

CambridgeSoft

präsentiert

E-Notebook

**DESKTOP-SOFTWARE
UNTERNEHMENS-LÖSUNGEN**

**CHEMISCHE UND BIOLOGISCHE
FORSCHUNGSINFORMATIK**

**LABOR, ENTWICKLUNG UND
HERSTELLUNGSINFORMATIK**

WISSENSMANAGEMENT

WISSENSCHAFTLICHE DATENBANKEN



CambridgeSoft®

*Life Science Enterprise Solutions
Naturwissenschaftliche Unternehmenslösungen
Solutions globales pour les sciences de la vie
ライフサイエンス・エンタープライズ・ソリューション*

Vision, Engagement

Forschung, Entdeckung, Entwicklung,



CambridgeSoft-Software, Lösungen und Datenbanken

& Innovation

Versuchsdurchführung und Herstellung

Motiviert durch Visionen



Innovativität ist ein unternehmerisches Muss in der pharmazeutischen, biotechnischen und chemischen Industrie. Effiziente neue Ideen, die

durch Zusammenarbeit und Kommunikation über Unternehmensgrenzen hinweg entwickelt werden, sind wichtige Faktoren für den langfristigen Erfolg. In der heutigen, kommunikationstechnisch eng vernetzten Welt kann die Informationsflut im Unternehmen überwältigend sein. Große Datenmengen – strukturiert und unstrukturiert – können die Fähigkeit eines Unternehmens im Forschungs- und Entwicklungsbereich, sich auf das Wichtige zu konzentrieren, beeinträchtigen. Seit 1986 befasst sich CambridgeSoft mit der Lösung von Problemen, die im Zusammenhang mit der elektronischen Datenerfassung und dem Datenaustausch von chemischen Strukturen, Modellen und Informationen entstehen.

Chemiker, Biologen, Wissenschaftler und Ingenieure benötigen schnellen, problemlosen Zugriff auf wichtige Informationen. Dabei spielt es keine Rolle, ob diese strukturiert oder unverarbeitet sind. CambridgeSoft, das in den Anfängen des Unternehmens mit *ChemDraw* und *BioDraw* Wissenschaftler bei der Verwaltung chemischer und biologischer Daten unterstützte, geht heute mit *ChemOffice* und *BioOffice Enterprise* und *Workgroup* auf unternehmensweite wissenschaftliche Informationsprobleme ein. Die Lösungen sind so flexibel und leistungsfähig, dass sie auch den heutigen komplexen Projekten, die sich über verschiedene Unternehmensbereiche und geographische Grenzen erstrecken können, gewachsen sind. Sie beseitigen Datenbarrieren und stellen für jeden Informationen – in interpretationsfähigem Format – zur Verfügung. So werden alle Teammitglieder zusammengeführt und können für die

Fortschritt durch Innovation



Die Fähigkeit eines Unternehmens in den Bereichen Forschung, Entwicklung, Versuchsdurchführung oder Herstellung, schnell und effektiv auf Gegebenheiten und Marktveränderungen

zu reagieren, Innovationen zu fördern und die Produktlieferung beschleunigen zu können, ermöglicht intelligenteres Arbeiten, was

Ausgangspunkt war die *ChemDraw-Software*, die 1992 auf *ChemOffice* und 2004 auf *BioOffice* erweitert wurde. Des Weiteren dehnte CambridgeSoft den Einsatzbereich seiner Software durch Einführung von *ChemOffice Enterprise* im Jahr 1998 und *E-Notebook* im Jahr 2000 auf Unternehmen sowie im Jahr 2001 mit *BioAssay* auf die biologische Industrie aus. Heute werden CambridgeSoft-Produkte von mehreren hunderttausend Chemikern, Biologen, Wissenschaftlern und Ingenieuren eingesetzt, die in pharmazeutischen, biotechnischen und chemischen Bereichen, einschließlich staatlicher und akademischer Forschung, tätig sind. Diese Systeme werden bei Forschung, Entwicklung, Versuchen und bei der Herstellung in die Informationstechnologie integriert, um das geistige Eigentum Ihres Unternehmens erfolgreich zu nutzen. Durch das Umwandeln von Informationen in explizites Wissen wird die Innovation beschleunigt und der Unternehmenserfolg gefördert.

Mit Engagement entwickelt

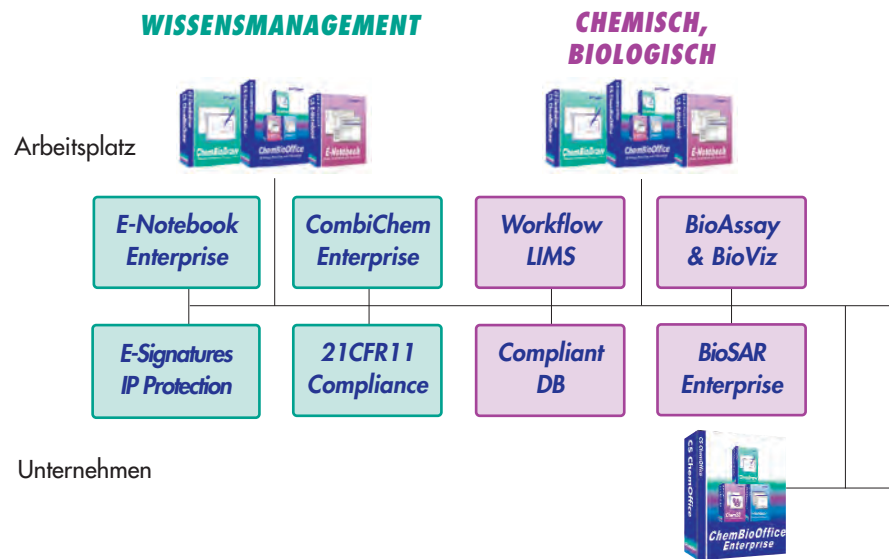
gemeinsam angestrebte Problemlösung und Innovativität ihr kollektives Wissen und ihre unterschiedlichen Fertigkeiten einbringen. Die Ergebnisse können beachtlich sein:



- Die Transparenz von Informationen und die Zusammenarbeit in der Gruppe steigern die Produktivität und senken Kosten.
- Schnellere und intelligentere Forschungsentscheidungen verkürzen die Markteinführungszeiten und vermeiden unproduktive Arbeit.
- Wirklich involvierte Mitarbeiter sind für Unternehmen in den Bereichen Forschung, Entwicklung, Versuchsdurchführung und Herstellung von höherem Wert.

wiederum einen Wettbewerbsvorsprung bedeutet. Bei dem sich stetig beschleunigenden Geschäftstempo streben Unternehmen eine schnellere und fundiertere Entscheidungsfindung sowie eine neue Geschäftseffizienz an. Die *Lösungen von CambridgeSoft* unterstützen nicht nur den einzelnen Chemiker, Biologen, Wissenschaftler oder Ingenieur, der chemische und biologische Daten erfassen, ordnen und weitergeben muss, sondern auch komplexe, weiterverzweigte Arbeitsgruppen. Außerdem erfüllen die Lösungen die Anforderungen eines unternehmensweiten, wissenschaftlichen Informationssystems.

Chem & Bio Office Desktop



Forschung, Entdeckung, Entwicklung,

WISSENSMANAGEMENT

- 6 *Chem & Bio Office Enterprise*
- 8 *E-Notebook Enterprise*
- 10 *Chemie und Biologie*
- 12 *Analytische Dienste*

Für Forschungsunternehmen ist es wichtig, dass Informationen einfach erfasst, gut verwaltet und jederzeit abgerufen werden können. *E-Notebook Enterprise* vereinfacht die Datenerfassung, bietet äußerste Sicherheit, eine effiziente Archivierung sowie text- und strukturbasierte Suchfunktionen. *E-Notebook* enthält leistungsstarke Tools für Unternehmen zur Übertragung unternehmenskritischer Daten von gemeinsamen Laufwerken auf eine gut organisierte, konforme und durchsuchbare Oracle-Anwendung. Für sämtliche Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten stehen MS Office, chemische Strukturen sowie Module zur Unterstützung des Workflows zur Verfügung.

LABORINFORMATIK

- 14 *Workflow LIMS*
- 14 *Compliant DB*
- 15 *Oracle Cartridge*

Laborinformatik beinhaltet *Workflow LIMS* zur Automatisierung von Instrumenten, *Compliant DB* zur Datenspeicherung und *Oracle Cartridge*, das von einem großen pharmazeutischen Unternehmen entwickelt wurde und branchenweit das einzige unternehmensweite Content-Management-System ist.

BIOINFORMATIK

- 16 *BioAssay Enterprise*
- 16 *BioDraw*
- 17 *BioSAR & BioViz*

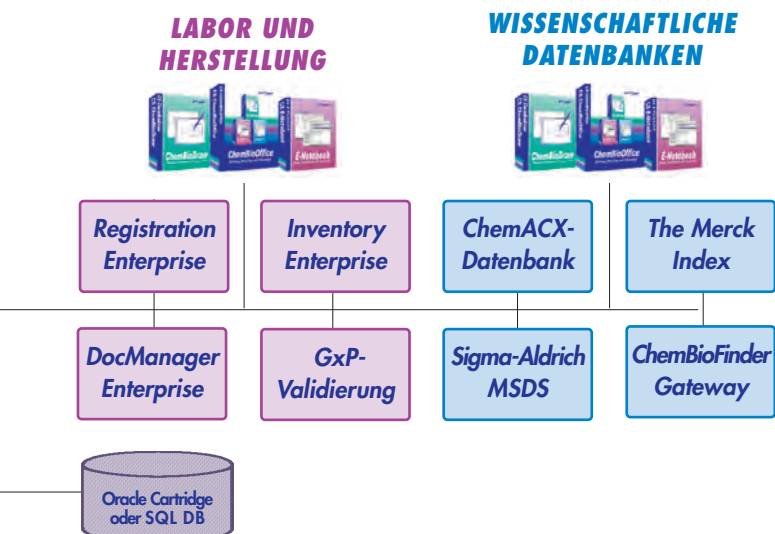
Das Auffinden struktureller Determinanten biologischer Aktivitäten erfordert die Verarbeitung unzähliger biologischer Versuchsdaten. Wissenschaftler verwenden *BioAssay Enterprise* und *BioSAR Enterprise* zum Einrichten biologischer Modelle und zum Visualisieren von Informationen. Mit der Anwendung *BioViz* können Sie Daten grafisch darstellen.

CHEMISCHE INFORMATIK

- 18 *Registration Enterprise*
- 19 *ChemBioFinderEnterprise*

Die Verwaltung der enormen Datenflut ist eine große Herausforderung. *Registration Enterprise* verwaltet Informationen über neue Verbindungen gemäß den Geschäftsregeln des jeweiligen Unternehmens.

Unternehmenslösungen



Versuchsdurchführung und Herstellung

HERSTELLUNGSINFORMATIK

- 18 *Inventory Enterprise*
- 20 *Materialverwaltung*
- 21 *Compliance-Management*

Inventory Enterprise von CambridgeSoft ist eine Anwendung zur Verwaltung von Daten für die Protokollierung von Chemikalien, Reagenzien, Proben und Verbindungen großer Chemie- und Pharmalaboratorien mit mehreren Standorten. *Inventory Enterprise* ist eine Oracle-basierte Anwendung des Produkts *ChemOffice Enterprise* für mehrere Anwender mit verschiedenen Containertypen, Regalen und Multi-Wellplatten.

DESKTOP-SOFTWARE

- 24 *ChemDraw & Chem3D*
- 25 *ChemFinder & ChemInfo*
- 26 *BioDraw, BioAssay & BioViz*
- 27 *Inventory & E-Notebook*

Mit *ChemOffice*, *ChemDraw*, *BioOffice* und *BioDraw* beginnt der Erfolg am Desktop. Hier verfolgen Wissenschaftler ihre Ideen und kommunizieren in der den chemischen Strukturen, biologischen Pathways und Modellen eigenen Sprache. Mit *E-Notebook* und *Inventory* können Wissenschaftler Informationen und Daten verwalten. *ChemBio3D* dient zur Modellierung, *ChemBioFinder* dient zum Suchen, und *BioOffice* enthält zusätzlich *BioDraw*, *BioAssay* und *BioViz*. Durch die Integration mit Microsoft Office können die Arbeitsschritte im Forschungsalltag schneller durchgeführt werden.

WISSENSCHAFTLICHE DATENBANKEN

- 28 *ChemBioFinder Gateway*
- 28 *The Merck Index*
- 29 *ChemACX-Datenbank*

Gute Forschung ist abhängig von Referenzinformationen, angefangen bei der *ChemACX-Datenbank* mit handelsüblichen Chemikalien, die nach Strukturen durchsucht werden kann, und *Sigma-Aldrich MSDS*. *The Merck Index* und andere wissenschaftliche Datenbanken liefern das notwendige Hintergrundwissen über Chemikalien, ihre Eigenschaften und Reaktionen.

PROFESSIONAL SERVICES

- 30 *Entwicklung*
- 31 *Ausbildung und Unterstützung*

Die wissenschaftlichen Mitarbeiter von CambridgeSoft verfügen über die notwendigen Branchenkenntnisse sowie über das chemische und biologische Wissen, um Ihre Informationssysteme so effizient wie möglich zu gestalten.

Chem & Bio Office Enterprise

Integrierte Forschung, Entdeckung, Entwicklung,

Vom Desktop bis zur Unternehmenslösung

Seit Unternehmensgründung bietet CambridgeSoft mit seiner Desktop-Software, insbesondere dem marktführenden Programm *Chem & Bio Draw*, die wichtigsten Anwendungen für Wissenschaftler, die Moleküle, Reaktionen und Pathways zeichnen und mit Anmerkungen versehen. Dieses Softwarepaket mit Unternehmensprogrammen wurde zunehmend verbessert und bietet nun Lösungen für nahezu alle Forschungsbereiche.

Forschung

Mit *E-Notebook* können Forscher ihre Informationen zu Experimenten aufzeichnen und mit anderen Mitarbeitern gemeinsam nutzen, während das intellektuelle Eigentum mit Hilfe von digitalen Signaturen und der 21CFR11-Kompatibilität geschützt wird. Die Forscher können einzelne Experimente oder kombinatorische Bibliotheken von Verbindungen erstellen. Sie können in der *ChemACX*-Datenbank Reagenzien suchen und erwerben, sie in *Inventory* speichern und verwenden, neu erstellte Verbindungen innerhalb eines proprietären Registrierungssystems aufzeichnen, die Ergebnisse in *BioAssay* aufzeichnen, die Ergebnisse mit *BioViz* analysieren und mit *BioSAR* Berichte mit Verknüpfungen zu den Aktivitäten und Strukturen erstellen.

Jeder Aspekt der Forschung, von Synthesepaltung, Bibliothek-Enumeration, Auswahl der Reagenzien, primäres und sekundäres Screening, In-vivo-Tests über Analyse der Ergebnisse bis zur Berichterstellung, wird von diesem integrierten Anwendungspaket abgedeckt.

Entwicklung und Tests

Aufbauend auf einer Produktivitätssoftware konzipierte CambridgeSoft Unternehmensanwendungen, um die Anliegen der expandierenden Community Gemeinschaft von Forschern und Entwicklern zu erfüllen, die aufgrund der durch die Globalisierung gesteigerten gestiegenen Anforderungen von der gemeinsamen Datennutzung über verschiedene wissenschaftliche Bereiche, Forschungsstandorte und sogar Weltmeere hinweg abhängig ist. Da die Software die neuesten webbasierten Technologien verwendet, wird sie gern in der Forschung und Entwicklung eingesetzt. Mithilfe des integrierten Softwarepakets können wissenschaftliche Teams die täglichen Herausforderungen in der Entwicklung leicht bewältigen. Zu diesen Teams gehören Wissenschaftler, die Herstellungsverfahren maßstäblich vergrößern und konzipieren, Toxikologen, die die Werte für den Stoffwechsel der Arzneimittelkandidaten festlegen, Rezepturwissenschaftler, die die Arzneimitteldosierung und das System für die Medikamenteneinnahme festlegen, u. v. a.

Tests

Ein geeigneter Arzneimittelkandidat verfügt über die gewünschte Aktivität für die Krankheitstherapie und erfüllt gleichzeitig die Anforderungen an die Arzneimittelsicherheit, kann kosteneffektiv und reproduzierbar gemäß den Richtlinien unter 21CFR11 und GMP hergestellt werden und ist unter normalen Rezeptur- und Lagerungsbedingungen stabil. Die letzte Herausforderung für einen Arzneimittelkandidaten besteht darin, die Sicherheit und Effizienz über das Labor hinaus in einer Patientenpopulation festzustellen.

ChemOffice

Inhalt	ChemBioOffice Enterprise Ultra	BioOffice Enterprise Ultra	ChemOffice Enterprise Pro	ChemOffice Enterprise Std	ChemBioOffice Workgroup Ultra	ChemOffice Workgroup Pro
E-Notebook Enterprise oder Workgroup	■	■			■	
BioAssay Enterprise oder Workgroup	■	■			■	
BioSAR Enterprise	■	■				
BioViz Desktop					■	
Registration Enterprise	■		■			
Inventory Enterprise oder Workgroup	■	■	■		■	■
ChemACX-Datenbank	■		■		■	■
ChemINDEX-Datenbank	■		■	■	■	■
Oracle Cartridge	■		■	■		
SQL Server-kompatibel					■	■
ChemFinder Ultra					■	■

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

und Workgroup-Lösungen

Workflow bei Versuchsdurchführung und Herstellung

Herstellung

Für die Herstellung benötigt man die Daten und Stapelverarbeitungs-Aufzeichnungen der Studien in den Pilotanlagen. Hierzu werden *Inventory*, *E-Notebook* und *Registration*-Systeme im Rahmen der Good Laboratory and Manufacturing Processes (GxP) verwendet.

Die Handhabung von Informationen wie Anforderungen an die Verwaltungskette Produktkette, Materialdokumentation, Material-Workflow, z. B. Verfügbarkeitsstatus und Nachzertifizierungsdaten, werden vom System verfolgt und verarbeitet.

Die Systeme erfüllen diese Anforderungen und liefern die Basis für das Verwalten von Materialien und Aufzeichnungen während der klinischen Tests. Kliniker können die Ergebnisse von Protokollen zusammenstellen und aufzeichnen. Alle webbasierten Software-Systeme ermöglichen den erforderlichen Zugriff für Kliniker, die sich an einem anderen Standort als das Sponsorunternehmen befinden.

