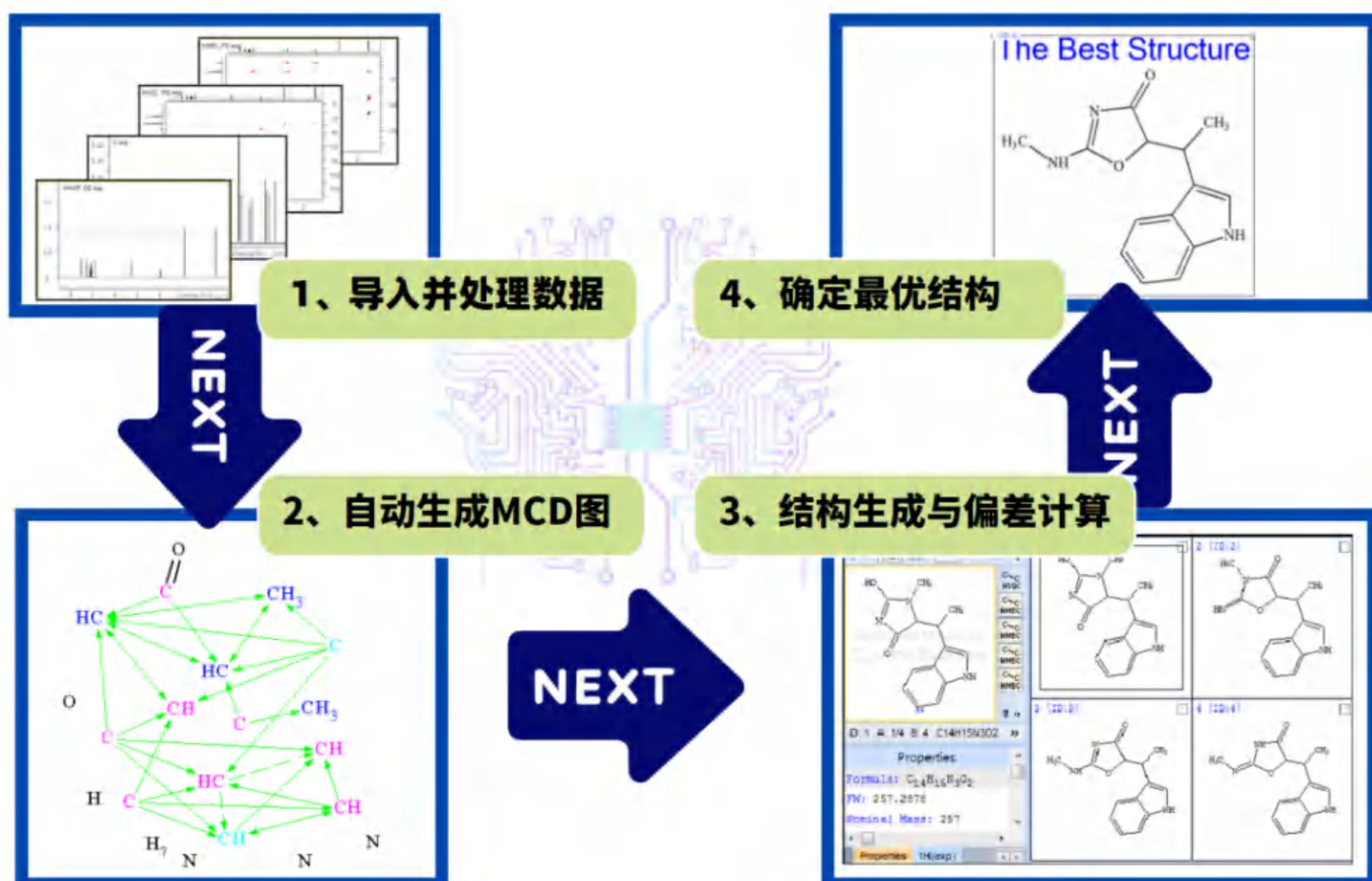




高效的未知物从头解析

ACD/Structure Elucidator Suite可利用1D & 2D NMR、MS等实验数据信息，基于CASE（Computer Assisted Structure Elucidation）技术，可帮助科研人员有效解析复杂化合物的结构，并且还可大大提高结构解析的效率，不用再耗费大量的时间来处理、解析繁复的工作。

- 基于实验核磁谱图信息自动生成分子连接图（MCD图）；
- 自动识别并颜色标记原子杂化状态及杂核原子间远程相关信息；
- 基于MCD图组合计算所有可能候选结构；
- 基于精确的核磁预测技术对候选结构分析并排序，获得最优结果。

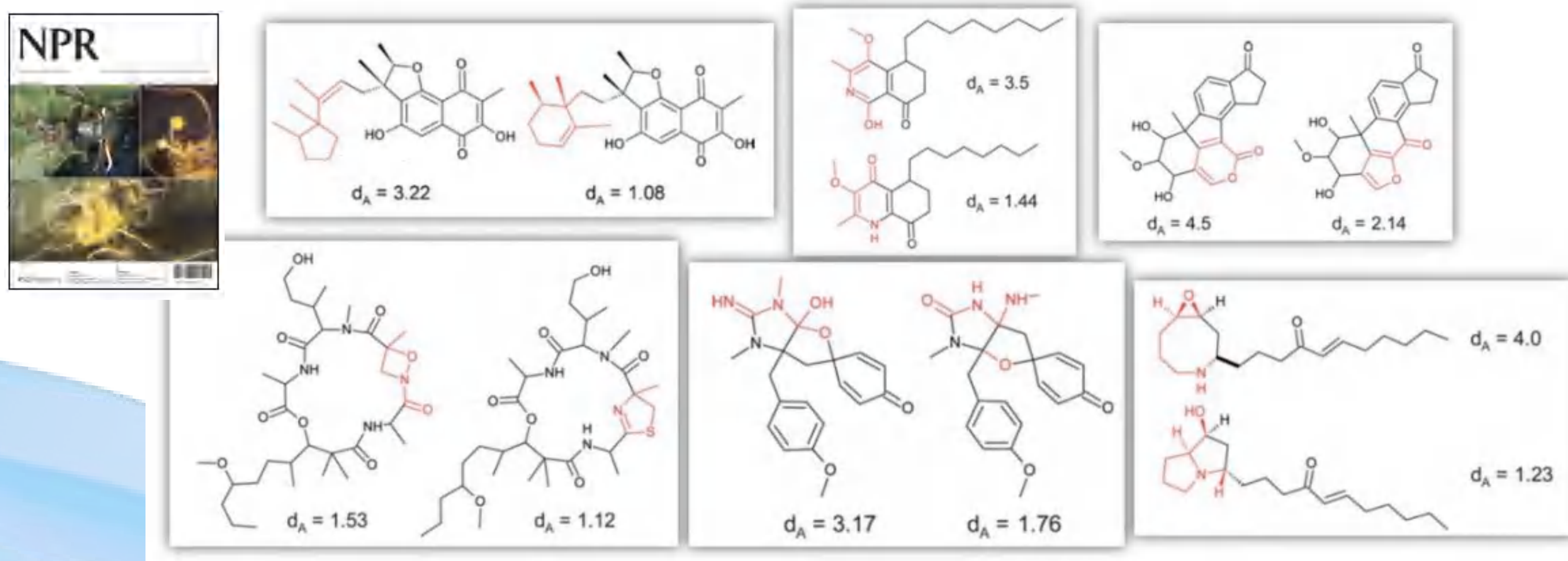


为什么需要计算机辅助结构解析？

计算机辅助结构解析（CASE）系统在化学领域中扮演着至关重要的角色，尤其是在面对大型和复杂化合物时，传统手动解析方法可能难以应对或彻底失败。随着化合物结构的复杂性增加，可能的异构体数量呈指数级增长。即便化学专家在场，手动解析也面临着巨大的挑战。CASE系统通过智能算法确保所有可能的结构都被考虑到，并利用化学位移预测功能，大幅缩短了从众多候选结构中筛选出最可能结构的时间，极大地提高了结构解析的效率和准确性。



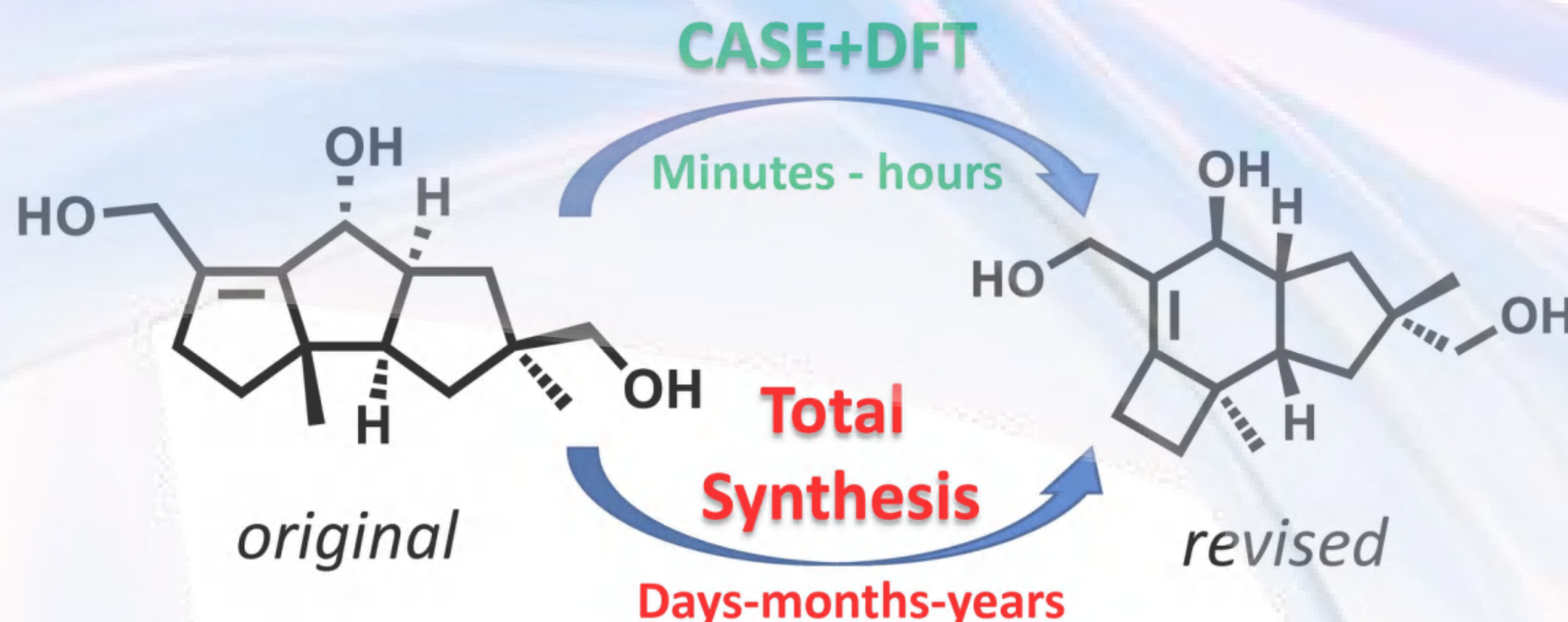
ACD/Structure Elucidator Suite软件基于CASE技术，借助计算机的强大计算能力实现无偏向性的从头解析，生成所有与谱图信号对应的结构，并根据计算NMR化学位移与实际化学位移的比对打分，从而推导最优的结果。这种方式往往可以避免人为经验的偏向性，得到更合理的结果。ACD/Labs公司已经通过该技术对于一些已发表的结构做了修正，如下图所示：



