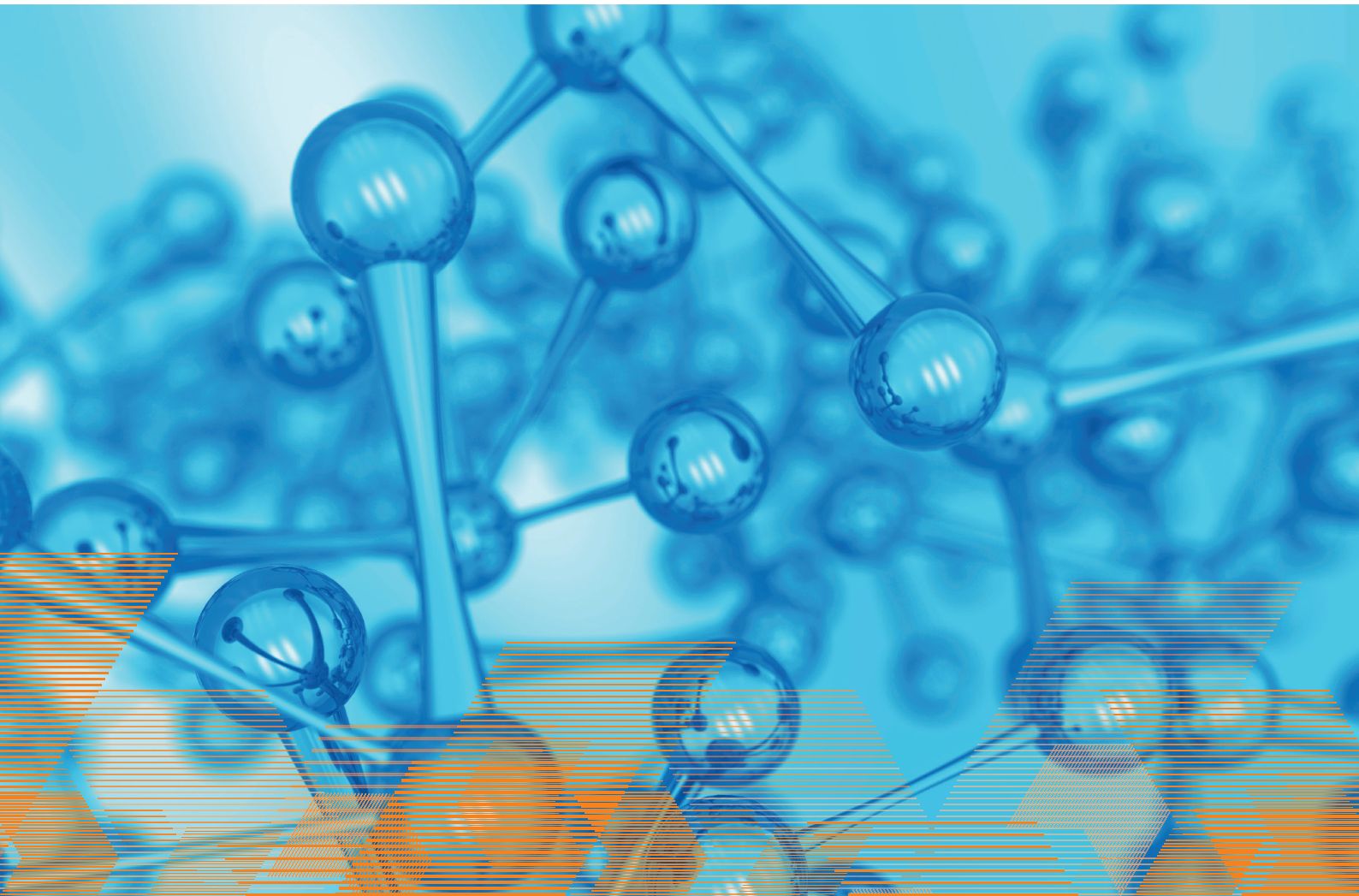


R&D SOLUTIONS

Reaxys®

Broșură



Cea mai scurtă cale către informații și literatură din domeniul chimie

Reaxys este proiectat pentru a susține întreaga gamă de cercetare din domeniul chimiei, inclusiv dezvoltarea farmaceutică, sănătatea mediului & siguranța muncii și știința materialelor. Reaxys ghidează toți cercetătorii, de la începător la expert, pe calea cea mai scurtă către răspunsuri. Întrebările legate de chimie se lansează prin intermediul interfeței de căutare foarte intuitive, astfel se poate descoperi literatură relevantă, informații despre brevete, proprietăți concrete ale compușilor chimici și proceduri experimentale. Găsirea răspunsurilor nu a fost niciodată mai ușoară.



ELSEVIER

Introducere

Reaxys oferă acces rapid și ușor la date experimentale pentru a promova: cercetarea în domeniul chimiei, descoperirile chimice și educația științifică. Nu a fost niciodată mai ușor să încorporezi literatură științifică relevantă, proprietăți exacte ale compușilor chimici și date despre reacții chimice, în fluxul de lucru al cercetării.

Reaxys îmbunătățește productivitatea în R&D prin poziționarea cercetătorilor pe calea cea mai scurtă către răspunsuri

Întrebare

- Există acest compus?
- Ce știm despre acest compus?
- Cum pot să îl obțin?
- Este implicat în ultimele cercetări?
- Cine mai lucrează cu acest compus?

Răspunde cu

- Literatură și brevete legate de chimie de ultimă oră
- Date despre proprietăți, reacții și multe altele
- Planuri de sinteză interactive și informații despre surse
- Date privind brevete de la toate oficiile relevante
