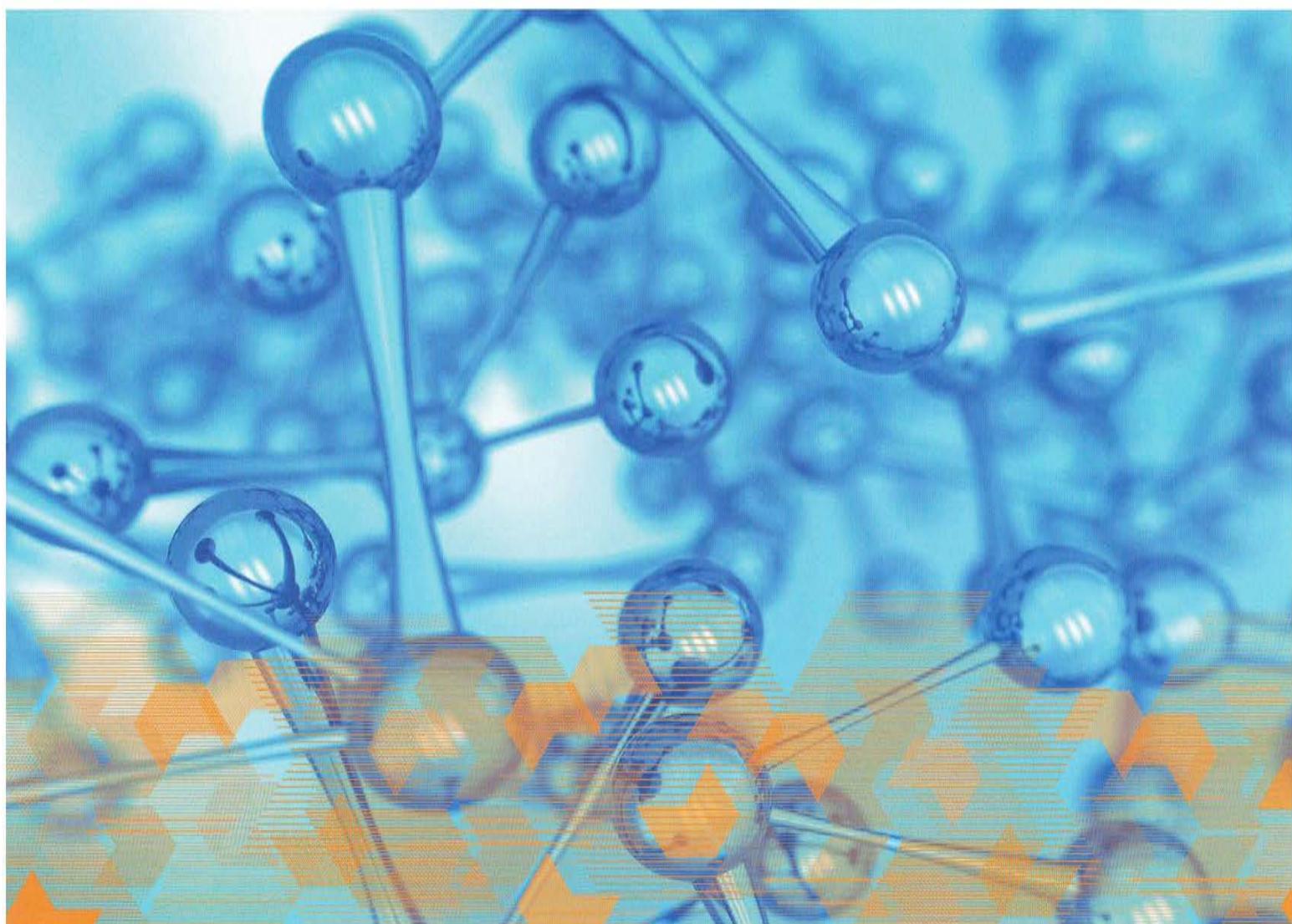
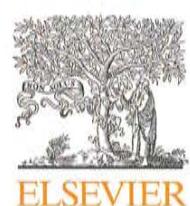