Chem & Bio Office Enterprise

Chem & Bio Office Enterprise ist eine umfassende Lösung für Wissensmanagement und Informatik und ermöglicht die Verwendung von elektronischen Notizbüchern, biologischem Screening, chemischer

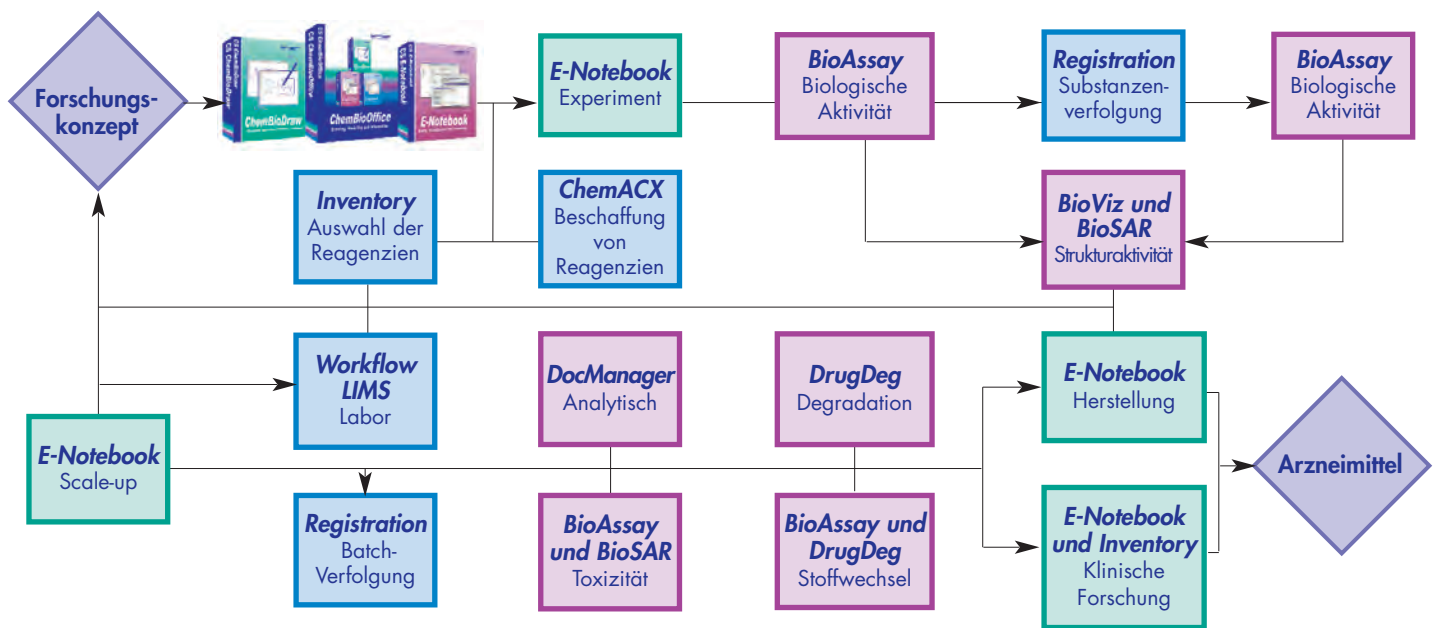
Registrierung etc. über das Intranet. *ChemBioOffice Enterprise Ultra* beinhaltet *E-Notebook* für Aufzeichnungen, *BioAssay* für Screening mit niedrigem und hohem Durchsatz mit integrierten Plattenbestandsdaten, *BioSAR* für SAR-Berichte, *Registration System*, *Inventory* für Reagenzien und biologische Substanzen und eine *ChemACX*-Datenbank mit verfügbaren Chemikalien. Folgende Technologien sind enthalten: *ChemDraw ActiveX* und *Oracle Cartridge*.

Chem & Bio Office Workgroup

Chem & Bio Office Workgroup Ultra ist eine umfassende Lösung für Wissensmanagement und Informatik und ermöglicht die Verwendung von elektronischen Notizbüchern, biologischem Screening u. v. a. über das Intranet.

Chem & Bio Office Workgroup Ultra beinhaltet *E-Notebook* für Aufzeichnungen, *BioAssay* für Screening mit niedrigem und hohem Durchsatz, *BioViz* zur Visualisierung, *Inventory* für Reagenzien sowie eine *ChemACX*-Datenbank mit verfügbaren Chemikalien. Diese Technologie beinhaltet außerdem SQL Server für eine kostengünstige und vereinfachte Administration.

Workflow bei Forschung, Entdeckung, Entwicklung, Versuchsdurchführung und Herstellung



Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Überblick und Flexible Architektur von E-Notebook Schutz geistigen

E-Notebook

E-Notebook ist führend in einer neuen Programmsparte und wird zur Zusammenarbeit, zur Weitergabe von Wissen, zur Einhaltung gesetzlicher Vorschriften, zum Schutz geistigen Eigentums, für LIMS, zur Dokumentenverwaltung, für Projektmanagement und Workflow-Unterstützung verwendet. Es ist konfigurierbar, vielseitig und unternehmensweit einsetzbar und enthält eine Lösung für eine Reihe von Anforderungen in der Forschung und Entwicklung und in der Herstellung. Zu den Basisfunktionen von *E-Notebook* zählt die Unterstützung für die Einhaltung der 21 CFR Part11-, 37 CFR- und GxP-Regulierungen. Des Weiteren bietet eine umfassend konfigurierbare Oberfläche Unterstützung für bestimmte wissenschaftliche und gesetzliche Workflows. Mit *E-Notebook* werden eine ganze Reihe verschiedener Anforderungen mit einer einzigen Anwendungsplattform erfüllt. Damit lassen sich die Kosten senken, die notwendig sind, um diese Anforderungen zu erfüllen. Außerdem können Wissenschaftler und technische Mitarbeiter dank der integrierten Umgebung produktiver arbeiten.

E-Notebook-Architektur

E-Notebook von CambridgeSoft enthält eine umfassende, benutzerfreundliche Oberfläche mit zahlreichen Einstellungen, die Notizbücher aus Papier im Labor überflüssig machen. Dahinter befindet sich ein voll konfigurierbares, sicheres System zur Organisation des Informationsflusses im Unternehmen. Wissenschaftler können chemische Reaktionen, Microsoft-Dokumente (Word, Excel, PowerPoint), Spektren, biologische Daten und Bilder sowie Informationen und Dokumente anderer Art eingeben und diese nach Text, chemischer Substruktur, Metadaten-Markierungen, Organisationsstruktur oder anderen Kriterien durchsuchen.

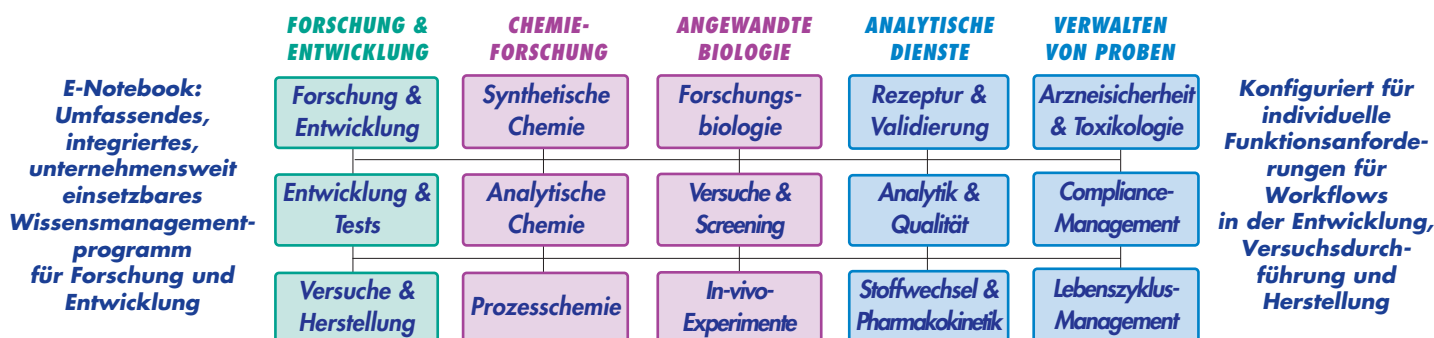
E-Notebook-Architektur

E-Notebook Enterprise ist eine global einsetzbare, Oracle-basierte Anwendung für kleine und große Firmen, von der Forschungsgruppe bis hin zum weltweit tätigen Großunternehmen. Oracle Cartridge verwaltet chemische Strukturen und Reaktionen in einem allgemeinen Datenspeicher, die mit detaillierten Sicherheits- und 21CFR Part11-Regulierungen (Audit-Trails, digitale Signaturen) in Ebenen unterteilt sind. Die Enterprise-Version kann mit Beschaffungsdatenbanken und Diensten wie der *ChemACX*-Datenbank und *Inventory*-Managementsystemen genutzt werden, um die für die Suche nach Chemikalien und die Eingabe von Strukturen benötigte Zeit zur verringern.

Flexible und konfigurierbare Architektur

Die Architektur des *E-Notebook* ermöglicht Unternehmen ein enormes Maß an Flexibilität. Mithilfe der leistungsstarken Konfigurationsebene können Aussehen und Funktionen der Anwendung wesentlich verändert und so an die verschiedensten Workflows angepasst werden. Dieselbe Anwendung bietet detaillierte Workflow-Unterstützung für Forscher bei von der ersten Forschung bis hin zur Frühphasenforschung durch frühen klinische Entwicklung, obwohl diese speziellen Gruppen vollkommen verschiedene Anforderungen an ein solches Programm stellen. Neben den Konfigurationstools enthält das Programm auch eine umfangreiche Schnittstelle zur Anwendungsprogrammierung (API), die benutzerdefinierte Anpassungen und Systemintegration ermöglicht.

E-Notebook kann außerdem mit integrierten Bestandsverwaltungssystemen, wie *Inventory* von CambridgeSoft, sowie internen Systemen, Erfassungssystemen für analytische Daten und Systemen zur Registrierung von Verbindungen genutzt werden. *E-Notebook* unterstützt dank der ausgefeilten Sicherheit auf Wunsch die Zugriffsbeschränkung auf bestimmte Informationen auf Projekt- oder Gruppenebene. Informationen können nach Belieben im gesamten Rahmenwerk gemeinsam genutzt oder gesichert werden.



Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

Allgemeine Forschung

Eigentums und Einhaltung gesetzlicher Vorschriften

Allgemeine Forschung und Entwicklung

Mit *E-Notebook* von CambridgeSoft können Pharma- und Biotech-Unternehmen die Effektivität des Prozesses vom Krankheitsziel zur Produkteinführung erhöhen. In der Oracle-Hauptdatenbank wird der Workflow verwaltet, der konform mit den Good Laboratory Practices (GLP), den Good Manufacturing Processes (GMP) und der FDA-Bestimmung CFR 21 Part 11 ist. Die Client-Schnittstelle ist für die frühe Phase der Arzneimittelforschung konfigurierbar und flexibel, weil diese Phase zwar methodisch, jedoch improvisiert ist. Überall, wo gemeinsame Laufwerke genutzt werden, bietet *E-Notebook* die bessere Lösung.

E-Notebook ermöglicht die Automatisierung von Workflows sowie die Weitergabe von Wissen. Im Forschungs- und Entwicklungsprozess erhöht sich so in jeder Phase der wissenschaftliche und wirtschaftliche Wert.

Forschung und Entdeckung

E-Notebook Enterprise bietet Wissensmanagementlösungen sowie Lösungen mit dem Schwerpunkt Biologie und Chemie für sämtliche Bereiche der Entwicklung. So können Forscher ihre Informationen zu Experimenten aufzeichnen und mit anderen Mitarbeitern gemeinsam nutzen, während das intellektuelle Eigentum mithilfe von digitalen Signaturen und der 21CFR Part 11- und 37 CFR-Kompatibilität geschützt wird.

- *Chem & Bio Draw* – Zeichnen Sie Moleküle, Reaktionen und biologische Pathways, und fügen Sie Anmerkungen hinzu.
- *ChemACX* – Suchen und kaufen Sie Reagenzien.
- *Inventory* – Speichern und verfolgen Sie Reagenzien und Proben.
- *Registration* – Zeichnen Sie neu erstellte Verbindungen auf.
- *BioAssay* – Modellieren Sie komplexe Protokolle und zeichnen Sie Ergebnisse aus den biologischen Tests auf.
- *BioSAR* – Erstellen Sie Berichte, um Aktivitäten mit Strukturen zu verknüpfen.
- *BioViz* – Analysieren Sie biologische Ergebnisse.

Jeder Aspekt der Entdeckung – von Synthesepaltung, Bibliothek-Enumeration, Auswahl der Reagenzien, primäres und sekundäres Screening, In-vivo-Tests über Analyse der Ergebnisse bis zur Berichterstellung für Daten-wird vom integrierten *E-Notebook* abgedeckt.

- Ersetzen gemeinsamer Laufwerke mit Oracle
- DMPK, Biologisches Screening, Genetik und Mikroskopie
- LIMS, Methodenausführung, 21 CFR Part 11, GxP

Entwicklung und Tests

E-Notebook Enterprise von CambridgeSoft erfüllt die Anliegen der expandierenden Community von Forschern und Entwicklern, die aufgrund der durch die Globalisierung gestiegenen Anforderungen von der gemeinsamen Datennutzung über verschiedene wissenschaftliche Bereiche, Forschungsstandorte und sogar Weltmeere hinweg abhängig ist. *E-Notebook* ermöglicht die benutzerdefinierte Integration einer großen Bandbreite von Modulen, internen Programmen, Laborinstrumenten und Backend-Datenspeicher. Dadurch wird *E-Notebook* zu einer wahren Rundumlösung für die Bereiche Entwicklung und Tests. Der Zeit- und Programmieraufwand für die Erstellung von Workflows und Berechnungen und das Ermöglichen von Variabilität fällt mit dem *E-Notebook* wesentlich geringer aus als mit bestehenden Laborinformationssystemen. Zu den Endbenutzern gehören Wissenschaftler und Prozesschemiker, die die Maßstäbe für Herstellungsverfahren festlegen und die Herstellungsverfahren konzipieren, Toxikologen, die die Werte für den Stoffwechsel der Arzneimittelkandidaten festlegen, Rezepturwissenschaftler, die die Arzneimitteldosierung und das System für die Medikamenteneinnahme festlegen u. v. a.

Versuchsdurchführung und Herstellung

Ein geeigneter Arzneimittelkandidat verfügt über die gewünschte Aktivität für die Krankheitstherapie und erfüllt gleichzeitig die Anforderungen an die Arzneimittelsicherheit, kann kosteneffektiv gemäß den Richtlinien unter 21CFR11 und GMP hergestellt werden und ist unter normalen Rezeptur- und Lagerbedingungen stabil. Die Handhabung von Informationen, wie Anforderungen an die Verwaltungskette, Materialdokumentation, Material-Workflow, z. B. Verfügbarkeitsstatus und Nachzertifizierungsdaten, werden von *E-Notebook* verfolgt und verarbeitet. *E-Notebook* erfüllt diese Anforderungen gemäß den Richtlinien im Rahmen der Good Laboratory and Manufacturing Processes (GxP) und bildet die Grundlage für die Verwaltung von Materialien und Aufzeichnungen während der klinischen Tests.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com
FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Chemie & Elektronische Journalführung und Datenaufzeichnung,

Chemie

Innerhalb der Forschungs- und Entwicklungs-Wertkette kann die Chemie in drei Funktionen unterteilt werden: Synthetische Chemie (Forschung/Entdeckung), analytische Chemie (präklinisch) und Prozesschemie (Entwicklung). Die Flexibilität und Konfigurierbarkeit von *E-Notebook* ermöglichen eine erfolgreiche Speicherung von Daten und unterstützen eine effiziente Analyse, die gemeinsame Nutzung von Daten sowie die Erstellung von Berichten und Durchführung von Suchen – ganz ohne Papier.

Synthetische Chemie

Synthesechemiker nutzen die Vorteile vieler Funktionen, die in eine benutzerfreundliche Oberfläche innerhalb von *E-Notebook* von CambridgeSoft integriert sind. Reaktionen werden mithilfe der Direktbearbeitung gezeichnet, eine Stöchiometrietabelle wird dynamisch mit Formeln, Molekulargewichten und chemischen Namen ausgefüllt. Reagenzien können auch aus anderen Systemen, wie der Datenbank für verfügbare Chemikalien *ChemACX* oder *Registration*-Systemen, importiert werden.

CombiChem ist bei der Erstellung von Bibliotheken für Synthesechemiker von besonderer Bedeutung. Manche Benutzer verwenden *E-Notebook* als vollständige *CombiChem*-Lösung und nutzen so die Vorteile der Funktionen, wie Enumeration der Produkte von einer virtuellen Bibliothek auf einem flexiblen Platten-Layout, Site-Checker für mehrere Reaktionen und Parallelsynthese aus mehreren Schritten. Andere Benutzer importieren einfach eine Liste der Verbindungen von einer externen Quelle oder SD-Datei, sodass sie Daten in einer bibliothekbasierten Stöchiometrietabelle aufzeichnen und berechnen können.

Analytische Chemie

E-Notebook dient als Datenspeicher für analytische Daten sowie als Kommunikationsportal, mit dessen Hilfe Wissenschaftler und Analysten miteinander kommunizieren können. Wissenschaftler können mit einem Mausclick Dienstanfragen erstellen und direkt an einen Analysten senden. Papier ist überflüssig: Der Analyst kann seine Ergebnisse in Bildern und Chromatogrammen direkt an das *E-Notebook* des Wissenschaftlers senden.

- Chemische Synthese, Scale-up und Analytik
- 37 CFR Elektronische Signaturen
- Dienstanfragen, Forschungs-Workflow

Prozesschemie

Aufgabe dieses Forschungszweigs ist die Ermittlung effizienter Verfahren für die Synthese pharmazeutisch aktiver Wirkstoffe, wobei diese Verfahren sowohl für klinische Tests als auch für die kommerzielle Nutzung einsetzbar sein müssen. Damit diese Prozesse von verschiedenen, räumlich verteilten Arbeitsgruppen angewendet werden können, müssen sie präzise dokumentiert sein. Außerdem muss ihre Konformität mit den Bestimmungen der Good Laboratory Practices (GLP), der Good Manufacturing Processes (GMP) sowie den FDA-Vorschriften aus CFR 21 Part 11 gewährleistet sein. Die *E-Notebook*-Module für die Prozesschemie unterstützen sowohl die Workflow- als auch die Einhaltung gesetzlicher Vorschriften, denen Prozesschemiker gegenüber stehen.

