ELSEVIER

REAXYS: ИНФОРМАЦИОННЫЙ БУКЛЕТ

ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

Reaxys – база данных химических соединений и реакций, структурированная в соответствии с химическими принципами и обладающая уникальными характеристиками, которые обеспечивают большую гибкость в формировании запросов, разработке путей синтеза химических соединений, создании отчетов, детальных обзоров литературы и других потребностей пользователя. Reaxys даст ответы на все ваши вопросы, касающиеся химии.

- Существует ли интересующее вас органическое, неорганическое или металлоорганическое соединение?
- Что известно о структуре, свойствах и реакциях, в которые вступает данное соединение?
- Каким образом можно получить данное соединение?
- Кто еще работает над данным соединением и реакциями данного типа?

ХАРАКТЕРИСТИКИ

Многоцелевая высокоструктурированная база данных

Данные о структуре и свойствах химических соединений, приведенные в базе Reaxys, взяты из ведущих журналов, патентов и учебников. Основу базы данных составляет исчерпывающий перечень литературных источников по химии, расположенных в порядке уменьшения значимости. Для полноты картины пользователь может дополнительно воспользоваться 16 000 периодическими изданиями, охватывающими широкий спектр публикаций (журналы по химии, учебники, а также протоколы конференций). Для более удобного поиска все источники информации проиндексированы и структурированы в соответствии с принципами химической номенклатуры.

База данных Reaxys содержит:

55 млн органических, неорганических и металлоорганических соединений

36 млн химических реакций

500 млн опубликованных результатов экспериментов

Источниками информации для уникальной базы данных являются:

16 000 периодических изданий по химии

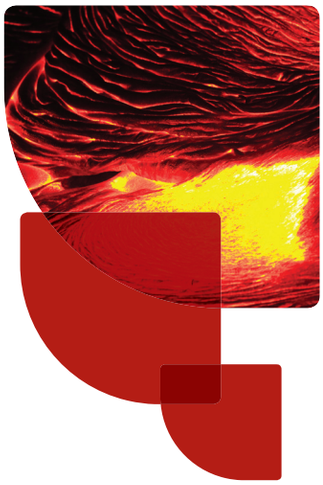
130 тематических разделов – гораздо больше, чем предлагают другие исследовательские платформы

Публикации за более чем **240**-летний период (с 1771 г. по настоящее время)

REAXYS®

elsevier.com/reaxys

Данные по состоянию на 1 марта 2014 г. Количество источников литературы округлено.



Функциональная гибкость в формировании запросов

На главной странице базы данных Reaxys (рис. 1) пользователю на выбор предлагаются 3 основные категории поиска: **литература**; **реакции** и **вещества**, **наименования и формулы**. Настраиваемые темы запросов имеют опции поддержки (введение текста и формул, соответствующих химической структуре) и включают в себя 500 поисковых полей, охватывающих более чем 130 разнообразных характеристик (физико-химические, спектральные, термодинамические, электрохимические и магнитно-химические характеристики). Также на главной странице доступен Конструктор формул (Formula Builder), созданный на основе периодической системы элементов (рис. 2) для облегчения поиска неорганических и металлоорганических соединений.

Новые системы поиска — Ask Reaxys и Reaxys Tree

Система **Ask Reaxys** позволяет осуществлять поиск в базе данных, составляя вопрос в привычной для вас форме (по аналогии с использованием обычного интернет-поисковика). Это позволяет осуществлять поиск по фразам и идеям, выраженным в общем виде. Поисковый алгоритм Reaxys распознает контекст и подбирает ответы, располагая их в порядке уменьшения значимости (например, документы, пути синтеза или же вещество и данные о его свойствах).

Система **Reaxys Tree** позволяет визуализировать таксономическую структуру базы данных Reaxys (рис. 3) и осуществлять собственный поиск, устанавливая связь между химическими аспектами, на первый взгляд не имеющими взаимосвязи.