- Link-uri directe către Scopus pentru informații detaliate

>119 MILIOANE

compuși organici,
anorganici și organometalici

>46 MILIOANE

reacții chimice

>500 MILIOANE

date experimentale
publicate

>16 000

reviste din domeniul chimie

>240

ani de cunoștințe chimice

6

surse de indexare pentru
o privire interdisciplinară
asupra chimiei

CARACTERISTICI

Descoperă unde este utilizată chimia: în inginerie, geologie, medicină și altele

Pentru a ne asigura că Reaxys facilitează descoperirea completă în domeniul vast al chimiei, există două procese de indexare ce au loc simultan. Reviste principale de chimie, capitole din manuale și brevete sunt supuse unui procediu intens de indexare manuală și de extragere a informațiilor legate de proprietăți chimice, reacții chimice și metode de sinteză. În plus, un proces automat de îmbogățire a conținutului bazat pe reguli, se aplică unor reviste din domeniul vast al chimiei.

Pentru că cercetătorii analizează articolele din perspective diferite, fiecare înregistrare este indexată cu termeni din 6 surse: Scopus®, Compendex®, Embase®, GeoBase®, MEDLINE® și Reaxys. Astfel, susține o privire interdisciplinară asupra informației chimice.

Explorează un depozit de articole peer-reviewed (recenzionate), brevete și multe altele

Fiecare întrebare inițiază o căutare într-o bază de date de literatură ce acoperă toate tipurile de literatură. Reaxys ajută utilizatorii să obțină date precise, extrase din texte integrale de literatură chimică (vezi "Avansează în cercetare cu datele extrase"). Mai mult decât atât, permite descoperirea rapidă de articole relevante, brevete și capitole de interes din manuale.

