

Die Produktfamilie von Revvity Signals enthält mehrere Softwarepakete zum chemischen und biologischen Zeichnen und Dokumentieren, zur Datenbankrecherche sowie zur Visualisierung und zur Analyse chemischer und biologischer Daten, zudem eine elektronische Laborjournallösung.

ADDITIVE ist der Vertriebspartner der Revvity Signals Software, Inc. im deutschsprachigen Europa und liefert zu den Softwarepaketen umfangreiche Services, wie Schulungen, Support und Applikationsprogrammierung.



## **ChemDraw™ Prime**

ChemDraw Prime ist das Softwarepaket mit den grundlegenden Werkzeugen, um schnell chemisch fundierte, veröffentlichungsreife sowie aussagekräftige Darstellungen von chemischen Strukturen und Reaktionen zu bauen sowie die zugehörigen Labornotizen und experimentellen Aufzeichnungen zu erstellen.

## **ChemDraw™ Professional**

ChemDraw Professional erweitert ChemDraw Prime um Werkzeuge zur Bearbeitung von Biopolymeren, die Software BioDraw, NMR-Vorhersagen, erweiterte Name-to-Structure-Funktionalitäten, ein verbessertes Retrosynthesewerkzeug und sogar die Integration chemischer Datenbanken wie zum Beispiel SciFinder®.

## **Signals ChemDraw™**

Signals ChemDraw ermöglicht das Zeichnen, Erfassen, Speichern, Abfragen, Analysieren und Teilen von Daten und Informationen über Verbindungen, Reaktionen, Materialien und deren zugehörige Eigenschaften.

## **Signals Notebook**

Signals™ Notebook ist ein webbasiertes elektronisches Laborjournal zum Erfassen und Organisieren der Laborexperimente und deren Ergebnisse in einem beispiellos intuitiven Workflow zur wissenschaftlichen Zusammenarbeit.

## **Spotfire®**

Spotfire® ist eine der führenden Enterprise Analyse- und Datenerforschungsplattformen mit extrem leistungsstarken Algorithmen, weitreichender Skalierbarkeit und hoher Datensicherheit.

# ChemDraw™ Prime

ChemDraw® Prime ist das Softwarepaket mit den grundlegenden Werkzeugen, um schnell chemisch fundierte, veröffentlichungsreife sowie aussagekräftige Darstellungen von chemischen Strukturen und Reaktionen zu bauen sowie die zugehörigen Labornotizen und experimentellen Aufzeichnungen zu erstellen. Es enthält dabei Vorlagen für chemische und labortechnische Ausrüstung und praktische Werkzeuge zum Zeichnen von TLC- und Gel-Elektrophorese-Platten. Zusätzlich kann der Anwender spezifische Eigenschaften der Moleküle berechnen und sich anzeigen lassen.

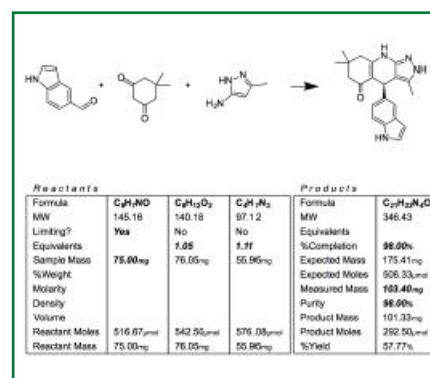


## Die Vorteile liegen auf der Hand:

- Leicht zu handhabende Zeichenlösung, um Zeit bei der Erstellung von Strukturen und Reaktionen zu sparen
- Kosten- & Zeitersparnis bei der Identifikation von Verbindungen mit gewünschten Eigenschaften, noch bevor diese synthetisiert werden
- Leicht implementierbare Anpassungen von Hotkeys und Strukturabkürzungen an die Bedürfnisse des Anwenders

## Features von ChemDraw Prime

- Schnelle Analyse der Eigenschaften einer Verbindung und Überprüfung ihrer strukturellen Korrektheit
- Structure Clean-Up - Eine kleine Tastenkombination und eine hastig erstellte Struktur wird nach chemischen Gesichtspunkten strukturiert aufgeräumt
- Aus-/Einklappen von abkürzenden Bezeichnungen - Anwender können standardisierte Abkürzungen wie TBS, OTs etc. nutzen und einfach zwischen der Bezeichnung und der Strukturansicht hin und her wechseln.
- Erstellen eigener Abkürzungen, um immer wiederkehrende Strukturelemente zeitsparend und einfach einzubauen
- Vierflächige und geometrische Stöchiometrie
- Multizentren-Andockpunkte für haptische und andere  $\pi$ -Bindungen
- Chemie-Polymer-Zeichenwerkzeuge
- Berechnung physikalisch-chemischer Eigenschaften - pKa, LogP, LogS, tPSA und viele mehr
- Speichern der Strukturen und Reaktionen in allen gängigen chemischen und grafischen Formaten
- Laden von JCamp- und Galactic-Spectra-Dateien
- Fragmentierungswerkzeuge
- Spezielles "Kopieren und Einfügen" und "Kopieren und Speichern" als Befehle für CDX, CDXML, molfile, SMILES, InChI und InChIKey (nur Kopieren)
- Dark Mode Style Sheet zum augenfreundlichen Zeichnen in weiß auf schwarz
- Verbesserte "Kopieren und Einfügen"-Funktionalität
- Atropisomere werden durch chemische Intelligenz erkannt