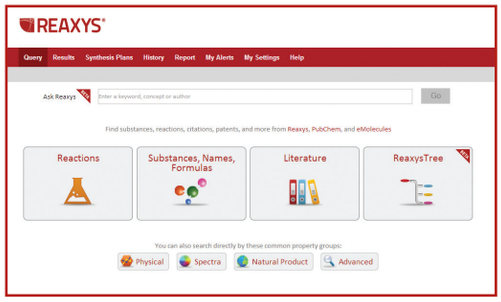


Рис. 1. Новый пользовательский интерфейс Reaxys

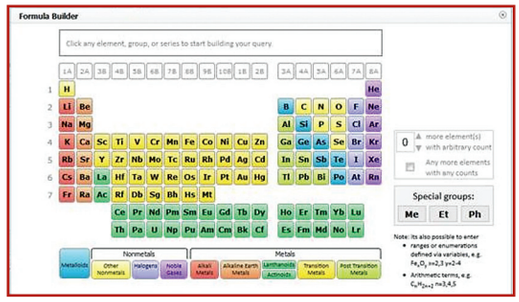


Рис. 2. Конструктор формул (Formula Builder) Reaxys

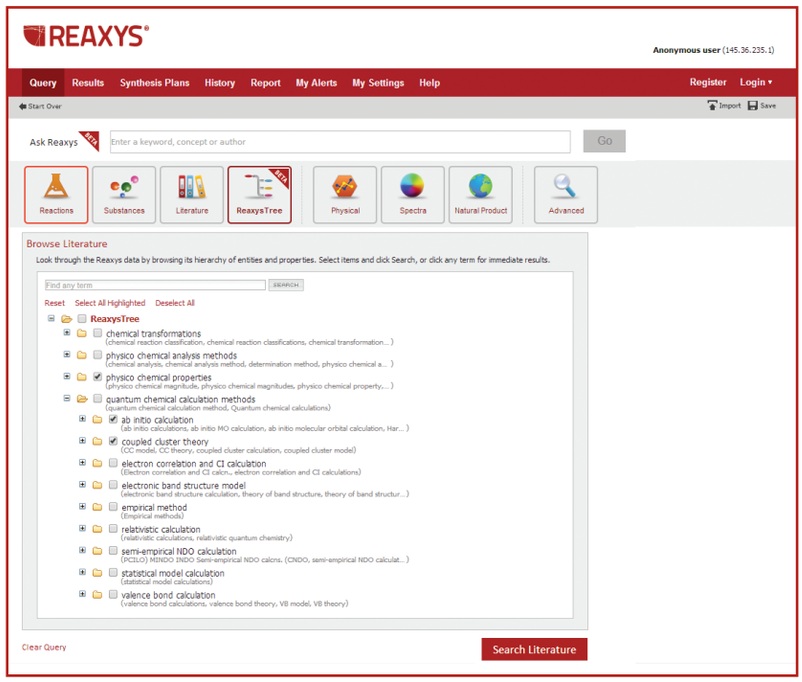


Рис. 3. Таксономический поиск данных с помощью Reaxys Tree

Планировщик путей синтеза химических соединений с ссылками на платные источники информации

Reaxys AutoPlan позволяет оптимизировать временные затраты при планировании синтеза за счет генерирования множественных альтернативных путей синтеза интересующих соединений (рис. 4). Reaxys AutoPlan содержит ссылки на базы данных eMolecules, Accelrys ACD и PerkinElmer ChemACX, что обеспечивает доступ к большему объему информации, включая оптимальные способы приобретения информации.

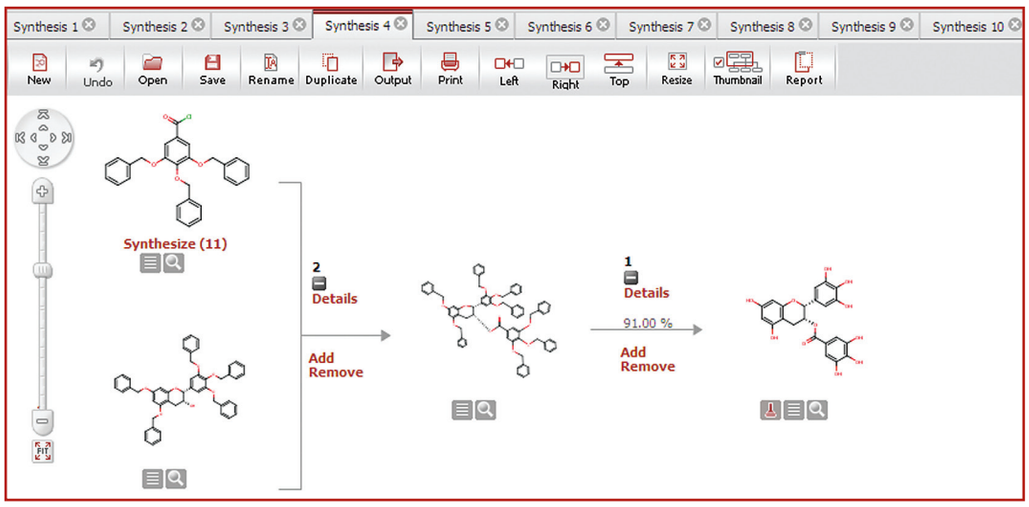


Рис. 4. Reaxys AutoPlan генерирует множественные альтернативные пути синтеза интересующего вас химического соединения

Поддержка при оценке результатов поиска

Reaxys Analysis View позволяет выбирать критерии анализа для выявления взаимосвязи между полученными вами результатами. Например, вы можете быстро выяснить, какие именно исследователи или организации занимаются интересующим вас направлением, отсортировать полученные вами результаты по выходу продукта или же проанализировать катализаторы или растворители для конкретного класса реакций (рис. 5).

