

Что нового в Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry?

Reaxys продолжает совершенствоваться в ответ на меняющиеся потребности пользователей, что позволяет ему оставаться передовым решением для проведения успешных научных исследований в области химии, новых материалов и поиска новых лекарственных средств.



Доступ к еще большему количеству важных данных

- С июня 2019 г. в Reaxys были добавлены данные из 2,99 миллионов документов, включая экспериментальные данные:
 - 1,4 млн. веществ
 - 2,79 млн. реакций
 - 1,85 млн. данных о биологической активности веществ
- Новая база данных доступности веществ в продаже и их поставщиков облегчает планирование экспериментов
- Существенное увеличение патентного контента в 2020 и 2021 годах

Беспрепятственный доступ к информации об имеющихся в продаже соединениях и поставщиках

Для упрощения процесса планирования экспериментов и повышения эффективности работы Reaxys теперь содержит ключевую информацию об имеющихся в продаже веществах и их поставщиках, включая:

- Номер CAS и идентификатор продукта по каталогу
- Стоимость и размер упаковки
- Чистота, структура и физико-химические свойства
- Наличие на складе, время отгрузки и страна-поставщик

Информация, полученная напрямую от растущего пула поставщиков со всего мира (более чем 380), позволяет принимать обоснованные решения о синтезе или покупке необходимых веществ.

База данных обновляется ежемесячно. По запросу клиентов возможна интеграция информации от предпочтительных поставщиков.

Исследователи могут осуществлять поиск по веществу или реакции, применять химические и коммерческие фильтры, чтобы получить точную информацию о поставщиках, а также экспортировать данную информацию в электронные лабораторные журналы (ELN) или системы закупок.

Расширенный охват патентных данных

В ответ на запросы исследователей, Reaxys инвестирует значительные средства, чтобы увеличить охват патентных данных за счет документов из ~100 дополнительных патентных ведомств и всех классов МПК. Это облегчит проведение углубленных исследований непроработанных областей, а также послужит источником ценной информации о веществах, реакциях, биоактивности и методиках проведения экспериментов.





Уникальные возможности поиска и анализа данных

- Откройте для себя наш передовой модуль предиктивного ретросинтеза на базе искусственного интеллекта
- Оставайтесь в курсе событий благодаря усовершенствованной функции оповещения по электронной почте
- Экономьте время благодаря прямому доступу к заявкам на патенты, методикам проведения экспериментов и другим данным
- Оптимизируйте процесс обработки экспортированных данных

Ускорение ретросинтеза с помощью ИИ

Эффективная работа в лаборатории зависит от наличия эффективных планов синтеза. Новое универсальное решение позволяет исследователям создавать надежные варианты путей синтеза для малых органических молекул. «Инструмент для предиктивного ретросинтеза Reaxys» (Reaxys Predictive Retrosynthesis), созданный совместно с д-ром Марком Уоллером (Dr. Mark Waller), является передовым решением на базе искусственного интеллекта, которое:

- Использует обширные данные о химических реакциях Reaxys и технологию глубокой нейронной сети
- Понятным образом связывает прогнозы с экспериментальными доказательствами
- Позволяет включать собственные реакции и строительные блоки

Примечание: Reaxys Predictive Retrosynthesis был протестирован и используется ведущими компаниями. Данный модуль поставляется за отдельную плату.

Получение актуальной информации по мере ее появления

Чтобы исследователям было проще оставаться в курсе событий, мы усовершенствовали функцию оповещения по электронной почте, а именно облегчили просмотр и оптимизировали доступ к исходным документам. Среди прочего, были усовершенствованы следующие аспекты:

- Информация в оповещениях, направляемых по электронной почте, содержит краткий обзор ключевой информации с указанием соответствующих структур, реакций, мишеней и ключевых слов
- Доступ к контенту в Reaxys или к полнотекстовым документам от издательства одним нажатием кнопки мыши
- Настраиваемая частота и уровень детализации, которые подходят для ваших рабочих процессов

Экономия времени и повышение эффективности благодаря уникальным функциям

Исследователям необходимо иметь возможность получать интересующую их информацию и данные из актуальных источников. Reaxys обеспечивает интеллектуальный и быстрый поиск информации благодаря следующим уникальным функциональным возможностям:

- Комбинирование поисков по структуре или подструктуре с текстовыми терминами
- Формирование комплексных и точных поисковых запросов с помощью нескольких полей данных, актуальных для исследований в области химии
- Получение не только конкретных запрашиваемых данных (напр., физикохимические и спектральные свойства, природные источники получения), но также и соответствующей текстовой информации, что минимизирует необходимость перехода в полнотекстовые источники
- Возможность быстрого и эффективного уточнения результатов поиска при помощи фильтров, включая фильтры по структуре и подструктуре веществ
- Получение информации о нескольких веществах одновременно с помощью пакетного поиска, осуществляемого в несколько нажатий кнопки мыши (информация о веществе, реакциях и документации)

В рамках миссии Reaxys по удовлетворению потребностей исследователей в области химии, мы реализовали следующие новые и усовершенствованные функциональные возможности Reaxys для осуществления поиска и просмотра результатов:

- Поиск фармацевтического контента с новой таксономией болезней
- На странице с результатами поиска отображается информация о сопутствующих препаратах, метаболитах и детальных параметрах для веществ, сходных с лекарствами (drug-like)
- Прямой доступ к заявкам на патенты в результатах поиска, а также возможность ограничивать результаты поиска только заявками на патенты
- Расширенные функциональные возможности, чтобы быстро фокусироваться на подходящих результатах благодаря новым фильтрам по значениям, диапазонам значений и экспериментальным процедурам
- Возможность получения информации о безопасности, данных о реакциях, методах очистки и масштабировании реакций в экспериментальных процедурах
- Планы синтеза для всех известных молекул (благодаря новой функции распространения плана синтеза от схожих молекул к целевым молекулам, если неизвестны их методы получения)

Интегрированные системы хемоинформатики обеспечивают беспрепятственные и продуктивные рабочие процессы, поэтому Reaxys регулярно внедряет новые средства межоперационной совместимости. В настоящий момент исследователи могут:

- Упростить и ускорить работу со структурами веществ благодаря прямому переходу из ChemDraw®, ведущего инструмента создания изображений химических структур, в Reaxys
- Сократить время обработки данных до проведения расширенного анализа благодаря большему контролю над экспортом данных
- Беспрепятственно импортировать списки результатов в Mendeley® благодаря новому расширению Mendeley Web Importer

Помимо добавления новых и улучшения существующих функциональных возможностей, разработчики Reaxys ведут работу над улучшением удобства работы пользователей.

Ниже приведены некоторые из последних улучшений:

- Улучшенный просмотр и редактирование существующих оповещений
- Перенос старых оповещений в новую улучшенную систему оповещений по электронной почте одним нажатием кнопки мыши
- Более понятное обозначение полей с длинными названиями в «Инструменте для формирования поисковых запросов» (Query Builder)
- Возможность определять расстояние между терминами во фразе для повышения точности поиска
- Выбор предпочтительного редактора структур (Marvin® JS или ChemDraw JS)
- Поддержка поиска по авторам
- Точное 3D-отображение структуры веществ (идеально подходит для уточнения 3D-координат)



Дополнительная информация доступна по адресу
elsevier.com/reaxys

Reaxys и Mendeley являются торговыми марками Elsevier Ltd. ChemDraw является торговой маркой Perkin Elmer Informatics, Inc. Marvin JS является торговой маркой ChemAxon Kft. Copyright © 2020 г. Elsevier, август 2020 г.