

対象化合物群の初期分離条件を提案します！ ACD/ChromGenius

新商品

先進技術

化合物の構造式に基づいた保持時間の予測ソフトウェア。

迅速な条件決定により、実験や機器のダウンタイムの削減、サンプル処理能力向上の効果が得られます。

【特長】

特定の測定条件で登録したデータベースから保持時間を予測し、最適な初期分離条件を提案します。

予測された分離条件は自動でカラーコード化され、視覚的に結果を判断できます。

自社で所有している構造式や実験パラメータを利用して、さらに精度の高い予測が可能となります。

1. 構造式の貼り付け

ACD/ChemSketchで作図または構造式ファイル (InChI, SMILES, molfile, SDfile) を読み込みます。

2. ChromGeniusデータベースからの検索

データベース*から分離条件を抽出します。

類似化合物のみで構成されたデータベースを使用することで高精度な予測を実現できます。

また、自社データベースの利用により検索水準を高めることが可能となります。

3. 分離条件の抽出

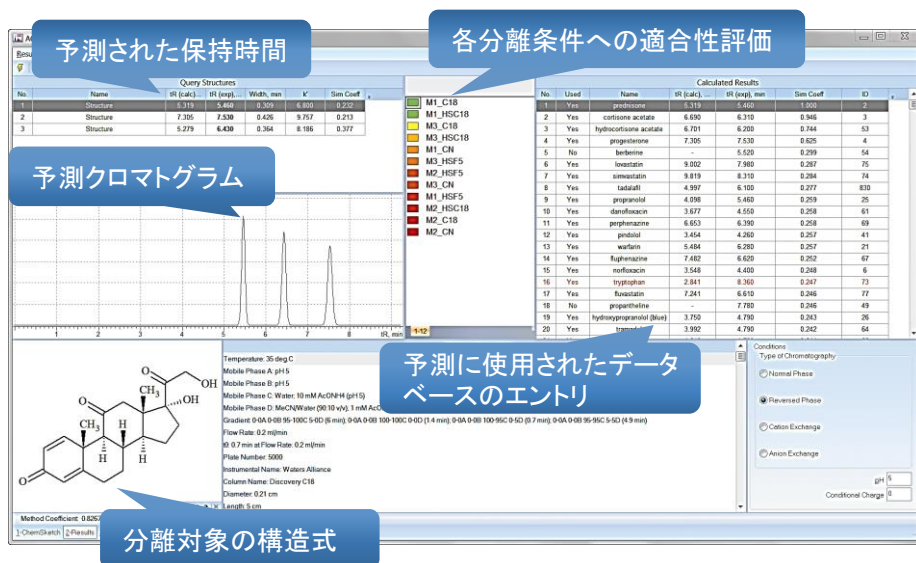
適切な分離条件と保持時間のリストを
ランキング形式で表示します。

4. 保持時間およびクロマトグラムの予測

各分離条件に対する保持時間およびクロマト
グラムが作成されます。

5. 高精度予測のためのAbsolvパラメータの追加

予測値と異なっていたり、より精度を高めたい
場合には、Abraham solvation (Absolv) パラ
メータを組み込むことにより精度の向上を図る
ことができます。



* データベース: 汎用的な方法が設定されているデータベース (Supelco, Thermo Scientific, Specs) を使用します。

Supelco→250化合物を8メソッドで測定した結果が登録されています。

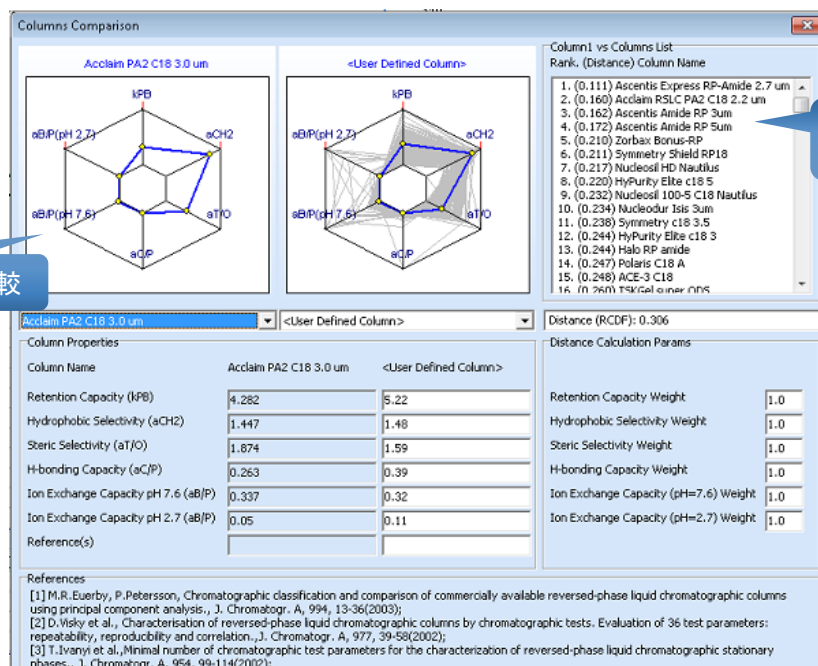
Thermo scientific→70化合物を10メソッドで測定した結果が登録されています。

Specs→何千種もの化合物の保持時間が登録されています。

■ 新機能“Column Selector”

ACD/ChromGenius 2015バージョンより追加された機能です。

初期データベースに収載されているカラムを持っていない場合の対応策として、同等のカラム情報を得ることができます。カラム特性*を考慮し、適切なカラムが自動で選択されます。HPLC↔UPLC間のメソッド移行にも役立ちます。



カラム特性をグラフ化して比較

マッチ度がランキング化されたカラムリスト

* カラム特性: リガンド密度、疎水性相互作用、形状選択性、水素結合能、トータルイオン交換容量および酸イオン交換容量

■ 一緒に購入するとより便利な製品はこちら(別売)



“データベース構築支援サービス”

これまでに蓄積された測定データ情報をデータベース化することにより、高精度な予測を行うことができます。



“ACD/AutoChrom” クロマト手法の開発支援ツール！

クロマトグラフ装置の制御、データ分析、手法開発のプロジェクト管理、実験モデリングなどのツールを組み合わせ、手法開発を総合的に支援します。



“ACD/MS Structure ID Add-on” 化合物の同定を精度高く、迅速に！

保持時間予測、フラグメントパターンおよびChemSpiderデータベースを統合的に活用することにより、マススペクトルから化合物を同定することが可能になります。

ACD/ChromGenius の機能をもっとお知りになりたい方へ

ACD/Labs 評価版ソフトウェア

実際の製品と同じ機能を、30日間無料でお試しいただけるソフトウェア(一部の特殊製品を除く)をご提供しております。

ACD/Labs ワークショップ

富士通のオフィスで、ACD製品の操作をご体験下さい。スタッフが操作をご説明致しますので、初めての方でも安心です。



詳細につきましては、下記までお気軽にお問い合わせ下さい。

富士通株式会社

テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部 科学システムソリューション統括部

〒261-8588 千葉県美浜区中瀬1-9-3 幕張システムラボラトリ

TEL: 043-299-3680 E-mail: tcsu-acd@ml.css.fujitsu.com

内容の詳細はインターネットでもご覧いただけます。

<http://www.fujitsu.com/jp/solutions/business-technology/tc/sol/acd/>