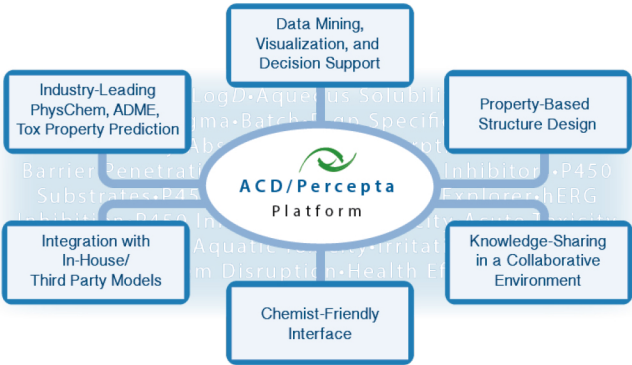


ACD/Percepta平台作为行业领先的性质预测及先导物优化设计工具为科学家的研发工作提供最优质、灵活的服务和帮助。软件在无缝衔接的运行环境下提供包括理化性质、ADME、Tox性质的准确预测、实验数据库参考、基于性质的先导物优化设计等完整方案。



庞大的后台数据库内容，供快速检索参考

自训练，进一步提供预测精确度及可信度

灵活选择所需的不同计算模型

高亮颜色标记性质贡献片段

支持批量化合物性质快速计算及筛选评价

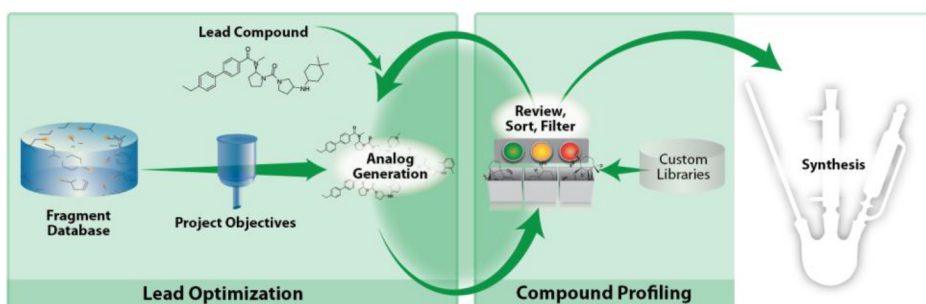
后台数据集中相似结构实验数据直观参考

PhysChem	ADME	Toxicity
Aqueous Solubility *	P-gp Specificity *	hERG Inhibition *
LogD *	Oral Bioavailability	Genotoxicity *
LogP *	Passive Absorption	Acute Toxicity *
pKa	Blood-Brain Barrier Penetration	Aquatic Toxicity *
Absolv	Plasma Protion Binding *	Irritation
Polar Surface Area	Volume of Distribution	Endocrine System Disruption
Index of Refraction	Cytochrome P450 Inhibition *	Health Effects
Rule-of-5	Cytochrome P450 Substrate *	Carcinogenicity (Impurities Package)
Bio-Concentration Factor	RegioSelectivity of metabolism	Clastogenicity (Impurities Package)
H-Bond Donors/Acceptors/Freely Rotatable Bonds/Molar Volume/Sigma/Polarizability/Surface Tension, etc.	Maximum Recommended Daily Dose	DNA Damage (Impurities Package)
	Basic Pharmacokinetic Parameters (AUC,Cp tmax)	Mutagenicity (Impurities Package)

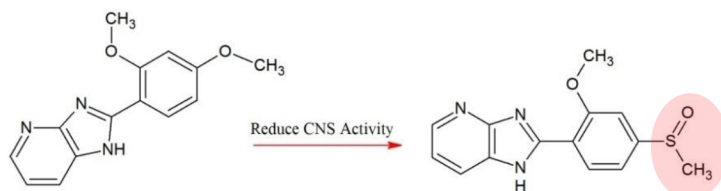
* 模型支持自训练



化合物的ADME/T及理化性质是影响其成药性的重要指标。获得所需性质要求的最优先导物是一项艰巨且富有挑战工作，需要进行成百上千化合物的合成，也涉及大量的性质测试及评估研究，而过程中也往往面临失败的风险。因此在研究前期开展化合物ADME/T及理化性质研究并指导先导物合成，有利于尽早排除失败的风险、降低开发成本，提高研发成功率。

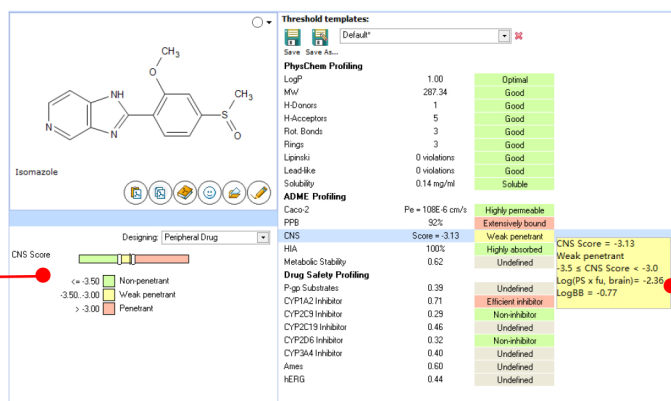


ACD/Structure Design Engine帮助药物化学家利用先进的软件工具根据项目需求对先导物进行ADME/T及理化性质优化、设计，生成结构类似物并评价分析，从而快速获得最优目标物进行合成研究。



Sanjivanjit Bhal, Michel R.J. Hachey. Optimising the Physicochemical Properties of Lead Compounds. *Innovations in Pharmaceutical Technology*, IPT, 22, 2007, 16-19

可以根据不同项目需求自定义修改各预测性质阈值区间



各性质预测的量化结果以用户自定义颜色标记显示（与性质相关的详细计算法则也显示在界面中）