通过ACD/Structure Elucidator Suite软件修正的部分已报道结构(d_A 值较小的为更合理结构)

案例来源: [Structural revisions of natural products by Computer-Assisted Structure Elucidation \(CASE\) systems](#). Nat. Prod. Rep., 2010, 27, 1296-1328

另外，ACD/Labs与默克公司科学家发表文章，提出了联合应用计算机辅助结构解析（基于ACD/Structure Elucidator的CASE算法）和密度泛函理论计算的方法，对最初提出的结构进行预防性验证，并在确定原始结构不正确的情况下，揭示正确的结构。文章研究了十二个真实的天然产物结构案例，并使用CASE和DFT的联合方法进行了结构修订。结果表明，这种方法可以避免耗时费力的全合成工作。



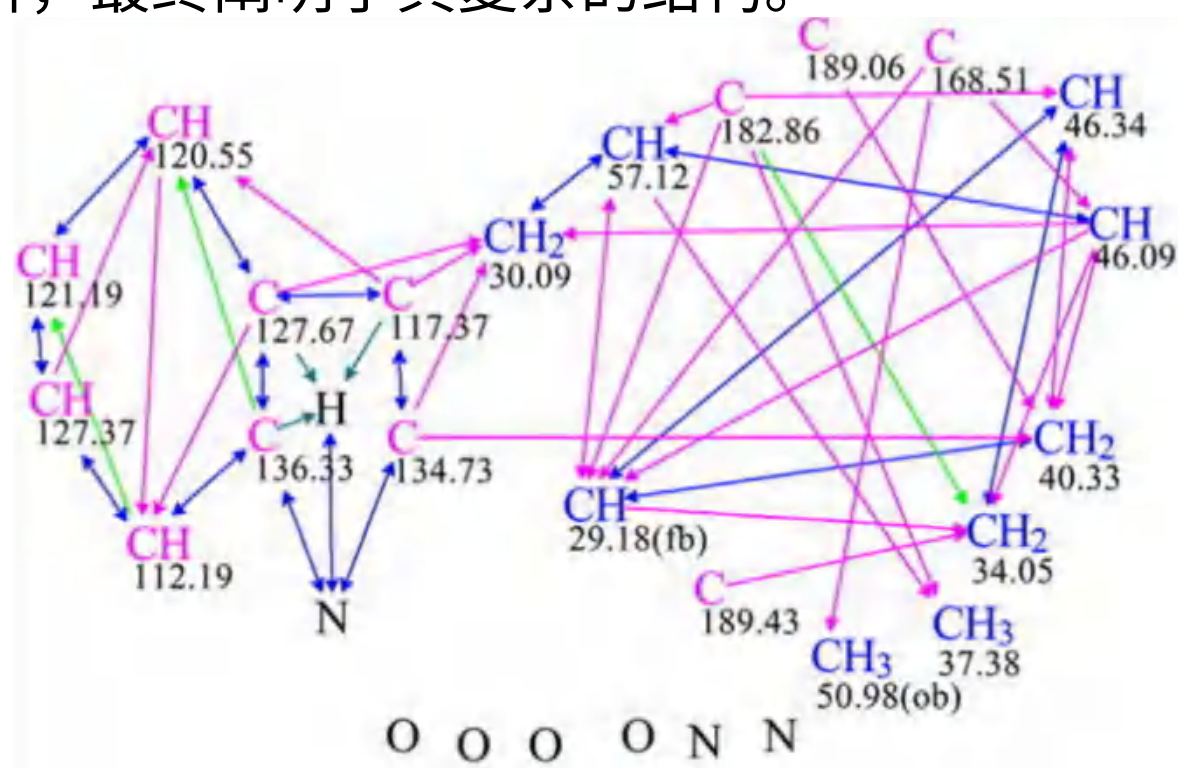
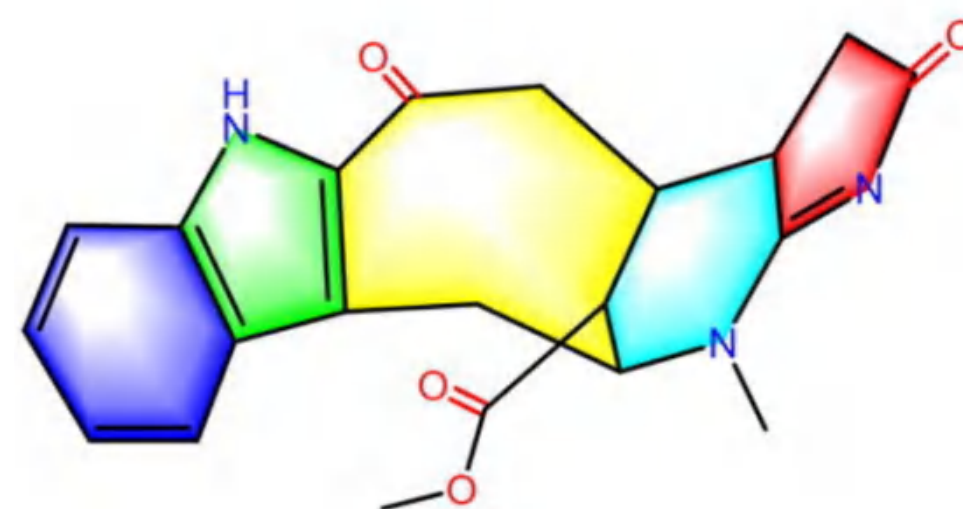
案例来源: [Enhancing Efficiency of Natural Product Structure Revision: Leveraging CASE and DFT over Total Synthesis](#). Molecules 2023, 28(9), 3796

ACD/Structure Elucidator Suite软件借助先进的计算机辅助结构解析（CASE）技术，已成为全球众多研究者解析复杂化合物结构的强大助手。该软件从实验谱图数据出发，能够独立进行化合物结构的从头解析，同时提供详尽的归属验证信息，确保化合物结构与谱图信号之间的精确对应。在学术界，尤其是在*J. Nat. Prod.*、*Org. Lett.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*J. Org. Chem.*等知名期刊上，众多文献已经充分展示了该技术在实际应用中的卓越成效，为研究者们提供了坚实的理论依据和清晰的解释框架。