Baza de date cuprinde:

- ~450 reviste și manuale de chimie de bază
O colecție de titluri esențiale, atent selecționate din domenii ca: chimie fizică, chimie organică și anorganică, de asemenea știința materialelor, petrochimie, farmacologie și chimie medicinală și computațională
- >16 000 de reviste legate de domeniul chimie, inclusiv abstracte de la conferințe
O gamă largă de conținut relevant pentru chimiști, ce include publicații minore în domenii de bază și publicații majore în domenii conexe
- Brevete de la toate oficiile importante din lume (inclusiv S.U.A și Asia)
O variație globală, ce acoperă inclusiv brevete în limbi asiatice, de la oficii din China, Taiwan, Japonia și Coreea de Sud

Efectuează căutări intuitive pentru a primi răspunsuri

Interfața optimizată cu utilizatorul permite utilizarea facilă, chiar și pentru începători. Căutările rapide pentru literatură sau pentru proprietățile compușilor chimici, se pot realiza folosind întrebări compuse din cuvinte cheie bazate pe limbaj natural, schițarea reacțiilor și structurilor chimice sau chiar o combinație dintre acestea (Figura 1). Secțiunea de construire completă a interogării (Query Builder) facilitează conceperea unor întrebări complexe, folosind o interfață optimizată de tip drag-and-drop, ce permite combinarea flexibilă a criteriilor de căutare. Părțile interactive facilitează includerea informațiilor esențiale de căutare ca: desenarea structurilor chimice sau formulele moleculare, și formulare specializate (Figura 2).

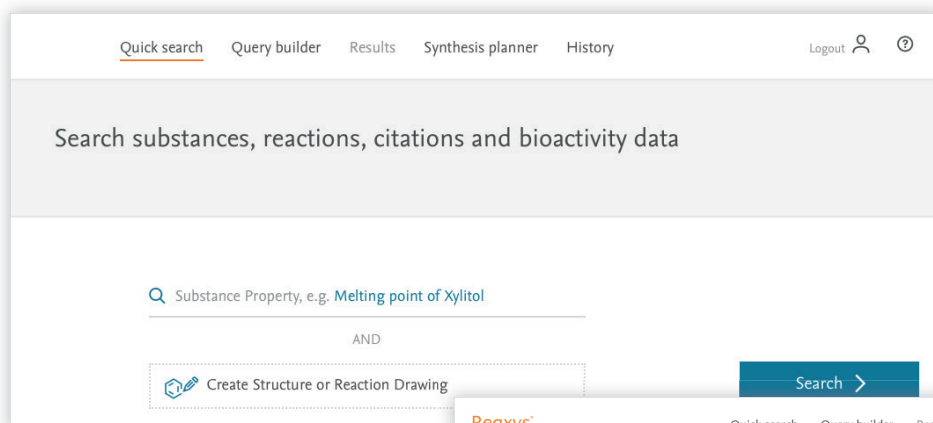


Figura 1. Pagina de start Reaxys oferă două opțiuni intuitive pentru căutări rapide

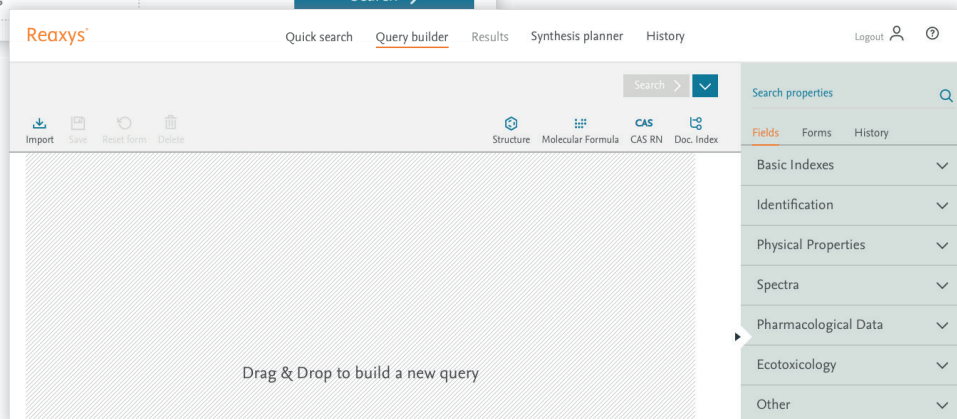


Figura 2. Secțiunea de construire a interogării (Query builder) pune toate cele mai importante caracteristici de căutare într-un singur loc

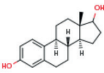
Avansează în cercetare cu datele extrase

O caracteristică unică pentru Reaxys este modul înalt calitativ de extragere a conținutului din: texte cu date chimice, grafice, imagini, tabele, informații suplimentare, scheme de reacții și legende de figurile. Seturile de date acumulate conțin peste 500 de milioane de date.

