

Что нового в Reaxys®?

Быстрый доступ к научным данным и литературе по химии

Reaxys®

[Quick search](#)[Query builder](#)[Results](#)[Synthesis planner](#)[History](#)Elsevier Reaxys 

Search substances, reactions, citations and bioactivity data

🔍 Substance CAS Registry Number, e.g. 102625-70-7

AND



Create Structure or Reaction Drawing

Reaxys — наш главный продукт для химических исследований. В 2016 г. в систему Reaxys было внесено множество усовершенствований. Все они продиктованы потребностью пользователей в быстром доступе к научным данным и литературе по химии. Мы обновили пользовательский интерфейс, увеличили количество контента, включив в него дополнительную литературу и патенты, добавили новый уровень индексации и систему отбора цитат, а также постарались облегчить интеграцию Reaxys с другими информационными системами.

Одна из наших главных целей в 2016 г. — научить всех ориентироваться в Reaxys как «продвинутого пользователя», даже студентов и новичков в химии. Теперь пользователю не требуется понимание организации баз данных или сложных систем поиска: новый интерфейс поиска и просмотра результатов интуитивно понятен и использует принципы, которые хорошо знакомы по поисковым системам в Интернете. Поэтому найти нужную литературу и важные данные стало проще простого.

Наш план расширения контента в этом году учитывает все отзывы научного сообщества. Кроме обновления основных научных трудов по химии, система Reaxys теперь содержит множество патентов из азиатских компаний, которые являются важным источником информации об уникальных соединениях и пользуются большим спросом у химиков.

Однако просто добавить новый контент — это только половина дела, эффективность работы зависит и от удобства и понятности системы Reaxys. Именно поэтому сейчас мы проводим индексацию нового контента и цитат. А успешный запуск нового интерфейса дополнительно облегчит доступ к данным Reaxys в процессе работы.

Что нового

Каждый исследователь становится «продвинутым пользователем»

- В новом пользовательском интерфейсе Reaxus есть два варианта поиска: Быстрый поиск (Quick Search), в котором можно пользоваться как словами, так и производить поиск по структуре, а также Составитель запросов (Query Builder), который позволяет быстро создавать расширенные запросы, перетаскивая их части из готовых списков.
- Быстрый поиск оформлен как знакомый всем интерфейс поисковых систем, но он позволяет получить точные выборки из литературы и данных запросов благодаря мощным алгоритмам поиска и глубокой индексации. Быстрый поиск позволяет использовать логические операторы и фильтры и выполняет глубокий поиск по полям свойств, а также имеет возможность опережающего ввода данных с клавиатуры для упрощения формулировки запроса.
- На странице промежуточных результатов пользователи могут просматривать данные, полученные на основе всех возможных интерпретаций запроса. Это позволяет увидеть возможности, которые они могли и упустить.
- Представление результатов поиска и анализа значительно упростилось благодаря новому пользовательскому интерфейсу, при переработке которого использовались отзывы клиентов о том, как они предпочитают работать с литературой и наборами данных.

Новая информация из регионов с развитыми химическими технологиями

- Мы значительно увеличили количество патентов на азиатских языках из таких регионов, как Япония, Южная Корея, Китай и Тайвань. Поскольку химия в азиатском регионе активно развивается, эти патенты являются важным источником информации о соединениях, которую невозможно найти где-либо еще: только 2 % патентов азиатских компаний появляются в сводках Всемирной организации интеллектуальной собственности, хотя на их долю приходится более 50 % мирового производства.
- В 2016 г. мы добавили в систему Reaxus более 650 000 новых соединений из азиатских патентов, что соответствует количеству патентов, которые мы получаем из патентов США, ЕС и Всемирной организации интеллектуальной собственности в течение года.
- И еще более 1 млн новых соединений из азиатских патентов будет добавлено в 2017 г.

Простота работы с большим объемом данных

- В Reaxus значительно увеличился объем данных, включая количество ключевых слов, терминов и химических соединений, что позволяет охватить больше литературы и химических данных. Пользователи могут изучить свойства и химические реакции в полнотекстовых статьях более чем 15 000 журналов и патентов.
- Благодаря улучшенной системе распознавания имен авторов на основе обработки текста на естественном языке (NLP-распознавание) и Быстрому поиску пользователем стало проще проводить литературный поиск. Чтобы начать литературный поиск, нужно лишь ввести запрос в поле Быстрого поиска.
- На простоту работы с программой также влияет применение двух процессов индексации: знакомая ручная индексация и отбор цитат журналов, патентов и учебников; новая автоматическая индексация, которая применяется к более широкому набору периодической литературы и патентов.

Беспрецедентные возможности для интеграции в другие программы

- В мае 2016 г. был успешно запущен новый программный интерфейс API (узлы KNIME и компоненты Pipeline Pilot). Кроме того, был уточнен способ запроса и отображения данных по компьютерному профилированию. Это особенно важно для специалистов по химической информатике, медицинской и вычислительной химии, поскольку облегчает формирование запросов к базе данных Reaxus через собственные системы и экспорт полученных данных в приложения для моделирования.
- В январе 2017 г. будет обновлена тепловая карта кликов, что позволит улучшить первоначальную оценку активности структуры и взаимосвязь компонентов для принятия решений о том, что именно необходимо экспортировать для дальнейшей оценки в приложения для моделирования.