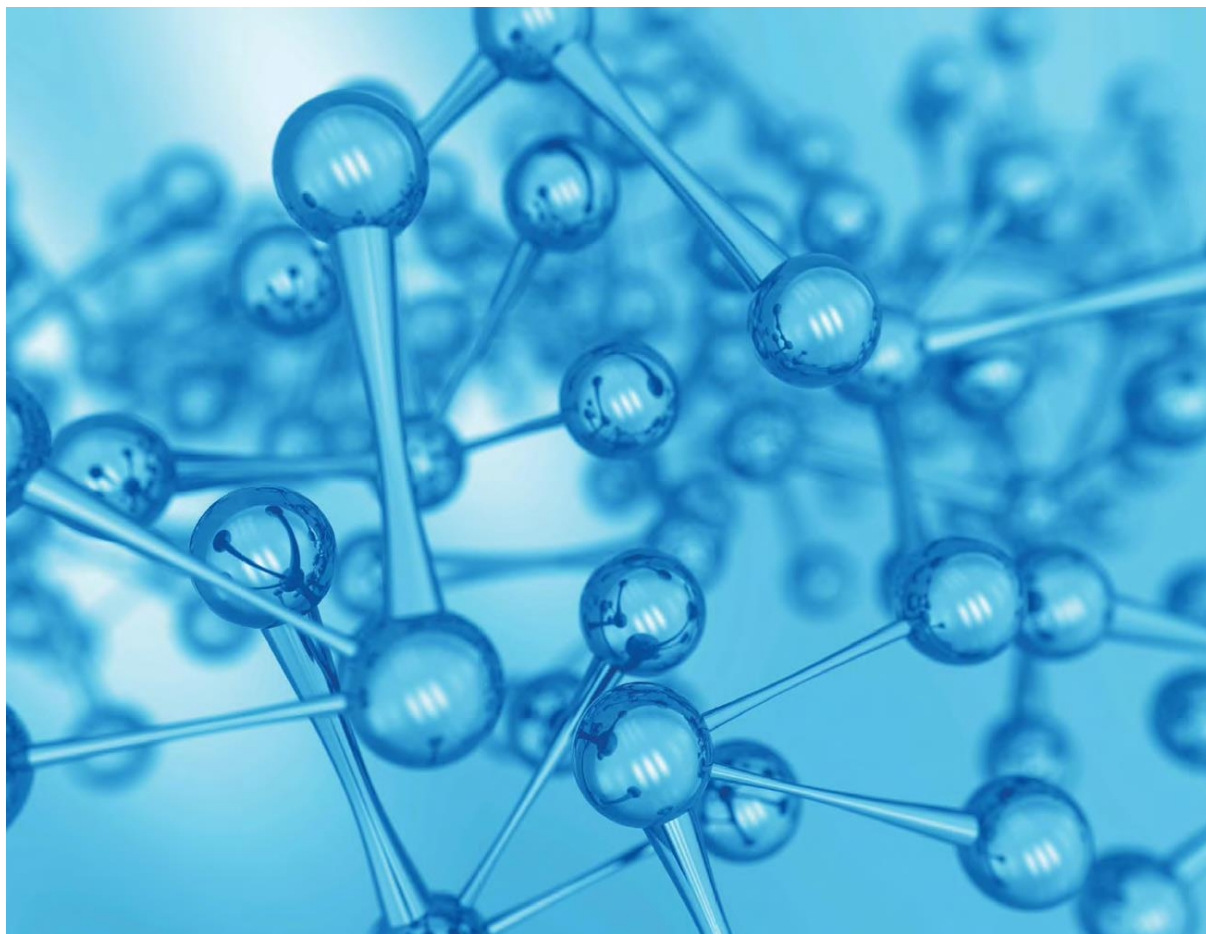




داده های ضروری برای تصمیم گیری های آگاهانه در مورد R&D شیمیایی

Reaxys یک راهکار پژوهشی بر پایه ی وب می باشد که با در اختیار گذاشتن واقعیات تجربی در مورد ساختارها، خصوصیات، واکنش های شیمیایی و نیز روش های اجرای کار، بازدهی تحقیق و توسعه را بهبود می بخشد.