✓ 经典案例：N-酰基咪唑生物碱类化合物的结构解析

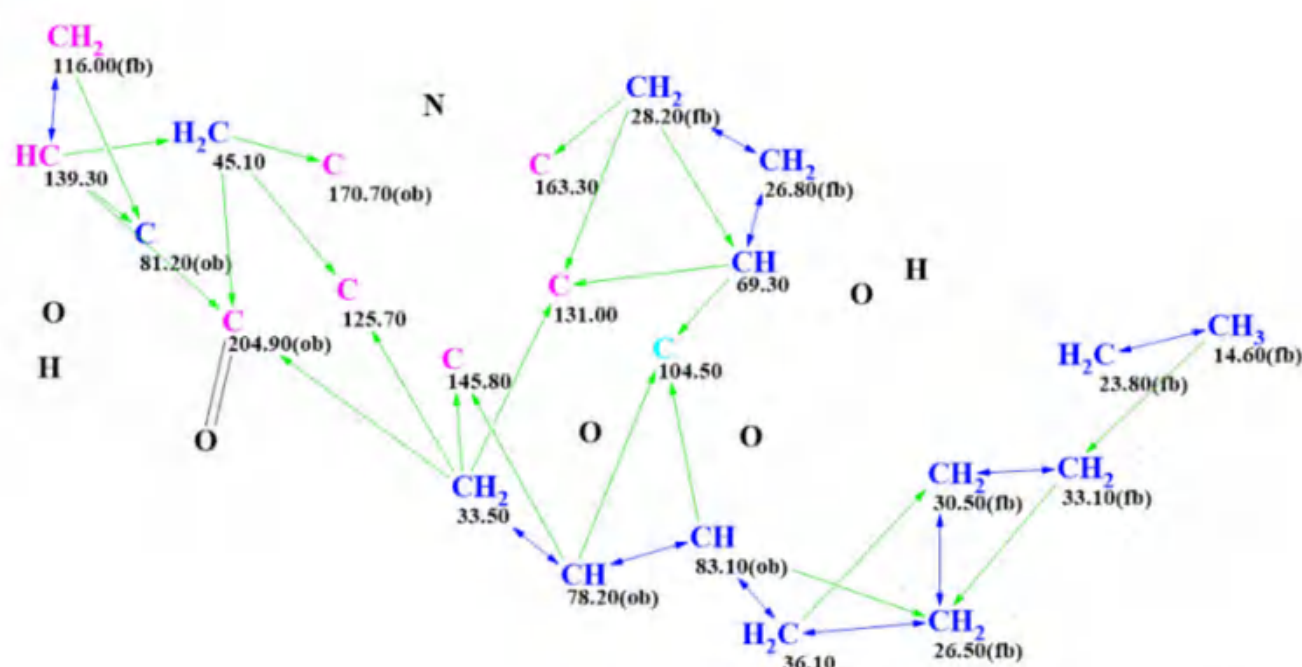
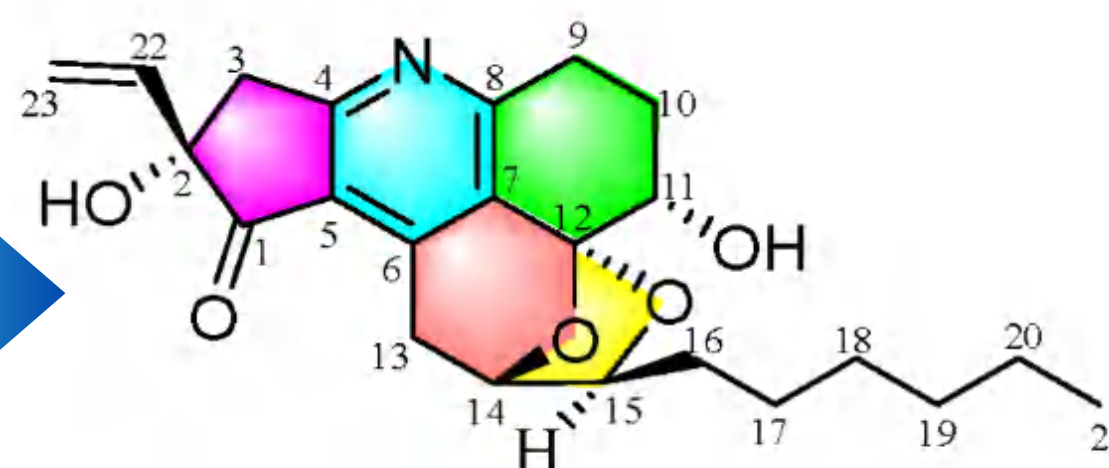
作者报道从非洲马铃薯 (*Voacanga africana*) 中提取分离得到了一个五环单萜咪唑生物碱 voafriamidine，这是一个骨架全新的化合物，它包含一个罕见的N-酰基脒结构，形成一个独特的2,4-二氮杂三环-[6,5,11,8,03,7]十四烷骨架。尽管缺乏季碳原子和氮原子的核磁共振相关信号，但文中作者通过计算机辅助结构解析软件ACD/Structure Elucidator、密度泛函理论(DFT)计算和电子圆二色谱(ECD)分析，最终阐明了其复杂的结构。



案例来源：Rapid and unambiguous assignment of proton-deficient N-acyl amidine indole alkaloid by a combination of calculation methods.
Tetrahedron Letters volume 68, 30 March 2021, 152949

✓ 经典案例：聚酮类天然产物trichodermatides A的结构解析

作者从拟康宁木霉 WZ-196 中分离并鉴定了一种高度氧化的五元杂化的聚酮类化合物，Trichopsistide A。通过各种光谱分析、ACD/Structure Elucidator软件和DFT化学位移计算等手段，确定了该化合物的绝对结构。化合物1是首个报道的具有5/6/6/6/5五元杂环体系的吡啶类生物碱



案例来源：Trichopsistides A and B: Two Highly Oxygenated Pentacyclic Polyketides with Promising Inhibitory Effects on the NF-κB Signaling Pathway from the Fungus *Trichoderma koningiopsis* WZ-196. *J. Org. Chem.* 2022, 87, 21, 14058–14067

- Chen, D., et al. (2024). "Discovery of Cadinane-Type Sesquiterpenoids from the Infected Stems of *Hibiscus tiliaceus* as Potential Agrochemical Fungicides." *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 72(8): 4089-4099.
- Bai, M., et al. (2024). "Isatin-based spiro indolenine alkaloids from *Isatis indigotica* Fortune with anti-neuroinflammatory and acetylcholinesterase inhibitory effects." *Organic Chemistry Frontiers* 11(2): 427-436.
- Wang, D.-D., et al. (2023). "(±)-Salvicatone A: A Pair of C₂₇-Meroterpenoid Enantiomers with Skeletons from the Roots and Rhizomes of *Salvia castanea* Diels f. *tomentosa* Stib." *The Journal of Organic Chemistry*.
- Trac, A., et al. (2023). "Ominoxanthone—The First Xanthone Linearly Fused to a γ -Lactone from *Cortinarius ominosus* Bidaud Basidiomata. CASE- and DFT-Based Structure Elucidation." *Molecules* 28(4).
- Novitskiy, I. M., et al. (2023). "Penicitone: Structural Reassignment of a Proposed Natural Product Acid Chloride." *Organic Letters* 25(43): 7796-7799.
- Elyashberg, M., et al. (2023). "Enhancing Efficiency of Natural Product Structure Revision: Leveraging CASE and DFT over Total Synthesis." *Molecules* 28(9).
- Soong, R., et al. (2022). "A CASE (Computer-Assisted Structure Elucidation) for Bench-Top NMR Systems in the Undergraduate Laboratory for De Novo Structure Determination: How Well Can We Do?" *Journal of Chemical Education* 99(11): 3780-3788.
- Feng, L., et al. (2022). "Trichopsistides A and B: Two Highly Oxygenated Pentacyclic Polyketides with Promising Inhibitory Effects on the NF- κ B Signaling Pathway from the Fungus *Trichoderma koningiopsis* WZ-196." *The Journal of Organic Chemistry* 87(21): 14058-14067.
- Fan, K., et al. (2022). "Tabernaecorymine A, an 18-normonoterpenoid indole alkaloid with antibacterial activity from *Tabernaemontana corymbosa*." *Fitoterapia* 157.
- Zhao, P., et al. (2021). "Three Unusual Sesquiterpenes with Distinctive Ring Skeletons from *Daphne penicillata* Uncovered by Molecular Networking Strategies." *The Journal of Organic Chemistry* 86(21): 15298-15306.
- Zhang, Z.-Z., et al. (2021). "Two new seco-polycyclic polyprenylated acylphloroglucinol from *Hypericum sampsonii*." *Organic & Biomolecular Chemistry* 19(1): 216-219.
- Xiao, J., et al. (2021). "Natural potential neuroinflammatory inhibitors from *Stephania epigaea* H.S. Lo." *Bioorganic Chemistry* 107.
- Stierle, A. A., et al. (2021). "Berkeleylactones and a Citreohybriddione Analogue from *Penicillium turbatum*." *Journal of Natural Products* 84(12): 3064-3070.
- Lv, T.-M., et al. (2021). "Structural Revisions of Two Highly Aromatic Naphthoquinone-Derived Dimers Based on NMR Analysis, Computer-Assisted Structure Elucidation Methods, and Computations." *Organic Letters* 23(18): 7231-7235.
- Ding, C.-F., et al. (2021). "Rapid and unambiguous assignment of proton-deficient N-acyl amidine indole alkaloid by a combination of calculation methods." *Tetrahedron Letters* 68.
- Yan, Z.-Y., et al. (2020). "Terpenylated coumarins from the root bark of *Ailanthus altissima* (Mill.) Swingle." *Phytochemistry* 175.
- Xue, J.-J., et al. (2020). "Baicalensines A and B, Two Isoquinoline Alkaloids from the Roots of *Thalictrum baicalense*." *Organic Letters* 22(19): 7439-7442.
- Wang, Y.-X., et al. (2020). "Phenolics from *Archidendron clypearia* (Jack) I.C.Nielsen protect SH-SY5Y cells against H₂O₂-induced oxidative stress." *Phytochemistry* 176.
- Moschny, J., et al. (2020). "Precursor-Directed Biosynthesis and Fluorescence Labeling of Clickable Microcystins." *Journal of Natural Products* 83(6): 1960-1970.

Lv, T.-M., et al. (2020). "Reassignments of the structure DOBFs directed by CASE algorithms and GIAO ^{13}C NMR computations." *Journal of Molecular Structure* 1219.

Lou, H.-Y., et al. (2020). "Hyperfols A and B: Two Highly Modified Polycyclic Polyprenylated Acylphloroglucinols from *Hypericum perforatum*." *Organic Letters* 22(17): 6903-6906.

Kossack, R., et al. (2020). "Nostotrebin 6 Related Cyclopentenones and δ -Lactones with Broad Activity Spectrum Isolated from the Cultivation Medium of the Cyanobacterium *Nostoc* sp. CBT1153." *Journal of Natural Products* 83(2): 392-400.

Duan, Z.-K., et al. (2020). "Structure reassignment of two triterpenes with CASE algorithms and DFT chemical shift predictions." *Natural Product Research* 36(1): 229-236.

Bai, M., et al. (2020). "The identification of alkaloids from the stems of *Picrasma quassioides* via computer-assisted structure elucidation and quantum chemical calculations." *Journal of Asian Natural Products Research* 23(3): 217-227.

Tabudravu, J. N., et al. (2019). "LC-HRMS-Database Screening Metrics for Rapid Prioritization of Samples to Accelerate the Discovery of Structurally New Natural Products." *Journal of Natural Products* 82(2): 211-220.

Liu, Y., et al. (2019). "Enzymatic Reconstitution and Biosynthetic Investigation of the Bacterial Carbazole Neocarazostatin A." *The Journal of Organic Chemistry* 84(24): 16323-16328.

Burns, D. C., et al. (2019). "The role of computer-assisted structure elucidation (CASE) programs in the structure elucidation of complex natural products." *Natural Product Reports* 36(6): 919-933.

