

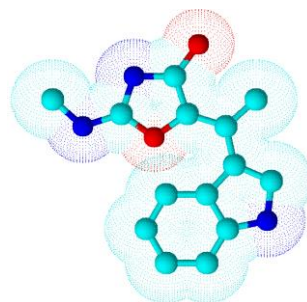
未知化合物の構造解析をより簡単に！ ACD/Structure Elucidator

新商品

先進技術

NMR データと分子式の情報から候補構造を出力

Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) 社が開発した構造解析ソフトウェア ACD/Structure Elucidator は、NMRデータの解析から化学構造の解析、データベースの構築までをトータルサポートし、お客様の生産性と競争力を大幅に向上致します。

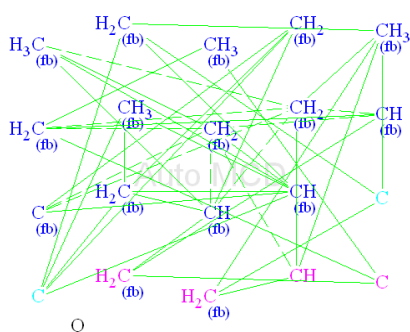


NMR データ処理

- NMR Workbook同様に、構造推定に用いる一連の1D/2D NMRデータは、「プロジェクト」という単位で管理されます。プロジェクト中の 1D/2D NMR データは同期されており、一つのスペクトルに対して行ったピークピック等のデータ処理は自動的に全データ間に転送・反映されるため、今までのようにスペクトル毎に処理作業を行う必要がありません。

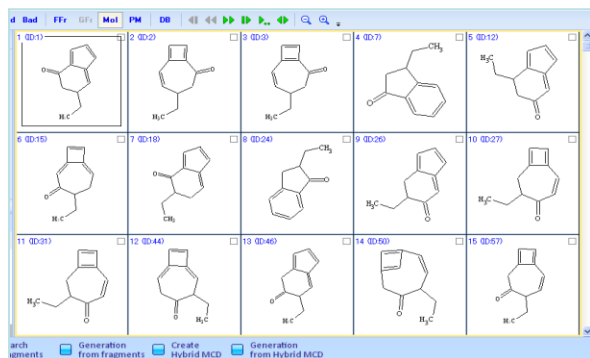
化合物の骨格を自動形成

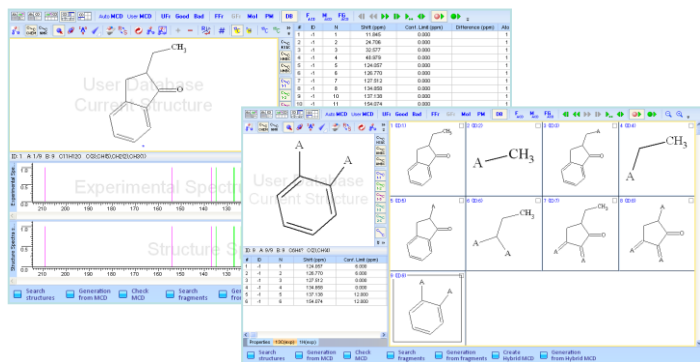
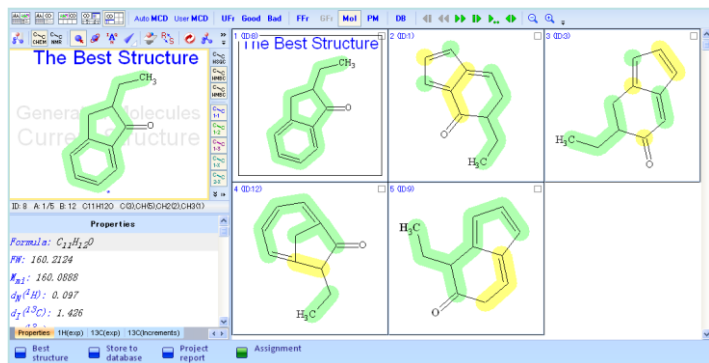
- MS データから得た分子式の情報と、解析した1D/2D NMR データのピーク情報を合わせる事で、化合物構造の骨格 (Molecular Connectivity Diagram: MCD) を自動形成します。
- MCD は 取り込んだNMRデータと連動しており、ピークとMCD 中の原子の対応は赤くハイライト表示されるので、内容を一目で確認できます。



候補構造の自動生成

- 形成された MCD を基に候補構造が生成されます。生成された候補構造に対して、重複している同一構造の削除や、特定の部分構造を持つもののピックアップなどもできます。
- また、入力したデータが不明瞭な情報を含む場合は、曖昧さを加味した解析 “Fuzzy” Generation を適用することで構造を出力させる事が可能です。





生成された候補構造のランク付け

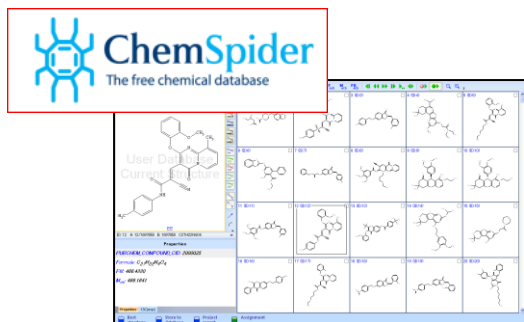
- 生成された候補構造が大量にある場合は、どの構造が一番実測データと合致しているかをソフトウェアが解析し、合致率の高い順番に並べて表示させる事ができます。
- 最も合致率の高い構造は、“Best Structure”として表示されます。

解析結果のデータベース化とその活用

- 解析を終えた化合物のデータは、データベースへ登録し、保管できます。
- データベースへ登録された構造はフラグメント化され、別の構造解析時の MCD を形成する際に利用されます。
- 実測データを MCD 形成へ利用する事により、構造解析をより高速・高精度に実行する事が可能です。

既存化合物との比較

- ACD/Structure Elucidator には、著名な化合物データベースである“ChemSpider” から引用された 約2,300万件の膨大な化合物データベースが付属されています。
- 実測データの¹³C NMRからこのデータベースを検索し、合致する既存化合物の有無を素早く確認できます。



ACD/Structure Elucidator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/>