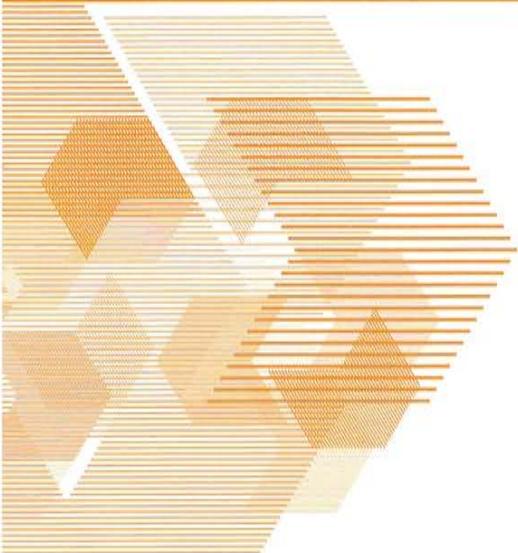
# Reaxys®



## ДАННЫЕ ДЛЯ ПРИНЯТИЯ ОБОСНОВАННЫХ РЕШЕНИЙ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ НИОКР В ОБЛАСТИ ХИМИИ

Reaxys является уникальным онлайн-ресурсом, повышающим производительность НИОКР в области химии путем предоставления экспериментальных данных о химических структурах, свойствах, реакциях и методиках.





## Reaxys®

### ВВЕДЕНИЕ

Reaxys предоставляет доступ к более чем 500 миллионам опубликованных экспериментальных фактов, что повышает эффективность процессов обнаружения и поиска химических соединений. Данные о химических структурах, свойствах химических веществ и реакциях помогают при поиске новых лекарственных средств, выборе подходящих материалов и оптимального механизма синтеза, в то время как функция экспорта данных позволяет проводить согласованный анализ внутренних и внешних данных.

**REAXYS ПОВЫШАЕТ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ НИОКР, ПРЕДОСТАВЛЯЯ ОТВЕТЫ НА ВОПРОСЫ СПЕЦИАЛИСТОВ В ОБЛАСТИ ХИМИИ.**

- Существует ли интересующее меня химическое соединение?
- Что известно об этом соединении?
- Каким образом можно получить данное соединение?
- Кто еще работает над данным соединением?

#### База данных Reaxys содержит:



### ФУНКЦИИ

### ОБШИРНЫЙ И ВЫСОКОСТРУКТУРИРОВАННЫЙ КОНТЕНТ

Данные о структуре, реакциях и свойствах химических соединений, содержащиеся в Reaxys, взяты из ведущих журналов, патентов и учебников. Основу базы данных составляет исчерпывающий перечень наиболее значимых источников литературы по химии.

Еще 16 тысяч периодических изданий, взятых из широкого спектра связанных с химией журналов, учебников и трудов конференций дополняют картину.

Для более удобного поиска все источники информации проиндексированы и структурированы в соответствии с принципами химической номенклатуры.

### СИСТЕМА ПОИСКА "ASK REAXYS"

Инновационная функция поиска позволяет с легкостью находить данные о химических свойствах и реакциях, информацию о терминах и цитирований. Система поиска "Ask Reaxys" понимает и осмысливает введенный текст (Рис. 1), предоставляемую требуемую информацию в наиболее подходящей форме. Сопоставляя слова из поискового запроса с абстрактным техническим языком базы данных, Ask Reaxys обеспечивает легкий доступ к требуемой информации.



Рис. 1. Ask Reaxys работает с текстовыми запросами

### ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ГИБКОСТЬ В ФОРМИРОВАНИИ ПОИСКОВЫХ ЗАПРОСОВ

На главной странице базы данных Reaxys (Рис. 2) пользователю на выбор предлагаются основные категории поиска: реакции, вещества, названия, формулы, медицинская химия и литература. Поисковые запросы по темам могут быть в форме текста, цифр, и химической структуры. Они включают в себя 500 поисковых полей, которые покрывают более 130 предметных тем (физико-химические, спектральные, термодинамические, электрохимические и магнитно-химические).

Рис. 2. Главная страница Reaxys с основными категориями поиска

Также, на главной странице доступен конструктор формул, созданный на основе периодической системы элементов (Рис. 3). Конструктор формул облегчает поиск неорганических и металлоорганических соединений по формулам химических соединений (в том числе по неполным формулам).