▼ Reaktionseigenschaften

▲ PowerPoint-Integration

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

CambridgeSoft
www.cambridgesoft.com

Biologie

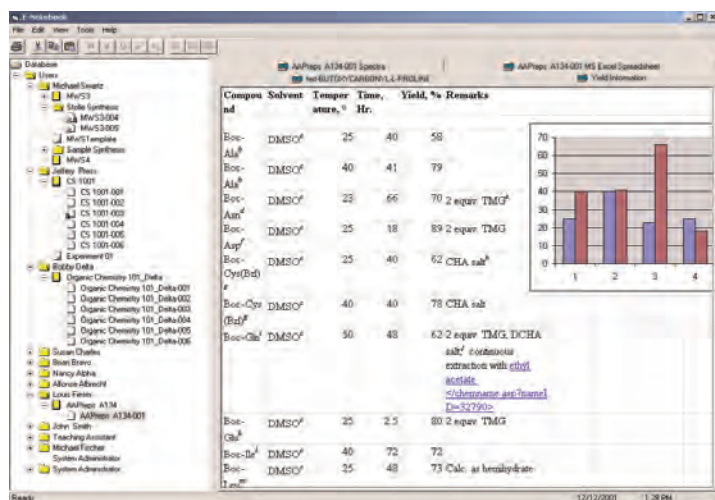
DMPK, Biologisches Screening, Mikroskopie

Forschungsbiologie

Diese Wissenschaftler sind bereits zu Beginn des Drug Discovery-Prozesses involviert, da Genom und Genetik erforderliche Bereiche für das Identifizieren eines Targets sind. Diese Arbeit ist methodisch, aber auch improvisiert. Daher ist ein elektronisches Notizbuch erforderlich, das so flexibel wie das früher verwendete Papier ist. Darin liegen die klaren Vorteile der Flexibilität von *E-Notebook*. Das System kann zwar für eine feste, formularbasierende Dateneingabe eingerichtet werden, die sich für spätere Forschungs- und Entwicklungsphasen eignen, jedoch sind die Konfigurationmöglichkeiten für die Forschungsbiologie normalerweise offen und grenzenlos. Genomkarten, DNA-, RNA- und Proteinsequenzdateien können per Drag-and-Drop in *E-Notebook* abgelegt, Sequenzierungsergebnisse direkt von den Instrumenten an elektronische Experimente gesendet und Protokolle und Daten mit bekannten Tools, wie z. B. Microsoft Word und Excel, verwaltet werden.

Der Vorteil der Datenerfassung in *E-Notebook* besteht darin, dass Informationen gesammelt und aussagekräftig angezeigt werden können. Beispielsweise besteht das Züchten einer neuen biologischen Stammkultur aus vielen Schritten, die an nicht aufeinanderfolgenden Arbeitstagen von verschiedenen Mitarbeitern ausgeführt werden. Mit *E-Notebook* können Sie benutzerdefinierte Berichte erzeugen, die den Prozess sofort zusammenfassen. In diesen Berichten können Sie navigieren: Klicken Sie auf einen einzelnen Schritt, um zum entsprechenden Experiment zu gelangen.

▼ Datenbankstruktur



- Chemische Synthese, Scale-up und Analytik
- DMPK, Biologisches Screening, Genetik und Mikroskopie
- LIMS, Methodenausführung, 21 CFR Part 11, GxP

Versuche & Biologisches Screening

Ein großer Vorteil von *E-Notebook* besteht darin, dass die vorhandenen elektronischen Methoden der Datenerfassung integriert werden können. Das Programm kann mit *BioAssay* von CambridgeSoft verwendet werden und bietet somit eine vollständige Screening-Unterstützung bei Experimenten. Des Weiteren sind Microsoft Word und Excel sowie die Möglichkeit zur Erfassung von Bildern und Filmen direkt in *E-Notebook* eingebettet. Wissenschaftler können so die Funktionen dieser Anwendungen nutzen, die in eine vielfältige, durchsuchbare Umgebung integriert wurden. Biologische Experimente können auf eine Weise verwaltet und sortiert werden, die in einem herkömmlichen Dateisystem nicht möglich ist.

In-vivo-Experimente/Tierverwaltung

In-vivo-Experimente spielen bei der Target-Forschung und -Validierung eine große Rolle und sind wichtig zur Ermittlung der Effektivität ausgewählter für therapeutische Zwecke eingesetzter Arzneimittelkandidaten. In *E-Notebook* von CambridgeSoft können Sie Ergebnisse aus In-vivo-Experimenten sammeln, speichern und interpretieren. Bei Verwendung mit *BioAssay* wird der gesamte Experiment-Workflow von der Erstellung über die Datenanalyse und Qualitätskontrolle bis hin zur zusammenfassenden Berichterstellung unterstützt. Zusätzlich zu den In-vivo-Experimenten selbst können auch Tierbauten und Fortpflanzung verfolgt werden. Der herkömmliche Workflow besteht aus Aufzeichnungen auf Papier bei den Tiereinrichtungen, im Labor und auf dem Schreibtisch des Forschers. Dank *E-Notebook* benötigen Sie kein Papier mehr, um Daten zu verfolgen und zu speichern. Das Formulartool kann für folgende Aufgaben verwendet werden:

- Verfolgen des Tierstatus
- Verfolgen der Tierzucht
- Aufzeichnen des Genotyps
- Aufzeichnen der Paarungsdaten
- Aufzeichnen der Geburtsdaten
- Verfolgen der Versuchsdaten

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Analytische Dienste & Elektronische Journalführung und Datenaufzeichnung

Rezeptur und Validierung

Das *E-Notebook*-Rezepturmodul unterstützt sowohl die Workflow- als auch die Einhaltung gesetzlicher Vorschriften, mit denen sich Rezeptur-Ingenieure konfrontiert sehen. Dank der Flexibilität können beliebig viele Rezepturen erstellt werden, wobei gewährleistet ist, dass nur designierte Administratoren eine neue Rezeptur erstellen können.

Analytische Kontrolle & Qualitätskontrolle

Labors für analytische und Qualitätskontrollen müssen definierte Verfahren zum Testen von Materialien einhalten, die während präklinischen oder klinischen Tests möglicherweise injiziert werden. Bei dieser Arbeit müssen die Bestimmungen von GxP und 21 CFR Part 11 eingehalten werden. *E-Notebook* enthält Vorlagen für gängige analytische Tests und Formulare für analytische Vorgänge, die mühelos erstellt und verwendet werden können. *E-Notebook* verfügt auch über Workflow-Funktionen, welche die Dateneingabe überwachen und sicherstellen, dass die Formulare in der für die Methodenausführung richtigen Reihenfolge bearbeitet werden.

Beispiel: Es können Regeln festgelegt werden, sodass im Formular "Tag 3" eines mehrtägigen Prozesses keine Eingaben akzeptiert werden, solange nicht alle erforderlichen Felder des Formulars "Tag 2" ausgefüllt wurden. Die Formulare können automatische Berechnungen enthalten, um Summen, Mittelwerte, Differenzen und vieles mehr zu berechnen. Durch die Möglichkeit der elektronischen Verwaltung von Lösungen, Geräten und anderen für das Experiment benötigten Ressourcen kann *E-Notebook* das Verfahren zusätzlich rationalisieren.

Arzneistoffwechsel

E-Notebook unterstützt DMPK-Labors beim Testen des Stoffwechsels und der Langlebigkeit von Verbindungen in verschiedenen In-vitro- und In-vivo-Modellen. Die Anforderungen an die DMPK-Datenerfassung können sehr unterschiedlich sein. Hier stellt *E-Notebook* die optimale Lösung dar. Beispielsweise können bei einem In-vivo-Enzym-Induktionstest relativ kleine Mengen an Daten für die Wissenschaftler, die *E-Notebook*-Integration mit Microsoft Excel verwenden, generiert werden. Im Gegensatz dazu werden große Datenmengen, die z. B. bei In-vitro-Enzym-Inhibitionsstudien generiert werden, oftmals in Anwendungen wie *BioAssay* von CambridgeSoft gesammelt. Die Integration von *BioAssay* und Excel ist für die Verwendung von *E-Notebook* im DMPK-Bereich daher außerordentlich wichtig.

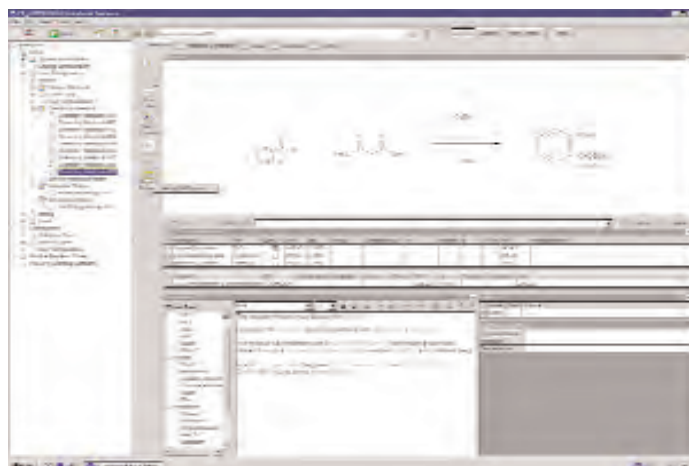
- Dienstanfragen-Workflow
- Verwalten von Proben
- Methodenausführungsrahmenwerk

Pharmakokinetik (DMPK)

Für den Arzneistoffwechsel und die Pharmakokinetik gibt es einen ganzheitlichen Ansatz. Das Verhalten einer Verbindung wird nicht in einer einzelnen Studie beschrieben. Es ist die Kombination aus Daten von verschiedenen Experimenten, die das pharmakologische Profil für eine Verbindung darstellt. Hier kommt eine der wichtigsten Funktionen von *E-Notebook* zum Einsatz: die Berichtsfunktion. *E-Notebook*-Berichte sind flexibel: Jedes Feld (z. B. Verbindungs-ID, Studientyp) kann für die Abfrage des Systems verwendet werden, und jedes Feld (z. B. Ergebnis, Dosis) oder jede Feldaggregation (z. B. durchschnittliche Radioaktivität) kann im Bericht angezeigt werden. Berichte sind dynamisch und navigierbar: Ergebnisse werden mit Links angezeigt, die einen schnellen Zugriff auf Experimente ermöglichen.

Die Berichte werden direkt in der *E-Notebook*-Oberfläche angezeigt. Sie können jedoch auch in MS Word oder eine PDF-Datei exportiert werden, um sie gemeinsam mit Kollegen zu verwenden, die keinen Zugriff auf *E-Notebook* haben.

▼ Inventory Enterprise



Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

Verwalten von Proben

Compliance-Management und Nachverfolgung von Proben

Arzneimittelsicherheit/Toxikologie

Notizbücher aus Papier waren die herkömmliche Aufzeichnungsquelle für das gesamte Experiment, jedoch fehlten darin oft nicht-experimentelle Informationen, die kurz nach der Konzeption generiert wurden. Beispielsweise werden toxikologische Studien oftmals nicht durch einen Wissenschaftler angefordert, der das Experiment ausführt, sondern von einem Manager oder Koordinator, der die Studie einem Wissenschaftler zuweist. Wichtige Materialien, die mit diesem ersten Schritt im Prozess in Zusammenhang stehen, wie z. B. Ideen, E-Mails und andere schriftliche Informationen, werden in herkömmlichen Notizbüchern aus Papier oftmals ausgelassen. Der Toxikologie-Workflow in *E-Notebook* berücksichtigt diese Informationen: Studien werden zuerst von einem Manager erstellt und anschließend einem Wissenschaftler zur Ausführung zugewiesen.

Compliance-Management

E-Notebook eignet sich auch für das Erfassen experimenteller, für das Experiment entsprechender Standardverfahren. Diese Dokumente werden oft separat von den tatsächlichen Daten gespeichert, was zu Fehlern und Verwirrung führen kann. Dies wiederum kann die Gültigkeit der Daten in Frage stellen. Das Speichern und Anzeigen von Verfahren und anderen diesbezüglichen Dokumenten zusammen mit den Daten verhindert dieses Risiko und unterstützt das Erstellen einer Perspektive zur Studie. Das Speichern und Anzeigen von Verfahren und anderen diesbezüglichen Dokumenten zusammen mit den Daten verhindert dieses Risiko und unterstützt das Erstellen einer Perspektive zur Studie.

Sample Lifecycle Management

E-Notebook kann den gesamten Lebenszyklus einer Probe durch enge Integration mit *Inventory* verwalten. Die Verwaltung der Lebenszyklus einer Probe spielt beim Registrieren, Testen, Beurteilen und bei der Berichterstellung in verschiedenen analytischen Phasen und Herstellungsphasen eine große Rolle. Die manuelle Verfolgung von Proben und Testergebnissen ist ein aufwändiger Prozess. Zur Einhaltung der GxP-Richtlinien sind außerdem kostspielige manuelle Überprüfungen erforderlich.

Die kontrollierte Flexibilität des *E-Notebook* von CambridgeSoft eignet sich hervorragend für diese Umgebungen, in denen Details und die Einhaltung von Bestimmungen eine große Rolle spielen. Das Sample Lifecycle Management-Modul von *E-Notebook* ist mit den Bestimmungen der Good Laboratory Practices (GLP), der Good Manufacturing Processes (GMP) sowie den Vorschriften aus 21 CFR Part 11 kompatibel.

- Nachverfolgung von Proben und Zuweisung eines Strichcodes
- Erstellung eines beliebigen Berichts aus der Datenbank
- Vollständiges Audit-Trail

Eingeben von Proben

Mit *E-Notebook* kann die Eingabe von Proben problemlos konfiguriert werden (Registrierung der Probe, Zuweisung eines Strichcode-Etiketts und die Initiierung der Nachverfolgung von Proben). Dies wird durch die Integration von *Inventory* von CambridgeSoft ermöglicht. Mithilfe von *E-Notebook* können Sie Formulare erstellen, um neu synthetisierte oder extern beschaffte Verbindungen, ihre physikalischen Eigenschaften und Tests zu verfolgen und eindeutige Kennungen zuzuweisen. Neue Verbindungen werden über das *E-Notebook*-Formular eingegeben, und chemische sowie nicht-chemische Daten werden mit der Probe hinterlegt. Wird eine unternehmenseigene Verbindung registriert, wird sie mittels einer konfigurierbaren, stereoselektiven Duplikatsprüfung auf Einmaligkeit geprüft und erhält eine Registrierungsnummer.

Nachverfolgung von Proben

Das Nachverfolgen von Proben, Anfordern von Analysen und Erstellen einer Verwaltungskette lässt sich einfach innerhalb der *E-Notebook*-Oberfläche verwalten. *E-Notebook* dient als Datenspeicher für analytische Daten und Experimente, indem es Daten direkt mit der Proben-ID verknüpft. Es fungiert auch als Kommunikationsportal, über das Wissenschaftler und Analysten während des Dienstanforderungslebenszyklus miteinander kommunizieren können. Wissenschaftler können mit einem Mausklick Dienstanfragen erstellen und direkt an einen Analysten senden. Papier ist überflüssig: Der Analyst kann seine Ergebnisse in Bildern und Chromatogrammen direkt an das *E-Notebook* des Wissenschaftlers senden. (Diese werden dann im Posteingang des *E-Notebook* angezeigt und können auf Wunsch in das Experiment aufgenommen werden.) Um eine Verwaltungskette zu erstellen, wird jeder Schritt des Probeneigentums verfolgt, aufgezeichnet und den FDA-Bestimmungen aus 21 CFR Part 11 angepasst.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com
FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Workflow LIMS, Compliant DB

Visuelles LIMS, Laborautomatisierung, Konforme

Workflow LIMS-Automatisierung

Workflow LIMS von CambridgeSoft ist ein wissenschaftliches Tool zur Verwaltung von Daten und Workflows und wird zur Laborautomatisierung und für In-silico-Experimente verwendet. Dank visueller Experiment-Entwicklung und Workflow-Layout mit integrierter Laborautomatisierung und Analytik in *Workflow LIMS* ist keine benutzerdefinierte Programmierung mehr erforderlich.

Mithilfe von *Workflow LIMS* können Forscher ihre Laborvorgänge, Instrumente und Entscheidungspunkte konzeptionell verbinden und an Instrumente zur Automatisierung und Datenerfassung koppeln und so Echtzeitergebnisse erzeugen. Die *Workflow LIMS* -Lösung ermöglicht wissenschaftlichen Teams, Vorgänge zu entwerfen, diese auszuführen, die Ergebnisse zu erfassen und Laborgeräte zu integrieren, um so einige oder alle Prozesse zu automatisieren. Die Vorgänge beziehen sich hauptsächlich auf Laboraktivitäten, es können jedoch auch Tools zur Entscheidungsunterstützung auf dem Desktop eines Wissenschaftlers und Anfragen oder Aktualisierungen zu Datenbanken einbezogen werden.

Interaktivität und Vollständigkeit

1. Die Modellierungsumgebung, der Workshop Configuration Editor: Hier modelliert das wissenschaftliche Team die Möglichkeiten des Labors, z. B. die im Labor verfügbaren Basisprozesse und die entsprechenden Arbeiten und erzielten Ergebnisse.
2. Die Entwicklungsumgebung, die Workbench: Hier erstellen Wissenschaftler Workflows aus diesen Basisprozessen.
3. Der Laufzeit-Operations Manager: Hier werden die Zuweisung von Aufgaben an Wirkstoffe verwaltet, der Fortschritt von Aufgaben und Workflows verfolgt und die Speicherung erfasster Daten verwaltet.
4. Die Wirkstoffebene, bestehend aus mehreren Anwendungen, die bestimmte Arten von Aufgaben entweder manuell (über eine Benutzeroberfläche) oder automatisch (durch Betreiben der Geräte über eine Steuerungsschnittstelle oder Durchführung automatisierter Datenverarbeitung) bearbeiten.
5. Die Überwachungsebene, bestehend aus einem Berichterstellungstool, das historische Nutzdaten liefert, und einer Live-Aktivitätenanzeige, die es Wissenschaftlern ermöglicht, Details individueller Workflows und Proben anzuzeigen.

- Dienstanfragen-Workflow ermöglicht Wissenschaftlern die Kommunikation während der Arbeit
- Direkte Kommunikation von *E-Notebook* aus zur Erstellung von Aufgaben und zum Senden der Ergebnisse
- Methoden-Framework für Standard-Vorgänge und Konformität

Angewandte Technologien und Vorteile

Workflow-Management ermöglicht es Forschungsteams, schnell neue Vorgänge zu testen, Best Practices zu erfassen und manuelle Prototypen erfolgreicher Entwürfe zu einem vollautomatischen Hochdurchsatz-Labor zu entwickeln. Prozesse in der Entdeckung und Forschung müssen von Natur aus flexibel und die Ausführung von Workflows muss schnell an neue Techniken und Geräte anpassbar sein.