# ChemDraw™ Professional

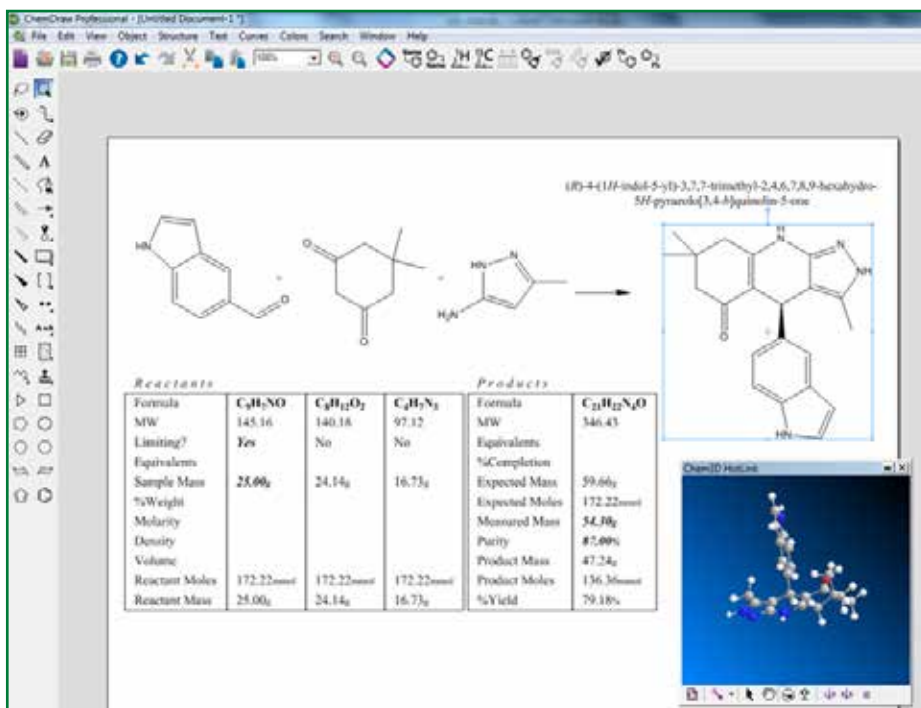
**ChemDraw® Professional** erweitert ChemDraw Prime um Werkzeuge zur Bearbeitung von Biopolymeren, die Software BioDraw, NMR-Vorhersagen, erweiterte Name-to-Structure-Funktionalitäten, ein verbessertes Retrosynthesewerkzeug und sogar die Integration chemischer Datenbanken, wie zum Beispiel SciFinder®. ChemDraw Professional erlaubt zudem die Strukturdatensuche, die Organisation und die Bearbeitung von Daten mit Excel durch ChemDraw for Excel sowie ChemFinder Standard, ChemScript und ChemDraw 3D Pro. Ebenfalls integriert ist ein zeitlich befristeter Zugang zur ChemDraw Cloud.

## Die Vorteile der Professional- gegenüber der Prime-Version:

- Leicht zu handhabende Zeichenlösung für organische und organometallische Materialien, Polymeren und Biopolymeren (inkl. Aminosäuren, Peptiden, RNA und DNA) sowie fortgeschrittene Stereochemie
- Zeichnen und Weiterleiten von Suchanfragen für chemische Stoffe und Reaktionen direkt in SciFinder ohne zeitraubendes Kopieren und Einfügen
- Schnelles, effektives und akkurates Kommunizieren von Forschungsergebnissen und Ideen durch das Nutzen von biologischen Vorlagen und Zeichenobjekten, um überzeugende Zeichnungen von Zellen und Reaktionspfaden zu erstellen
- Zeit sparen und die Datengenauigkeit erhöhen durch die Vorhersage von Eigenschaften, der Erzeugung von Spektren, dem Konstruieren von korrekten IUPAC-Namen sowie der Kalkulation korrekter Stöchiometrie
- Schnellere und genauere Suche nach Strukturen von Verbindungen schafft eine große Zeitersparnis

