

Что нового в Reaxys?

Мы расширяем возможности поиска и охват контента, улучшаем качество и скорость его индексации, чтобы Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry оставались наилучшими инструментами поиска релевантных и применимых на практике ответов для всех направлений научных исследований и образования, связанных с химией.

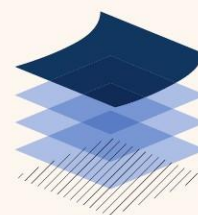
Новые функциональные возможности

- Интеграция ChemDraw JS в качестве альтернативного редактора структур
- Улучшенная интеграция со Scopus
- Функция предиктивного ретросинтеза
- Функция управления запасами химических веществ



Новый контент и индексация

- Больше регулярных обновлений базы данных в Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry
- Больше данных, извлеченных из литературы, включая данные о биоактивности веществ
- Новые таксономии для исследований в области разработки лекарственных препаратов



Исследователям и преподавателям очень сложно оставаться в курсе растущего объема химической информации, публикуемой в рецензируемых журналах, материалах конференций, патентах и книгах. То же самое можно сказать о фармацевтах и специалистах в области медицинской химии, которые сталкиваются с огромными объемами новых данных о биоактивности веществ.

Elsevier работает над созданием решений, способных предоставить свободный доступ к тщательно отобранной высококачественной литературе и данным. Мы работаем над тем, чтобы вы могли получить конкретные ответы на ваши вопросы, и принимали обоснованные решения при проведении НИОКР в области химии, фармации, материаловедении, а также в смежных областях. Наши решения, помимо всего прочего, предназначены для достижения дальновидными образовательными учреждениями поставленных ими целей.

В 2018 и 2019 гг. мы продолжаем работу над Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry, чтобы обеспечить их актуальность для всех направлений научных исследований по химии, а также для образовательной сферы. Так, данные решения теперь содержат больше высококачественного контента, имеют новые таксономии для индексации, а также новые функции предиктивного ретросинтеза и управления запасами химических веществ.

Reaxys

Улучшение! Скорость добавления контента и индексация

Мы делаем все, чтобы поиск в Reaxys был настолько актуальным и полным, насколько это возможно. Наша система обновления и индексации объединяет в себе ручную индексацию и выборку данных, производимую для ключевой химической литературы и патентов, с автоматической индексацией и выборкой на основе заданных алгоритмов для не ключевой литературы. Данная система демонстрирует высокую эффективность, обеспечивая увеличение скорости обновления контента и улучшая поисковые возможности Reaxys.

- База данных Reaxys теперь обновляется 2-3 раза в неделю.
- С помощью автоматической системы «статьи в печати» индексируются на 2 месяца раньше обычного.
- Значительно увеличилась скорость ручной выборки данных о структуре соединений и свойствах веществ (на 2 месяца быстрее, чем ранее).
- С помощью автоматической системы нам удалось повысить скорость извлечения данных, касающихся американских и европейских патентов, из раздела А и С МПК.
- Увеличилась скорость ручной выборки данных из статей (около 110 000 статей в 2018 г.).

Кроме того, в 2018 г. скорость ручной выборки данных из патентов и автоматической индексации новых не ключевых статей осталась на уровне прошлого года. В этом году был запущен процесс автоматической индексации не ключевой химической литературы, в результате чего было индексировано около 4 миллионов статей.

Обновление! Интеграция редактора структур ChemDraw®

ChemDraw компании PerkinElmer является ведущим редактором химических структур, используемым учеными всего мира. С недавнего времени ChemDraw доступен в Reaxys. ChemDraw JS полностью интегрирован с Reaxys и является альтернативным редактором структур для формирования поисков по структуре. Таким образом, специалисты в области химии могут использовать привычный для них редактор для формирования поисковых запросов по структуре. Данная интеграция также реализована в популярной настольной (десктоп-) версии редактора структур. Пользователи могут инициировать поиск в Reaxys через десктоп-версию ChemDraw. Другими словами, пользователи могут по желанию провести поиск по структуре без необходимости ее импортирования или воссоздания в Reaxys.