Datele extrase sunt organizate în câmpuri de tip text sau numeric, cu proprietatea de a putea fi căutate individual. Astfel, informațiile pot fi recuperate bazându-se pe criterii specifice, nu doar cuvinte cheie.

- Găsește substanțele cu proprietățile dorite
- Compară reacțiile pe baza condițiilor
- Evaluează brevetele prin examinarea utilizărilor

Datele extrase sunt tabelate pentru o evaluare ușoară (Figura 3), de asemenea pot fi descărcate pentru a fi studiate ulterior și pot fi utilizate ca punct de plecare pentru procese de căutare avansată atunci când se folosesc filtre și instrumente de analiză în Reaxys.



estradiol

C₁₈H₂₄O₂ 272.387 2217087 145164-84-7

Hit Data - 3

Identification

Physical Data - 22

Spectra - 7

Bioactivity - 28

Other Data - 96

Preparations - 5

Reactions - 18

Documents - 52

Hit Data - 3

Ecotoxicology - 3 hits out of 3

1 of 3	Effect (Ecotoxicology)	reproductive effects
	Endpoint of Effect (Ecotoxicology)	sex ratio in hatchings
	Species or Test-System (Ecotoxicology)	Chelydra serpentina serpentina, common snapping turtle
	Concentration (Ecotoxicology)	15 µg/5 µl EtOH
	Kind of Dosing (Ecotoxicology)	15 µg per 5 µl 95 percent EtOH; administered as a 5µl bolus onto the upper shell of the egg
	Exposure Period (Ecotoxicology)	Ca. 8 w
	Method (Ecotoxicology)	eggs collected from the uncontaminated sites in Canada, June 1996; ca. 30 eggs/dose; incubation at 26 deg C (male-producing temp.); at stage 14 of embryonic development, eggs were treated topically with title comp.; killed within 30 d of hatching
	Further Details (Ecotoxicology)	approx. 30 eggs/dose; sex detn. by macroscopic and histological diagnosis; estradiol-17β as positive control
	Results	sign. feminization, male:female ratio 6:24, compared to 30:4 in untreated control
	Reference	Portelli, Melinda J.; De Solla, Shane R.; Brooks, Ronald J.; Bishop, Christine A. - [Ecotoxicology and Environmental Safety, 1999, vol. 43, # 3, p. 284 - 291] Full Text Cited 17 times Details Abstract

Figura 3. Reaxys oferă date extrase profesional, ce garantează acces imediat la conținutul unei publicații și pot fi utilizate direct pentru analiză.

Descoperă și analizează ușor tendințele

Proiectat într-o manieră centrată pe utilizator, astfel încât nevoile cercetătorilor să fie întrunite. Reaxys are o interfață optimizată pentru a selecta rezultate dorite. Afișează într-un mod transparent, modalitatea prin care au fost obținute toate seturile de date și permite sortarea acestor rezultate. Categoriile interactive de filtre susțin: un instrument puternic de analiză ce evaluează rapid relațiile între categorii, identificarea conținutului din subseturile unei liste de referințe, descoperirea tendințelor în publicare și multe altele (Figura 4).