## Features von ChemDraw Professional

- BioDraw - Zeichnen biologischer Reaktionspfade
- Biopolymer-Toolbar - Zeichnen von Peptid- und Nukleotid-Sequenzen
- Ketten-Tool - Werkzeug für lineare und Zick-Zack-Kohlenstoffketten
- HotLink-Verbindung zu Chem3D
- ChemNMR Solvent Selection
- ChemNMR User Proton Shift Database
- ClogP, LogP, LogS
- HotLink-Verbindung zu Datenbanken
- Gelelektrophorese-Tool
- Microsoft Office-Integration
- Name=Struct
- Einfügen von Sequenzen
- Plasmidkarten-Tool
- Relative Stereochemie
- Rotation um frei wählbare Zentren
- Sequenzierungswerkzeug
- Stereochemie, Stöchiometrische Tabelle
- DC-Platten-Werkzeug
- tPSA (Topological Polar Surface Area)
- Struktursäuberung, Strukturperspektiven-Tool
- Wasserstoffbrücken werden in 3D-Darstellung übernommen



# Signals ChemDraw™

**Signals ChemDraw** ist das umfangreichste Softwarepaket in dem Revvity Signals Softwarebereich mit wissenschaftlich fundierten Werkzeugen zur Erzeugung von chemischen und biologischen Strukturen in 2D und 3D und enthält das komplette ChemDraw Professional. Signals ChemDraw dient nicht nur dem Zeichnen von Verbindungen und Reaktionen, sondern auch dem Erfassen, Speichern, Abfragen, Analysieren und Teilen von Daten und Informationen über Verbindungen, Reaktionen, Materialien und deren zugehörige Eigenschaften. Es enthält zusätzlich Chem3D Ultra, ChemFinder Ultra sowie Schnittstellen zu quantenchemischer Software von Drittanbietern (MOPAC, Gaussian, Conflex und Autodock) sowie einen zeitlich befristeten Zugang zur Signals Notebook Individual Edition, einer cloud-basierten, elektronischen Laborjournallösung.

Signals ChemDraw ermöglicht es Biologen und Chemikern, ihre Arbeit effizient zu strukturieren und zu visualisieren, wodurch ein tieferes Verständnis der Ergebnisse möglich ist und Korrelationen zwischen biologischer Aktivität und chemischen Strukturen erkannt werden können.



## Signals ChemDraw beinhaltet folgende Anwendungen:

- **ChemDraw Professional**

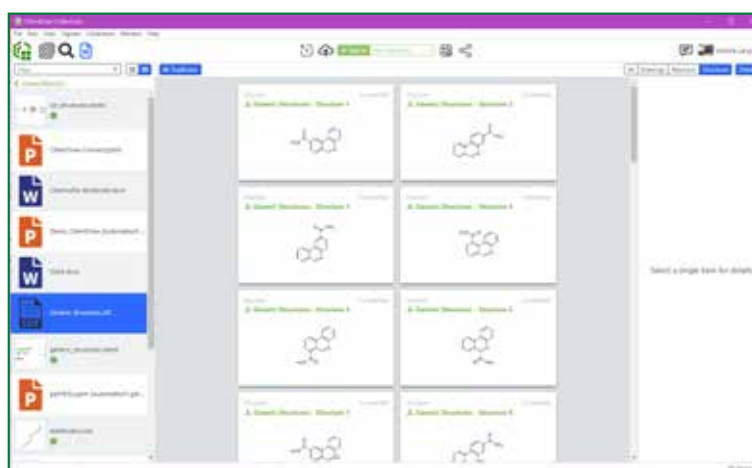
erlaubt das schnelle und effiziente Zeichnen von Molekülen, Reaktionen und biologischen Einheiten sowie Abläufen für den Einsatz in Dokumenten, Publikationen und elektronischen Laborjournalen. Des Weiteren ermöglicht es den Zugriff auf Datenbanken, wie z. B. SciFinder, und kann die genaue Bezeichnung aus Strukturen erstellen. Zusätzlich ist es in der Lage, typische Eigenschaften und Spektren von chemischen Verbindungen vorherzusagen.

- **ChemDraw+**

bringt ChemDraw Desktop in die Cloud, so dass die vereinfachte Version über das Signals Research Portal in gängigen Browsern genutzt werden kann. Strukturen können lokal oder in der Cloud bearbeitet und gespeichert werden.