Рис. 3. Конструктор формул облегчает поиск неорганических и металлоорганических соединений

## ОБЗОР БАЗЫ ДАННЫХ

ReaxysTree позволяет визуализировать таксономическую структуру базы данных Reaxys (Рис. 4). Пользователи могут просматривать иерархическую структуру терминов, в частности, термины, касающиеся химических превращений и свойств веществ. Это помогает пользователям устанавливать связь между химическими аспектами, разрозненными на первый взгляд.

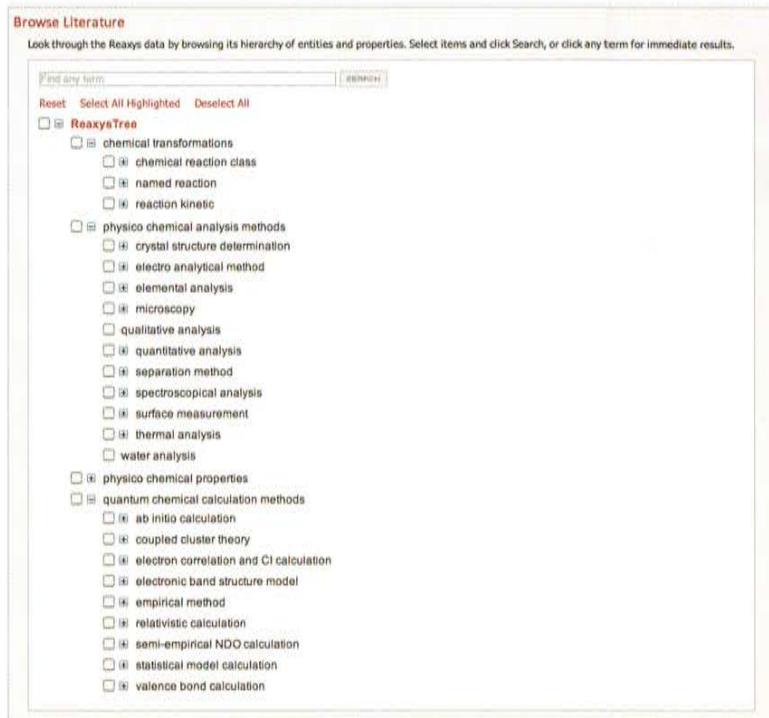


Рис. 4. Таксономический поиск данных с помощью ReaxysTree

## БЫСТРОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ РЕЛЕВАНТНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Reaxys имеет обширный набор фильтров, позволяющих определять наиболее подходящие результаты. Пользователи могут фильтровать результаты поиска по структуре и свойствам, параметрам реакции, параметрам биоактивности, по типу публикации и по прочим параметрам.

## ПОДДЕРЖКА ПРИ ОЦЕНКЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПОИСКА

Reaxys Analysis View (Рис. 5) позволяет выбирать критерии анализа для выявления взаимосвязи между полученными результатами поиска. Например, пользователи могут быстро выяснить какие именно исследователи или организации занимаются интересующим направлением, отсортировать полученные результаты по релевантности, или же проанализировать катализаторы или растворители для конкретного класса реакций.

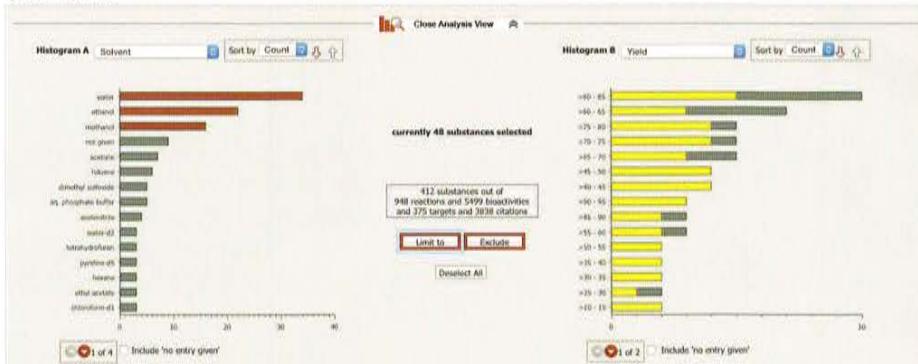


Рис. 5. Analysis View создает гистограммы для оценки взаимосвязи между полученными результатами