Bitchagno, G. T. M. and S. A. Fobofou Tanemossu (2019). "Computational methods for NMR and MS for structure elucidation III: More advanced approaches." *Physical Sciences Reviews* 4(9).

Navarro-Vázquez, A., et al. (2018). "Computer-Assisted 3D Structure Elucidation (CASE-3D) of Natural Products Combining Isotropic and Anisotropic NMR Parameters." *Journal of Natural Products* 81(1): 203-210.

Chhetri, B. K., et al. (2018). "Recent trends in the structural revision of natural products." *Natural Product Reports* 35(6): 514-531.

Bortot, M., et al. (2018). "Quaternized Q-PEIPAAm-Based Antimicrobial Reverse Thermal Gel: A Potential for Surgical Incision Drapes." *ACS Applied Materials & Interfaces* 10(21): 17662-17671.

Buevich, A. V. and M. E. Elyashberg (2017). "Towards unbiased and more versatile NMR-based structure elucidation: A powerful combination of CASE algorithms and DFT calculations." *Magnetic Resonance in Chemistry* 56(6): 493-504.

Williams, R. B., et al. (2016). "Isolation and Identification of the Novel Tubulin Polymerization Inhibitor Bifidenone." *Journal of Natural Products* 80(3): 616-624.

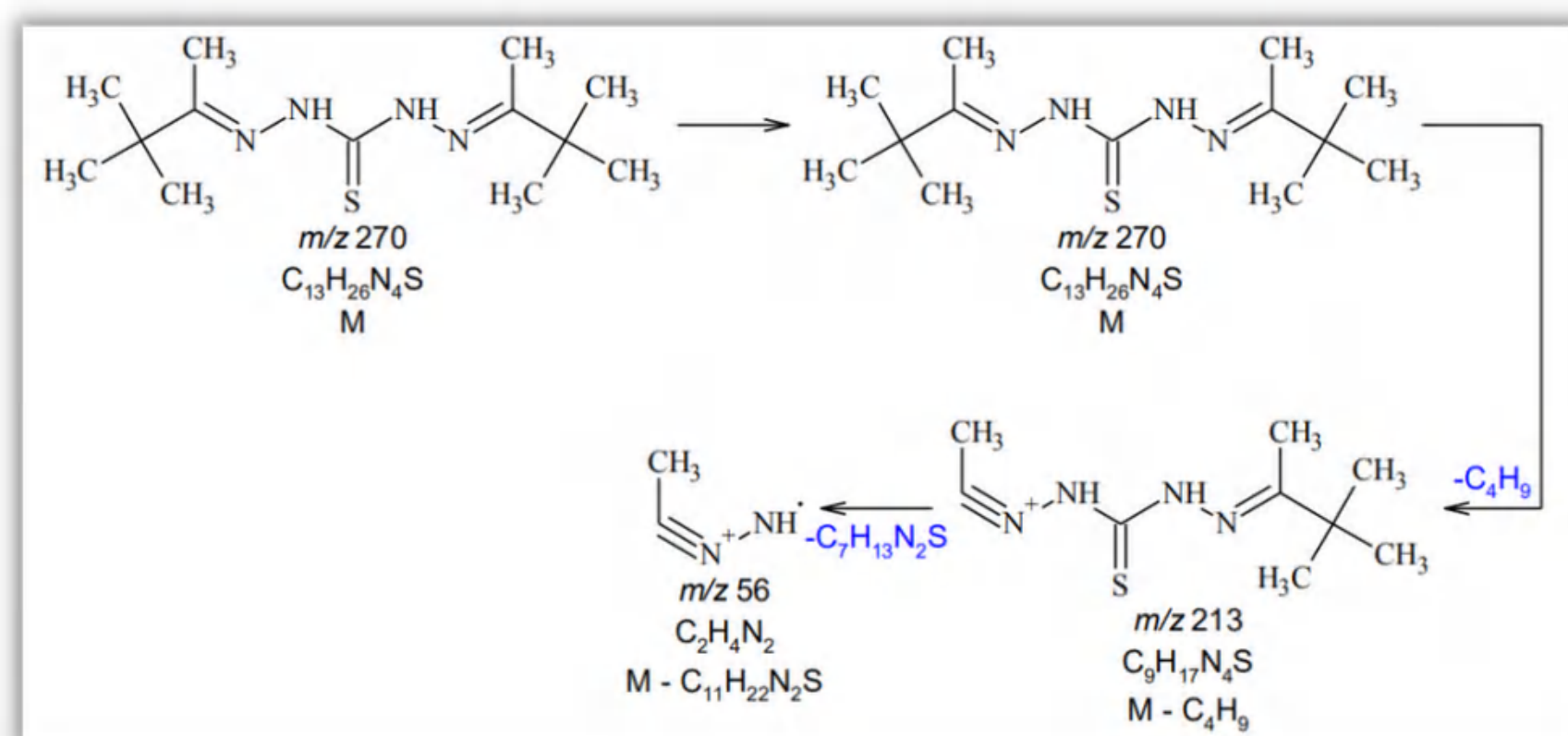
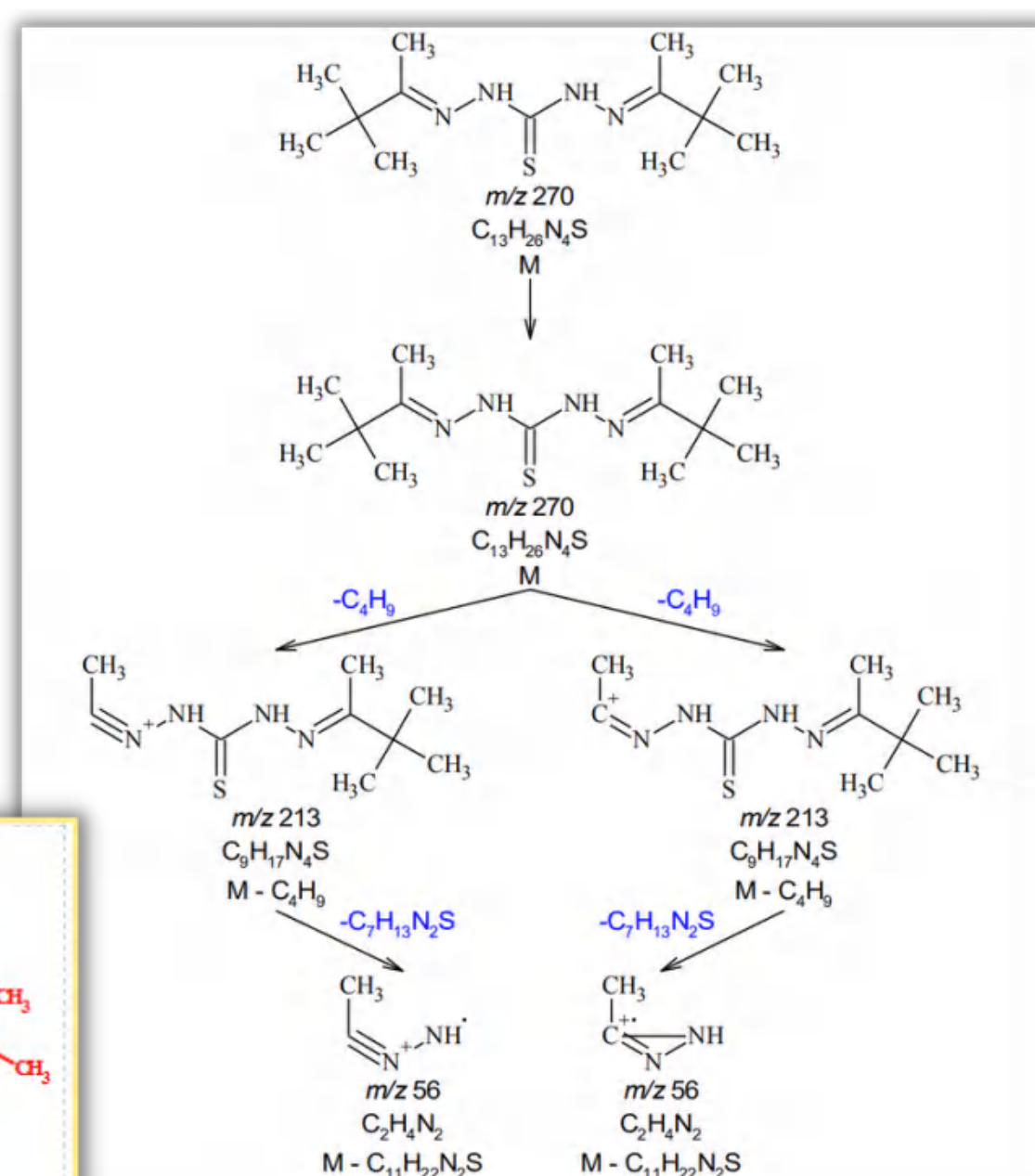
Mevers, E., et al. (2016). "Homodimericin A: A Complex Hexacyclic Fungal Metabolite." *Journal of the American Chemical Society* 138(38): 12324-12327.

Li, X. N., et al. (2016). "Application of a computer-assisted structure elucidation program for the structural determination of a new terpenoid aldehyde with an unusual skeleton." *Magnetic Resonance in Chemistry* 55(3): 210-213.