Konventionelle Workflow-Anwendungen zur Verwaltung von Labordaten können diese Anforderungen nicht erfüllen, da sie mit einem hohen Konfigurationsaufwand verbunden sind, sich schlecht anpassen lassen und es sehr kompliziert und kostspielig ist, diese in die sich rasch verändernden Labortechnologien zu integrieren. *Workflow LIMS* bietet hier die ideale Lösung. Durch die visuelle, benutzerfreundliche Umgebung zur Beschreibung von Prozessen und zum Aufbau von Workflows aus diesen Prozessen können Wissenschaftler neue Vorgänge rasch testen. Mithilfe des schnellen Entwicklungs-Toolkits für die Integration von Geräten, das eine stufenweise Automatisierung ermöglicht, können Anschaffungskosten und Betriebsrisiken minimiert werden.

Workflow LIMS von CambridgeSoft vereinfacht sogar manuelle Vorgänge im Labor, indem Vorgänge in einzelne Aufgaben aufgespalten werden und der Großteil der Datenerfassung und der Transfervorgänge automatisiert wird. Durch die Erfassung von Prozessen und Daten reduziert *Workflow LIMS* Kosten und Risiken bei der Implementierung von Forschungstechniken und ermöglicht es Unternehmen, den gesamten Forschungsprozess zu beschleunigen.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

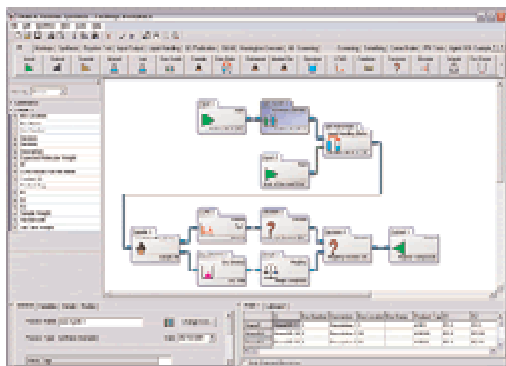
& Oracle Cartridge

Speicherintegration und Verwaltung chemischer Daten

Compliant DB

Compliant DB von CambridgeSoft wurde von einem großen Pharma-Unternehmen entwickelt und ist branchenweit das beste unternehmensweite Content-Management-System. Es dient als elektronische Bibliothek, die alle strukturierten und unstrukturierten elektronischen Aufzeichnungen sammelt, organisiert, speichert, indiziert und sicher archiviert. Von den Rohdaten und Laborberichten bis hin zu Konformitätsaufzeichnungen unterstützt *Compliant DB* auch jede Workflow-Lösung von CS wie *E-Notebook*, *BioAssay* und *Inventory*. *Compliant DB* ist vollkommen konform mit den Bestimmungen des 21 CFR Part 11 für elektronische Aufzeichnungen und Signaturen.

Compliant DB kann direkt über das Intranet oder Extranet des Unternehmens oder mithilfe eines einfachen Webbrowsers über das Internet verwendet werden. *Compliant DB* bietet Unternehmen eine sichere zentralisierte elektronische Bibliothek für alle elektronischen Datendateien unter Einhaltung der Bestimmungen aus 21 CFR Part 11. Es können nicht nur maschinell lesbare Datendateien, sondern auch Bilder, Multimediadateien, Präsentationen, lesbare Textdokumente und Adobe PDF-Dokumente, Tabellen sowie viele weitere Formate gespeichert werden. Diese Daten können als Quelldaten (z. B. Instrumentendaten für *BioAssay*) und als Datenspeicher (für signierte *E-Notebook* -Versuchsdatensätze) dienen. *Compliant DB* kann als eigenständiges Programm betrieben werden, doch nur CambridgeSoft bietet voll integrierte Anwendungen im Bereich Wissensmanagement und Unternehmenslösungen mit konformer Speicherintegration. *Compliant DB* macht dies möglich.



▲ Workbench Beispiel

- Entwicklung eines zentralisierten, validierten und GxP-konformen Speichers
- Speichern von Dokumenten, Instrumentdateien und chemischen Objekten
- Oracle Cartridge ist kompatibel mit Linux, Solaris, AIX und Windows und enthält Struktursuche, Eigenschaftsvorhersagen und Nomenklatur

Oracle Cartridge

Oracle Cartridge von Cambridge Soft wird in allen *ChemOffice Enterprise*-Anwendungen zum Speichern, Durchsuchen und Analysieren chemischer Daten verwendet. Dieses Programm kann auch für die Entwicklung benutzerdefinierter Oracle-Anwendungen verwendet werden. Chemische Strukturen und Reaktionsdaten lassen sich ohne spezielle Software nur schwer bearbeiten. Die Cartridges von Oracle definieren neue, bekannte Datentypen. *Oracle Cartridge* von CambridgeSoft nutzt diese Technologie und ermöglicht die Bearbeitung chemischer Strukturen und Reaktionsdaten in Oracle. Dadurch wird die Portabilität und Konsistenz in Anwendungen verbessert. Durch den Zugriff auf *Oracle Cartridge* über die native Oracle SQL-Sprache können Programmierer direkt auf chemische Strukturdaten in der Datenbank einwirken.

Oracle Cartridge von CambridgeSoft unterstützt die Formate CDX, CDXML, MolFile, MolFile v3000, RXN und SMILES und ist dadurch so flexibel, dass es ohne Konvertierung sowohl für neue als auch für bereits vorhandene Datenanwendungen verwendet werden kann. Chemische Daten können in *ChemDraw* oder *ISIS Draw*, *E-Notebook*, *Inventory* oder *Registration* erstellt werden. *Oracle Cartridge* unterstützt Stereochemie, relative Stereochemie, Tautomere und Strukturnormalisierung. Es enthält außerdem einen integrierten Strukturerenumerator (für unspezifische Strukturen), grundlegende Eigenschaftsvorhersagen, Nomenklatur-Algorithmen (name=struct) und dynamische Funktionen für die molekulare Dateiformatkonvertierung.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

BioAssay, BioViz, Versuchs-Screening und Visualisierung

BioAssay

BioAssay ist das Programm der Wahl für die Verwaltung biologischer Forschungsdaten, insbesondere für die Modellierung komplizierter In-vivo-Experimente und die Unterstützung einer Ultra-HTS-Plattform. Es ist die einzige Anwendung dieser Kategorie, die eine optimale Lösung sowohl für Hochdurchsatz-Labors als auch für Umgebungen mit geringerem Durchsatz bietet. *BioAssay* unterstützt Laborautomatisierung, Berechnung und Statistik sowie komplizierte Versuche mit hohem oder niedrigem Durchsatz, wie beispielsweise Tiermodelle oder In-vivo-Experimente.

BioAssay ist für beide Durchsatzszenarien gleichermaßen geeignet. Der Schlüssel hierfür ist eine Anwendung, die flexibel genug ist, um Versuche aller Komplexitätsstufen zu modellieren, und die gleichzeitig robust genug ist, um eine zuverlässige und komfortable Benutzeroberfläche für den Import, die Speicherung und Analyse der Daten bereitzustellen. Die Software unterstützt nicht nur das schnelle Setup biologischer Modelle, automatischer Berechnungen und Kurvenanpassungen, sondern auch die Datenvalidierung und die Erzeugung maßgeschneiderter Berichte zur Strukturaktivität.

E-Notebook Erweiterung durch BioAssay

BioAssay Enterprise ist eine skalierbare, flexible Lösung für das biologische Screening, das auf dem rollenbasierten Oracle-Sicherheitsschema und der *Oracle Cartridge* aufbaut. Als Teil von *ChemOffice Enterprise* ist *BioAssay* in *E-Notebook* für Forschungsdaten, in *Inventory Enterprise* für Plattenverfolgung und -verwaltung, in *Registration Enterprise* für die Registrierung neuer Verbindungen und in *BioSAR Enterprise* für die benutzerdefinierte Berichterstellung integriert.

BioAssay Ultra bietet dem Benutzer einen Großteil der Funktionalität unserer Unternehmensanwendungen, muss jedoch nicht in einer komplexen Umgebung eingeführt werden. *BioAssay Ultra* stellt in Kombination mit *BioViz* eine benutzerfreundliche Oberfläche für den Import, die Anzeige, Validierung und Darstellung biologischer Versuchsdaten am Desktop zur Verfügung.

- *BioAssay* verwaltet Daten aus komplexen biologischen Versuchen im Zusammenhang mit der Wirkstoffoptimierung effektiv.
- *BioViz* ist in *BioSAR* integriert und liefert in nur einem Schritt umfassende Datenanalysen aus einem *BioSAR*-Bericht

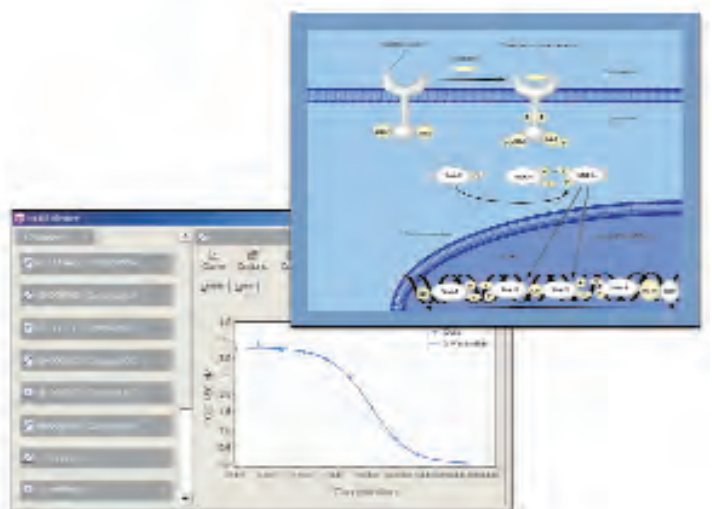
- Effektive Verwaltung von Daten aus komplexen biologischen Versuchen im Zusammenhang mit Wirkstoffoptimierung
- Skalierbares HTS & HTTS
- Verwendung von *BioDraw* zur Dokumentation zellulärer Abläufe

BioDraw

Die Darstellung und Präsentation von zellulären Pathways wird durch *BioDraw* leichter und effektiver. *BioDraw*, früher unter dem Namen Pathworks bekannt, bietet nun Biologen dieselben Vorteile, die Chemiker mit *ChemDraw* genießen: Zeitersparnis und eine professionellere Darstellung der Wissenschaft.

Mit *BioDraw* lassen sich biologische Pathways einfach und schnell zeichnen und mit Anmerkungen versehen. Dadurch wird ein unvergleichliches Maß an Einheitlichkeit und Genauigkeit erreicht. Häufig vorkommende Pathway-Elemente wie Membranen, Enzyme, Rezeptoren, DNA und Reaktionspfeile können über die *BioDraw*-Symboleiste eingefügt werden. *BioDraw* ermöglicht außerdem den Import von Bildern in den Formaten GIF, PNG oder JPEG. *BioDraw* bietet Biologen zahlreiche Möglichkeiten zum gemeinsamen Zugriff auf Zeichnungen und dazugehörige Daten. Benutzer können Daten in Microsoft Office-Anwendungen exportieren, um diese in Präsentationen und Förderungsanträge aufzunehmen, oder sie können die Daten als Bilddatei für die Vorlage als Journaldatei speichern.

▼ Zeichnen biologischer Pathways



▲ Grafische Darstellung von Versuchsdaten

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

BioSAR & BioDraw

Data Mining und Pathway-Zeichnungen

BioSAR

BioSAR Enterprise, ein strategisches Muss für jedes an ernsthaftem Data Mining interessierte Forschungsunternehmen, ist ein von einem Datenwörterbuch gesteuertes Strukturaktivitäts-Analyseprogramm. Der Benutzer kann im Wörterbuch registrierte Versuche auswählen oder nach interessanten Versuchen suchen.

Die Möglichkeiten von *BioSAR* ergeben sich dadurch, dass Forscher mit allen verfügbaren wissenschaftlichen Daten dynamisch arbeiten können, ohne dass IT-Support notwendig ist. Wenn ein Versuch beispielsweise erst einmal im Datenwörterbuch registriert ist, wird er automatisch in das leistungsfähige Analyse-Framework einbezogen. Durch Verkürzung der Zeit zwischen Frage und Antwort gibt *BioSAR* Forschern die Möglichkeit, neue Ideen zu entwickeln. Mit *BioSAR* erhalten Forscher die Kontrolle über die SAR-Berichterstellung.

BioSAR Enterprise ermöglicht es Forschern, benutzerdefinierte Berichte und Ansichten ihrer Daten zu erstellen. Der Benutzer entscheidet, was angezeigt wird, und *BioSAR* erledigt den Rest.

Die meisten SAR-Tools verfügen lediglich über eine tabellenbasierte Benutzeroberfläche. *BioSAR* bietet sowohl eine formularbasierte als auch eine tabellenbasierte Ansicht und kann zum Erstellen vielseitiger Analysen mit *BioViz* verwendet werden. *BioSAR* vereint die Perfektion einer leistungsfähigen Datenkatalogtechnik mit dem Wissen, das durch jahrelange enge Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern erworben wurde. Das Ergebnis ist eine SAR-Anwendung, die ebenso intuitiv wie leistungsstark ist. Die Sicherheit innerhalb von *BioSAR Enterprise* ist hochdetailliert. Es bestehen verschiedene Rollen für Administratoren, Publisher und Browser.

Administratoren können Versuche in das Datenkatalogsystem aufnehmen, Publisher erstellen Berichte und veröffentlichen diese. Browser können Daten abfragen und analysieren. Die meisten Data Mining-Tools enthalten einen Mechanismus zum Speichern von Abfragen, doch die Benutzeroberfläche zum Erstellen von Abfragen ist zu komplex. Bei *BioSAR* ist jede Versuchsgruppe ein vollständiger Bericht, bestehend aus Abfrageformular, Anzeigeformular und Tabellenansicht. Das Programm vereint die Benutzerfreundlichkeit einer *ChemFinder*- oder *ISIS*-Anwendung mit der Leistungsfähigkeit und Flexibilität einer kataloggesteuerten Data Mining-Software.

- *BioSAR* ist ein kataloggesteuertes Data Mining- und Strukturaktivitäts-Analyse-Programm
- *BioSAR* liefert eine Formular- und eine Tabellenansicht in einer einfachen, leistungsstarken Web-Benutzeroberfläche
- *BioViz* ermöglicht umfassende Analysen verschiedener Variablen in nur einem Schritt

- *BioSAR* ist ein kataloggesteuertes Data Mining- und Strukturaktivitäts-Analyse-Programm.
- *BioSAR* liefert eine Formular- und eine Tabellenansicht in einer einfachen, leistungsstarken Web-Benutzeroberfläche.
- Mit *BioDraw* können biologische Pathways, darunter häufig vorkommende Elemente wie Membranen, Enzyme, Rezeptoren und DNA, problemlos gezeichnet und mit Anmerkungen versehen werden.

BioViz

BioViz wandelt zusammen mit *ChemFinder* Zahlen aus einer Datenbank in Grafiken auf dem Bildschirm um. Sie können eine Gruppe von Verbindungen abrufen und durchsuchen bzw. die anzuzeigenden Daten auswählen – ganz gleich, ob es sich um biologische Testergebnisse in Oracle-Tabellen, automatisch berechnete physikalische Eigenschaftswerte oder Preise in einem Katalog handelt; *BioViz* generiert ein entsprechendes interaktives Fenster mit Scatterplot, Histogramm oder einer anderen Datengrafik.

Das Plotfenster, in *BioViz* für die Datenvisualisierung zuständig, zeigt zwei Variablen, die in Bezug zueinander in einem Scatterplot dargestellt sind. Jeder Punkt steht für eine Struktur aus der aktuellen Trefferliste. Wenn Sie die Liste verändern, beispielsweise indem Sie eine Suche durchführen, wird der Plot entsprechend aktualisiert und zeigt die neue Punktmenge an. Zur Auswahl einer Punktegruppe wird ein Rechteck darum gezogen. Ebenso kann die Ansicht ausschnittsweise vergrößert werden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Inventory, Registration, Verwaltung von chemischen und biologischen Substanzen

Chemische und biologische Substanzen

Inventory ist eine Anwendung, mit der Benutzer in Labors und Forschungszentren chemische und biologische Substanzen in einer Vielzahl von Kontexten verfolgen können. *Inventory* kann unter anderem in den Bereichen Laborreagenzien, Gefrierschränke/Regale, Plattenverwaltung, unternehmenseigene Verbindungen und Lager eingesetzt werden.

Das System verwaltet die Daten über kommerziell erworbene und intern hergestellte chemische Substanzen. Die Datenerfassung deckt alle Vorgänge von der Beschaffung oder Ersterzeugung der Substanzen bis hin zu Verbrauch und Entsorgung ab. *Inventory Enterprise* ist eine Oracle-basierte Anwendung des Softwarepakets *ChemOffice Enterprise*. Das Programm wird zur Verwendung mit anderen Modulen integriert. In *E-Notebook* wird es beispielsweise integriert, um Chargendaten bei der Herstellung zu verfolgen oder um bei der Planung einer Synthese den Bestand von Reagenzien im Lager zu überprüfen, in *BioAssay* zur Unterstützung einer Hochdurchsatz-Screening-Umgebung, in *Registration* zur Verfolgung unternehmenseigener Verbindungen, in *DocManager* zur Verknüpfung von Zertifikaten von Analysen, analytischen Berichten oder anderen mit Proben verbundenen Dokumenten, und in die Datenbank *ChemACX*, um Bezugsquelleninformationen zu neuen Verbindungen anzuzeigen.

Inventory Enterprise beinhaltet Platten-Handling und Benutzeroberflächen für Flüssigkeitschromatographen in HTS-Umgebungen, Gefrierschrank-/Regal-Layouts und Zielbestimmung für die Verwaltung biologischer Substanzen, vollständige Verwaltungsketten, Audit-Trails für GxP-Konformität, Anfrage-/Verteilungs-Workflows zur Verwendung in Herstellungs- und präklinischen Umgebungen sowie auf bestimmte Materialbereiche abgestimmte Funktionen.

- Reagenzien-Handling und Lager-Berichterstellung.
- Anfrage-/Verteilungs-Workflow für Lager- und GxP-Umgebungen.
- EH&S-Modul, Verknüpfungen zu MSDS-Datenblättern.
- Gefrierschrank-/Regal-Layout für biologische Materialien.
- Umfassendes Platten-Handling für HTS- und uHTS-Umgebungen.
- Vollständige Oracle SK für Systemintegration und -erweiterungen.