## ПЛАНИРОВАНИЕ ПУТЕЙ СИНТЕЗА ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Reaxys AutoPlan позволяет оптимизировать временные затраты при планировании синтеза за счет создания множественных альтернативных путей синтеза интересующих соединений. Пути синтеза строятся на основании реакций, описанных в различных видах источников, что позволяет сформировать наиболее подходящий путь синтеза. Reaxys AutoPlan содержит ссылки на базы данных eMolecules, Accelrys ACD и PerkinElmer ChemACX, что обеспечивает доступ к большему объему информации, включая оптимальные способы приобретения химических соединений.

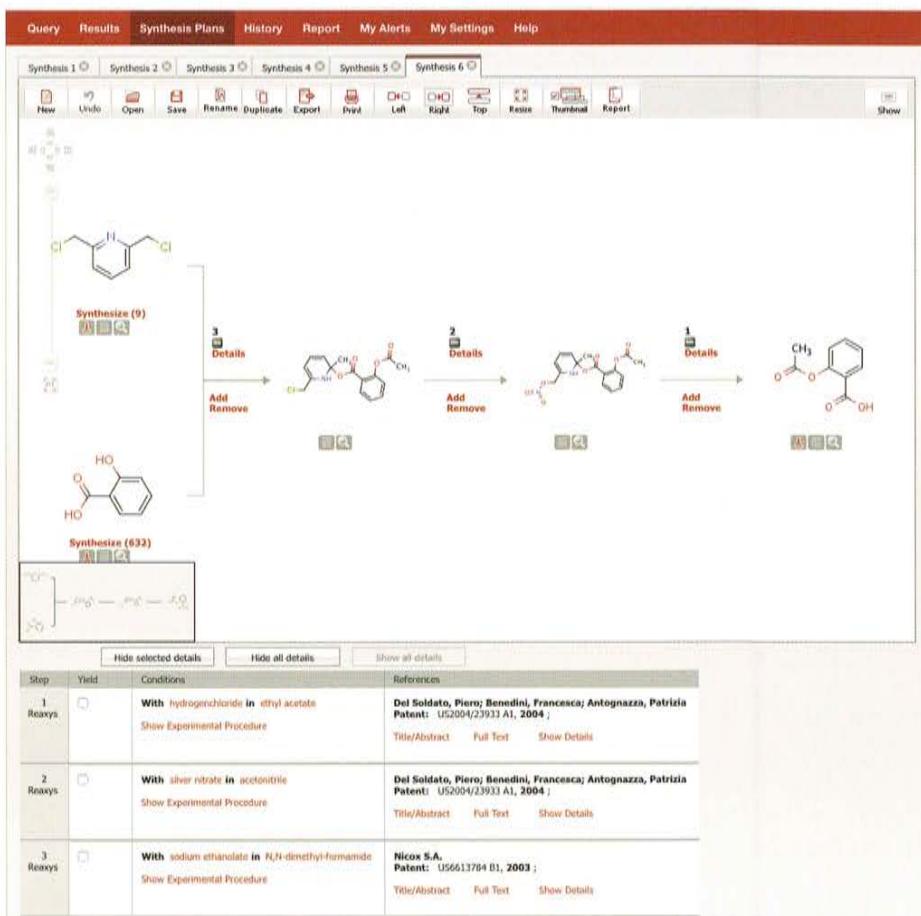


Рис. 6. Reaxys AutoPlan создает множественные пути синтеза интересующего химического соединения

ДЕЛИТЕСЬ ПОЛУЧЕННЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ С ДРУГИМИ ИССЛЕДОВАТЕЛЯМИ

Reaxys Report (Рис. 7) позволяет с легкостью делать аннотации и экспортить результаты поиска.

Аннотации можно добавлять к записям, либо к определенным их частям. После этого можно отправить отчет по электронной почте нескольким адресатам.