Reaxys دسترسی به بیش از 500 میلیون واقعیات تجربی منتشر شده را جهت توانمند ساختن در کشف و توسعه مواد شیمیایی فراهم می آورد. تمرکز بر ساختارها، خصوصیات و واکنش ها از کشف زودهنگام دارو، گزینش مواد و برنامه ریزی برای ساخت حمایت می کند و احتمالات خروجی داده ها این اجازه را به محقق می دهد که داده های درون سازمانی و خارجی را به طور هماهنگی مورد تجزیه و تحلیل قرار دهد.

Reaxys، تحقیق و توسعه را از طریق ارائه پاسخ ها به نحوی که شیمیدانان به آن ها نیازمند می باشند، بهبود می بخشد.

- آیا یک ترکیب وجود دارد؟
- در مورد این ترکیب چه می دانیم؟
- چگونه می توان به این ترکیب دست یافت؟
- چه شخص دیگری بر روی این ترکیب کار می کند؟

پایگاه داده Reaxys شامل موارد زیر است:



ویژگی ها:

محتوای بسیار سازمان یافته جامع

Reaxys، داده های ساختار شیمیایی، واکنش و خصوصیات به دست آمده از مجلات، ثبت اختراعات و فصول تکست بوک ها را گلچین می کند. هسته ای این بانک اطلاعاتی، مجموعه ای جامع از مقالات و متون شیمی انتخاب شده مرتبط با موضوع می باشد. بیش از 16 هزار گاهنامه دیگر که از طیف وسیعی از مجلات مربوط به شیمی، تکست بوک ها و کنفرانس ها به دست آمده اند، تکمیل چنین تصویری را به پیش می برند. به منظور افزایش قابلیت جستجو، تمام اطلاعات فهرست شده و مطابق با اصول طبقه بندی شیمی سازمان دهی می شوند.

ASK REAXYS

این گزینه که جستجوی بسیار ساده و نوآورانه را تنها با یک کلیک میسر می سازد، راهی شهودی را جهت یافتن سریع جزئیات یک واکنش، خاصیت شیمیایی، مفاهیم و استنادها ارائه می دهد. Ask Reaxys فهم و تفسیر متن را تسهیل می کند (شکل 1) و اطلاعات ویژه ای را به صورت مرتبط ترین شکل بازیابی می کند. همچنین میان ورودی های کاربر پسند که زبان طبیعی را مشابه با زبان فنی چکیده پایگاه داده می کند، پلی می زند تا اطلاعات راحت تر در دسترس قرار گیرند.