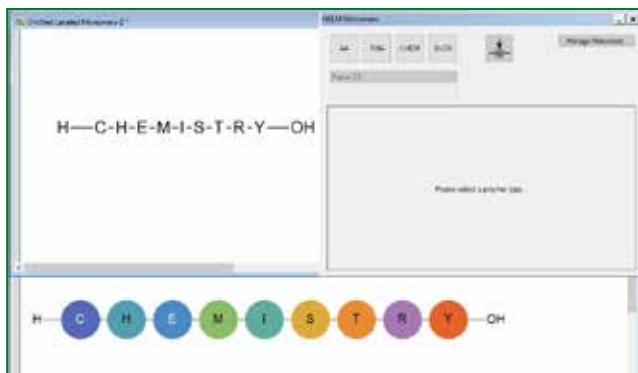
- **ChemDraw Collections**

ermöglicht das Zusammenführung von Daten aus Signals Notebook-Experimenten, das einfache Durchsuchen lokaler ChemDraw- oder Office-Dokumenten nach chemischen Strukturen, das Erstellen von Listen von Verbindungen aus verschiedenen Dokumenten heraus und das einfache Generieren von Berichten in PowerPoint.



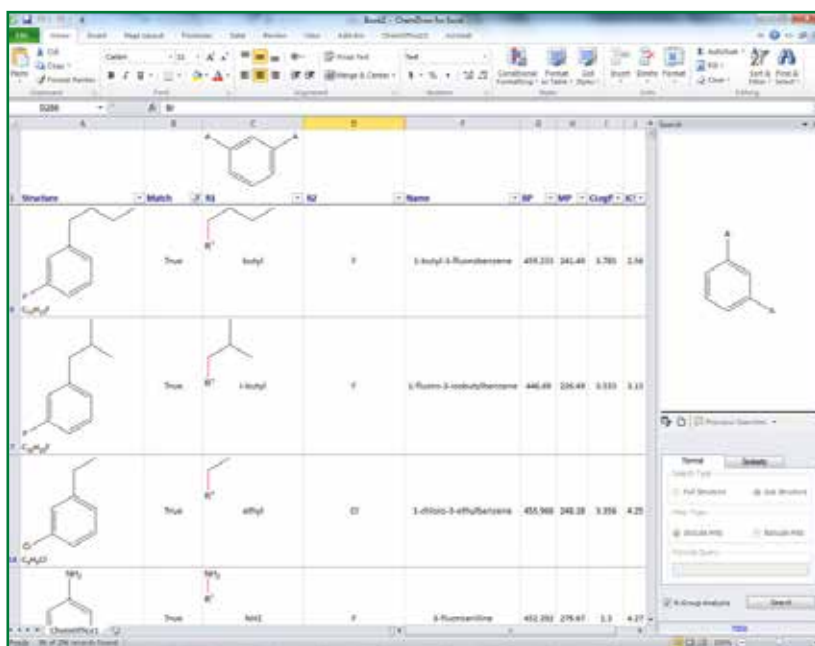
## • Helm Monomer Curation


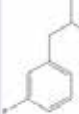
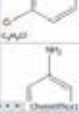

Die Hierarchical Editing Language for Macromolecules ("HELM") wird eingesetzt, um die hierarchische Struktur von Biomolekülen korrekt und einfach darzustellen. Mit der HELM Monomer Curation können bestehende Monomer-Datenbanken verwaltet und neue, eigene Datenbanken erstellt und im Signals Notebook verwendet werden.



## • ChemDraw for Excel

erweitert Excel um chemisches Verständnis. Dadurch können die Excel®-Funktionen zum Analysieren, Sortieren und Organisieren zur weiteren Bearbeitung und Erweiterung der Datensätze von Verbindungen genutzt werden, um z. B. Verhältnisse zwischen Struktur und Aktivität zu untersuchen.



Structure	Match	Name	Weight	Count
	True	1-butyl-3-fluorobenzene	418.230	241.40
	True	1-butyl-3-isobutylbenzene	446.69	226.44
	True	1-butyl-3-ethylbenzene	435.560	240.28
	True	1-butyl-3-methylbenzene	432.592	275.61

## • Chem3D

erzeugt 3D-Modelle zur Visualisierung von Verbindungen, wodurch Abschätzungen bezüglich der Gestalt und damit verbundene Eigenschaften wie Aktivität und Spezifität ermöglicht werden. ChemDraw3D Hotlink enthält dabei GAMESS und Schnittstellen zu MOPAC, Gaussian, Conflex und Autodock.

## • ChemFinder Ultra

ist ein chemisch intelligentes, personalisiertes Datenbanksystem, mit dem chemische Verbindungen organisiert werden können. Außerdem kann nach Korrelationen zwischen Struktur und Eigenschaften sowohl gesucht als diese auch übersichtlich dargestellt werden, z. B. als Cluster-Karten oder idealisierte Profile der Verbindungen, um schnell und einfach Struktur-Aktivitäts-Verhältnisse zu erkennen.