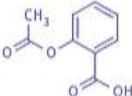
	Structure	Structure/Compound Data
1	 <input type="checkbox"/> Synthesize   Show Details   Find similar	<b>Chemical Name:</b> Aspirin  <b>Reaxys Registry Number:</b> 779271 <b>CAS Registry Number:</b> 50-78-2 <b>Type of Substance:</b> isocyclic <b>Molecular Formula:</b> C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub> <b>Linear Structure Formula:</b> C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> OOCCH <sub>3</sub> COOH <b>Molecular Weight:</b> 180.16 <b>InChI Key:</b> BSYNRYMUTXBXSQ-UHFFFAOYSA-N  <b>Highest Clinical Phase:</b> Marketed
<b>Copy to Reaxys Report:</b> <input checked="" type="checkbox"/> – Structure only <input type="checkbox"/> – Structure and Header Data		
<b>Chemical Name:</b> sodium acetyl salicylate		

Рис. 7. Reaxys Report позволяет с легкостью делиться результатами

## ИНТЕГРАЦИЯ REAXYS В СУЩЕСТВУЮЩУЮ СИСТЕМУ УПРАВЛЕНИЯ ДАННЫМИ

Reaxys предоставляет несколько вариантов интеграции контента с существующими инструментами и системами управления данными. Система совместима с электронными лабораторными записными книжками большинства производителей, включая Accelrys, Perkin Elmer и IDBS. Интерфейс прикладного программирования (англ. Application Programming Interface) позволяет получать информацию и доступ в режиме реального времени к системе и контенту Reaxys. С помощью Structure Flat File можно получить данные о химических структурах соединений, свойствах, реакциях и патентах для внутреннего использования (напр., использование структурного аналога и оценка уникальности соединений).

Команда Elsevier R&D Solutions Professional Services без труда способна интегрировать Reaxys в существующие рабочие процессы.

## БАЗА ДАННЫХ БИОАКТИВНОСТИ

База данных Reaxys может быть в полной мере интегрирована с Reaxys Medicinal Chemistry, что позволит вам детально изучить взаимосвязь между интересующими вас химическими соединениями, молекулярными мишенями и данными о биоактивности. При наличии подписки на два программных пакета, вы сможете получить доступ к обоим программным пакетам с помощью единого, интуитивно понятного пользовательского интерфейса.

## КЛЮЧЕВЫЕ ПРЕИМУЩЕСТВА

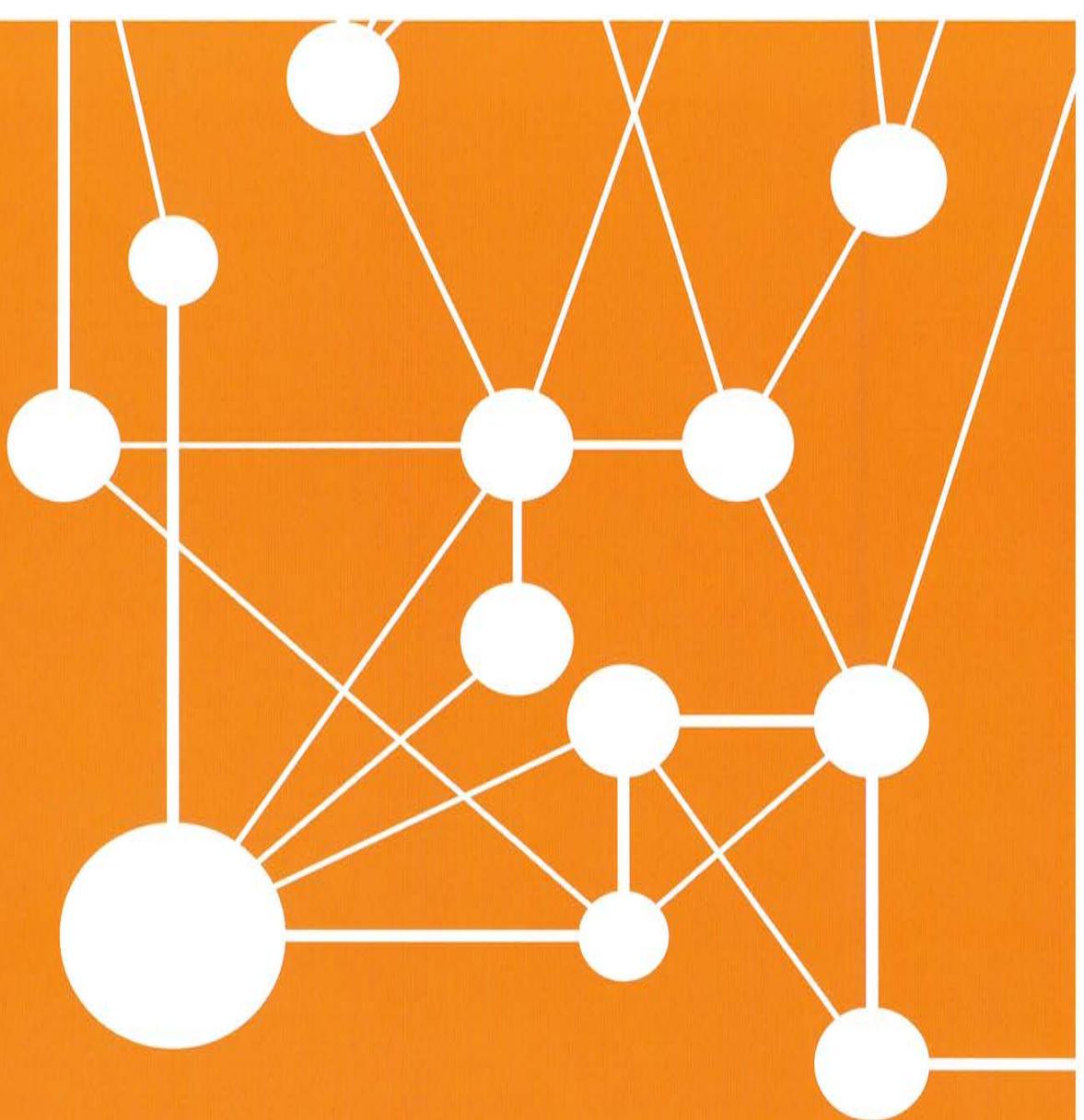
Reaxys позволяет исследователям:

- Находить информацию о химических структурах, свойствах и реакциях
- Составлять поисковые гибкие и интуитивно понятные поисковые запросы
- Оценивать варианты синтеза и приобретения интересующих химических соединений
- Делиться данными внутри организации и за ее пределами
- Сравнивать собственные и опубликованные экспериментальные данные

## **НАЧАЛО РАБОТЫ**

Дополнительную информацию о том, как Reaxys может помочь вашей организации достичь успехов в научно-исследовательской и образовательной сфере, можно получить у коммерческих представителей Elsevier по адресу [elsevier.com/reaxys](http://elsevier.com/reaxys)

Для получения дополнительной информации или демонстрации продукта,  
посетите сайт представительства Elsevier в России  
[www.elsevierscience.ru/products/reaxys/](http://www.elsevierscience.ru/products/reaxys/) или свяжитесь с нами  
по указанным контактам:  
Тел.: +7 (495) 644-09-11  
Email: [a.khudoshin@elsevier.com](mailto:a.khudoshin@elsevier.com)



## LEARN MORE

To request information or a product demonstration,  
please visit [elsevier.com/reaxys](http://elsevier.com/reaxys) or email us at  
[reaxys@elsevier.com](mailto:reaxys@elsevier.com).

Visit [www.elsevier.com/rd-solutions](http://www.elsevier.com/rd-solutions)  
or contact your nearest Elsevier office.

### ASIA AND AUSTRALIA

Tel: + 65 6349 0222  
Email: [sginfo@elsevier.com](mailto:sginfo@elsevier.com)

### JAPAN

Tel: + 81 3 5561 5034  
Email: [jpinfo@elsevier.com](mailto:jpinfo@elsevier.com)

### KOREA AND TAIWAN

Tel: +82 2 6714 3000  
Email: [krinfo.corp@elsevier.com](mailto:krinfo.corp@elsevier.com)

### EUROPE, MIDDLE EAST AND AFRICA

Tel: +31 20 485 3767  
Email: [nlinfo@elsevier.com](mailto:nlinfo@elsevier.com)

### NORTH AMERICA, CENTRAL AMERICA AND CANADA

Tel: +1 888 615 4500  
Email: [usinfo@elsevier.com](mailto:usinfo@elsevier.com)

### SOUTH AMERICA

Tel: +55 21 3970 9300  
Email: [brinfo@elsevier.com](mailto:brinfo@elsevier.com)