شکل 1. Ask Reaxy جستجوهای متن را پذیرفته و تفسیر می کند

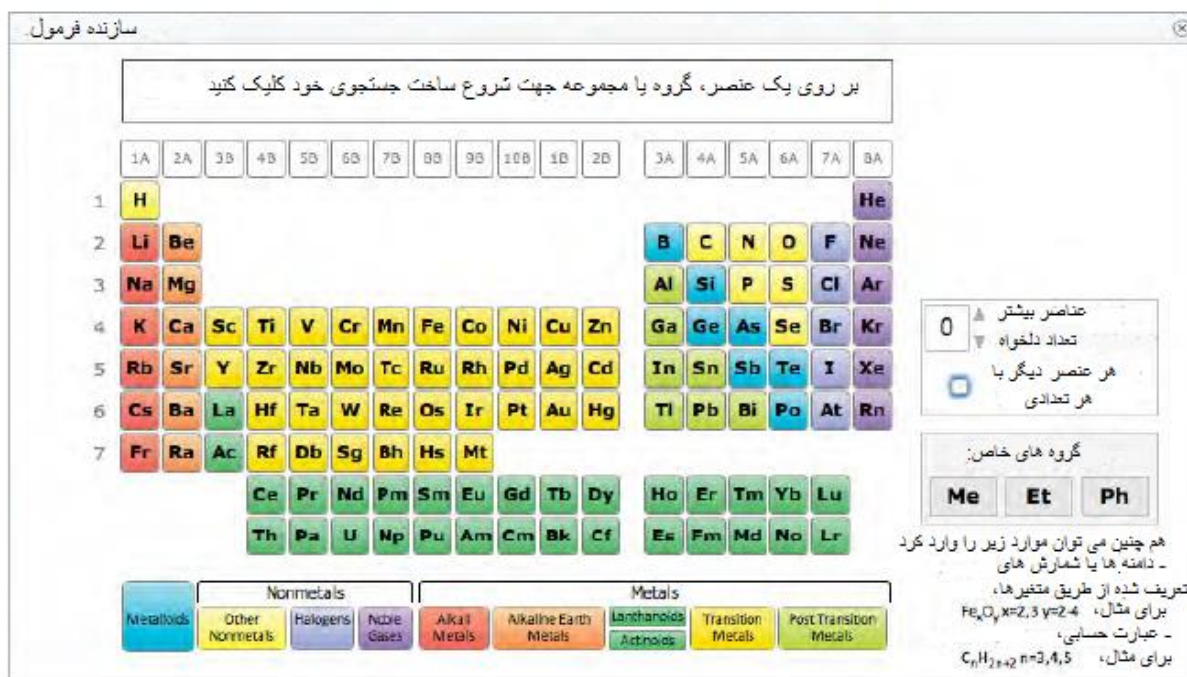
ساختار انعطاف پذیر جستجو

صفحه شروع Reaxys (شکل 2)، امکان جستجو در طبقه بندی های گوناگون را ارائه می دهد؛ واکنش ها؛ مواد؛ نام ها؛ فرمول ها؛ شیمی دارویی؛ و متون (شکل 2). زمینه های جستجوی قابل تنظیم، ورودی مبتنی بر متن، عدد، و ساختار شیمیایی را پشتیبانی کرده و شامل 500 زمینه قابل جستجو می باشند که بیش از 130 موضوع را پوشش می دهند و شامل مفاهیمی متفاوت همانند اطلاعات فیزیکوشیمیایی، طیف ها، ترمودینامیک، الکتروشیمی و شیمی مغناطیسی می باشند.



شکل 2. صفحه شروع Reaxys با طبقه بندی های اصلی جستجو

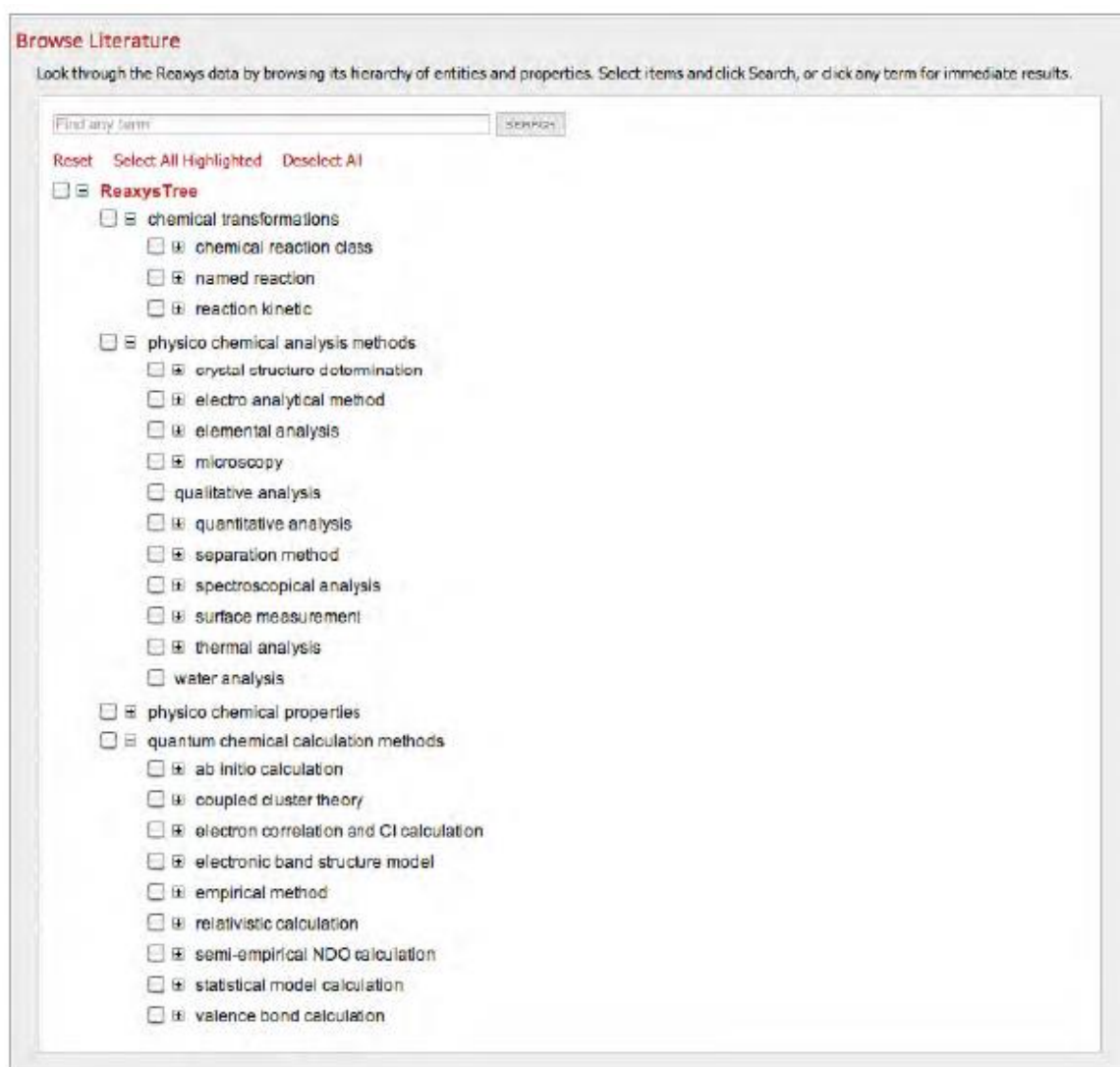
این صفحه هم چنین شامل **ساختار فرمول** بر پایه جدول تناوبی (شکل 3) جهت تسهیل جستجوهای شیمی معدنی و آلی-فلزی، بر اساس فرمول های شیمیایی کامل یا به نسبت کامل می باشد.