## • ChemFinder für Office

durchsucht Dateien und Verzeichnisse nach chemischen Strukturen und kann entsprechend zum Durchforsten von Dokumenten nach spezifischen Strukturen genutzt werden.

## • ChemScript

ist eine Script-Sprache, welche die Automatisierung von Abläufen und die Bearbeitung von Strukturen erlaubt.

# Vergleich von ChemDraw™ Prime, ChemDraw™ Professional und Signals ChemDraw

Version 23.0 NEW FEATURES	Platform	ChemDraw Prime	ChemDraw Professional	Signals ChemDraw
Dark Mode Style Sheet	win/mac	🟢	🟢	🟢
Atropisomer perception	win/mac	🟢	🟢	🟢
Ignore Top Level Chiral flag	win/mac	🟢	🟢	🟢
Smart Paste (no overlapping on paste actions)	win/mac	🟢	🟢	🟢
Hydrogen Bonding in 3D cleanup	win/mac		🟢	🟢
Hydrogen Bonding support in 3MF	win/mac			🟢
License Management & Authentication via Signals	win/mac			🟢
Automatic Update	win/mac			🟢
Save to Signals	win/mac			🟢
Open from Signals	win/mac			🟢
Launch Signals applications	win/mac			🟢
ChemDraw+*	Web			🟢
ChemDraw Collections**	win/mac			🟢
HELM Curation***	Web			🟢
ChemDraw+	Platform	ChemDraw Prime	ChemDraw Professional	Signals ChemDraw
<b>Dashboard</b>	Web			🟢
View Recents & Favorites	Web			🟢
Create a new Drawing from a Style Sheet	Web			🟢
<b>File organization with Notebooks &amp; Favorites</b>	Web			🟢
<b>List Views</b>	Web			🟢
Drawings	Web			🟢
Notebooks	Web			🟢
Favorites	Web			🟢
<b>Trash &amp; Untrash Drawings</b>	Web			🟢
<b>Edit Drawings in a ChemDraw web editor</b>	Web			🟢
Duplicate a Drawing	Web			🟢
Rename a Drawing	Web			🟢
Download cdxml drawing	Web			🟢
Round Trip editing to ChemDraw Desktop	Web			🟢
Favorite a Drawing	Web			🟢
<b>Draw biopolymer sequences using ChemDraw+ HELM editor</b>	Web			🟢
Draw with centralized monomer libraries from Pistoia Alliance & Signals	Web			🟢
Draw with centralized custom monomer libraries	Web			🟢
Add Favorite monomers (peptides, RNA/DNA, Chem, Blob)	Web			🟢

# Vergleich von ChemDraw™ Prime, ChemDraw™ Professional und Signals ChemDraw

Insert HELM or FASTA string using the Text Tab	Web			●
Filter libraries using text based search & peptide filters	Web			●
Insert Monomers to the Right or Left in a sequence	Web			●
Replace a monomer in a sequence	Web			●
<b>HELM Curation Application (New for 23)</b>	<b>Platform</b>	<b>ChemDraw Prime</b>	<b>ChemDraw Professional</b>	<b>Signals ChemDraw</b>
Browse Monomer Libraries	Web			●
Inspect Monomer Details	Web			●
Deprecate/Restore Monomers	Web			●
Bulk Import Custom Monomer Libraries	Web			●
Bulk Import Reports	Web			●
<b>ChemDraw Collections (Formerly ChemOffice+)</b>	<b>Platform</b>	<b>ChemDraw Prime</b>	<b>ChemDraw Professional</b>	<b>Signals ChemDraw</b>
Browse & Drill-down into ChemDraw Files (.cdx, .cdxml)	Win/Mac			●
Browse & Drill-down ChemDraw Files embedded in MS Word / Power Point	Win/Mac			●
Browse ChemDraw For Excel Files	Win			●
Create a collection from .csv files	Win/Mac			●
Create collection from SMILES text file	Win/Mac			●
Browse .mol & .sdf Files	Win/Mac			●
View .sdf Files properties	Win/Mac			●
Copy Embedded Chemical Structures to the Clipboard	Win/Mac			●
Create Collection of Chemical Structures	Win/Mac			●
Adding / Editing Properties to / of Collections	Win/Mac			●
Saving Collection Layout as a Template	Win/Mac			●
Batch-Editing of Multiple Chemical Structures in Collections	Win/Mac			●
Structure-searching inside Cloud-hosted MS Office documents	Win/Mac			●
Searching across Signals Notebook (SNB) Experiments ***	Win/Mac			●
Create Collection of Reactions from SNB Experiments	Win/Mac			●
Export Collections to SD Files (v2000, v3000)	Win/Mac			●
Create Powerpoint Reaction Report Slide from SNB Experiments ***	Win/Mac			●
Create Powerpoint Molecule Report Slide from Collection	Win/Mac			●
<b>Recent Additions</b>	<b>Platform</b>	<b>ChemDraw Prime</b>	<b>ChemDraw Professional</b>	<b>Signals ChemDraw</b>
Magic Hotkeys Enhancements	Win/Mac	●	●	●
Shortcuts Enhancements	Win/Mac	●	●	●
Join function improvements	Win/Mac	●	●	●