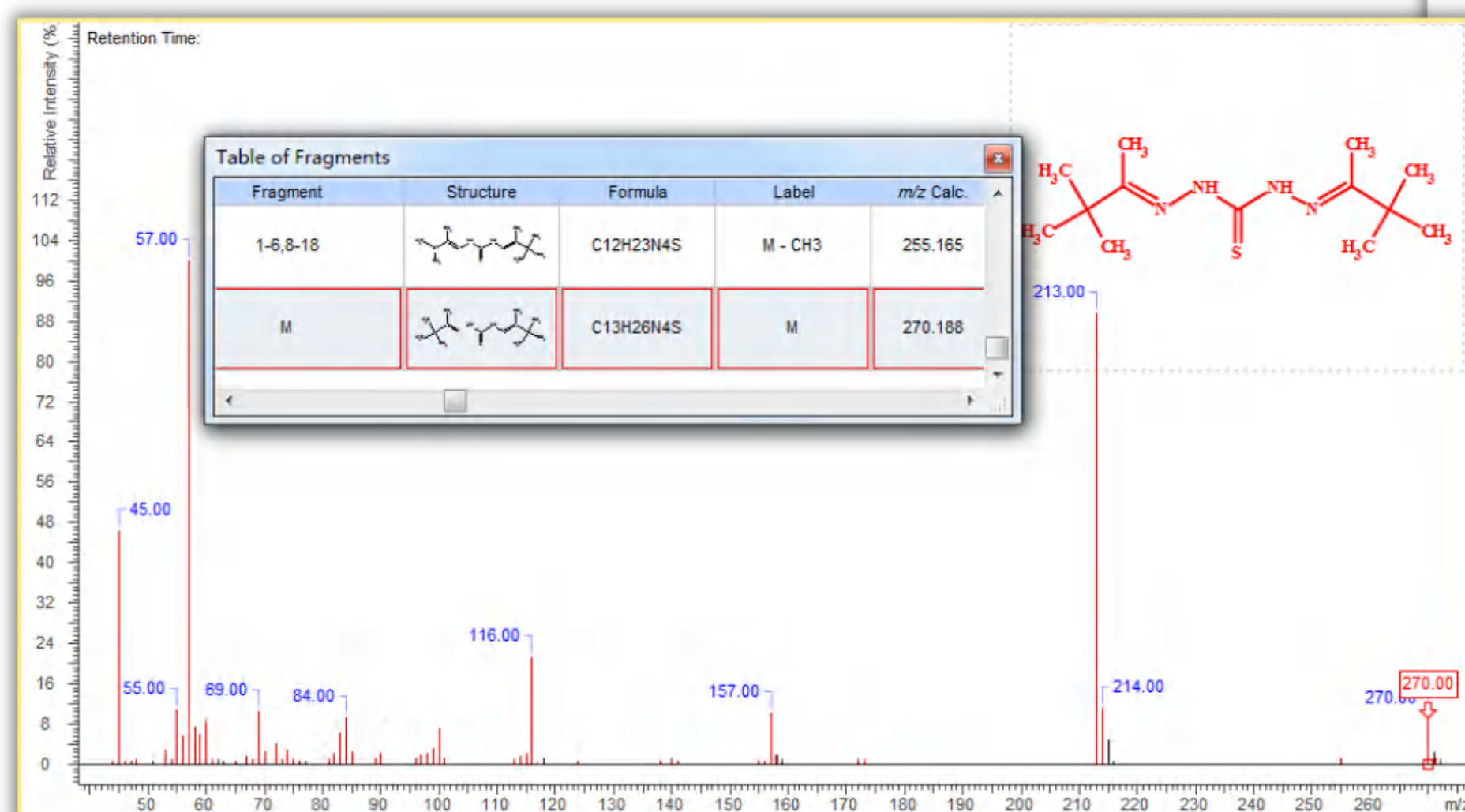
质谱碎片裂解预测工具

MS Fragmenter 经由文献建立的质谱断裂规则来预测化合物离子碎片，帮助科学家正确理解碎片裂解途径及碎片结构。同时提供正负离子模式下不同离子源（CI, EI, APCI, ESI, FAB 等）预测化合物的断裂方式，具有良好的预测精度和准确度。

- 可同时提供正负离子模式下不同离子源预测化合物的断裂方式
- 可显示关键的碎片裂解途径和离子结构
- 可创建多种碎片报告包括Branch, Scheme, Compact 和 Deailed 等模式
- 可预测原子数不超过 255 的化合物结构（包括 H 原子）



Pathway报告模式



实现结构谱图的自动匹配，通过软件浏览化学结构、谱图及碎片表格的一一对应。

自动化质谱定性工具

ACD/MS Structure ID Suite是一站式的质谱数据处理、分析和管理平台，可帮助科学家进行目标化合物与非目标化合物的筛选和自动化结构识别。它提供专业的算法对LC/MS,GC/MS和MSn数据进行处理、解释，并且可以通过数据储存管理实现数据的获取、分享。支持与已有化学信息学平台进行嵌合或者与商业数据库整合，搭建专属的MS数据库平台。