Inventory ist auch in zwei weiteren Versionen erhältlich: Workgroup und Desktop. *Inventory Workgroup* ist eine umfassende Client-SQL-Server-basierte Software zur Verwaltung von Lagern und Reagenzien. *Inventory Ultra* ist eine Desktop-Version. Diese basiert auf der Workgroup-Version, enthält jedoch zusätzlich die *ChemACX*-Datenbank.

- Registrierung und Verfolgung chemischer und biologischer Substanzen im gesamten Unternehmen
- Gefrierschrank-/Regal-/Platten-Handhabung – Zielbestimmung, Workflow und HTS-Unterstützung
- Unterstützt Strichcodes, Berichterstellung und Audit-Trails

Registration Enterprise

Registration Enterprise stützt sich auf ein robustes Datenmodell für reine Verbindungen, Ansätze, Verwaltung von Salzen, eine automatische Duplikatsprüfung und weist eindeutige Kennungen zu. Das Programm baut auf *Oracle Cartridge* von CS auf und handhabt Stereochemie (einschließlich der Fortschritte in der relativen Stereochemie), Tautomerisierung und Strukturnormalisierung für die Duplikatsprüfung. Durch Verwendung von *ChemScript* kann es auch die Aufstellung von Geschäftsregeln, wie die Orientierung um eine Matrix und die Normalisierung einer funktionellen Gruppe, durchführen. Verbindungen können einzeln über ein benutzerfreundliches Web-Formular, mithilfe eines Stapelladers, über *Inventory* oder direkt über *E-Notebook* eingegeben werden.

Bei der Registrierung der Verbindungen, ganz gleich, ob diese über die Web-Benutzeroberfläche, *E-Notebook* oder eine Batch-Datei erfolgt, werden diese mithilfe einer konfigurierbaren, stereoselektiven Duplikatsprüfung auf Einzigartigkeit überprüft und mit einer Registrierungsnummer versehen. Alle Informationen über die Verbindung, einschließlich der Testdaten und anderer Synthesen, können anhand der Registrierungsnummer verfolgt werden. So können Daten in *ChemOffice Enterprise* verknüpft werden. *Registration Enterprise* ist die einzige echte n-stufige Anwendung ihrer Art, die für Thin Clients und Thin Server entwickelt wurde. Benutzeroberflächen stellen eine direkte Verbindung zu *Inventory*, Batch-Datei-Registrierung und *E-Notebook* her. Oracle wird auf vielen Plattformen und Betriebssystemen unterstützt. Dank der rollenbasierten Sicherheit von Oracle bleiben Ihre Daten geschützt. Außerdem können mit Oracle alle chemischen und nicht-chemischen Daten direkt in Oracle-Tabellen gespeichert werden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com
FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com
ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft
www.cambridgesoft.com

DocManager & ChemFinder

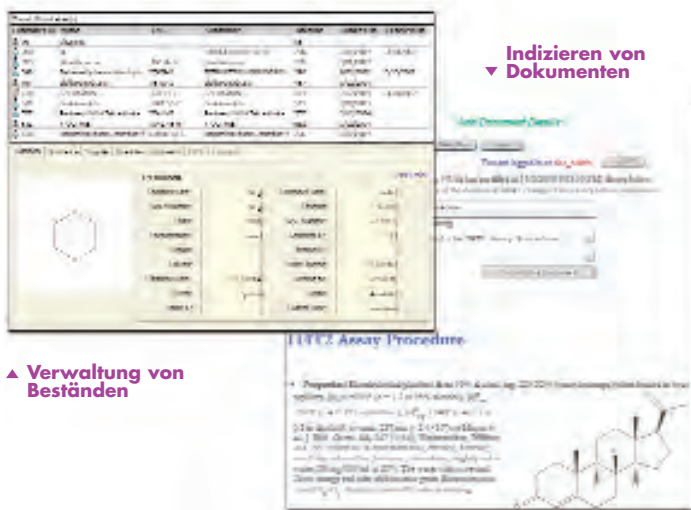
Gefrierschränke, GxP, Registrierung und Unternehmensinfrastruktur

Formulations & Mixtures

Rezepturwissenschaftler haben andere Herausforderungen zu bewältigen als Wissenschaftler, die mit einzelnen Molekülen arbeiten. Jedoch kommen viele Instrumente, die sie benötigen, aus dem pharmakologischen Bereich, in dem die Forschung am einzelnen Molekül der Normalfall ist. Wenn wir zum Beispiel an die wichtige Aufgabe der Registrierung von Substanzen denken, fällt sofort ins Auge, dass die meisten Systeme lediglich für die Registrierung einzelner Moleküle ausgelegt sind, meist aber nicht für die Registrierung von Rezepturen und Gemischen. CambridgeSoft hat ein System speziell für die Registrierungsanforderungen bei Rezepturen und Gemischen mit der Bezeichnung "Formulations & Mixtures" entwickelt.

ChemFinder Enterprise

ChemFinder Enterprise ist ein Mehrbenutzersystem, das für Standorte mit sehr umfangreicher Chemie- und Biologiedatenverarbeitung entwickelt wurde. *ChemFinder Enterprise* enthält ein eigenes Modul für die Arbeit mit lokalen und gemeinsam genutzten Datenbanken und wird auch mit *Oracle Cartridge* ausgeliefert, dem leistungsstarken von Oracle betriebenen Strukturmodul, das auf *ChemFinder*-Suchtechnologie basiert. *ChemFinder Enterprise* hat die gleiche benutzerfreundliche, formularorientierte Benutzeroberfläche wie die Desktop-Version, bietet darüber hinaus jedoch eine schnelle Direktverbindung zu Oracle und der robusten, skalierbaren *Oracle Cartridge*, die auf dem Server läuft.



- *DocManager* analysiert Word-, Excel- und PowerPoint- Dokumente, einschließlich freiem Text und Strukturen
- *ChemFinder* ist eng integriert in *BioSAR*, *BioViz* und *Oracle*
- Unterstützung für hochentwickeltes Formular-Layout und Design

DocManager Enterprise

- *DocManager* analysiert Word-, Excel- und PowerPoint-Dokumente, einschließlich freien Text und Strukturen.
- *DocManager* verfügt über eine Web-basierte Benutzeroberfläche und einen Dateiablageordner für schnelle Einträge.
- *Oracle Cartridge* ist kompatibel mit Linux, Solaris, AIX und Windows und enthält Struktursuche, Eigenschaftenvorhersagen und Nomenklatur.

Da auf *DocManager Enterprise* mit einem Web-Browser zugegriffen wird, werden die Funktionen der Standardsuchmaschinen noch erweitert: Volltextsuche und die intelligente Suche nach chemischen Strukturdaten in Text-, Microsoft Word-, Excel-, PowerPoint- und Adobe PDF-Dateien. Mit der Benutzeroberfläche von *DocManager Enterprise* können Dokumente ganz leicht einzeln weitergegeben werden. Hierzu ist eine Reihe von einfach zu bedienenden Web-Formularen vorgesehen. Wird ein neues Dokument hinzugefügt, erstellt *DocManager* einen Freitext-Index des Dokuments und extrahiert die chemischen Informationen in eine chemiebezogene Datenbank, die auch nach Substruktur durchsucht werden kann. Diese chemischen Informationen können sich entweder in *ChemDraw* oder *ISIS Draw* befinden.

Zu *DocManager Enterprise* gehört eine Funktion, mit der Benutzer auf Administratorebene viele Dokumente auf einmal laden können. Das System lässt sich so konfigurieren, dass einmalig ein Stapel von Dokumenten übertragen wird oder dass eine regelmäßige tägliche Übertragung erfolgt. Der Administrator bestimmt, zu welcher Zeit der Vorgang stattfindet und wo die Dateien zu finden sind. *DocManager Enterprise* nutzt die Suchintelligenz des *ChemOffice Enterprise*-Softwarepakets.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464900 EMAIL info@cambridgesoft.com
 FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com
 ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, *ChemDraw*, *Chem3D*, *BioOffice* & *BioDraw* sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft
www.cambridgesoft.com

Referenzstandards, Regulierte Materialverwaltung

Inventory Enterprise

Inventory Enterprise von CambridgeSoft ist eine Anwendung zur Nachverfolgung von Chemikalien, Reagenzien, Proben und Verbindungen in großen Chemie- und Pharmedizinlaboratorien mit mehreren Standorten. *Inventory Enterprise* ist eine Oracle-basierte Anwendung des Softwarepakets *ChemOffice Enterprise* für viele Anwender mit verschiedenen Containertypen, Regalen und Multi-Well-Platten.

Zu den verwalteten Einheiten des *Inventory*-Systems zählen Lagerort, Behälter und Substanzen. Siehe hierzu Abbildung 1 unten. Ein Lagerort ist als physisch existierender Ort definiert, an dem Behälter, Platten oder andere Lagerorte gelagert werden können. Ein Bestandsbehälter ist ein physisch existierender Behälter, in dem chemische Substanzen gelagert werden können. Eine Bestandssubstanz ist eine chemische Verbindung, ein Gemisch, eine Probe usw. *Inventory Enterprise* verwaltet und verfolgt eine unbegrenzte Anzahl verschiedener Lagerorte, Behälter und Substanzen.

Zur Darstellung der tatsächlich im Unternehmen verwendeten Behälter werden virtuelle Behälter angelegt. Jedem Behälter wird ein eindeutiger Strichcode zugewiesen, der mithilfe der *Inventory*-Benutzeroberfläche nach einer individuellen Vorlage ausgedruckt werden kann. Die Bestandsaktualisierung erfolgt nun ganz einfach durch Scannen von Strichcodes in das System und Anpassen von Parametern für einen oder mehrere Behälter. Auf diese Weise können Behälter nach Bedarf ein- und ausgecheckt, verschoben, aufgeteilt und mit anderen Behältern zusammengeführt werden. Hier eine Auswahl gebräuchlicher Behälter: Flaschen, Fläschchen, Röhrchen, Zylinder, Kisten, Regale, Multi-Well-Platten usw.

Multi-Well-Platten

Inventory Enterprise übernimmt die Verwaltung von Multi-Well-Plattendaten. Neben dem Erstellen, Speichern, Verschieben und Löschen von Platten gestattet die Anwendung das Erstellen von Tochterplatten, das Neuformatieren von Platten und die Verwendung von Plattenkarten. *Inventory* unterstützt außerdem Benutzer- und Maschinenoberflächen für diese Vorgänge (einschließlich das Lesen von Dateien von Flüssigkeitschromatographen). Mit *Inventory Enterprise* können Datendateien von anderen Computersystemen, wie Flüssigkeitsverteilern oder -chromatographen, MS Excel-Datenblätter usw., importiert werden, um eine automatische Aktualisierung der Daten in der *Inventory*-Datenbank zu ermöglichen.

- Anforderung/Verteilung/Referenzstandardmaterialien von der zentralen Gruppe an die Standorte
- Zertifizierung/Ablauf/Zertifikat der Analyse von Behältern und Aliquoten
- Erstellen/Verwalten der Behälterhistorie und Genealogie

Suchabfragen

Jedes einzelne Feld eines Datensatzes kann durchsucht werden. Die Anwendung umfasst eine Reihe von speziellen Formularen für das Durchsuchen des Bestands. Suchergebnisse werden in Listenform angezeigt und können mithilfe des Berichtsmoduls in Dokumente (PDF, RTF, HTML) exportiert werden.

Workflow-Unterstützung

Zu den unterstützten Benutzertransaktionen zählen u.a. die Möglichkeit der Anfrage, Verteilung, Änderung, Duplikation und Entsorgung von Einheiten im System. Diese und andere Transaktionen bilden einen wichtigen Bestandteil der individuell anpassbaren *Inventory*-Workflows.

Das könnte so aussehen: Der Benutzer meldet sich an, sucht die anzufordernden Substanzen und gibt eine Anforderung ins System ein. Die Anforderung wird entweder direkt durch die Änderung des Lagerorts der Substanz erfüllt oder dadurch, dass ein Aliquot entnommen und ein neuer Behälter der Substanz erstellt wird. Die neue Substanz bzw. der neue Behälter wird wie gehabt im System nachverfolgt und übernimmt alle wichtigen Eigenschaften des übergeordneten Behälters. Wenn der übergeordnete Behälter einer Qualitätskontrollenprüfung unterzogen wird, wirken sich die Ergebnisse auch auf die Eigenschaften des untergeordneten Behälters aus.

Mithilfe der Mehrfachauswahlfunktion kann der Benutzer mehrere Container auswählen und eine Transaktion auf allen Behältern gleichzeitig ausführen. Beispiele für Aktionen: Ein- oder auschecken, verschieben, als veraltet einstufen, löschen, aktualisieren. Wenn beispielsweise eine Anforderung ans System gestellt und von einem anderen Benutzer erfüllt wird (z. B. die Verteilung), erhält derjenige, der die Anforderung gestellt hat, auf Wunsch eine E-Mail-Benachrichtigung über den Fortschritt. Ebenso können Benutzer auf offene Anforderungen im System aufmerksam gemacht werden, damit diese erfüllt werden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

Inventory & GxP

Dokumentspeicherung, Chargendaten

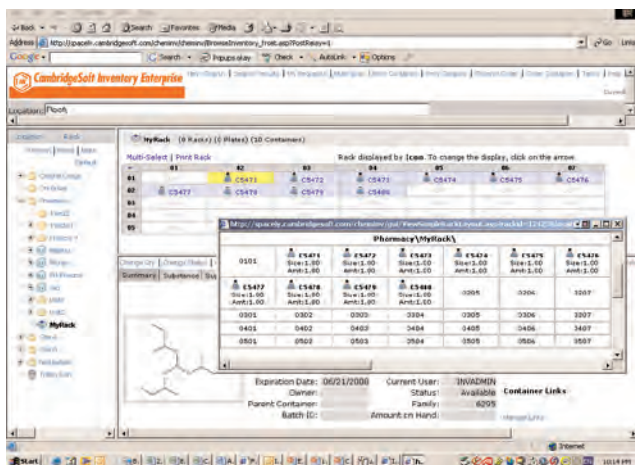
Konfliktlösung

Im Prozess der Konfliktlösung werden Duplikate im System automatisch markiert und korrigiert. Sie können auch jederzeit nach Duplikaten suchen. Wird ein Konflikt gefunden, so werden die entsprechenden Felder auf dem Bildschirm rot hervorgehoben. Der Benutzer hat dann die Möglichkeit, die bestehende Substanz auszuwählen, die konfliktverursachende Substanz zu bearbeiten oder ein Duplikat dieser Substanz zu erstellen, um den Konflikt später zu lösen.

Gedruckte Berichte und Etiketten

Über die Benutzeroberfläche von *Inventory* können das Drucken von Etiketten und Erstellen von Berichten in Auftrag gegeben werden. Das Berichtsmodule in *Inventory Desktop* und *Workgroup* ermöglicht mithilfe verschiedener Assistenten die schnelle Erstellung einfacher Vorlagen für Berichte und Etiketten, auf die dann unternehmensweit zugegriffen werden kann. Benutzer können für handelsübliche Etikettenbögen (z. B. Avery Dennison) vorlagenbasierte Etiketten erstellen. In *Inventory Manager* werden zur Beschleunigung in großem Umfang Strichcodes und webbasierte Benutzeroberflächen eingesetzt. Der hauptsächliche Gewinn ergibt sich jedoch aus der automatischen Generierung von Berichten und Warnmeldungen. Beispiele hierfür sind die Benachrichtigung aller Benutzer über Proben, die von einem bestimmten Standard abgeleitet sind und deren Status sich geändert hat sowie über abweichende Analyseergebnisse oder eine versäumte Nachzertifizierung.

▼ Inventory Enterprise



- Validiert für GxP-Umgebungen mit Audit-Trails, Behälterhistorie
- Speichern von Proben mit Batch-Nummern und Analysenzertifikaten
- Ermöglicht flexible Berichterstellung

Elektronische Datendateien

Neben dem Speichern, Verschieben und Entsorgen von Behältern ermöglicht die Anwendung die Neuformatierung von Platten und die Erstellung von Tochterplatten sowie die Integration in Flüssigkeits-Dispensern/-Handlern zur Neuformatierung von Platten aus Pipettenprotokolldateien.

Konformität

Die Einhaltung der Richtlinien der amerikanischen Gesundheitsbehörde FDA (Food and Drug Administration) in Unternehmen führt zur Automatisierung. Um diese Richtlinien zu erfüllen, müssen entsprechende Systeme sorgfältig implementiert werden. Grundlage des Systems sind die Kontrollmechanismen, die bei Systemen in regulierten Umgebungen erwartet werden: Prüfprotokolltabellen, Sicherheit und validierte Entwicklungsverfahren. Jede einzelne Transaktion sämtlicher Behälter im System wird nachverfolgt. Die Prüfungsberichte sind für eine einfache Darstellung konfigurierbar.

Dokumentenverwaltung

Um die Verwaltung der unzähligen Dokumente zu bewältigen, die in der Forschung und in regulierten Umgebungen entstehen, speichert CambridgeSoft die Dokumente sicher in Oracle. Dort werden sie nach chemischen und textbezogenen Merkmalen indiziert und durch die Sicherheitsfunktionen der Datenbank geschützt. Das Speichern der zugehörigen Dokumente in Oracle schützt die Systemintegrität derart, dass Sie eine Sicherung bis zu einem bestimmten Punkt durchführen können und dass die Dokumente und Daten zuverlässig miteinander synchronisiert sind. Außerdem sorgt diese Konfiguration für strikte Dokumentensicherheit, reduziert den IT-Overhead der mit der gemeinsamen Nutzung von Dateien einhergeht und stellt eine direkte Verknüpfung zu Inventory-Behältern her.