# Vergleich von ChemDraw™ Prime, ChemDraw™ Professional und Signals ChemDraw

Smart Copy/Paste (SMILES, InChI, HELM)	Win/Mac	●	●	●
Aromatic Cycle Display Toggle and Preferences	Win/Mac	●	●	●
Stereochemistry handling improvements	Win/Mac	●	●	●
Improved Polymer Brackets (Average MW)	Win/Mac	●	●	●
Hydrogen Bond Tool	Win/Mac	●	●	●
Open CIF Files	Win/Mac	●	●	●
Atom/Bond Color Highlighting	Win/Mac		●	●
Ring-Fill Coloring	Win/Mac		●	●
Search into SciFinder-n / Reaxys	Win/Mac		●	●
Improved HELM Monomer Toolbar	Win/Mac		●	●
HELM Cartoon Representation	Win/Mac		●	●
Support for ambiguous FASTA/HELM Monomers	Win/Mac		●	●
Save & Copy as 3D-printable Object (.3MF)**	Win/Mac			●
Atom/Bond Color Highlight & Ring Fill transfer to 3MF	Win/Mac			●
Google Patents/Scholar / PubChem GHS Safety Add-in	Win/Mac			●
ChemDraw Add-ins SDK / Dynamic Download / Token-based Authentication	Win/Mac			●
Shared HELM Libraries	Win/Mac			●
<b>Includes</b>	<b>Platform</b>	<b>ChemDraw Prime</b>	<b>ChemDraw Professional</b>	<b>Signals ChemDraw</b>
Read & Save as .cdx / .cdxml / .rxn / .skc / .mol / .sdf / .rdf Files	Win/Mac	●	●	●
Save ChemDraw Style Sheet	Win/Mac	●	●	●
Structure & Reaction Clean-up	Win/Mac	●	●	●
Magic Hotkeys	Win/Mac	●	●	●
Tools: Chemical Bonds, Text, 3D Perspective, Chemical Rings, Arrow, Orbitals, Brackets, Pen, Shapes	Win/Mac	●	●	●
Chemical Polymers Tools	Win/Mac	●	●	●
Mass Fragmentation Tools	Win/Mac	●	●	●
Thin Layer Chromatography Tool	Win/Mac	●	●	●
Gel Electrophoresis Tool	Win/Mac	●	●	●
Insert & Copy OLE Object	Win	●	●	●
Stereochemistry	Win/Mac	●	●	●
Reaction Interpretation & Mapping	Win/Mac	●	●	●
Calculate MW / Exact Mass / Chemical Formula / Elemental Analysis / m/z	Win/Mac	●	●	●
Copy/Paste as CDXML / SMILES / SYBYL (SLN) / InChI / Mol File / Mol3000	Win/Mac	●	●	●
pKa / Log P / Log S / tPSA	Win/Mac	●	●	●
Generic Structures (Enumeration): Atom List / Variable Attachment / Label Repeating Units / Polymer Repeating Units	Win/Mac	●	●	●

# Vergleich von ChemDraw™ Prime, ChemDraw™ Professional und Signals ChemDraw

Chemical Structures / Laboratory Equipment Templates	Win/Mac	●	●	●
Analyze/Check Structures	Win/Mac	●	●	●
Expand/Contract Labels	Win/Mac	●	●	●
Define/Use Nicknames	Win/Mac	●	●	●
Document Metadata/Tagging	Win/Mac	●	●	●
Multicenter Attachments	Win/Mac	●	●	●
Save as JPEG / PNG / TIFF / SCG / EPS image	Win/Mac	●	●	●
Name-to-Structure / Structure-to-Name	Win/Mac		●	●
Predict 1H NMR / 13C NMR	Win/Mac		●	●
Search SciFinder / SciFinder-n / Reaxys	Win/Mac		●	●
Reaction Stoichiometry Grid	Win/Mac		●	●
R-Group Table Generic Structures (Enumeration)	Win/Mac		●	●
BioDraw Toolbar	Win/Mac		●	●
cLogP	Win/Mac		●	●
HELM Toolbar	Win/Mac		●	●
Copy / Paste as HELM / FASTA Peptide / DNA / RNA	Win/Mac		●	●
CAS RN to Structure from ChemACX.com	Win/Mac		●	●
ChemDraw / CombiChem for Excel	Win		●	●
Name-to-Structure / Structure-to-Name for ChemDraw for Excel	Win		●	●
Chem3D Professional	Win		●	●
ChemFinder Standard	Win		●	●
ChemScript	Win		●	●
Molecular Topology for Chem Draw for Excel/Chem 3D	Win		●	●
ChemProp Std Properties for Chem Draw for Excel/ Chem 3D	Win		●	●
ChemACX Explorer	Win/Mac			●
Custom ChemDraw Add-ins SDK	Win/Mac			●
Chem3D Ultra	Win			●
Chem3D Interface to Conflex / Autodock/ GAMESS 2020 / Gaussian 16W / MOPAC 2016	Win			●
ChemFinder Ultra	Win			●