The screenshot shows the Reaxys 'Filters and Analysis' interface. On the left, there are several filter categories: 'By Structure' (Yield), 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Catalyst Classes', 'Solvent Classes', and 'Product Availability'. The 'Yield' filter is expanded, showing a list of yield ranges from '>95 - 100' to '>65 - 70' with corresponding counts. The 'Solvent' filter is also expanded, showing a list of solvents from 'toluene' to '1,2-dichloro-ethane' with corresponding counts. The main panel displays two chemical reactions. Reaction 1 (ID: 5335501) shows the synthesis of a complex molecule from a phenylacetylene derivative and a cyclic amide. Reaction 2 (ID: 5328734) shows the synthesis of a quinoline derivative from an aniline derivative and a phenylacetylene derivative. Both reactions include hit details, conditions, and references.

Figura 4. Filtrele interactive și instrumentul de analiză (Analysis Tool) dezvăluie tendințele și conexiunile dintre categoriile de date reprezentate într-o listă de rezultate.

Păstrarea informației acum și în viitor

Tehnologiile sunt în dezvoltare rapidă și produc din ce în ce mai multe tipuri de date. Vor fi relevante în viitor datele actuale din domeniul chimiei? Indiferent că utilizezi date publicate, comerciale sau interne, asigură-te că cercetarea ta captează datele în aceeași perspectivă contextuală.

Reaxys este proiectat: să stocheze orice fel de date din domeniul chimiei, să integreze conținut din baze de date diferite, să ajute la distribuirea informațiilor cu colaboratorii și să producă date ce pot fi folosite azi și în viitor.

În urma unei colaborări cu Pistoia Alliance ce implica companii farmaceutice și distribuitori de caiete de laborator electronice, Elsevier a dispus ca structura de date Reaxys să fie disponibilă ca un model de date unificat (UDM) pentru a standardiza schimbul de date în chimia sintetică.

- Descoperă date relevante din domeniul chimiei indiferent de formatul folosit pentru raportare.
- Asigură-te că informația este stocată și poate fi distribuită sau explorată în contextul dorit.
- Distribuie cercetarea într-un format universal accesibil.



Crează căi noi de sinteză pe baza reacțiilor și condițiilor publicate

Reaxys AutoPlan (Figura 5) înlătură aspectele ce consumă timp, atunci când planifici o sinteză, prin generarea instantanee de căi multiple și alternative de sinteză, pentru compușii de interes. Planul de sinteză este construit din reacții descrise în multiple surse, permițând utilizatorului să construiască cea mai bună cale.

Pentru a oferi cele mai bune opțiuni de achiziționare a compușilor și pentru a furniza mai multe informații, Reaxys AutoPlan include link-uri către bazele de date: eMolecules®, Biovia® ACD și PerkinElmer® ChemACX.