شکل 3. ساختار فرمولی، جستجو برای داده های ترکیب معدنی و آلی - فلزی را تسهیل می کند

مرور بانک اطلاعاتی

ReaxysTree طبقه بندی Reaxys را قابل تجسم می کند (شکل 4). کاربران می توانند سلسله مراتب عبارات را مرور کنند به ویژه آنهایی که با تغییر شکل های شیمیایی و خصوصیات مواد در ارتباط می باشند. این ساختار به کاربر کمک می کند که ارتباطاتی را بین جنبه های ظاهرا جداگانه شیمی برقرار کنند.



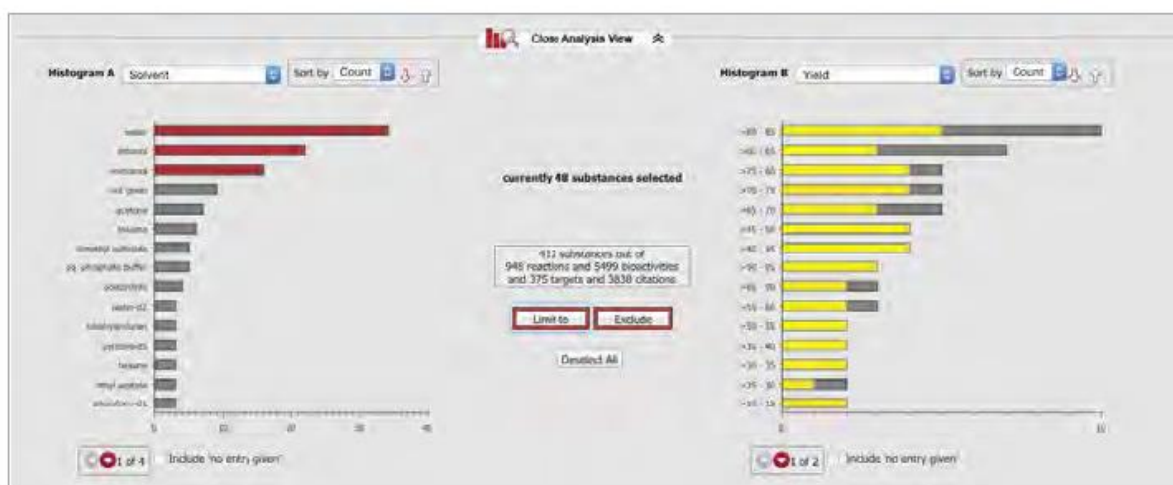
شکل 4. پایگاه داده را با استفاده از ReaxysTree به شکل طبقه بندی فهرست گذاری کنید.

تمرکز سریع بر نتایج مرتبط

جهت کمک به شناسایی مرتبطترین نتایج، Reaxys دارای مجموعه جامعی از فیلترها برای hitsetها می باشد. کاربران می توانند بر اساس ساختار و خصوصیات، پارامترهای واکنش، پارامترهای فعالیت زیستی، نوع انتشار و سایر موارد جستجوی خود را فیلتر کنند.