\* ChemDraw+ is the new web-based ChemDraw application

\*\* ChemDraw Collections is a cloud-native application that is automatically updated quarterly

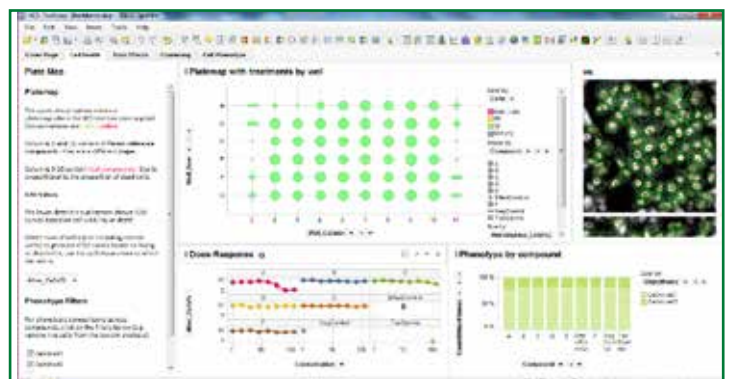
\*\*\* HELM Curation is a web-based application for the curation of centralized monomer libraries for use in the HELM editor in ChemDraw+ and Signals

Spotfire® ist eine Enterprise Analyse- und Datenerforschungsplattform mit extrem leistungsstarken Algorithmen, weitreichender Skalierbarkeit und hoher Datensicherheit. Seine disruptiven hybriden Datenbank-Analysetechniken erlauben Auswertungen, ob nun im Arbeitsspeicher oder in einem Datenbanksystem, die auch den Bedürfnissen in schnell wachsenden Datenbeständen gerecht werden, selbst bei Tausenden von Nutzern und unbegrenzt vielen Datenzeilen. Geführt von interaktiven Dashboards und Datenvisualisierungsobjekten lassen sich beliebige präventive Analysen (Predictive Analytics) schnell und intuitiv durchführen, ideal für jede geschäftliche Anforderung – ob nun in einem kleinen Unternehmen oder einem multinationalen Konzern.



## Die Vorteile

- Dynamische, kollaborative Bedienoberfläche, die Daten aus mehreren Quellen aufnehmen kann – chemische Strukturen, Text, Zahlen, Bilder, chemische Eigenschaften, biologische Proben usw.
- Einfache Erzeugung von analytischen Anwendungen, wodurch schnell Erkenntnisse gewonnen werden können
- Fast augenblicklicher Import und Visualisierung von Daten



# Lead Discovery powered by Spotfire

Die Lead Discovery macht Spotfire zur Hauptplattform für chemische Analytik. Importieren, filtern und interpretieren Sie chemische Strukturen zusammen mit weiteren relevanten Daten in einer visuellen und interaktiven Umgebung. Dadurch wird eine Darstellung komplexer chemischer Daten ermöglicht, sodass Schlüsselbeziehungen besser verstanden und Entscheidungen mit größerer Sicherheit getroffen werden können.

## Hauptfunktionen der Lead Discovery:

- Strukturfilterung im Web
- Mit Lead Discovery 7.5 for Business Author and Consumer können chemische Strukturen im webbasierten Spotfire Consumer betrachtet und auch bearbeitet werden. Dadurch können die Funktionen der leichtgewichtigen Datenanalyse genutzt werden.
- Anzeige und Filterung von chemischen Strukturen
- Lead Discovery analysiert und zeigt alle zugehörigen R-Gruppen an, die zur Leitstrukturoptimierung beitragen.
- Clusterbildung nach chemischer Struktur
- Berechnung chemischer Struktureigenschaften auf Grundlage von integrierten Vorhersagealgorithmen
- Substruktursuche und Treffermarkierung beim Import von Strukturen aus einer Datenbank
- Automatische Erkennung von Strukturformaten beim Import