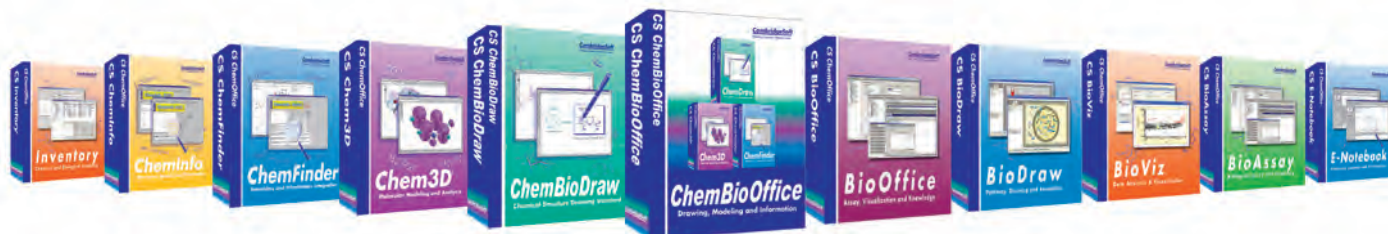
Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ANSCHREIBE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007



Unfasst

Software Pakete

ChemBioOffice Ultra
ChemOffice Ultra
ChemBioDraw Ultra
ChemDraw Ultra
ChemDraw Pro
ChemBio3D Ultra
BioOffice Ultra
BioDraw Ultra
BioAssay Ultra
Inventory Ultra
E-Notebook Ultra

Software	OS	ChemBioOffice Ultra	ChemOffice Ultra	ChemBioDraw Ultra	ChemDraw Ultra	ChemDraw Pro	ChemBio3D Ultra	BioOffice Ultra	BioDraw Ultra	BioAssay Ultra	Inventory Ultra	E-Notebook Ultra
*ChemDraw Ultra	Win/Mac	■	■	■	■	■						
*ChemDraw Pro	Win/Mac					■						
*ChemDraw Std	Win/Mac							■	■	■	■	■
*ChemDraw ActiveX/Plugin Pro	Win/Mac	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
*ChemBio3D Ultra	Win	■	■				■	■	■			
*ChemBio3D ActiveX Pro	Win	■	■	■	■	■		■	■	■		■
*ChemBio3D Pro	Win			■	■							
ChemBio3D Std	Win				■							■
ChemFinder Pro	Win	■	■	■				■	■			
ChemFinder Std	Win				■			■			■	■
*BioDraw Pro	Win/Mac	■	■	■	■			■	■	■	■	
*BioAssay Pro	Win	■							■		■	
BioViz Pro	Win	■						■	■		■	
*Inventory Pro	Win	■								■		■
*E-Notebook Ultra	Win	■	■						■			■
E-Notebook Pro	Win			■	■			■				
CombiChem/Excel	Win	■	■									■
ChemFinder/Office	Win	■	■	■	■				■			■
ChemFinder/Oracle	Win	■										
Ideal Compound Profiling	Win	■						■	■		■	
Struct=Name	Win/Mac	■	■	■	■	■						■
ChemDraw/Excel	Win	■	■	■	■	■						
ChemNMR & ClogP	Win/Mac	■	■	■	■	■						
Database Livelink	Win/Mac	■	■	■	■	■						
Structure Clean Up	Win/Mac	■	■	■	■	■	■					
Stoichiometry Grid	Win/Mac	■	■	■	■	■						
TLC Plate Tool	Win/Mac	■	■	■	■	■	■					
Polymer Draw	Win/Mac	■	■	■	■	■	■					
Sequence Tool	Win/Mac	■	■	■	■	■			■	■		
ChemScript	Win	■						■				
GAMESS	Win	■	■	■				■		■		
Gaussian Interface	Win	■	■					■		■		
Jaguar Interface	Win	■	■					■		■		
MOPAC Interface	Win	■	■					■		■		
*ChemACX Ultra (1 Year)	Win/Mac	■										■
*ChemINDEX Ultra	Win	■	■	■	■	■		■	■	■		■
ChemRXN, NCI & AIDS	Win	■	■	■	■	■		■	■	■		■

*Separat erhältlich Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

CambridgeSoft
www.cambridgesoft.com

Chem & Bio Office

Softwarestandard für Wissenschaftler

Das neueste
Softwarepaket
für Wissenschaftler

Chem & Bio Office ist ein leistungsstarkes Softwarepaket mit den Programmen *ChemDraw*, *Chem3D*, *ChemFinder* und *ChemACX* für Chemiker, *BioDraw*, *BioAssay* und *BioViz* für Biologen und *Inventory* und *E-Notebook* für alle Wissenschaftler. *Chem & Bio Office* ist für Microsoft Windows erhältlich.

Der Standard
erreicht ein neues
Level

Chem & Bio Draw beinhaltet *Struct<=>Name*, *ChemDraw/Excel* und *ChemNMR*, *BioDraw*, ein Tool für biologische Sequenzen, Verknüpfungen zu 3D-Strukturen, Stöchiometrietabellen, live verknüpfte Berechnungen chemischer Eigenschaften, ein DC-Platten-Tool etc. Das *ChemDraw ActiveX/Plugin* verleiht Browsern chemische Intelligenz und ermöglicht Datenbankabfragen und die Anzeige von Informationen.

Computergestützte
Chemie leicht
gemacht

ChemBio3D ermöglicht eine hochmoderne Visualisierung und Anzeige von Proteinstrukturen, Molekularoberflächen, Molekularorbitalen, elektrostatischen Potenzialen, Ladungsdichten und Drehdichten. *Chem3D* umfasst grundlegende Tools, wie 3D Molecular Overlay und Dihedral Driver, und verwendet MOPAC, Jaguar, Gaussian, GAMESS und Hückel (erweitert) zur Berechnung molekularer Eigenschaften. *ChemProp* berechnet Connolly-Oberflächen, Molekülvolumen und -eigenschaften, einschließlich ClogP, molarer Refraktion, kritischer Temperatur und kritischen Drucks.

Desktop- und
unternehmensweite
Suche

ChemFinder ist ein chemisch intelligenter Datenbankverwalter und ein Suchsystem. *ChemFinder* unterstützt die Datenbanksuche, Profilerstellung für Verbindungen, R-Gruppen-Analyse, Unterformulare, enge Integration in *ChemDraw/Excel* und *CombiChem/Excel*, statistische Analysen und Visualisierung durch *BioViz* in einer benutzerfreundlichen, formularbasierten Umgebung. *ChemFinder/Office* durchsucht Dokumente, Tabellen und Dateien nach chemischen Strukturen und Referenzen. *ChemFinder/Oracle* ermöglicht unternehmensweite Integration von Lösungen.

Das beste
Softwarepaket
für Biologen

BioOffice ist das neueste Softwarepaket zur Verwaltung, Analyse und Visualisierung biologischer Daten. *BioDraw* wird zum Zeichnen von Pathways und *BioAssay*, *BioFinder* und *BioViz* zur Datenanalyse verwendet. Enthält *Bio3D*, *Draw/Excel*, *CombiChem/Excel*, *Inventory* und *E-Notebook*.

Zeichnen von
Pathways

BioDraw unterstützt das Zeichnen biologischer Pathways und Anmerkungen. Eine Reihe anpassbarer Zeichen-Tools sind verfügbar, z. B. Membranen, DNA, Enzyme, Rezeptoren, tRNA, Ribosomen und ein Plasmidkarten-Tool.

Daten-Screening

BioAssay verwaltet Hoch- und Niedrigdurchsatz-Screening-Daten. Die Anwendung wurde für komplexe Wirkstoffoptimierungsexperimente entwickelt und unterstützt die schnelle Anpassung an biologische Modelle.

Daten-
Visualisierung

BioViz liefert automatisierte statistische Analysen, Kurvenanpassung und benutzerdefinierte Strukturaktivitätsberichte und verfügt über eine benutzerfreundliche Oberfläche zum Importieren, Anzeigen, Validieren und Darstellen chemischer und biologischer Daten.

Handhabung der
Reagenzien-
Nachverfolgung

Mit **Inventory** lassen sich Reagenzien und biologischen Substanzen nachverfolgen. Mit MSDE als Desktop-Datenbank können Sie Bestandsdaten organisieren, speichern und durchsuchen. *Inventory* ist in die *ChemACX*-Datenbank verfügbarer Chemikalien und in *ChemMSDX*-Sicherheitsdaten integriert und liefert Informationen zu Bezugsquellen und Beschaffung.

Effiziente
Notizbuch-
führung

E-Notebook bietet eine effektive und genaue Möglichkeit zum Verfassen von Notizbüchern. Es speichert MS Office-Dokumente, *ChemDraw*-Strukturen und -Reaktionszeichnungen sowie verwandte Daten in einem Notizbuch, das nach Text oder chemischen Strukturen durchsucht werden kann. Dabei können die einzelnen Seiten beispielsweise nach Projekt, Versuch oder anderweitigen Kriterien organisiert werden. Verwenden Sie *CombiChem/Excel* zur Erstellung von Bibliotheken.

Müßeloser Zugang
zu Informationen

Datenbanken enthalten *ChemINDEX* mit NCI-AIDS-Datenbanken. Die *ChemACX*-Datenbank enthält über 400 Kataloge führender Hersteller und die *ChemMSDX*-Datenbank enthält über 20.000 Sicherheitsdatenblätter für gebräuchliche Laborchemikalien.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280

UK +44 1223 464900

FAX +44 1223 464990

EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80

EU 00 800 875 20000

US 1 800 315-7300

WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

ChemDraw, Chem3D, Zeichnen von Strukturen und Molekülmodellierung

ChemBioDraw Ultra erweitert durch Hinzufügen von *BioDraw*, *ChemFinder*, *BioViz* und *E-Notebook* die Funktionalität von *ChemDraw Ultra*. Mit den *BioDraw*-Tools lassen sich ganz einfach hochwertige biologische Pathway-Illustrationen zeichnen und mit Anmerkungen versehen. Die Kombination der *BioDraw*-Tools mit *ChemDraw* und *E-Notebook* schafft eine hervorragende Grundlage für eine reibungslose Kommunikation zwischen Chemikern und Biologen.

ChemDraw Ultra fügt *Struct=Name*, *ChemDraw/Excel*, *ChemNMR*, *Stöchiometrietabellen*, *CLogP*, *tPSA* sowie die erweiterten Funktionen von *Chem3D Pro* und *ChemFinder Std* zur *ChemDraw Pro*-Anwendung hinzu. Mit Tools für umfassende Polymernotation, Erweiterung generischer Strukturen und Fragmentierung und einer modernen Benutzeroberfläche ist *ChemDraw* leistungstärker als je zuvor. Erstellt Strukturtabellen, identifiziert und bezeichnet Stereochemie, sagt anhand einer *ChemDraw*-Struktur NMR-Spektren vorher, leitet aus chemischen Namen die Strukturen und aus Strukturen die Namen ab und erstellt mehrseitige Dokumente und Poster.

ChemDraw Pro steigert Ihre Produktivität wie nie zuvor. Zeichnen Sie hochwertige Publikationen mit Strukturen, Reaktionen, chemischen Anfragen, Polymeren, relativer Stereochemie, generischen Strukturen, DC-Plattendarstellungen und einem Tool für biologische Sequenzen. Veröffentlichen Sie diese mit dem *ChemDraw*-Plugin im Internet. Geben Sie Atom- und Bindungseigenschaften und Stereochemie an und erstellen Sie auf diese Weise präzise Datenbankabfragen. Zeigen Sie Spektren, Strukturen und Anmerkungen auf derselben Seite an.

Struct=Name umfasst die führenden Methoden für die Umwandlung chemischer Strukturen in chemische Bezeichnungen und umgekehrt. Es kann für viele Arten von Substanzen verwendet werden, etwa für geladene Substanzen und Salze, in hohem Maße symmetrische Strukturen und viele Arten von anorganischen und organometallischen Substanzen. *Struct=Name* ist in zwei Varianten verfügbar: Als Batch-Anwendung und als interaktive Version in *ChemDraw Ultra*.

- Die verbesserte Funktion von *Chem Draw*, *Struct=Name*, erzeugt Namen für viele verschiedene Verbindungen
- Das Live-*ChemDraw*-Fenster der *Chem3D*-Anwendung ermöglicht eine gleichzeitige 2D- und 3D-Bearbeitung
- Chem3D bringt Molekülgrafiken und leistungsfähige Berechnungsmethoden in Workstation-Qualität auf Ihren Desktop-Computer

ChemDraw/Excel ermöglicht die Erstellung chemisch intelligenter Tabellen in der gewohnten Microsoft Excel-Umgebung. Sie können in der gewohnten MS Excel-Umgebung chemische Strukturen in Excel erstellen und bearbeiten, chemische Eigenschaften berechnen und Datenbanken durchsuchen.

ChemNMR kann für die genaue Vorhersage chemischer ¹³C- und ¹H-Verschiebungen verwendet werden. Die Struktur und das Spektrum werden mit den chemischen Verschiebungen angezeigt, die auf dem Molekül angezeigt werden. Das Spektrum ist mit der Struktur verknüpft, d. h. wenn Sie auf einen Peak im Spektrum klicken, wird das zugehörige Fragment auf dem Molekül hervorgehoben.

ChemBio3D Ultra bietet dem Chemiker Funktionen für die Visualisierung und die Molekülmodellierung für kleine Moleküle und Proteinstrukturen. Zu den Berechnungsmethoden für kleine Moleküle zählen Molecular Overlay und Dihedral Driver. Es enthält außerdem Schnittstellen zu den semiempirischen und Ab-initio-Berechnungspaketen MOPAC, Jaguar, Gaussian und GAMESS. Mit *Chem3D ActiveX* können hochwertige *Chem3D*-Grafiken im Internet angezeigt werden.

Chem3D Pro bringt molekulare Bilder und Anzeigen in Workstation-Qualität auf Ihren Desktop. Konvertieren Sie *ChemDraw*- und ISIS/Draw-Skizzen in 3D-Modelle. Zeigen Sie Moleküloberflächen, Orbitale, elektrostatische Potenziale, Ladungsdichten und Drehdichten an. Verwenden Sie den integrierten erweiterten Hückel zur Berechnung von Teil-Atomladungen und MM2 zum Ausführen von schnellen Energieminimierungen und Moleküldynamiksimulationen. Chem3D kann auch zur Vorhersage physikalischer Eigenschaften wie log*P*, Siedepunkt, Schmelzpunkt etc. verwendet werden. Stellen Sie Connolly-Oberflächenbereiche und Molvolumina optisch dar.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

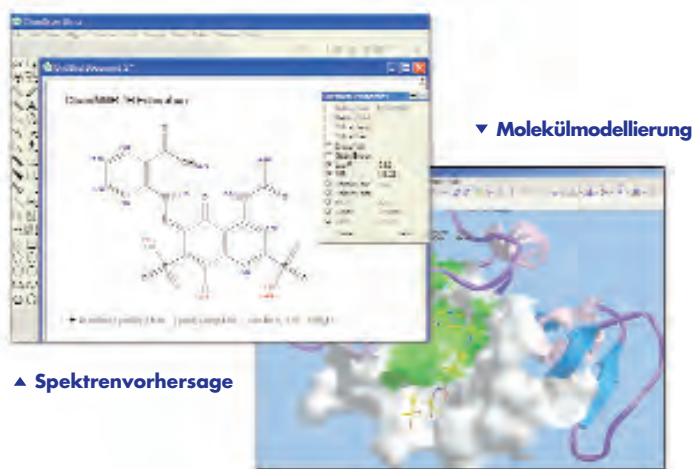
ChemFinder & ChemInfo

Struktursuche und wissenschaftliche Datenbanken

ChemFinder Ultra ist ein chemisch intelligentes Datenbankverwaltungssystem für chemische und biologische Daten. *ChemFinder Ultra* kann mit lokalen (MSDE-) oder gemeinsam genutzten (Oracle-) Datenbanken verwendet werden. In beiden Datenbanken wird über dieselbe benutzerfreundliche, formularorientierte *ChemFinder*-Benutzeroberfläche interagiert. Das in *ChemFinder Ultra* enthaltene *BioViz* enthält weitere Visualisierungsfunktionen, die dem Benutzer die Beziehungen zwischen biologischen Daten und chemischen Strukturen näher bringen sollen. Mit diesen Funktionen können Sie Strukturdaten und biologische Daten in unterschiedlichen Formaten darstellen, statistische Analysen durchführen, die Darstellungen anhand frei wählbarer Kriterien filtern, Listen und sich überschneidende Sätze in der Darstellung hervorheben, Histogramme der Datendistribution erstellen und vieles mehr.

Das in *ChemFinder Ultra* enthaltene *BioViz* liefert statistische Analysen und Visualisierungstools für Strukturdaten und biologische Daten. *BioViz* wandelt die in der *ChemFinder*-Datenbank enthaltenen Informationen in leicht verständliche Grafiken um, so dass sich Strukturaktivitätsbeziehungen auf einen Blick erkennen lassen. Mit *BioViz* können Sie mithilfe von Filtern oder Suchoptionen eine Gruppe von Verbindungen abrufen und ein interaktives Fenster generieren, in dem viele nützliche Informationen in grafischer Form dargestellt werden.

ChemFinder Pro ist eine schnelle, chemisch intelligente, relationale Datenbanksuchmaschine für den Desktop. Durch die Integration mit Microsoft Excel und Word werden Tabellen und Dokumente um chemische Such- und Datenbankfunktionen erweitert. Die Kompatibilität mit MDL ISIS-Datenbanken ist durch SD- und RD-Dateiimport/-export gegeben.



- *ChemFinder* zeichnet sich durch die verbesserte Verwaltung von Suchabfragen und Trefferlisten sowie durch die neue Eigenschaftengenerierung aus
- *ChemFinder* ist eng integriert in *Oracle Cartridge* von CambridgeSoft
- Durchsuchen von *ChemACX*- und anderen CambridgeSoft-Datenbanken nach wichtigen chemischen Informationen

Die Datenbank **ChemACX** umfasst 1 Million chemische Produkte aus 472 Herstellerkatalogen, die mit einer einzigen Abfrage nach Struktur, Substruktur, Namen, Synonym, Teilnamen sowie sonstigen Text- und numerischen Kriterien durchsucht werden können.

Die Datenbank **ChemMSDX** ist in *ChemACX* integriert und verfügt über mehr als 23.000 Material Sicherheits-Datenblätter (MSDS) im PDF-Format.

Die Datenbank **ChemINDEX** umfasst 100.000 Chemikalien, öffentliche NCI-Verbindungen, AIDS-Daten u.a.

Die Datenbank **NCI** umfasst 200.000 Verbindungen mit Dosisreaktionsdaten aus der Krebsmedizin.

Die Datenbank **AIDS** ist eine NCI-Datenbank für virenhemmende Verbindungen in AIDS-Medikamenten.

Die Datenbank **ChemRXN** ist eine Sammlung von 30.000 Reaktionen mit vollständigen Atom-Abbildungen, die aus der Chemieliteratur ausgewählt und verfeinert wurden. Sie enthält außerdem Reaktionen aus der ChemSelect-Datenbank von InfoChem und der ChemPrep-Datenbank von ISI.

ChemBioFinder.Com ist eine preisgekrönte Website mit Informationen und Internet-Links für über 100.000 Chemikalien. Der Benutzer kann die Website nach Namen oder Teilnamen durchsuchen, Strukturzeichnungen anzeigen oder das *ChemDraw ActiveX/Plugin* für Struktur- und Substruktursuchen verwenden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

BioAssay, BioViz, BioDraw, Biologische Versuche, Visualisierung und Pathways

BioAssay Ultra

BioAssay Ultra ist das Herzstück von *BioOffice* und ermöglicht flexibles Speichern, Abrufen und Analysieren biologischer Daten. *BioAssay* verwaltet problemlos Hoch- und Niedrigdurchsatz-Screening-Daten.

