

ПРОСТОЙ
И УДОБНЫЙ
РЕДАКТОР
ФОРМУЛ
BIOVIA Draw

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Программное обеспечение BIOVIA Draw предоставляет ученым возможность создавать и редактировать изображения сложных молекул, химических реакций и биологических последовательностей, помогая упростить процессы совместных исследований, коммуникаций в исследовательских группах и хранения информации.

BIOVIA Draw – это необходимый инструмент для каждой цифровой лаборатории, предлагающий уникальные возможности для управления сложными биологическими объектами, включая возможность регистрации и извлечения пептидов, олигонуклеотидов и олигосахаридов. Ученые получают доступ к множеству функций, включая:

- Редактор биологической последовательности, позволяющий определять пользовательские остатки и линкеры;
- Инструменты структуры Маркуша;
- Инструменты гаптической и водородной связей.



ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

BIOVIA Draw сокращает время и повышает эффективность процесса создания изображений химических структур за счет следующих возможностей:

- Непрерывное изображение связей, «вытягивание» колец и добавление атомов при использовании многофункционального инструмента создания изображений;
- Закрепление в панели инструментов наиболее часто используемых структур и химических аббревиатур посредством простого «перетаскивания»;
- Доступ к параметрам атома, связи и фрагмента, а также к опциям запроса по конкретному элементу при помощи нажатия правой клавиши мыши;
- Редактирование атомов за счет наведения на них мыши без необходимости нажатия правой клавиши;
- Оперативный возврат на предыдущие стадии создания изображения за счет функции множественного возврата/повторения действий;
- Упрощенный процесс создания структур с Rgroups для запросов или упорядочивания;
- Создание подробных комментариев для схем реакции с помощью текста, цветового форматирования и различного набора стрелок;
- Удобный процесс создания высококачественных изображений структур для включения в документы и презентации Microsoft Office.

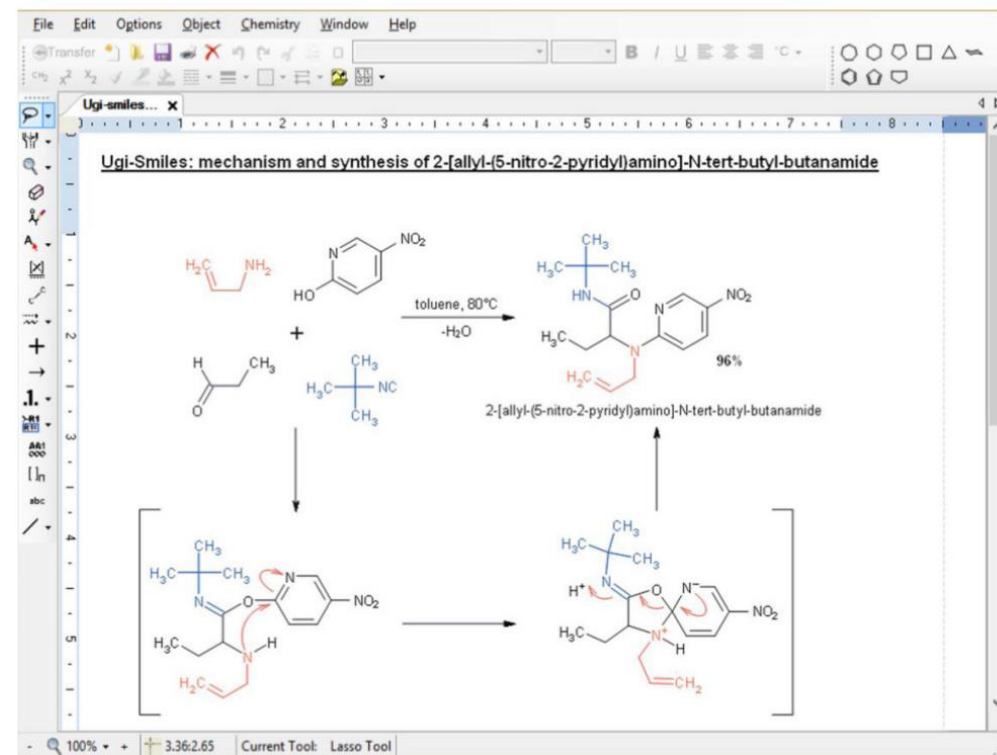


Рисунок 1. Изображение синтеза, созданное в BIOVIA Draw и предназначенное для высококачественной печати. Внизу отображается наименование продукта, автоматически сгенерированное при помощи встроенного генератора наименования структур.



ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

- Выбирайте из обширной библиотеки защищенных сгруппированных шаблонов;
- Воспользуйтесь улучшенным распознаванием тетраэдральных и геометрических стереогенных центров благодаря алгоритму BIOVIA NEMA;
- Создавайте и редактируйте совместимые с ISIS эскизы, редактируйте наследуемые эскизы с использованием функции улучшения качества;
- Упростите процесс перехода с ISIS на BIOVIA Draw за счет наличия схожего принципа работы и аналогичных инструментов создания изображений;
- Открывайте Chemdraw CDX файлы в BIOVIA Draw;
- Рассчитывайте параметры структуры в процессе создания ее изображения (AlogP, состав, массу, формулу и прочее).

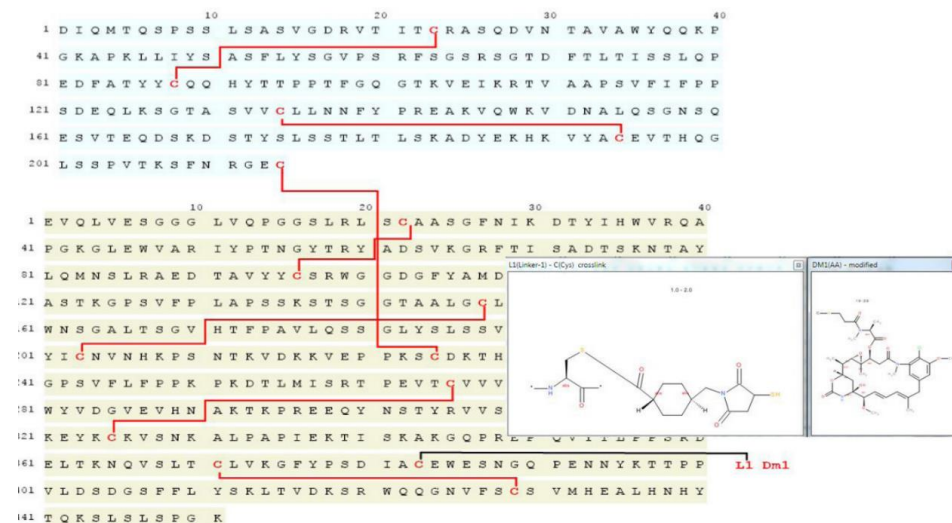


Рисунок 2. Сохраняйте, регистрируйте, проводите поиск и представляйте 1 и 3-буквенные пептиды, биопрепараты, ДНК и РНК. Реконструируйте последовательности для включения несвойственных остатков, мутаций и мостиковых связей. Используйте шаблоны для добавления HELM мономеров, пользовательских остатков (пептиды, ДНК, РНК), присоединений, линкеров и защищенных групп.



ПРОСТАЯ НАСТРОЙКА И ИНТЕГРАЦИЯ

Программное обеспечение BIOVIA Draw для корпоративного использования предлагает гибкую интеграцию с пользовательскими приложениями Java® и .NET, а также интеграцию с BIOVIA Insight и Insight для Excel, BIOVIA Registration, BIOVIA Workbook, BIOVIA Notebook, Accelrys Isentris® и ISIS.

- Изменяйте внешний вид изображения в соответствии с потребностями предприятия, настроив XML-приложения;
- Создавайте собственные надстройки для повышения эффективности работы в рамках вашего предприятия;
- Интеграция с уже установленными приложениями;
- Используйте веб-приложения для запросов и просмотра.



ДЛЯ УЧЕНЫХ – БЫСТРОЕ И ЭФФЕКТИВНОЕ СОЗДАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ СТРУКТУР

- Конвертор структур преобразовывает: структуры в IUPAC имя и наоборот (теперь включает в себя Улучшенную стереохимию); структуры в SMILES и наоборот; структуры в InChI имя и наоборот, а также структуры в InChI ключ
- Создавайте структуры используя "Structure Resolver". Проводите поиск структур по таким идентификаторам как CAS номер, имя, MDL номер, SMILES, inChI и прочим при помощи веб-сервисов, предоставленных следующими онлайн базами данных:
 - NCI/CADD (96М уникальных структур),
 - PubChem (63М уникальных структур),
 - Chemspider (36М уникальных структур),
 - BIOVIA DiscoveryGate ® Available Chemicals Directory (13М уникальных структур).
 - Вы также можете использовать и другие онлайн базы данных для получения нужных вам структур без необходимости создавать их изображение самостоятельно
- Создавайте и редактируйте гаптические связи, полимеры, составы и смеси (Sgroups)
- Создавайте и редактируйте Rgroup (Маркуш) запросы, в том числе встроенную логику Rgroup запросов
- Создавайте и редактируйте 3D запросы; поддреживаются все функции 3D запросов, в том числе 3D rotate
- Создавайте SD-файлы из mol-файлов и фрагментов рабочей области изображения
- Открывайте SD-файлы и просматривайте содержимое, проверяйте доступность в BIOVIA DiscoveryGate ® Available Chemicals Directory, рассчитывайте свойства, проводите поиск в рамках открытого файла, экспортируйте или создавайте отчеты по результатам и вычислениям
- «Копировать как» и «Вставить» в виде параметров:
 - Molfile, Sketch строка
 - IUPAC
 - SMILES, InChI (ключ или строка), NEMA, Chime
 - HELM, Sequence
 - Bitmap, Metafile, текст