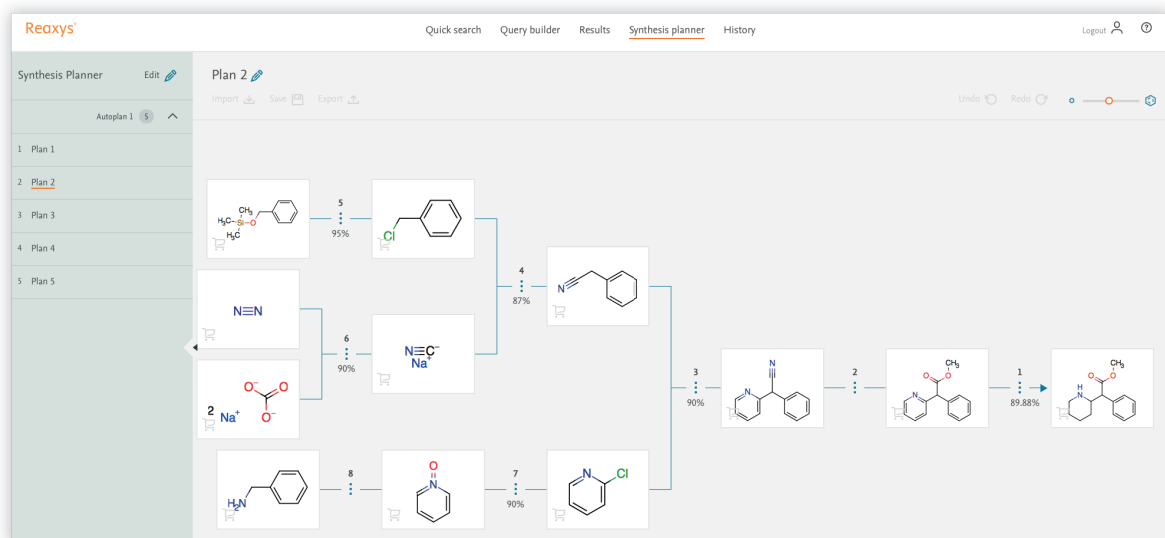
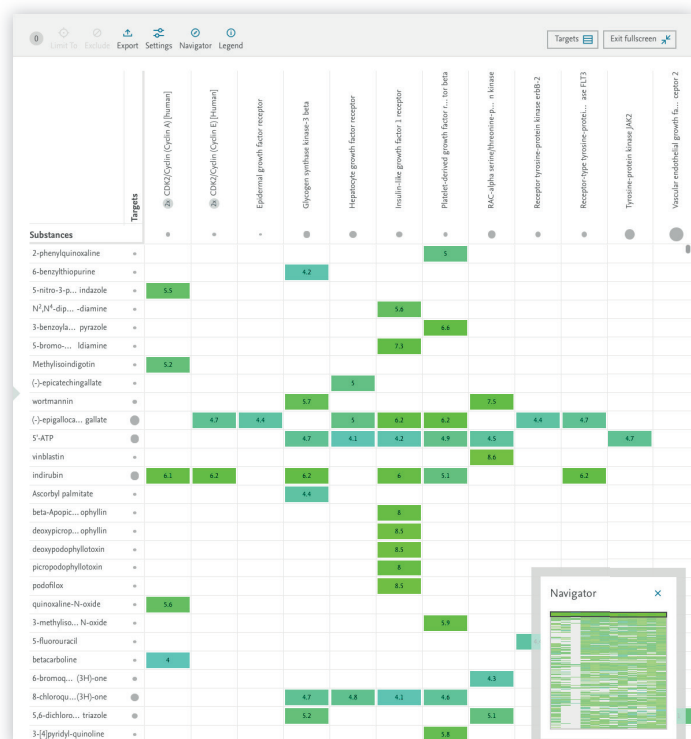


Figura 5. Reaxys AutoPlan generează multiple căi de sinteză.

Investighează bioactivitatea compusului

Reaxys poate fi complet integrat cu Reaxys Medicinal Chemistry, permițând explorarea în detaliu a relațiilor dintre compusul în cauză, ținta acestuia și datele despre bioactivitate (Figura 6). Dacă există o subscripție pentru ambele soluții, acestea pot fi accesate printr-o singură interfață optimizată.

Figura 6. Heatmap este o opțiune disponibilă pentru Reaxys Medicinal Chemistry. Permite o evaluare rapidă a interacțiunii dintre substanță și locul acțiunii.



Distribuie descoperirile cu alți cercetători

Reaxys Export (Figura 7) este cea mai simplă cale de a distribui și exporta rezultatele căutării. Accesând butonul de Export, apar diverse opțiuni pentru a integra mai departe rezultatele în planul de lucru.