Die Software wurde für komplexe Wirkstoffoptimierungsexperimente entwickelt und unterstützt nicht nur das schnelle Setup von biologischen Protokollen, automatische Berechnungen und Kurvenanpassungen, sondern auch die Erzeugung von maßgeschneiderten Berichten zur Strukturaktivität. Mit *BioAssay* holen Sie sich alle diese Funktionen auf Ihren Desktop. *BioAssay Ultra* ist mit der MSDE-Datenbank kompatibel und stellt eine benutzerfreundliche Oberfläche für den Import, die Anzeige, Validierung und Darstellung biologischer Versuchsdaten zur Verfügung.

BioViz

Die Kombination von biologischen Daten und chemischer Struktur ist von größter Wichtigkeit für die Arzneimittelforschung. *BioViz* ermöglicht die visuelle und statistische Analyse strukturbezogener und biologischer Daten in *ChemFinder*:

Benutzer können strukturelle und biologische Daten durchsuchen und verschiedene Darstellungen wie Scatterplots oder Histogramme erzeugen. Die Darstellungen sind interaktiv und ermöglichen Ihnen die Auswahl von Teildatensätzen, die Ausführung statistischer Analysen, das Filtern der Darstellungen anhand von frei wählbaren Kriterien, die Hervorhebung von Listen und sich überschneidenden Sätzen in der Darstellung, die Erstellung von Histogrammen der Datendistributionen und vieles mehr.

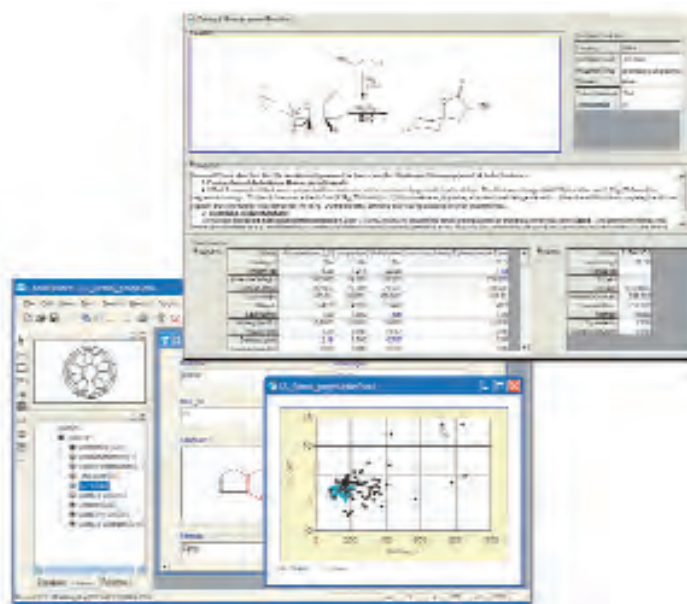
BioDraw

Über neue Erkenntnisse zu berichten und sie vorzustellen, sind Aufgaben, die jedem Biologen vertraut sind. Eine Vereinfachung und Effektivitätssteigerung in diesem Bereich wäre für alle Beteiligten von Vorteil. Die Kollegen aus der Chemie sparen mit *ChemDraw* seit Jahren sehr viel Zeit und können darüber hinaus die Ergebnisse wissenschaftlicher Arbeit wesentlich professioneller präsentieren. Dies ist mit *BioDraw* jetzt auch für Biologen möglich. Mit *BioDraw* lassen sich biologische Pathways einfach und schnell zeichnen und mit Anmerkungen versehen. Dadurch wird ein unvergleichliches Maß an Einheitlichkeit und Genauigkeit erreicht. Typische Zeichnungen biologischer Pathways enthalten zahlreiche Elemente, die sich mit der Standardsoftware für Präsentationen und

- *BioAssay* ermöglicht flexibles Speichern, Abrufen und Analysieren biologischer Daten
- *BioViz* liefert statistische Analysen und grafische Darstellungen der in das *ChemFinder*-Formular eingegebenen Daten
- *BioDraw* ermöglicht schnelles und einfaches Zeichnen von biologischen Pathways und das Hinzufügen von Anmerkungen an diese Pathways

Textverarbeitung schwer darstellen lassen. Häufig vorkommende Pathway-Elemente wie Membranen, Enzyme, Rezeptoren, DNA, tRNA und Plasmidkarten können über die *BioDraw*-Symbolleiste eingefügt werden. *BioDraw* wurde auf der Grundlage von *ChemDraw* entwickelt. Die Benutzer können die vielen verschiedenen Veröffentlichungsoptionen in *ChemDraw* nutzen, wie beispielsweise den Import und Export von Bildern in den Formaten GIF, PNG oder JPEG. Darüber hinaus ist durch die Integration von *ChemDraw* und *BioDraw* in *Chem & Bio Draw* für eine hervorragende Kommunikation zwischen Chemikern und Biologen gesorgt.

▼ Notebook-Seiten



▲ Datenvisualisierung

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

Inventory & E-Notebook

Materialmanagement und elektronische Journalführung

Inventory Ultra

Inventory Ultra ermöglicht es dem Benutzer, chemische und nicht-chemische Bestandsdaten für Labors und Forschungszentren zu verfolgen. Das System verwaltet die Daten über kommerziell erworbene und intern erzeugte chemische Substanzen. Die Datenerfassung deckt alle Vorgänge von der Beschaffung oder Ersterzeugung der Substanzen bis hin zu ihrem Verbrauch und ihrer Entsorgung ab. *Inventory Ultra* ist ein MSDE-basiertes Produkt und enthält die *ChemACX*-Datenbank mit über 450 Katalogen mit chemischen Reagenzien.

Die drei wichtigsten Größen im *Inventory*-System sind der Lagerort, der Behälter und die Substanz. Benutzer oder Administratoren konfigurieren ein kaskadierendes Lagerortmodell, das sämtliche Lagerorte innerhalb des Unternehmens abbildet. Zur Darstellung der tatsächlich in Ihrer Einrichtung vorhandenen Behälter werden virtuelle Behälter angelegt. Jedem Behälter wird ein eindeutiger Strichcode zugewiesen, der mithilfe der *Inventory*-Benutzeroberfläche nach einer individuellen Vorlage ausgedruckt werden kann.

In jedem Behälter ist eine Substanz gelagert. In zusätzlichen Textfeldern können weitere chemische Informationen (z. B. Lösungsmittel) eingegeben werden. Darüber hinaus können auch benutzerdefinierte Felder angelegt werden. Mithilfe einer vom System verwalteten internen Datenbank für chemische Strukturen können die vorhandenen Substanzen nachverfolgt werden. In der Datenbank sind spezifische Substanzen abgelegt, die wiederum mit Bestandsbehältern assoziiert werden können. Außerdem hält das System eine erweiterte Suche nach doppelten Einträgen bereit. Jedes einzelne Feld eines Datensatzes, inklusive chemischer Struktur, Molekülformel und Molekulargewicht, kann durchsucht werden.

Die Anwendung umfasst eine Reihe von speziellen Formularen für das Durchsuchen des Bestands. Suchergebnisse werden in Listenform angezeigt und können mithilfe des Berichtsmoduls in Dokumente (PDF, RTF, HTML) exportiert werden. Auf der Benutzeroberfläche von *Inventory* können das Drucken von Etiketten und das Erstellen von Berichten in Auftrag gegeben werden. Die Berichtsanwendung in *Inventory* ermöglicht mithilfe verschiedener Assistenten die schnelle Erstellung einfacher Vorlagen für Berichte und Etiketten, auf die dann unternehmensweit zugegriffen werden kann.

Inventory Pro

Inventory Pro verfügt über dieselben Funktionen wie *Inventory Ultra* von CambridgeSoft, lediglich die *ChemACX*-Datenbank von CambridgeSoft ist nicht enthalten.

- *Inventory* dient zur Verfolgung chemischer Substanzen und Reagenzien für Labore und Forschungszentren
- *Inventory* erhält eine eigene interne Datenbank mit chemischen Strukturen, die über eine erweiterte Duplikatsprüfung verfügt
- *E-Notebook* speichert Microsoft Office-Dokumente, *ChemDraw*-Strukturen, Reaktionszeichnungen und verwandte Daten in einem praktischen, durchsuchbaren Format

E-Notebook Ultra

E-Notebook Ultra ist ein effizientes, genaues Programm zur Speicherung von Labornotizbuch-Informationen. Microsoft Office-Dokumente, *ChemDraw*-Strukturen, Reaktionszeichnungen und zugehörige Daten werden in einem elektronischen Notizbuch abgelegt, das Sie anschließend nach Text oder einer chemischen Struktur durchsuchen können. Dabei können die einzelnen Seiten mit der MSDE-Datenbank beispielsweise nach Projekt, Versuch oder anderweitigen Kriterien organisiert werden. *CombiChem/Excel* legt kombinatorische Bibliotheken an. *E-Notebook* ist genau so konfiguriert, wie sich das ein Chemiker für sein Notizbuch wünscht. Reaktionen können mühelos in die Reaktionsvorlage gezeichnet werden. Dazu wird entweder eine der vorbereiteten Reagenzien aus der umfangreichen Liste gewählt oder man zeichnet sich die Chemikalie selbst. Häufig verwendete Reagenzien können in einem separaten Ordner gespeichert werden, sodass schnell darauf zugegriffen werden kann. Hervorragend ist auch der Abschnitt zur Ablaufdokumentation. Dieser enthält vorverfasste Satzglieder zum Versuchsablauf. Die Namen der an der Reaktion beteiligten Reagenzien werden einfach eingefügt. Darüber hinaus können weitere Daten (z. B. Spektren) problemlos eingefügt werden, aber auch Word- oder Excel-Dokumente.

CombiChem/Excel

CambridgeSoft gibt Chemikern die Tools zur Hand, die sie für die Versuchsplanung im Bereich der kombinatorischen Chemie benötigen. *CombiChem/Excel* stellt zusätzliche Funktionen für Arbeiten im Bereich der kombinatorischen Chemie zur Verfügung. Benutzer können ausgehend von einer Reaktion und Reagenzienlisten die resultierenden Produkte berechnen. Darüber hinaus können alle Produkte eines bestimmten Reagens oder auch alle Reagenzien eines bestimmten Produkts angezeigt sowie Platten-Layouts für Reagenzien und Reaktionen erstellt werden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

The Merck Index, NCI, AIDS,

Wissenschaftliche Referenz, chemische Reaktionen und Patente

ChemBioFinder Gateway

ChemBioFinder Gateway ermöglicht das Durchsuchen sämtlicher CambridgeSoft-Datenbanken mit einer einzigen Abfrage. Durchsuchen Sie Datenbanken wie *The Merck Index*, *R&D Insight for Chemists*, *Traditional Chinese Medicines* mit nur einem Klick auf die Suchschaltfläche. Alle Ergebnisse führen Sie direkt zu den jeweiligen Datenbanken, wo Sie weitere Informationen finden.

The Merck Index

Die für ihre Integrität, Detailliertheit und Langlebigkeit berühmte Datenbank *The Merck Index* enthält über 10.000 Monographien von Arzneimitteln, Chemikalien und anderen biologisch aktiven Molekülen. Zu den typischen darin enthaltenen Informationen zählen Angaben zur Substanz und ihren Derivaten, gängige und systematische Namen sowie Handelsnamen, Marken und zugehörige Unternehmen, CAS-Registrierungsnummer, physikalische und toxikologische Daten, therapeutische und kommerzielle Anwendungsbereiche, Literaturverweise sowie chemische Strukturen, Formeln und Molekulargewichte. Die elektronische Version enthält archivierte Monographien aus vorherigen Auflagen und wird zweimal jährlich aktualisiert.

R&D Insight/Chemists

Informationen zu aktuellen Daten für Arzneimittel im Entwicklungsstadium sind besonders für diejenigen wichtig, die in Pharmaunternehmen und im Gesundheitswesen in den Bereichen Forschung und Entwicklung sowie Lizenzvergabe und Marketing tätig sind. *R&D Insight for Chemists*, ein Produkt, das aus der Zusammenarbeit von Wolters Kluwer Health und CambridgeSoft entstand, vereint die Leistungsfähigkeit der Suche nach chemischen Strukturen mit einer Fülle von Daten für Arzneimittel im Entwicklungsstadium und verhilft den Abonnenten zu einem Wettbewerbsvorteil, wenn sie Entscheidungen treffen, die die Richtung ihrer Forschung beeinflussen. Die Datenbank wird wöchentlich aktualisiert. Benutzer können in mehr als 20.000 Verbindungen nach Struktur, Substruktur, Namen, Teilnamen und Synonymen suchen.

Patent Database (Patentdatenbank)

Mit den leistungsstarken Suche- und Analyse-Tools von CambridgeSoft können Forscher, Chemiker und Patentanalysten jetzt mühelos Patente nach chemischen Strukturen durchsuchen. Das neue *Patent Database*-Portal von CambridgeSoft, das zusammen von CambridgeSoft und Reel Two entwickelt wurde, ermöglicht Benutzern den Zugang zu allen in einem Patent erwähnten chemischen Substanzen und das Durchsuchen von Patenten nach Strukturen, Schlüsselwörtern oder chemischen Bezeichnungen.

- *The Merck Index* enthält enzyklopädische Referenzen für über 10.000 Chemikalien, Arzneimittel und biologische Substanzen
- *R&D Insight for Chemists* enthält Informationen zu mehr als 20.000 Arzneimitteln in unterschiedlichen Entwicklungsstadien aus über 1.700 Quellen weltweit
- Alle elektronischen Datenbanken werden aktualisiert, enthalten Informationen, die nicht in gedruckter Form erhältlich sind und können nach Strukturen, Text und numerischen Bereichen durchsucht werden

Traditional Chinese Medicines

Mit der *Traditional Chinese Medicines*-Datenbank haben Benutzer Zugang zu einer riesigen Fülle an Wissen. Die Datenbank enthält Monografien über 10.458 chemische Substanzen, die wiederum aus 4.625 natürlichen Quellen isoliert wurden, die in traditionellen chinesischen Heilmitteln zum Einsatz kommen. Die Monografien selbst enthalten Bioaktivitätsdaten zu einem Großteil der Verbindungen, Wirkungen und Indikationen der Medikamente, englische, lateinische und chinesische Bezeichnungen der natürlichen Quellen sowie über 2.000 Verweise.

ChemINDEX, NCI, AIDS und Cancer

Seit 1995 arbeiten Wissenschaftler mit der preisgekrönten *ChemFinder.Com*-Datenbank. Die Daten in *ChemFinder.Com* wurden jetzt als *ChemINDEX* in *ChemOffice* integriert. *ChemINDEX* enthält Daten zu über 75.000 Verbindungen mit Strukturen, Namen und Synonymen, physikalischen Eigenschaften und Internet-Links. Des Weiteren wurden drei informative Datenbanken mit den NCI- und AIDS-Datenbanken, einer Sammlung von mehr als 200.000 durch das National Cancer Institute erforschten Molekülen, zu einer leistungsstarken Anwendung kombiniert.

ChemReact und ChemSynth

Diese Reaktionsdatenbank-Sammlungen der InfoChem GmbH enthält wichtige Informationen zu chemischen Reaktionen, die zwischen 1974 und 2001 in der Literatur veröffentlicht wurden. Die größte Datenbank ist die *ChemReact500* mit fast 500.000 Reaktionen, die besonders im Hinblick auf synthetische Nutzbarkeit ausgewählt wurden. *ChemSynth* enthält einen Teil der Reaktionen in der *ChemReact500*-Datenbank, die aufgrund ihrer hohen Ausbeute von über 50% und ihrer mehrmaligen Erwähnung in führenden Zeitschriften ausgewählt wurden. *ChemReact68* enthält 68.000 Reaktionen, die ausgewählt wurden, weil ihre Ausbeute bei über 50% liegt und sie mehr als fünf Mal in führenden Zeitschriften erwähnt wurden.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft[®]
www.cambridgesoft.com

ChemACX & Sigma-Aldrich MSDS

Verfügbare Chemikalien und Materialsicherheits-Datenblätter

ChemACX-Datenbank

Das Durchblättern chemischer Kataloge ist eine Zeitverschwendung für jeden Forscher. Die ChemACX-Datenbank löst dieses Problem. Sie enthält ein umfassendes Tool zum Durchsuchen chemischer Quellen und zum direkten Erwerb. Der Schwerpunkt liegt dabei auf aktuellen Informationen. So können Sie mit ChemACX Chemikalien schnell, effizient und bequem bestellen, ohne dicke Kataloge wälzen zu müssen. Der Zugriff auf die Datenbank kann vom Desktop und von anderen Unternehmungsumgebungen aus erfolgen. Sie enthält fast 500 Kataloge der wichtigsten Anbieter, von Alfa Aesar und Aldrich bis hin zu TCI und Zeneca und viele andere.

Sigma-Aldrich MSDS

Umweltschutz, Gesundheit und Sicherheit (EH&S) spielen in modernen Forschungsinstituten eine wichtige Rolle. Ein Hauptdokument, das bei der Verwaltung der Umweltschutz-, Gesundheits- und Sicherheitsaufgaben dienlich ist, ist das "Material Safety Data Sheet" (MSDS, Datenblatt für Materialsicherheit). In jedem Unternehmen gibt es mehrere Mitarbeitergruppen, die auf die MSDS-Dokumente zugreifen müssen. Jeder, der mit Chemikalien arbeitet, muss sich über die korrekte

- ChemACX enthält über 1 Million Produkte aus fast 500 Katalogen und kann nach Strukturen durchsucht werden
- ChemACX und Sigma-Aldrich MSDS werden halbjährlich aktualisiert, um die Anforderungen von Wissenschaftlern zu erfüllen
- Suche nach Namen, Synonym, Teilnamen, Formel und anderen Kriterien

Handhabung, Lagerung, Entsorgung und Notfallmaßnahmen im Klaren sein. Die MSDS-Sammlung von Sigma-Aldrich hilft bei der Erfüllung dieser vielfältigen Anforderungen. Die Datenbank enthält über 130.000 MSDS-Dokumente für die Produkte der Sigma-Aldrich-Katalogfamilie (Sigma, Aldrich, Fluka, Supelco und Riedel-de Haën) im HTML-Format. Mit einem Klick auf einen Hyperlink können Benutzer die MSDS-Dokumente von Sigma-Aldrich in ihrem bevorzugten Browser anzeigen. Diese Daten sind in die ChemACX-Datenbank und andere Unternehmensanwendungen integriert.