ارزیابی روابط درون hitset ها

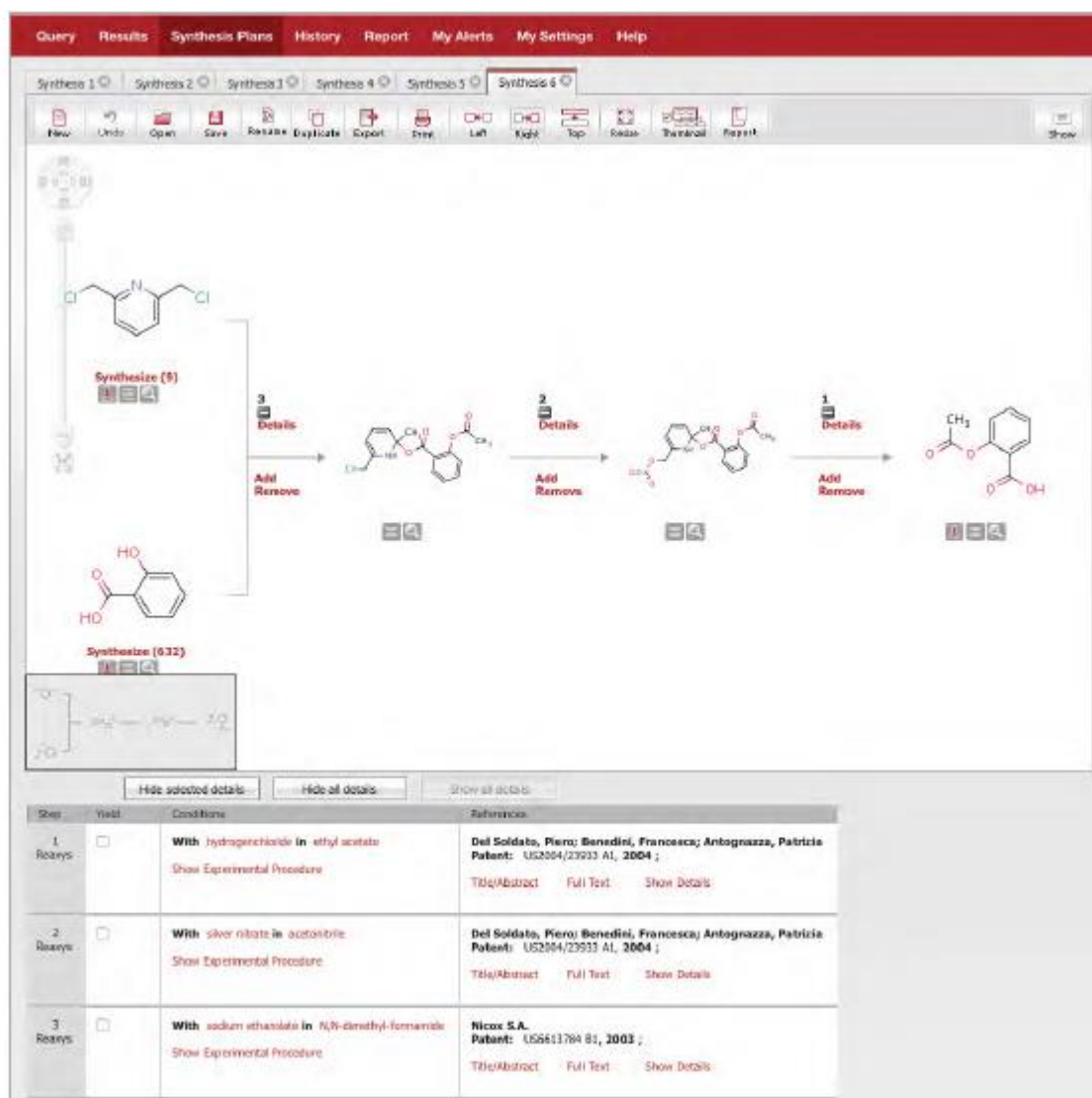
Reaxys Analysis View (شکل 5) به کاربران اجازه می دهد که معیارهای آنالیز را جهت درک روابط بین نتایج انتخاب کنند. برای مثال، کشف سریع افراد و سازمان هایی که در حوزه تحقیقاتی ویژه ای فعال می باشند را ممکن می سازد، نتایج را مطابق با خروجی طبقه بندی می کند، یا کاتالیزورها یا حلال هایی را برای یک طبقه ویژه واکنش، مشخص می سازد.