Обновление! Ключевые слова в области химии

Reaxys Quick Search предлагает функцию автоматической подстановки ключевых слов в области химии. Данная функция улучшает точность поиска, так как поиск основывается на названиях и терминах из ReaxysTree и Emtree®, которые являются тезаурусами, используемыми для индексации данных в Reaxys.

Улучшение! Улучшенная интеграция со Scopus®

Reaxys уже интегрирован с ключевыми решениями Elsevier, включая ScienceDirect®, PharmaPendium® и Scopus. В 2019 г. планируется провести более глубокую интеграцию со Scopus. Это позволит пользователям проводить более специализированный поиск по авторам и организациям.

Обновление! Функция предиктивного ретросинтеза

Начиная с 2019 г., Reaxys представит новый подход к проведению ретросинтеза. Это стало возможным благодаря партнерству с Доктором Марком Уоллером. Wallerlab использует глубокие нейронные сети и символический искусственный интеллект для планирования синтеза. В отличие от существующих функций ручного синтеза и AutoPlan, новый подход будет распространяться на предиктивное моделирование неопубликованных путей синтеза.

Обновление! Функция управления запасами химических веществ

Пользователи Reaxys высоко оценили функцию, позволяющую им проверять наличие в продаже химических веществ в eMolecules и некоторых базах данных поставщиков. В 2019 г. на основании существующей функции Reaxys планирует реализовать более полноценную функцию проверки наличия химических веществ у поставщиков и управления запасами химических веществ. Новая функция охватит большее количество поставщиков химических веществ и будет иметь доступ к собственным запасам химических веществ пользователей. Наличие химического вещества будет в первую очередь проверяться в собственных запасах химических веществ. При наличии требуемого химического вещества в собственных запасах, Reaxys позволит разместить внутренний заказ. Если нет, то система проверит наличие химического вещества в коммерческих базах данных.

Reaxys Medicinal Chemistry

Улучшение! Скорость добавления контента и индексация

Поиск новых лекарственных средств с использованием Reaxys Medicinal Chemistry зависит от данных биоактивности, которые в ручном режиме подбираются из литературы, нормализуются для обеспечения совместимости, индексируются для обнаружения в поисковых запросах, и тщательно проверяются на предмет качества. Выборка данных происходит на основании актуальности самих данных в области медицинской химии, а не на основании названий журналов. То есть главным критерием отбора являются сами данные, а не их источник. Мы гордимся тем, что предлагаем доступ к наиболее тщательно отобранной, наиболее организованной и самой большой базе данных о биоактивности.

Несмотря на колоссальную нагрузку, в 2018 г. мы планируем отобрать и обработать данные из порядка 20 000 документов. Это на 3 000 документов больше, чем в 2017 г.

Обновление! Таксономии в области медицинской химии

Индексация данных в Reaxys Medicinal Chemistry основывается на известных таксономиях в области медико-биологических наук Elsevier с использованием индексных терминов из большого количества актуальных источников. Для того, чтобы исследователи могли использовать ключевые слова, соответствующие их мышлению и рабочим процессам, в этом году были добавлены три новые таксономии. Добавление новых таксономий обеспечило большую гибкость и точность поиска, что оказало положительный эффект на работу пользователей.

- Таксономия под названием «Мишени» (Target taxonomy) для поиска по протеиновым мишеням
- Таксономия под названием «Параметр» (Parameter taxonomy) для добавления дополнительных возможностей для поиска по биоактивности
- Таксономия под названием «Клеточные линии» (Cell Line taxonomy) для обеспечения поиска конкретных клеточных линий или клеточных моделей

Reaxys

Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry используются химическими и фармацевтическими предприятиями, исследователями и преподавателями в качестве источника актуальной литературы, патентной информации, действительных свойств веществ (включая нормализованные данные об аффинности химических веществ и мишеней), информации о методиках проведения экспериментов.

Дополнительную информацию вы можете получить на сайте:

<https://www.elsevier.com/solutions/reaxys>