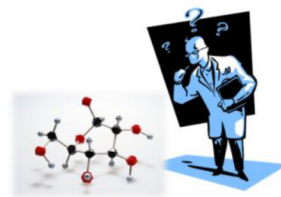


ACD/Structure Elucidator Suite作为业界领先的化合物结构确认软件平台通过庞大的本地核磁数据库及高级算法为科学家在研究杂质、天然产物结构等领域提供全面的解决方案。

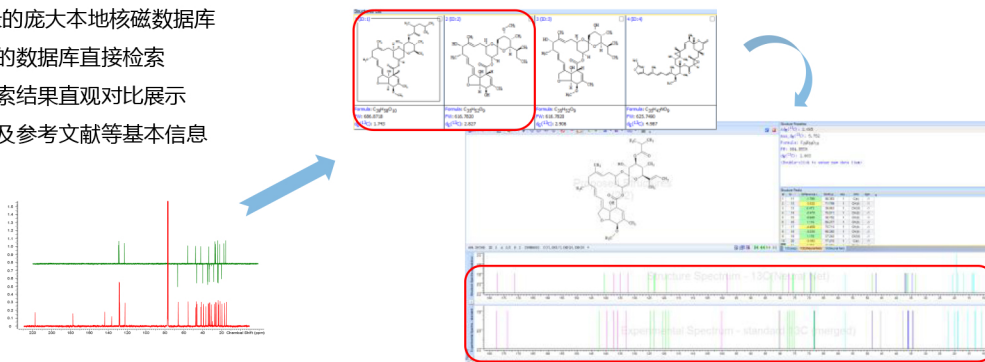
- **数据库检索**——基于谱图直接检索本地3000万条记录的庞大核磁数据库
- **未知物从头解析**——通过CASE技术基于实验谱图实现未知物结构从头解析生成
- **精确核磁谱图预测**——基于HOSE及神经网络算法和后台数据库精确预测核磁谱图
- **知识数据管理及共享**——全波谱数据一站式分析及综合管理与共享



一、数据库检索

利用实验核磁谱图在软件平台下进行便捷数据库检索，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。

- 3000万条记录的庞大本地核磁数据库
- 基于核磁谱图的数据库直接检索
- 实验谱图与检索结果直观对比展示
- 提供数据来源及参考文献等基本信息



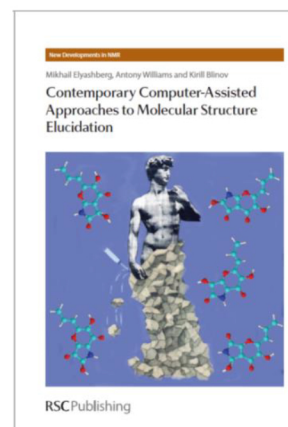
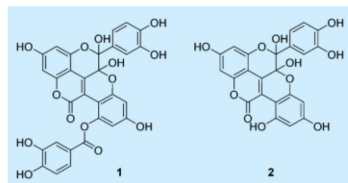
二、未知物从头解析

利用1D & 2D NMR、MS等实验数据信息，基于CASE (Computer Assisted Structure Elucidation) 技术，辅助研究者扩展解析思路，实现未知化合物结构从头高效生成。

- 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



Aronia melanocarpa



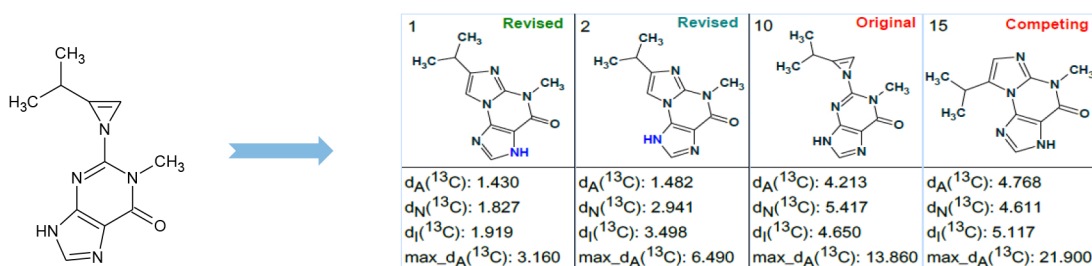
C. Benjamin Naman. Computer-Assisted Structure Elucidation of Black Chokeberry (*Aronia melanocarpa*) Fruit Juice Isolates with a New Fused Pentacyclic Flavonoid Skeleton
Journal of Natural Products 2015, 17 (12), 2988–2991



三、精确核磁谱图预测

基于HOSE编码及神经网络算法及后台数据库支撑，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。

- 计算 H、C、N、F、P 及 2D 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
- 计算结果被 SciFinder、MarinLit 等数据库广泛引用



基于计算机技术实现错误结构修正，并利用核磁预测手段对多个候选物进行自动信号归属、差异度排序及最终结构确认
www.acdlabs.com/download/app/nmr/appnote_case_for_case.pdf



四、知识数据管理及共享

在无缝连接的一体化平台下实现对主流设备厂商的 NMR, MS, LC/UV/MS, IR, TGA, DSC 等数据的读取及分析，同时可将所有分析数据结果及化学结构、文本信息及参考文献等进行关联化智能存储，实现完整的信息化数据库构建。数据库支持基于不同方式的快捷检索，进而达到组织内的高效信息共享。