**SO MANY QUESTIONS SO LITTLE TIME**

Chemical structure analysis callouts:

- alpha-beta Substitutions
- More electron density here?
- Acidic Hydrogens?
- Oxidation problems? Would a quat center help?
- 3D View?
- Racemic? (S) (R)
- HBD/A
- Alkylate?
- Heteroatom Replacement?
- Electronic Effects?
- Sterics?
- Electronics?
- Substitution Patterns

**With Lead Discovery, I can answer all of my questions**

Activity plot callouts:

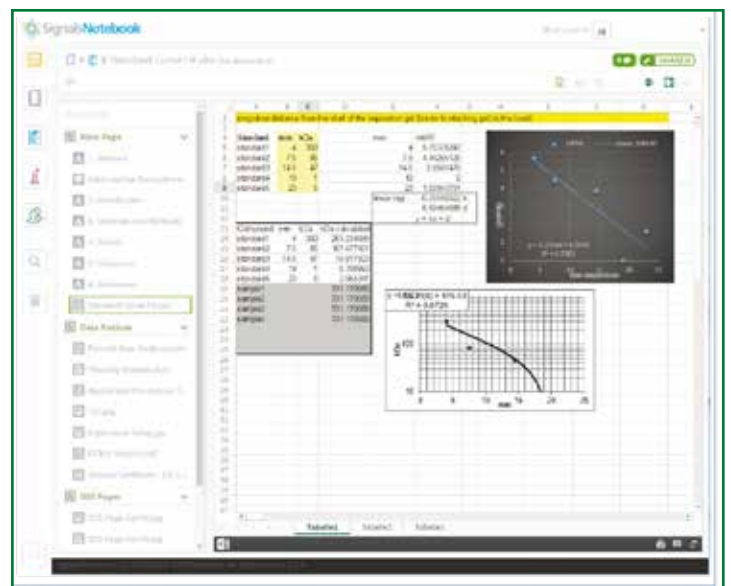
- R1 and R2 must be H, loss of all activity with substitution
- Increased activity when R3 is electron W/D. Increased p450 stability and activity against target when R4 does not equal H
- Optimal activity when R5 is ortho substituted.
- Chiral center (R) enantiomer 15x more active
- Alkyl substitution at R6 is optimal. Unsubstituted beta-position is key.

# Signals™ Notebook

Signals Notebook ist ein leistungsstarkes webbasiertes, elektronisches Laborjournal zum lückenlosen Erfassen und Organisieren von Laborexperimenten und ihren Ergebnissen in einem beispiellos intuitiven Workflow zur wissenschaftlichen Zusammenarbeit.

## Hauptvorteile

- Vollständige Integration von Microsoft Office® & Microsoft Office® Online: Office-Dokumente lassen sich direkt in Signals Notebook erstellen, hinzufügen und verknüpfen. Update der Dokumente entweder in Office oder Office Online.
- Effizientes wissenschaftliches Datenmanagement: Erfassen und Speichern aller wissenschaftlichen Daten in einem System für effektives Arbeiten, Verteilen und Verknüpfen mit anderen Experimenten
- Visualisierung der chemischen Struktur und Reaktionsideen durch ChemDraw in der Cloud
- Keine Installation nötig: 100 % webbasiertes System ohne jegliche Installation oder Download oder gar Hardware, die es zu kaufen gäbe, oder IT, mit der Dinge konfiguriert werden müssten.
- Teamwork: Nahtlose Verbindung zu Kollegen, weltweite, effiziente Kommunikation und Diskussion über Experimente und Folgeexperimente
- Inventory
- Verknüpfung mit der Revvity Signals Research Platform



The screenshot shows a chemical reaction in the Signals Notebook interface. The reaction involves silver oxide (Ag<sub>2</sub>O) and a chiral amide derivative, resulting in a product. Below the reaction is a table of reagents:

Reagent	MF	FM	EM	Limit?	Eq	Sample Mass	Moles	Molarity	Vol
I Silver(I) oxide	Ag <sub>2</sub> O	231.74	231.80510		5	13.4 g	489 mmol		
II Acetonitrile	CH <sub>3</sub>	141.94	141.82764	50		139 g	978 mmol		81.1 n
III Benzyl (S)-[1-(benzylamino)-3-hydroxy-1-oxopropan-2-yl]carbamate	C <sub>21</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	336.37	336.14211		1	33.3 g	97.8 mmol		

Below the reagent table is a table of products:

Product	MF	FM	EM	Theo Mass	Actual Mass	Purity	Yield	TP
IV Benzyl (S)-[1-(benzylamino)-3-methoxy-1-oxopropan-2-yl]carbamate	C <sub>22</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	342.40	342.13796	33.3 g	31.7 g	95%	94%	97