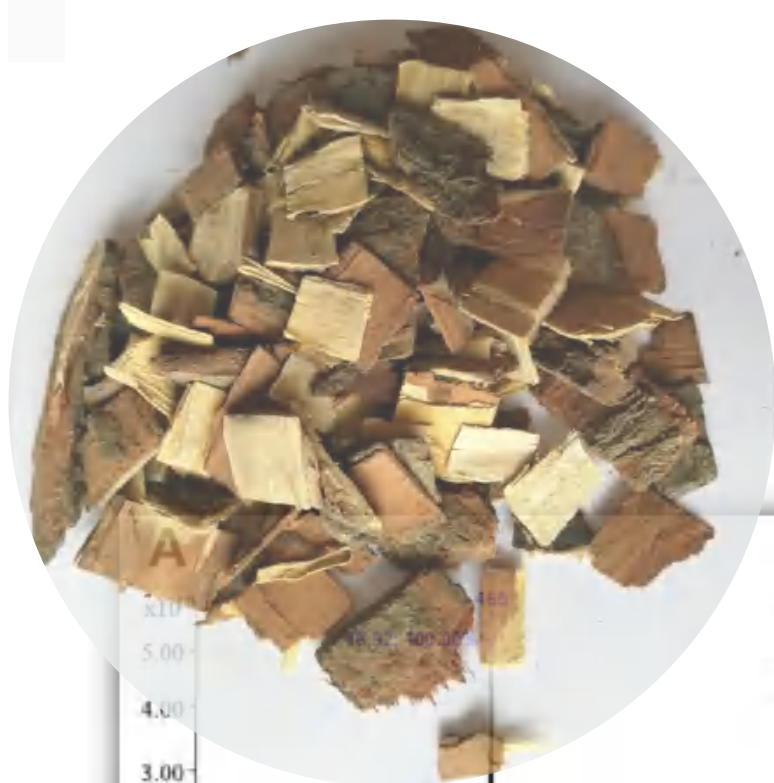
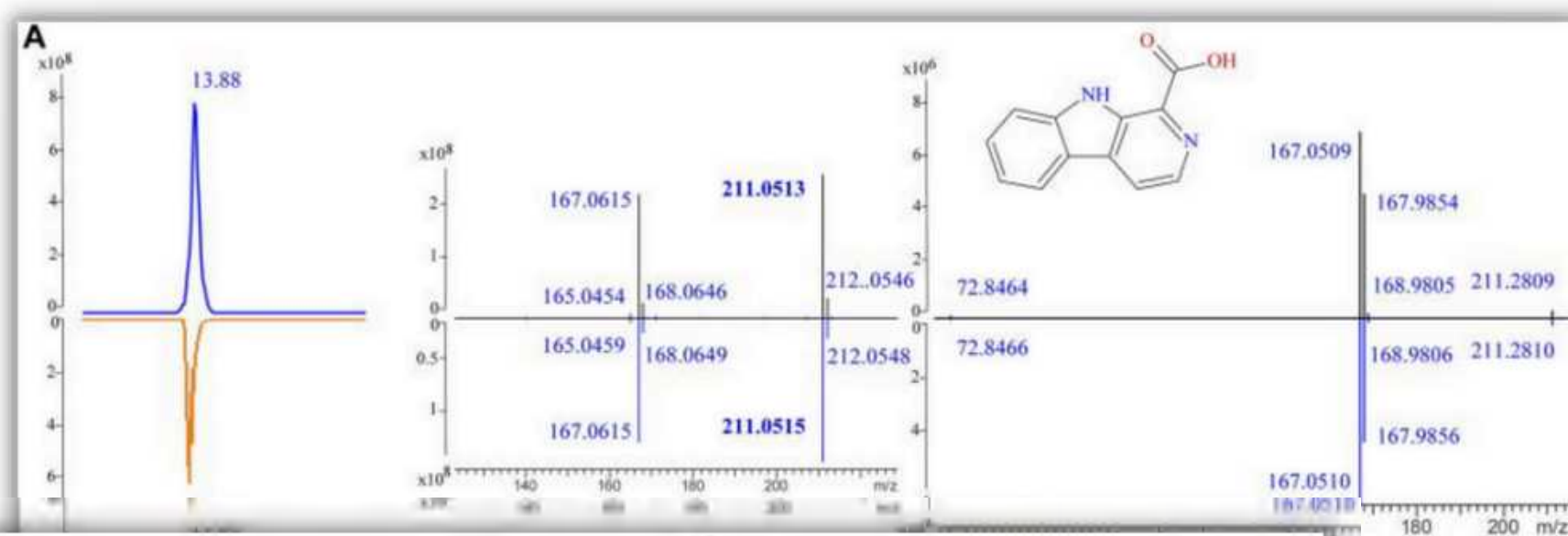
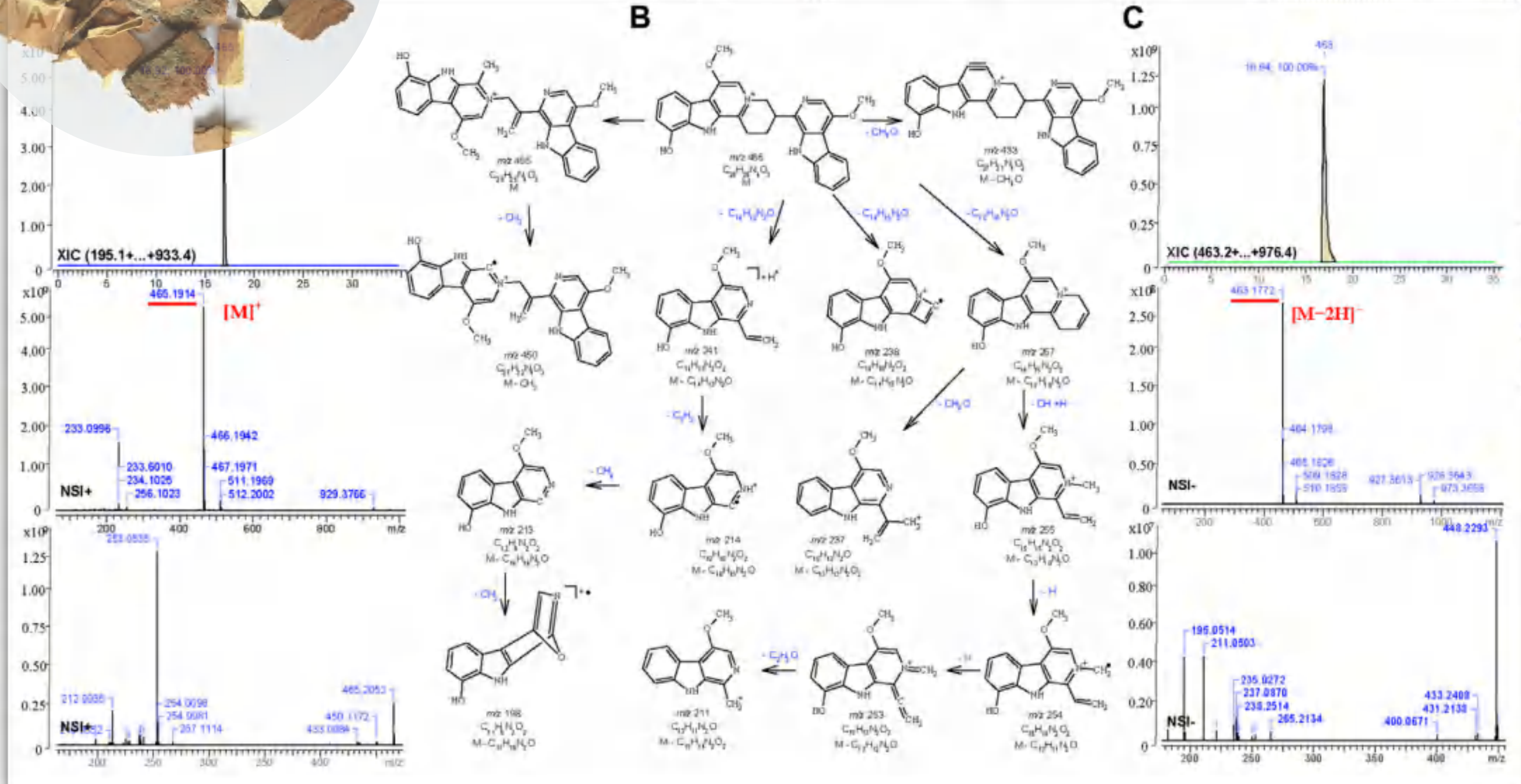
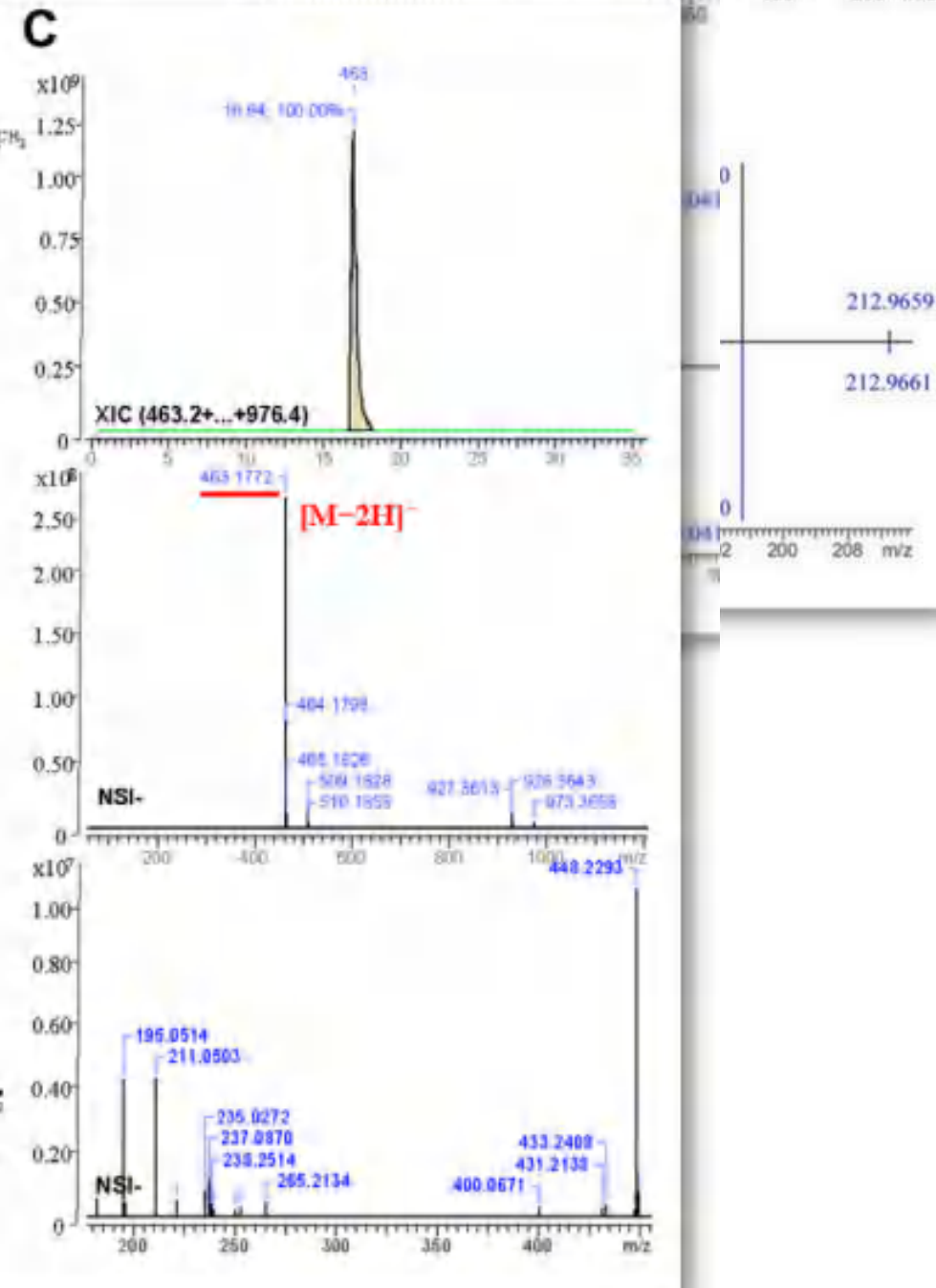
- 谱图检索匹配专有的谱图库和商业数据库
- 检索 PubChem数据库以获得符合组分精确分子量和分子式的结构
(针对中药、天然产物等研究领域可提供专属的数据库供检索)
- 通过色谱保留时间和结构片段列表缩小候选结构的范围；
- 通过碎片裂解预测工具进一步确认候选结构

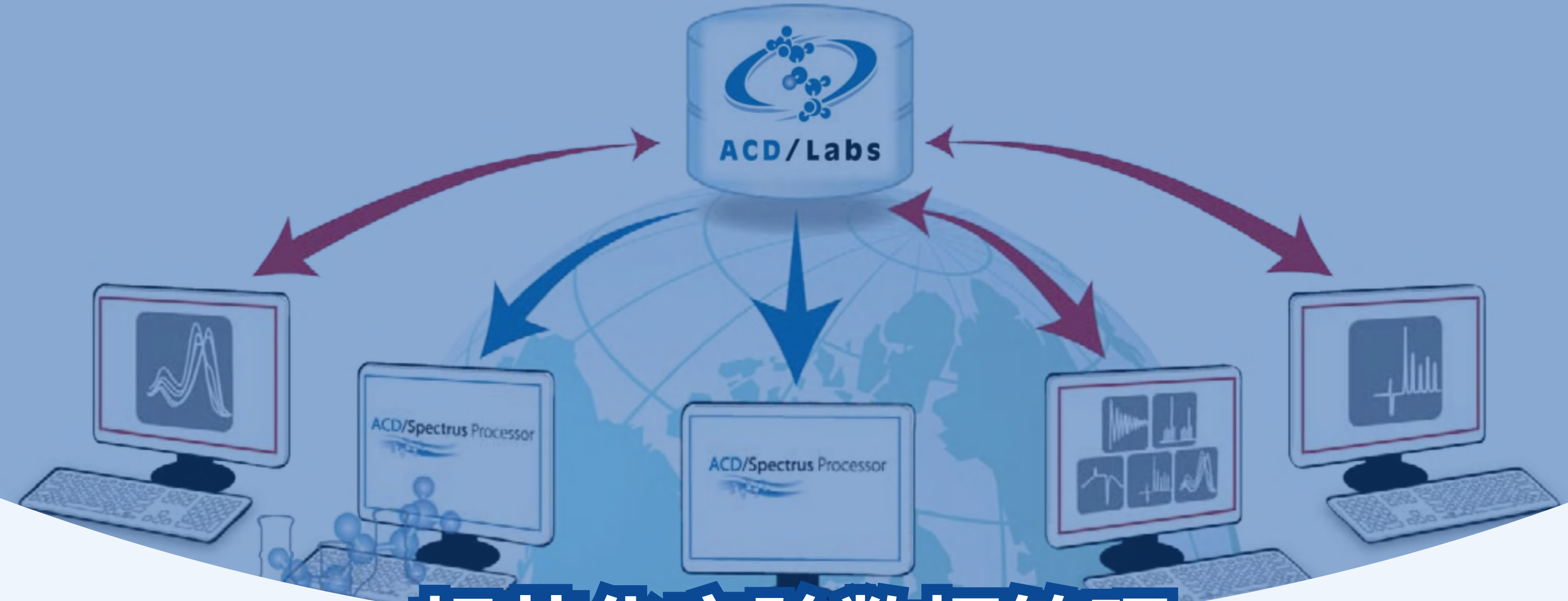




✓ 案例：中药苦木抗菌活性化学成分的质谱定性

苦木 (PQ) 为苦木科苦木属植物，是我国民间常用中药，具有清热解毒、祛湿等功效，临床主要用于风热感冒、咽喉肿痛、湿热泻痢、湿疹、疮疖、蛇虫咬伤。然而，其抗菌活性的化学基础仍未得到阐明。因此，作者基于活性导向分离的策略，针对金黄色葡萄球菌和大肠杆菌的活性成分进行分离，通过UHPLC-Orbitrap-Ion Trap质谱进行样品数据采集，结合ACD/MS Structure ID Suite软件的数据库检索、质谱碎片预测(MS Fragmenter)和保留时间预测(ChromGenius)等技术的联合应用分析，高效地对活性成分进行了化学结构阐明。