شکل 5. Analysis View، ابزار مبتنی بر هیستوگرام برای ارزیابی روابط درون hitset ها می باشد

نقشه ریزی مسیرهای سنتز

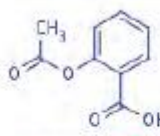
ReaxysAutoPlan، جنبه های زمان بر نقشه ریزی برای سنتز را از طریق چندین مسیر مولد که مسیرهای سنتز جایگزین را برای ترکیبات مورد نظر ایجاد می کنند، حذف می کند. نقشه های سنتزی از واکنش های توصیف شده از طریق چندین سند منبع ساخته می شوند که به کاربران اجازه می دهند که بهترین مسیر سنتز را برای هدف خود تهیه کنند. این ابزار، شامل لینک هایی به پایگاه های داده eMolecules، Accelrys ACD و PerkinElmer ChemACX جهت ارائه اطلاعات بیشتر، شامل بهترین گزینه ها برای خرید ترکیبات می باشند.



شکل 6. ReaxysAutoPlan، چندین مسیر سنتز را ایجاد می کند

به اشتراک گذاری یافته ها با سایر محققان

Reaxys Report (شکل 7)، راهی ساده جهت تفسیر و خروجی گرفتن از نتایج پژوهش می باشد. کلیک بر هر نتیجه، دو گزینه را برای افزودن به یک گزارش ارائه می دهد. تفاسیر را می توان به ورودی کلی یا به جنبه ویژه ای از آن افزود. سپس می توان گزارش را به چندین دریافت کننده ایمیل کرد.

Structure	Structure/Compound Data
 Synthesize Show Details Find similar	Chemical Name: Aspirin Reaxys Registry Number: 775271 CAS Registry Number: 50-78-2 Type of Substance: isocyclic Molecular Formula: C ₉ H ₈ O ₄ Linear Structure Formula: C ₆ H ₄ OOCH ₃ COOH Molecular Weight: 180.16 InChI Key: BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N Highest Clinical Phase: Marketed
Copy to Reaxys Report: - Structure only - Structure and Header Data	Chemical Name: sodium acetylsalicylate

شکل 7. Reaxy Report اشتراک گذاری آسان یافته ها را امکان پذیر می سازد

ادغام Reaxys در جریان های کاری موجود

Reaxys چندین گزینه را برای ادغام مطالب و محتوی در یک محیط سیستم و ابزار موجود ارائه می کند. این کار با نوت بوک های آزمایشگاه الکترونیکی (ELN) از تامین کنندگان اصلی، از جمله Accelrys، PerkinElmer و IDBS سازگار می باشد.

رابط برنامه نویسی نرم افزار، ارائه اطلاعات انعطاف پذیر و دسترسی برنامه نویسی را در زمان واقعی به محتوا و سیستم Reaxys امکان پذیر می سازد. ساختار فایل یک سطحی، ساختارها، داده های واکنشی و واقعی مرتبط و اطلاعات ثبت اختراع برای کاربرد درون سازمانی، برای مثال، جستجوی آنالوگ ساختاری و ارزیابی منحصر به فردی ترکیب را ارائه می دهد. تیم خدمات حرفه ای راه حل های R&D الزویر جهت ادغام یکپارچه Reaxys به درون جریان های کاری موجود آماده می شود.

بررسی فعالیت زیستی ترکیب

Reaxys می‌تواند به طور کامل با Reaxys شیمی دارویی ادغام گردد تا درک روابط بین ترکیبات مورد نظر، اهداف و داده‌های فعالیت زیستی را عمیق‌تر سازد. مشترکین با استفاده از هر دو راه حل می‌توانند به نتایج جستجو از طریق یک رابط کاربری منفرد و آسان دسترسی پیدا کنند.

مزایای کلیدی

Reaxys محققان را برای موارد زیر توانمند می‌سازد:

- کشف ساختارها، خصوصیات و واکنش‌های شیمیایی
- ساخت جستجوگرهای انعطاف پذیر به راحتی و به طور مستقیم
- ارزیابی سنتز ترکیبات و گزینه‌های خرید
- به اشتراک گذاری داده‌ها با درون و بیرون از سازمان خود
- مقایسه داده‌های تجربی منتشر شده و درون سازمانی