Drugs: Synonyms and Properties

"Drugs: Synonyms and Properties" von Ashgate beschreibt umfassend 8.000 Arzneimittel, die derzeit weltweit eingesetzt werden. Eine zentrale Komponente dieser Referenz ist die umfangreiche Zusammenstellung von Synonymen. Die elektronische Version enthält fast 70.000 Synonyme und Handelsnamen, die in der Druckversion keinen Platz mehr fanden. Diese Daten sind auch als SD-Datei verfügbar, damit sie besser in der *In-silico*-Forschung eingesetzt werden können.

Nanogen Index

Der Nanogen Index enthält Daten zu über 1.000 Pestiziden und sonstigen Umweltgiften. Die Datenbank ist die aktuelle und maßgebliche Quelle für Informationen zu sämtlichen Pestiziden und landwirtschaftlichen Chemikalien, die weltweit eingesetzt werden und die sich aktuell in der Forschung und Entwicklung befinden, sowie zu Verbindungen, die bereits auf dem Markt waren oder einen Entwicklungsstatus erreicht haben. Datenfelder enthalten chemische Strukturen und SMILES-Strings, Namen (CAS, IUPAC, Handelsnamen), die verschiedenen Registrierungs-codes für die Verbindungen (RTECS, EINECS/ELINCS, CAS, US EPA, CA DPR, Tarife usw.), Codes für gefährliche Substanzen und Sicherheits-codes, den Hersteller und die Verwendung.

Wissenschaftliche Datenbanken

REFERENZDATEN

The Merck Index	11.000 Monographien
R&D Insight/Chemists	20.000 Substanzen
ChemINDEX-Datenbank	75.000 Substanzen
NCI, AIDS und Cancer	270.000 Substanzen
Traditional Chinese Medicines	10.000 Substanzen
Drugs: Synonyms & Properties	8.000 Arzneimittel
Nanogen Index	1.000 Pestizide
Medicinal Chemistry	540.000 Substanzen

DATEN ZU BESCHAFFUNG UND SICHERHEIT

ChemACX-Datenbank	480 Kataloge
ChemMSDX-Datenbank	23.000 MSDS
Sigma-Aldrich MSDS	130.000 MSDS

DATEN ZU REAKTIONEN UND SYNTHESEN

ChemReact500	450.000 Reaktionen
ChemReact68	68.000 Reaktionen
ChemSynth	178.000 Reaktionen

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com
FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice & BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Entwicklung, Bereitstellung, Kundenspezifische Entwicklung und Systemimplementierung

Wenn Prozesse und Technologien keine Einheit bilden, büßen Unternehmen Effizienz und Entscheidungsfähigkeit ein. Bei den Professional Services von CambridgeSoft werden Technologien verwendet, die Prozesse verbinden, Systeme integrieren und bei der strategischen Informatikplanung helfen.

Planung von Informatiklösungen

Strategische und betriebliche Planung

Eine genaue Überprüfung der Entdeckungs- und Entwicklungsprozesse zusammen und der Schnittstellen zwischen Mensch und System bilden die Grundlage für die erfolgreiche Nutzung von Technologien.

- Analyse aktueller Labor- und Technologie-Workflows
- Analyse des aktuellen Stands der wissenschaftlichen IT-Infrastruktur, einschließlich vorhandener Technologiearchitektur und betrieblicher Prozesse
- Überprüfung der strategischen Ziele und Identifizierung möglicher Hindernisse
- Erarbeitung eines mehrstufigen Plans für den Technologiewechsel

Bedarfsanalyse und Konzeptnachweis

Durch unsere langjährige Erfahrung im Forschungs- und Entwicklungssektor können Sie sich darauf verlassen, dass CambridgeSoft Ihre Anforderungen versteht. Mit dem Prototypen-Prozess lässt sich die funktionale und technische Durchführbarkeit potenzieller technischer Lösungen genau überprüfen. Der Prozess bietet eine Grundlage für die künftige Entwicklung und die Bereitstellung einer maßgeschneiderten Lösung. Die Benutzer erhalten wertvolle Einblicke in die Art und Weise, wie das System Sie bei der Realisierung Ihrer Produktivitätsziele auf Mitarbeiter- und Arbeitsgruppenbasis unterstützt.

Migration der Altsysteme

Altsysteme mit privater Datenstruktur und -architektur können beim Wechsel zu neuen Technologien ein Hindernis darstellen. Die Kundenberater von CambridgeSoft haben umfassende Erfahrungen mit diesen Systemen und können chemische und biologische Daten, Geschäfts-Workflows und andere Elemente alter Informatiktechnologien erfolgreich in neue Technologien migrieren.

21CFR Part 11-Konformität und GxP-Validierung

Als wichtigen Bestandteil bei der Erstellung von 21CFR11- und GxP-konformen und GxP-validierten Anwendungen bietet CambridgeSoft folgende Dienstleistungen an:

- Software- und Prozessüberprüfung
- Entwicklung von konformen Systementwurfsspezifikationen
- Erstellung von IQ-/OQ-/PQ-Dokumenten
- Erarbeitung von Testplänen und Validierungsmatrizen
- Sicherstellung der Systemkonformität mit den Funktionsvorgaben

Bei der kundenspezifischen Entwicklung erarbeitet CambridgeSoft gemeinsam mit Ihrem Team ein System, das genau auf Ihre Erfordernisse abgestimmt ist und unseren Qualitätsstandards für die Softwareentwicklung entspricht. Wir erfüllen Ihre Anforderungen zuverlässig innerhalb vorgegebener Zeitpläne und Budgets.

Produktentwicklung

Entwicklungsberatung

Bei der kundenspezifischen Entwicklung erarbeitet CambridgeSoft gemeinsam mit Ihrem Team ein System, das genau auf Ihre Erfordernisse abgestimmt ist und das unseren Qualitätsstandards für die Softwareentwicklung entspricht. Wir erfüllen Ihre Anforderungen zuverlässig innerhalb vorgegebener Zeitpläne und Budgets.

Systemintegration

Für die Prozessverbesserung ist oft die Integration von Systemen erforderlich, die für bestimmte Arbeitsbereiche entwickelt wurden. CambridgeSoft hat verschiedene E-Notebook-, Registrierungs- und Bestandssysteme sowie Systeme biologischer Versuchsdaten in verschiedene Umgebungen integriert. Ganz gleich, ob es sich bei den Systemen um Produkte von CambridgeSoft oder eines Drittherstellers oder um betriebseigene Lösungen handelt, CambridgeSoft kann diese Systeme vereinen und so die Geschäftsvorgänge optimieren und die Laboreffizienz und die Fähigkeit zur Entscheidungsfindung verbessern.

Konfiguration der Anwendungen

Sie haben bereits erkannt, welche Vorteile Ihr Unternehmen aus der Einführung einer CambridgeSoft-Anwendung ziehen könnte, möchten diese jedoch für eine bestimmte Umgebung anpassen. Unser professionelles Serviceteam nimmt benutzerspezifische Änderungen mithilfe von Markt-Add-Ins oder anderen Veränderungen vor, die heute und in der Zukunft optimale Ergebnisse erzielen.

Systemimplementierung

Installation und Konfiguration

CambridgeSoft hat eine Methodik zur Systemimplementierung getestet, die aus einer Überprüfung der IT-Architektur, des Geschäfts-Workflows und der Prozesse in Bezug auf bestimmte wissenschaftliche Bereiche, der Prozessintegration sowie Wartungsrichtlinien besteht. CambridgeSoft befolgt bei der Installation und Konfiguration von Systemen die Vorgaben dieser Methodik genau. Dadurch wird gewährleistet, dass diese Systeme einfacher zu warten sind und sich einfacher auf Änderungen im wissenschaftlichen oder geschäftlichen Workflow anpassen lassen, die mit wachsender Erfahrung in diesen Gebieten auftreten.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 **UK** +44 1223 464900 **FAX** +44 1223 464990 **EMAIL** info@cambridgesoft.com

FR +33 1 70 71 98 80 **EU** 00 800 875 20000 **US** 1 800 315-7300 **WWW** www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation | 1 Signet Court | Swanns Road | Cambridge, CB5 8LA | UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

CambridgeSoft
www.cambridgesoft.com

Schulung und Support

Schulungen und technischer Support

Systemoptimierung

Die CambridgeSoft-Implementierungsteams sorgen Hand in Hand mit Ihren eigenen Fachleuten dafür, dass das neue System die erwartete hohe Leistung bringt. Unabhängig davon, ob es sich um Systeme, Netzwerke, Anwendungen oder Datenbanken handelt – der Name CambridgeSoft steht für Performance auf höchstem Niveau.

Beta- und Pre-Release-Programme

Unsere Beta- und Pre-Release-Programme sind darauf ausgelegt, Ihre Produktivität mithilfe unserer Produkte zu maximieren, Ihnen die neuesten Technologien bereitzustellen sowie Ihnen das nötige Wissen zu liefern. Mithilfe Ihrer Rückmeldungen kann CambridgeSoft ständig seine Produkte verbessern.

Vorab-Bewertung von Software

Es empfiehlt sich, eine Anwendung zunächst im kleineren Rahmen zu testen, bevor sie im gesamten Unternehmen eingeführt wird. CambridgeSoft unterstützt Sie bei der Planung dieser Testphase, richtet die Anwendung ein und erfasst Feedback hinsichtlich Systemdesign, APIs und Spezifikationen.

Schulung

Bei vielen Systemimplementierungen wird die Schulung von Benutzern, Administratoren und Hotline-Mitarbeitern leider vernachlässigt. Dabei können Investitionen in eine gründliche Systemschulung sich für das jeweilige Unternehmen mehr als bezahlt machen. CambridgeSoft bietet eine Reihe umfassender, benutzerorientierter Schulungs-Services an.



Durch die Verwaltung des IT-Bereichs durch CambridgeSoft kann sich Ihr Unternehmen voll auf seine wissenschaftliche Arbeit konzentrieren, während CambridgeSoft die entsprechende Technologie-Umgebung plant, implementiert und verwaltet.

Systemverwaltung

Verwaltung des IT-Bereichs

Sie können sich darauf verlassen, dass die geeigneten Fachleute, Prozesse und Technologien zum Einsatz kommen, um Ihrem Unternehmen das erforderliche Serviceniveau bereitzustellen. Gegen eine monatliche Gebühr stellt CambridgeSoft Ihnen die IT-Umgebung und die fachkundigen Mitarbeiter bereit, die Sie für eine maximale Produktivität benötigen. Dieses Serviceangebot ermöglicht Ihren Mitarbeitern, sich auf ihre wissenschaftliche Arbeit zu konzentrieren. CambridgeSoft übernimmt für Sie die Planung, Implementierung und Verwaltung Ihrer IT-Infrastruktur.

Systembetreuung

Wir bieten einen Betreuungsservice an, der es unseren Kunden ermöglicht, unsere hochentwickelten Unternehmensanwendungen von jedem Standort aus täglich 24 Stunden über das Extranet zu nutzen. Mit dieser Dienstleistung können unsere Kunden die Verantwortung für den Betrieb von Anwendungen und die IT-Infrastruktur-Verwaltung an CambridgeSoft übertragen, wodurch unsere Kunden mehr Zeit für die Wissenschaft, Forschung, Entdeckung und Entwicklung aufwenden können.

Ultra-Serviceprogramm

Das Ultra-Serviceprogramm von CambridgeSoft umfasst persönlichen Service auf höchstem Qualitätsniveau für unsere Kunden. Die wissenschaftlichen Supportmitarbeiter von CambridgeSoft stehen Unternehmen sowohl telefonisch als auch per E-Mail zur Verfügung. Sie sind die Ansprechpartner für folgende Themen:

- Softwarenutzung und -installation
- Produktkompatibilität und -interoperabilität
- Fehlerlokalisierung mittels Ferndiagnose
- Softwarekonfiguration
- Planung von Updates und Upgrades
- Problemlösung

Technischer Support und Remote DBA-Services

Technischer Support und Remote DBA-Services für Oracle und SQL Server runden unserer Serviceangebot im Verwaltungsbereich ab.

Änderungen vorbehalten.

DE +49 69 2222 2280 UK +44 1223 464900 FAX +44 1223 464990 EMAIL info@cambridgesoft.com

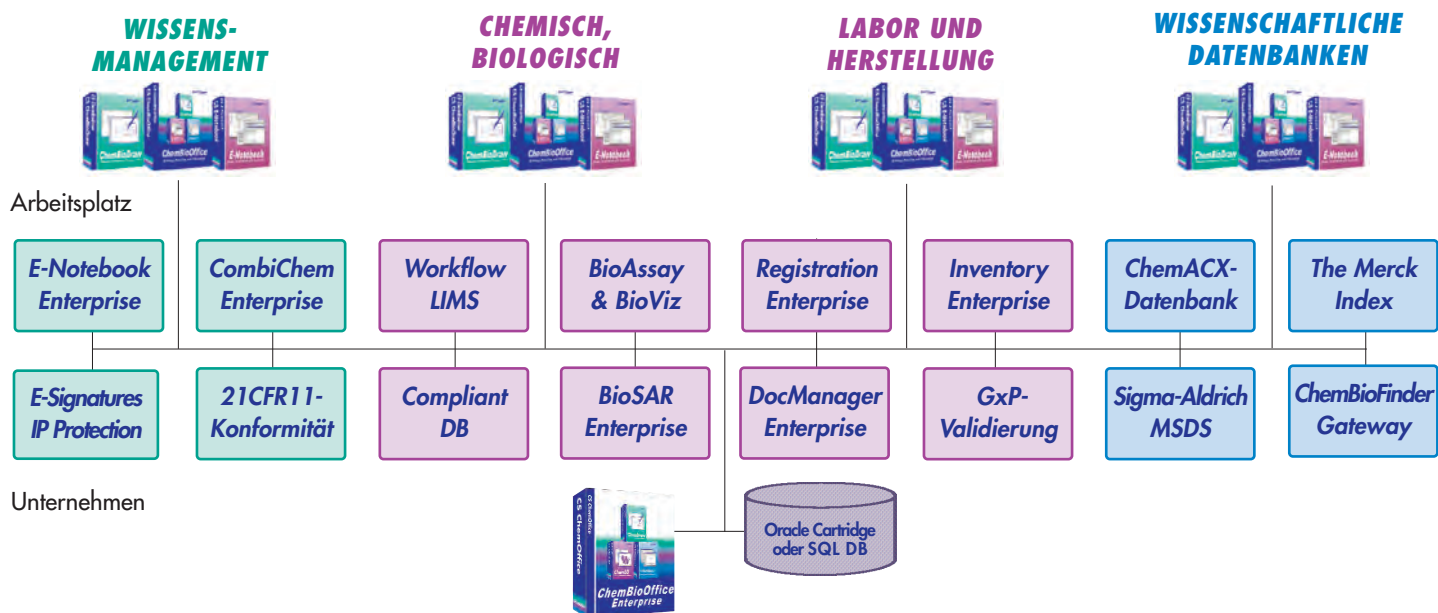
FR +33 1 70 71 98 80 EU 00 800 875 20000 US 1 800 315-7300 WWW www.cambridgesoft.com

ADRESSE CambridgeSoft Corporation 1 Signet Court Swanns Road Cambridge, CB5 8LA UK

ChemOffice, ChemDraw, Chem3D, BioOffice& BioDraw sind eingetragene Handelsmarken der CambridgeSoft Corporation ©2007

Chem & Bio Office

Von Desktop-Software bis zur Unternehmenslösung



Forschung, Entdeckung, Entwicklung, Versuchsdurchführung und Herstellung

Unternehmenslösungen umfassen *Chem & Bio Office* mit *Oracle Cartridge* sowie *Chem & Bio Office Workgroup*, basierend auf SQL Server, um kleine Arbeitsgruppen bis hin zu großen Unternehmen bei der effektiveren Zusammenarbeit und beim Austausch von Informationen zu unterstützen.

Wissensmanagement mit *E-Notebook*, inklusive *Reaction Explorer*, *CombiChem*, *E-Signatures* zum Schutz geistigen Eigentums und *21CFR11-Konformität*, vereinfacht tägliche Aufzeichnungen und bietet äußerste Sicherheit und effiziente Archivierung.

Laborinformatik umfasst *Workflow LIMS* für die Instrumentenautomatisierung sowie *Compliant DB* zur Speicherung von Daten.

Bioinformatik Wissenschaftler verwenden *BioDraw*, *BioAssay*, *BioSAR* und *BioViz* zum Einrichten biologischer Modelle und zur Visualisierung von Daten, zur Erstellung von Tabellen, die Struktur und Aktivität korrelieren, zum Durchsuchen nach Strukturen und zum Zeichnen von Pathways und Hinzufügen von Anmerkungen zu Pathways.

Chemieinformatik organisiert zusammen mit *Registration* neue Verbindungsinformationen. *Inventory* bietet umfassende Verwaltung von chemischen und biologischen Bestandsdaten einschließlich *GxP-Validierung*. *DocManager* indiziert chemische Strukturen in Dokumenten.

Herstellungsinformatik umfasst *Inventory* zur Verfolgung von Chemikalien, Reagenzien, Proben und Verbindungen großer Chemie- und Pharmalaboratorien mit mehreren Standorten sowie *E-Notebook* zur Verwaltung der Herstellungskonformität.

Desktop-Software enthält *Chem & Bio Office*, ein leistungsstarkes Softwarepaket, bestehend aus *ChemBioDraw*, *ChemBio3D*, *ChemFinder* und *ChemACX* für Chemiker, *BioDraw*, *BioAssay*, und *BioViz* für Biologen sowie *Inventory* und *E-Notebook* für alle Wissenschaftler.

Wissenschaftlichen Datenbanken umfassen die *ChemACX -Datenbank* mit handelsüblichen und verfügbaren Chemikalien sowie *Sigma-Aldrich MSDS*. *The Merck Index* und andere wissenschaftliche Datenbanken liefern Informationen über Chemikalien, ihre Eigenschaften und Reaktionen.

Professional Services umfassen benutzerdefinierte Entwicklung, Systemimplementierung, Schulungen und technischen Support für Kunden der Pharma-, Biotech- und Chemie-Industrie, einschließlich Kunden der Regierung und der Lehre, durch erfahrenes Personal.

Web www.cambridgesoft.com **Email** info@cambridgesoft.com

Deutschland +49 69 2222 2280 **Europa** 00 800 875 20000

Frankreich +33 1 70 71 98 80 **UK** +44 1223 464900

USA 1 800 315-7300 **Japan** 0120 146 700

IAG 08962 0705

CambridgeSoft®
Life Science Enterprise Solutions
Naturwissenschaftliche Unternehmenslösungen
Solutions globales pour les sciences de la vie
ライフサイエンス・エンタープライズ・ソリューション