规范化实验数据管理

ACD/Labs 分析数据整合管理系统是光谱和色谱数据整合、管理、数据再处理、统一格式报告、以及基于结构、谱图、用户数据搜索的分析数据集成解决方案。该解决方案能为专家用户提供齐全的工具系统，也能为一般用户提供简单的操作系统。可处理数据包括 1D 和 2D NMR(核磁共振)、MS(质谱)、Chromatography(色谱)、UV-IR(紫外和红外)、Raman(拉曼光谱)、Curve(曲线)等所有分析数据，兼容绝大多数仪器厂家的数据格式，并可对其数据进行处理和贮存，同时支持多种搜索技术。

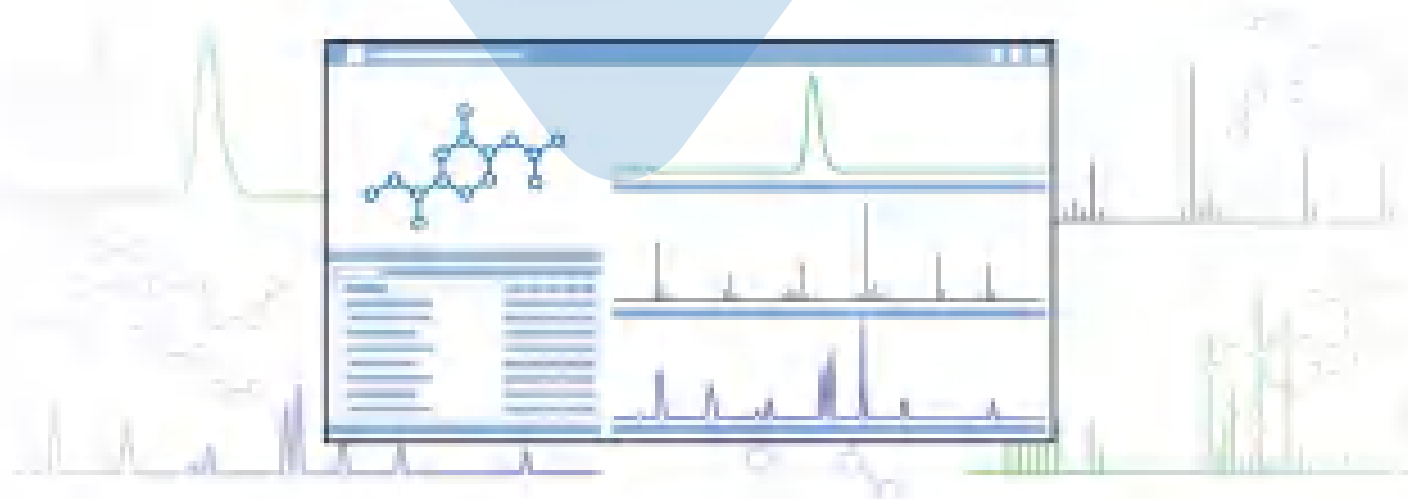


告别传统的“死”数据管理模式

项目信息文件零散难以检索？

对于纸质版或者pdf的谱图报告，没法重新编辑处理？

还需花费时间查找原始文件？



实现“活”的数据管理模式

项目信息互相关联，方便检索

以原始数据保存，方便追溯、对数据再处理分析、利用

完美的数据兼容性

- 化学结构（兼容主流的画图软件格式）
- 化学反应
- 谱图信息（核磁、质谱、色谱、紫外、红外等）
- 兼容主流的分析仪器产生的原始文件
- 生物及毒性信息
- 描述性文本记录
- 批次及项目编号附件（doc、xls、ppt、pdf、txt 等）

强大的搜索功能

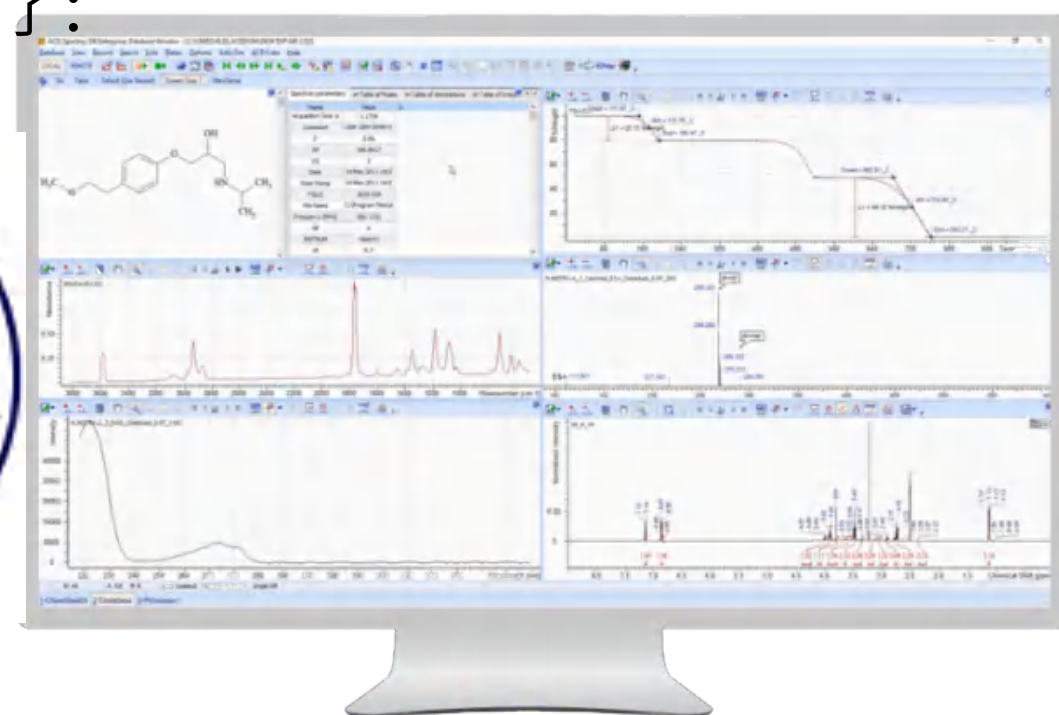
- 化学结构（精确结构、子结构、相似结构）
- Markush 结构
- 峰信息、谱图或其他光谱或色谱参数
- 文本或数值信息
- 分子量或其范围
- 谱图搜索功能（峰信号、精确谱图、相似谱图）

ACD/Labs分析数据管理平台 可为不同级别需求的用户提供定制的方案

✓ 高校科研用户应用案例

海军军医大学药学院天然产物化学教研室通过ACD/Labs的管理系统，实现了：

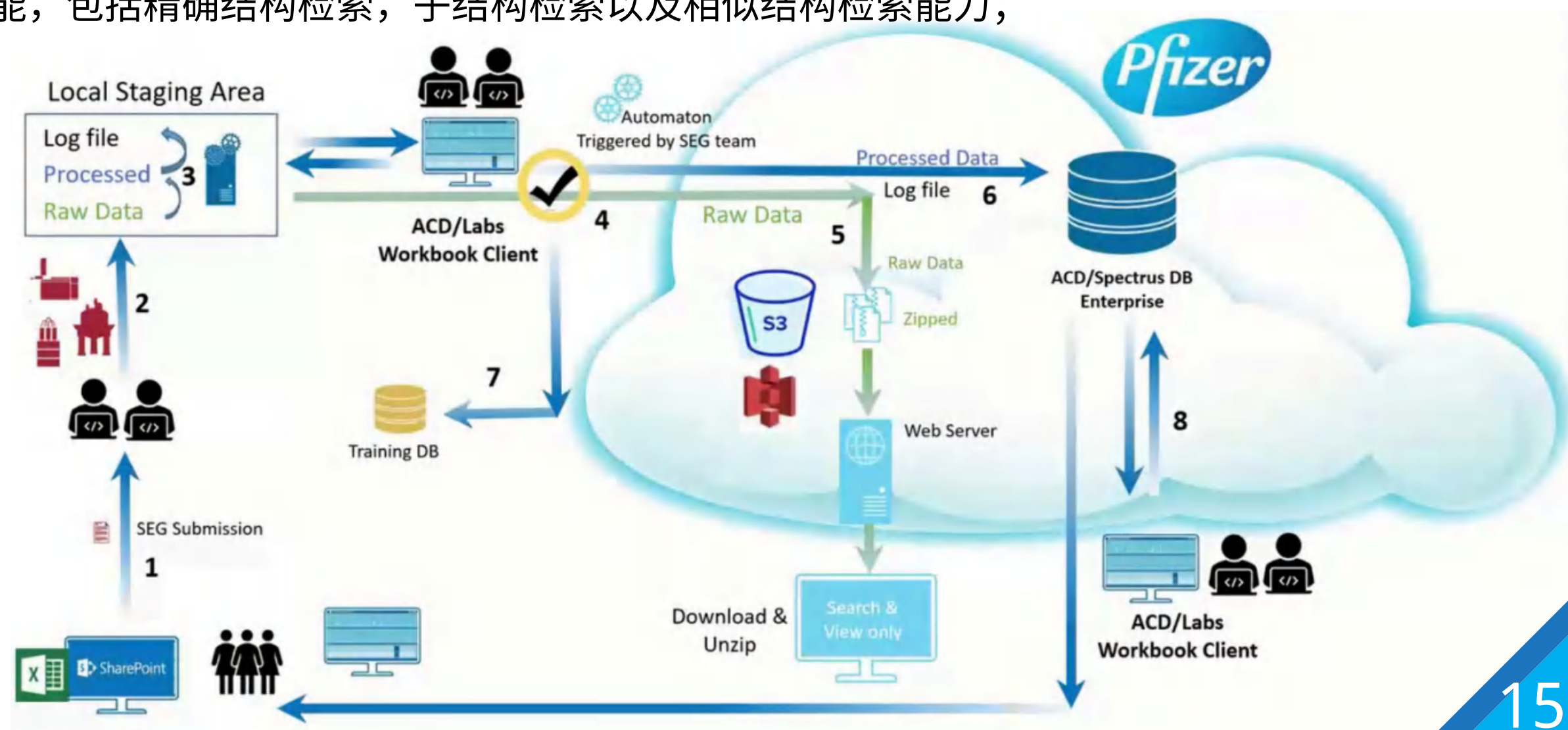
- 有效、规范地管理研究生的科研数据(尤其是谱图文件)；
- 可及时发现学生对谱图数据解析的质量，方便追溯；
- 避免了学生毕业后原始数据难以查找等问题；
- 利于科研项目的数据统一整理，汇报；
- 构建了实验室内部的知识数据库；
- 可实现实验室内部的数据查重。