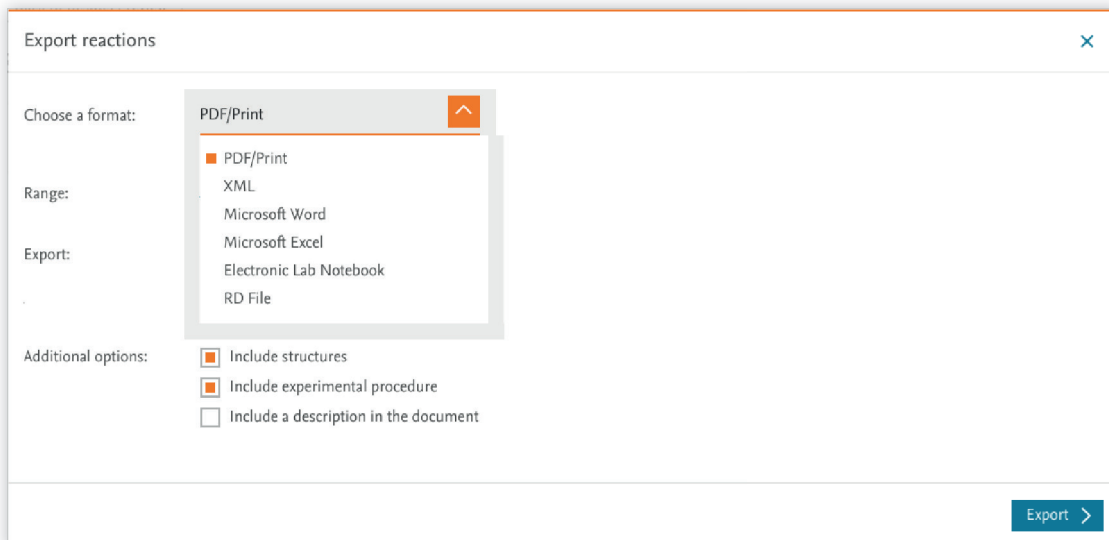


Figura 7. Reaxys Export permite distribuirea facilă a descoperirilor

Integrează Reaxys în planul de lucru deja existent

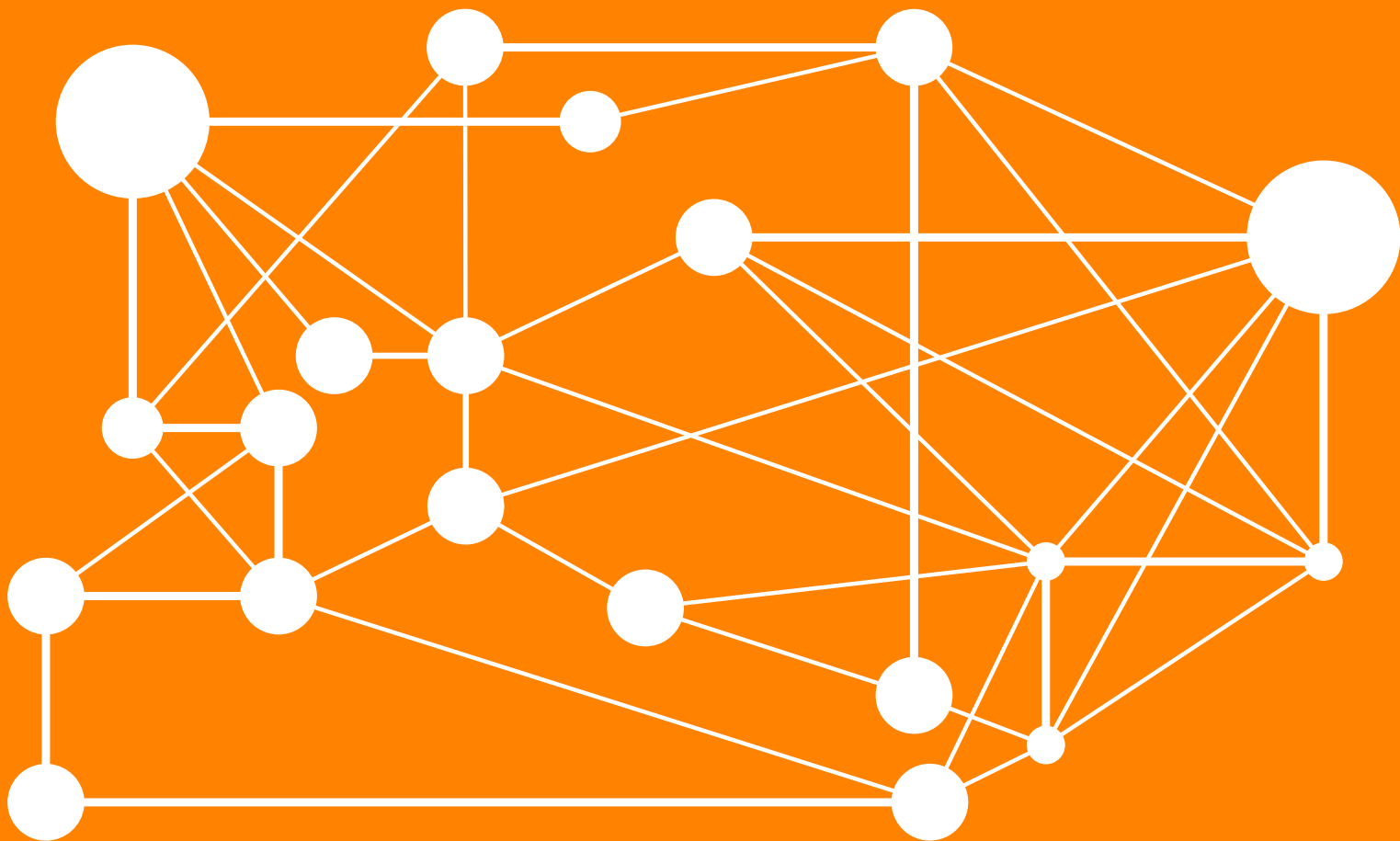
Reaxys oferă multiple opțiuni pentru a integra conținutul în alte instrumente și sisteme. Este compatibil cu caiete de laborator electronice (electronic lab notebooks – ELN) de la majoritatea furnizorilor, inclusiv Accelrys, Perkin Elmer și IDBS.

