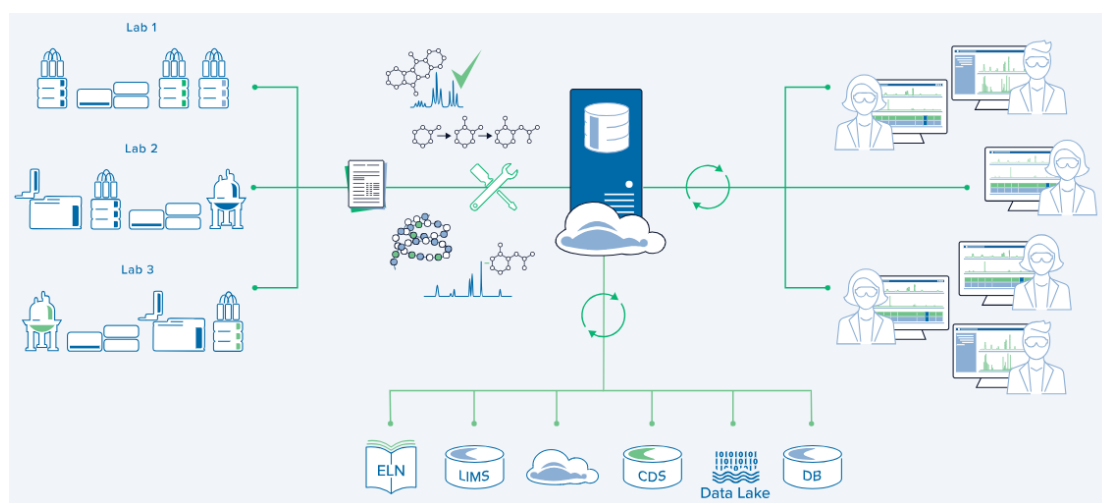


ACD/Labsを活用した化学研究情報管理

分析業務全体の効率化と高度化を実現



NMR、LC/MS、GC/MS、IR、Ramanなどの主要な分析機器データの処理・解析・レポート作成に加え、分析データのデジタル化やワークフローの自動化を支援し、研究DXを推進します。分析業務全体の効率化と高度化を実現し、研究開発の加速に貢献します。



ACD/Labsの対応領域

①スペクトル解析

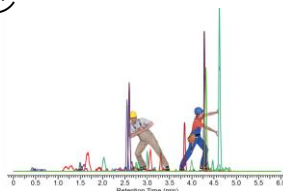
分析手法やメーカーを問わず、
データ読込可能



②分離分析

⑤ 分離分析

クロマトグラム分離シミュレーション



③化合物データ情報管理

分析スペクトルや化合物構造をまとめたデータベース



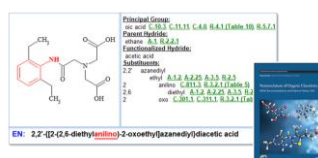
④自動化，情報共有

④自動化/情報共有



⑤ 化合物命名

構造式からIUPAC名を命名



⑥物性, ADME, 毒性予測

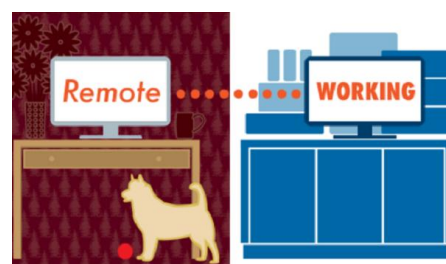
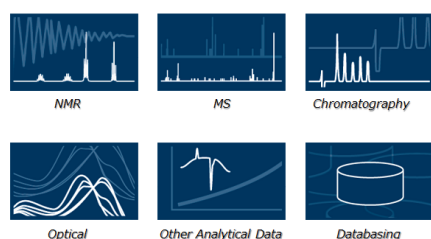
LogP, LogD, pKa, ADME, 毒性など



Smart Lab ACD/Labsを活用した化学研究情報管理

分析業務全体の効率化と高度化を実現

ACD/Labsの特長



オールインワンのソフトパッケージ

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です。
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。

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。
分析データを処理するための非常に強力なツールで、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。

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も最適です。1つのソフトウェアインターフェイ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。
在宅ワークに最適なツールです。



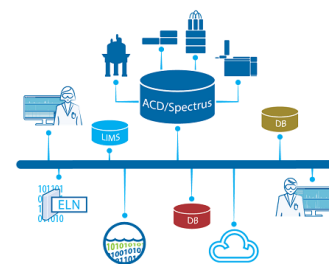
レポート作成の簡便化

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。
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。
・スペクトルとクロマトグラム
・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



データベース管理

機器から直接分析データを収集・処理・解析までの仕組みを自動化させることも可能です。作業効率性とデータ整合性を向上させることに役立ちます。
データ検索・再利用・意思決定・共有化を加速するコラボレーション環境を提供します。



他システムとの連携

既存のインフォーマティクスプラットフォームおよびシステム（ELN、LIMS、SDMS、クラウドストレージ、データレイク）と連携することにより、ライブ分析データを合理的に統合することが可能となります。

富士通株式会社

クロスインダストリーソリューション事業本部 Healthy Living事業部 ACD/Labs担当
E-Mail contact-acdlabs@cs.fujitsu.com