✓ 跨国药企多部门联合应用案例

Pfizer公司通过ACD/Spectrus平台建立NMR和MS谱图数据库。

- 用统一化的数据库满足两个不同地点实验室之间数据传输共享的要求；
- 进一步优化NMR和MS结构解析工作流程提高工作效率；
- 提高历史数据查询的效率，做到快速反馈检索结果；
- 统一标准化结构解析数据结果，形成专家管理结构解析结果的“黄金标准”；
- 形成完整的结构检索功能，包括精确结构检索，子结构检索以及相似结构检索能力；





ACD/SES软件的应用优势

ACD/Structure Elucidator Suite 是一款功能强大的软件平台，它在天然产物化学、有机合成等专业领域得到了广泛应用。该平台能够显著提高科研工作者在化合物结构鉴定和数据分析管理方面的工作效率，从而加速项目研究的进展。此外，ACD/Structure Elucidator Suite 还致力于在科研、教学和测试服务等多个领域为用户提供最大化的软件价值，助力用户实现更高效的工作流程和更深入的科学探索。无论是在实验室的日常研究中，还是在学术课堂上的教学活动中，这款软件都能成为您不可或缺的助手。

科研



教学



测试服务





科研应用优势

1. 提高实验数据自主分析能力

软件平台下强大的数据兼容能力可识别读取不同仪器商的原始数据文件，如 Bruker, Agilent, Thermo, Waters 等，可完全解放仪器工作站的负荷运转，实现实验数据的灵活、自主化分析

2. 减少不同复杂软件学习时间

软件统一平台下可分析处理不同类型化学数据，包括核磁、质谱、色谱、红外等，避免不同类型软件之间的切换和学习，加快效率

3. 便捷的数据传递

分析过的数据可存储为统一的文件格式，方便不同研究者之间数据传递与共享

4. 已知化合物快速识别及排重

软件内置的庞大化合物数据库内容，可供用户进行基于谱图的直接检索，快速获得化合物的候选结构

5. 复杂化合物骨架信息或片段信息获取

软件内置的庞大化合物数据库内容，可供用户进行基于谱图的直接检索，快速获得复杂化合物的骨架类型

6. 候选化合物结构快速判定

基于精确地核磁谱图预测技术，对候选化合物进行谱图预测并与实验谱图对比，快速判定结构准确性

7. 未知化合物解析

针对复杂的化合物，当数据库不能提供足够可用的信息，且根据自己经验知识不能进一步推断结构时，可利用全波谱数据基于计算机辅助进行自动化合物结构生成，实现未知化合物的自动结构解析

8. 化学数据综合管理

研究过的实验数据可进行统一管理，以化合物结构为导向，将所有相关的谱图、文本参数、参考文献等信息进行系统整合，构建规范的本地电子数据库

9. 以往数据再利用

构建后的数据库可被用于组内或研究单位内数据共享，后期研究者在实验过程中可对数据库进行检索利用，获得有效的参考信息，避免重复性实验和工作



教学应用优势

1. 多样化教学模式

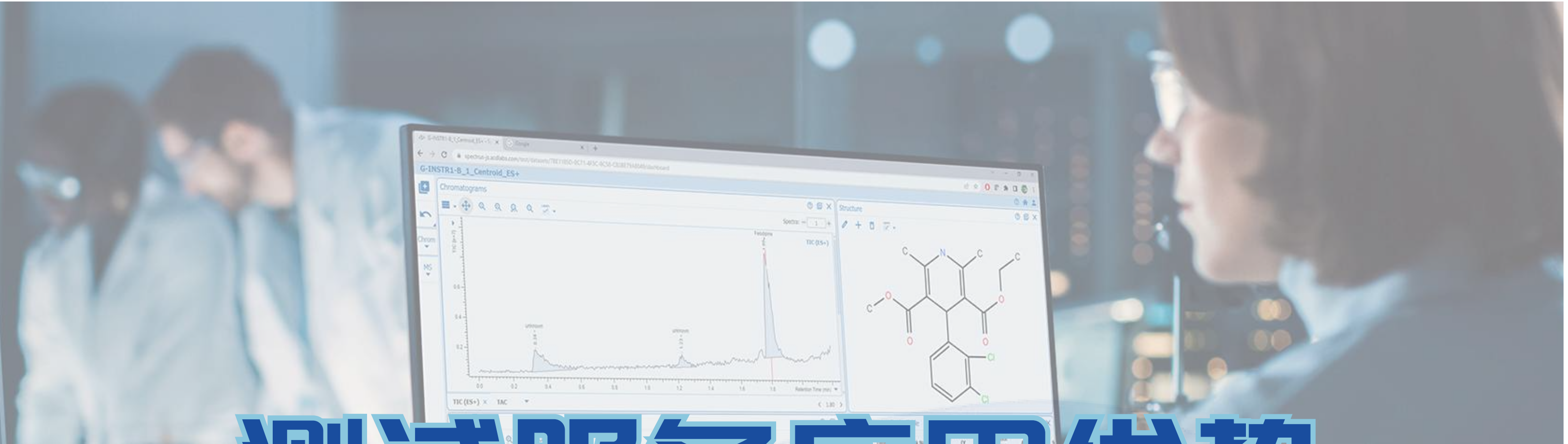
在教学授课过程当中，除了常规的理论知识讲述之外可以增加软件直观演示，将理论知识“可视化”，增强学生对分析数据的直观认识

2. 丰富授课内容

可以借助软件平台展示不同难易程度的应用案例及解决方法，丰富授课内容

3. 理论与实践结合

在教学过程中可将软件平台提供给学生自己动手练习，将被动的“信息接收”转化为主动的练习操作，以利于以后学生自己分析数据能够快速上手



测试服务应用优势

1. 提高测试服务的核心竞争力

当前，绝大多数的核磁仪器平台仅停留在测试服务的层面，只提供原始谱图数据，而不附加任何分析工作，受试者需要自己将分析谱图带回，利用不同软件分析处理。合理利用软件平台可以提供给受试者更多的附加价值，同时也直接提供仪器平台的核心竞争力。

- 1) 软件平台提供给受试者良好的数据分析平台，在获得测试数据的第一时间即可进行谱图数据分析，并且每人保存的数据为同一类型格式文件，方便以后互相交流和数据传阅。
- 2) 利用软件平台中的数据库功能，受试者在获得谱图数据的第一时间不仅可以进行数据分析，同时也可以对谱图数据进行数据库检索，查看可能的候选结构，辅助结构确认。
- 3) 针对有目标性结构的测试数据，受试者获得谱图的第一时间即可利用软件进行结构确认，将实验谱图与候选结构之间进行自动比对和归属验证，快速确认结果。
- 4) 平台定期组织硬件设备及软件学习培训，让受试者能更好的利用硬件及软件平台，不仅提高大家业务水平，同时也扩大测试平台的综合影响力。

2. 辅助测试平台提供谱图解析

平台负责老师经常需要进行谱图数据分析，利用软件中的数据库及解析功能可以帮助老师进行快速的数据分析及结构确认工作。

3. 数据整合管理

平台中往往有大量的化学谱图数据，如果前期分析的结果只是以文件夹或文件袋的形式放起来，很难体现数据的二次价值，因此利用软件的数据管理能力可以将所有的谱图数据信息进行整合和管理，不仅可以在测试平台利用，同时也可以对科研小组或学院里的科研数据库进行有效扩增。

国内部分用户

- 中国科学院昆明植物研究所
- 中国人民解放军海军军医大学
- 自然资源部第三海洋研究所
- 中国科学院南海海洋研究所
- 中国科学院上海药物研究所
- 西安近代化学研究所(204所)
- 中国科学院天津工业生物技术研究所
- 中国食品药品检定研究院
- 赣江中药创新中心
- 赣南医学院
- 青海大学
- 昆明理工大学
- 遵义医科大学珠海校区
- 沈阳药科大学
- 华中科技大学
- 天津中医药大学
- 成都中医药大学
- 江西中医药大学
- 云南大学
- 中山大学
- 暨南大学
- 厦门大学
- 贵州大学
- 西南大学
- 广西大学
- 广东工业大学

联系我们

广州凯美科信息技术有限公司
www.chemico.com.cn

产品经理：胡经理
联系电话：18680221948
电子邮箱：hcw@chemico.com.cn



微信公众号