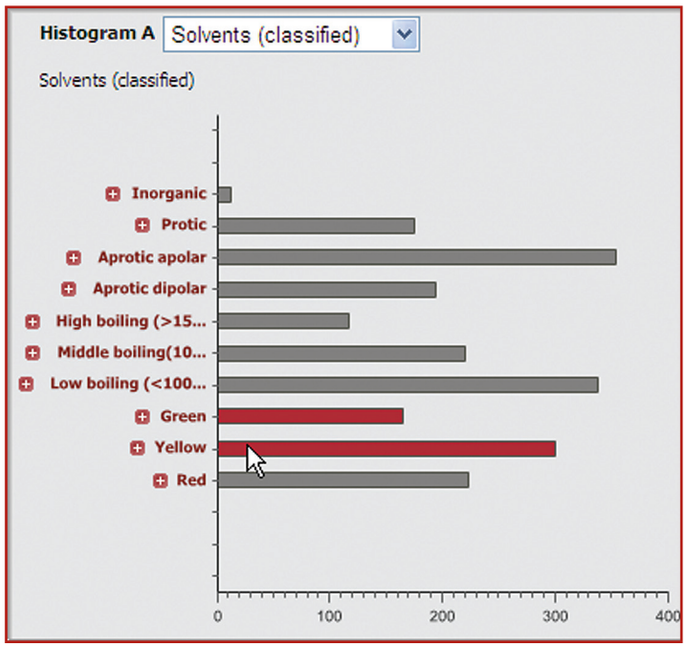


Рис. 5. Reaxys Analysis View генерирует гистограммы, используя ваши исходные данные

Делитесь полученными результатами с коллегами

Для упрощения обмена информации с коллегами в **Reaxys Report** поддерживаются аннотации, экспорт результатов поиска и путей синтеза (рис. 6). Также Reaxys совместима с библиотеками электронных лабораторий (ELN) от ведущих разработчиков, таких как Accelrys, Perkin Elmer и IDBS.

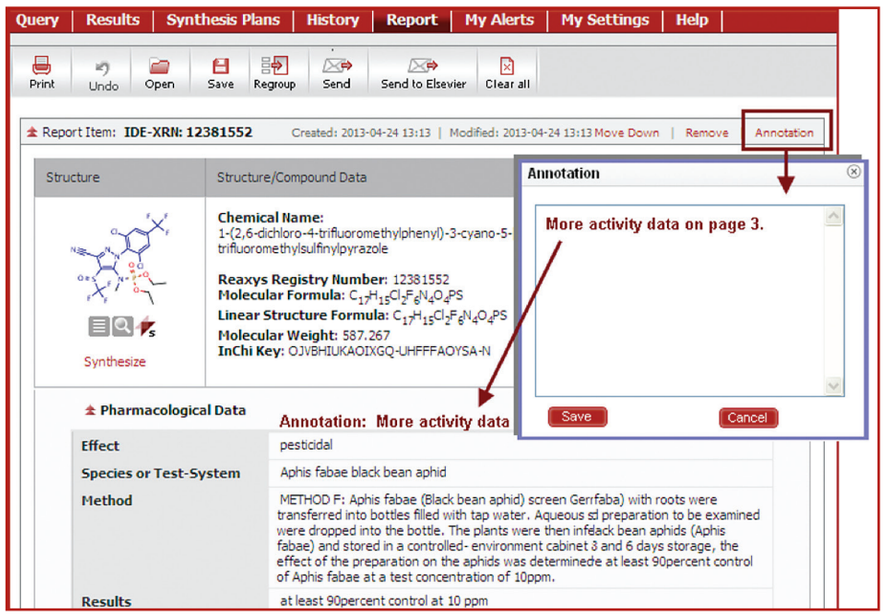


Рис. 6. Reaxys Report позволяет добавлять аннотации

Интегрируйте Reaxys в вашу систему управления данными

Интегрировать Reaxys в вашу систему управления данными и внутренними рабочими процессами вычислений можно при помощи программного пакета Reaxys Structure Flat File. Также доступен интерфейс Application Programming Interface, поддерживающий разработку специфических химических реакций и изучение определенных веществ, что персонализирует ваше исследование и увеличивает его потенциал.

Откройте для себя самую большую базу данных биоактивности

Reaxys может быть в полной мере интегрирована в Reaxys Medicinal Chemistry, что позволяет вам детально изучить взаимосвязь между интересующими вас химическими соединениями, белками, а также данными по биоактивности. Подписка на оба программных пакета обеспечивает доступ к ним с помощью единого, интуитивно понятного пользовательского интерфейса.

КЛЮЧЕВЫЕ ПРЕИМУЩЕСТВА

Какие возможности предлагает Reaxys исследователям?

- Быстрый доступ к информации о химических структурах, свойствах и реакциях
- Гибкий подход к формированию запросов, не требующий специализированных знаний
- Охват публикаций по химии за более чем 240-летний период (с 1771 г. по настоящее время)
- Достоверная оценка вариантов синтеза и приобретения интересующих химических соединений
- Интуитивно понятный интерфейс, позволяющий делиться данными с коллегами (как в рамках организации, так и с любыми партнерами)

Узнайте больше на
elsevier.com/reaxys

REAXYS®

Copyright © 2014 Reed Elsevier Properties SA. Все права защищены. Reaxys® и знак Reaxys® являются зарегистрированными и защищенными торговыми марками Reed Elsevier Properties SA. Все права защищены.