API (Application Programming Interface) permite predarea flexibilă a informației și acces în timp real la sistemul și conținutul din Reaxys, prin intermediul limbajului de programare. **Structure Flat File** oferă structuri chimice, informații conexe și date despre reacții pentru utilizarea internă (căutare de structuri asemănătoare și evaluarea unicității compusului). Există componente integrate pentru a facilita lucrul cu KNIME nodes și Pipeline Pilot. Echipa Elsevier R&D Solutions Professional Services este pregătită să vă asiste în integrarea Reaxys cu planul de lucru deja creat.

BENEFICII

Reaxys ajută cercetătorii să:

- Descopere structuri, proprietăți și reacții chimice
- Găsească facil literatură relevantă și brevete
- Construiască interogări cu o interfață intuitivă și optimizată
- Evalueze sinteza compușilor și opțiunile de achiziționare
- Distribuie datele în cadrul sau în afara instituției/organizației
- Compare datele experimentale publicate cu cele interne



Reaxys

Reaxys ajută companiile din domeniul chimiei să dezvolte produse de succes, prin furnizarea drumului cel mai scurt către optimizarea sintezelor și identificarea proprietăților chimice dorite. Reaxys împinge chimiștii și farmacologii către descoperiri medicamentoase de succes, furnizând calea cea mai scurtă către literatură relevantă, informații despre brevete, proprietăți valide ale compușilor chimici și proceduri experimentale.

Mai multe informații

Pentru a solicita mai multe date sau o demonstrație a acestui produs, te rugăm să accesezi elsevier.com/reaxys sau să trimiți un e-mail la adresa reaxys@elsevier.com.

Accesează elsevier.com/rd-solutions
sau contactează cel mai apropiat birou Elsevier

ASIA ȘI AUSTRALIA

Tel: + 65 6349 0222

JAPONIA

Tel: + 81 3 5561 5034

COREEA ȘI TAIWAN

Tel: +82 2 6714 3000

EUROPA, ORIENTUL MIJLOCIU ȘI AFRICA

Tel: +31 20 485 3767

AMERICA DE NORD, AMERICA CENTRALĂ ȘI CANADA

Tel: +1 888 615 4500

AMERICA DE SUD

Tel: +55 21 3970 9300