ДЛЯ БИОХИМИКОВ – СОЗДАВАЙТЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ, РЕГИСТРИРУЙТЕ И СОСТАВЛЯЙТЕ ОТЧЕТЫ О ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПЕПТИДНЫХ ИЛИ НУКЛЕИНОВЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ

- Создавайте 1 и 3-буквенные пептиды, ДНК или РНК последовательности при помощи инструмента «Sequence». Используйте тот же инструмент для создания изображений пересекающихся связей, дисульфидных мостиков и прикрепленных защитных групп боковой цепи. Импортируйте и преобразовывайте текст, файлы XHELM, HELM, FASTA, Swiss-Prot, PDB и EMBL в химически значимые последовательности
- «Растягивайте» остатки в последовательности до полной структуры с целью демонстрации химических модификаций
- Используйте редактор HELM для генерации и редактирования строковых обозначений HELM
- Для разработчиков - добавляйте изображение структуры и представление в приложения и настраивайте в соответствии с рабочими процессами конкретного предприятия
- Обновленная интеграция с BIOVIA Pipeline Pilot предоставляет разработчикам и администраторам дополнительные возможности расширения для BIOVIA Draw, используя коллекции Pipeline Pilot, такие как Chemistry, ADMET и т. д., обеспечивающих поддержку различных типов выходных данных:
 - Вычисленные значения;
 - Молекулы;
 - SD Файлы;
 - Графики и таблицы;
 - Пользователи могут применять хранящиеся в BIOVIA Draw примеры или настраиваемые протоколы (после публикации) для собственных структур и выбирать необходимые параметры для получения требуемой информации;
 - Используйте BIOVIA Draw в браузере Microsoft Internet Explorer®;
 - BIOVIA Draw поддерживает Microsoft Windows 7, 8.1 (32 и 64 бит) и Office 2010, 2013 (32 и 64 бит).

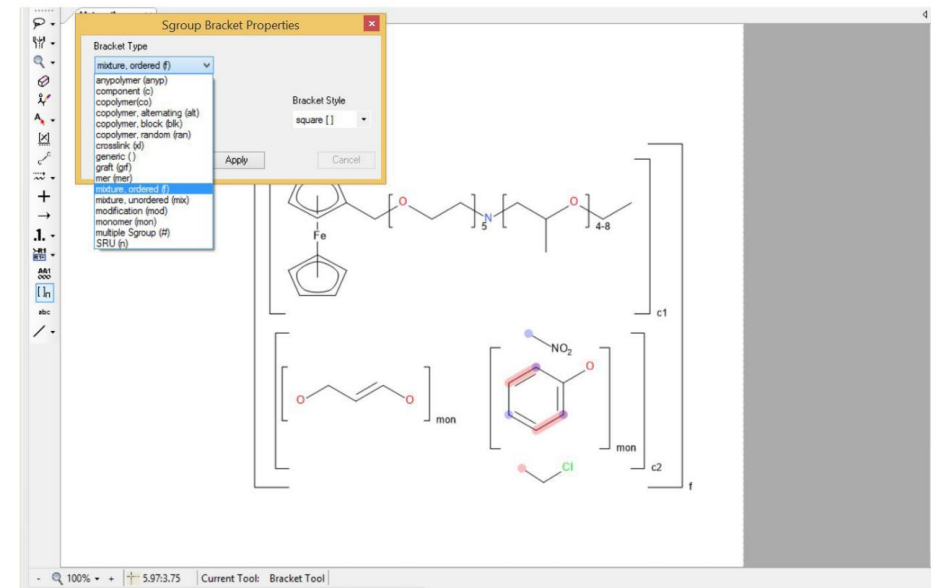


Рисунок 3. Поддерживаются все функции гаптических связей, полимеров, смесей и формул Sgroup. Переменные присоединения (также известные как связи Маркуша) также показывают место, где присоединение возможно. В конкретном примере, комбинация связи Маркуша, Дженераика и Sgroup данных используется для представления структуры Маркуша.

