



Reaxys Medicinal Chemistry

ВВЕДЕНИЕ

Reaxys Medicinal Chemistry является крупнейшей структурированной базой данных по медицинской химии в мире, обладающей инструментами для оперативного экспорта данных. Она предназначена для установления связей между химическими соединениями, мишенями и биологической активностью, что позволит вам оценить потенциальные лекарственные препараты на ранней стадии.

- Какие соединения взаимодействуют с моей мишенью?
- Какого типа взаимодействия происходят между моим соединением и моей мишенью?
- Как взаимодействуют другие соединения с похожей структурой?
- Какое из моих лекарств-кандидатов имеет наибольшие шансы на успех?
- Какие исследователи работают над схожими соединениями и мишенями?

ОСОБЕННОСТИ

Крупнейшая в мире структурированная база данных по медицинской химии

Reaxys Medicinal Chemistry является крупнейшей из существующих баз данных по медицинской химии. База данных GVK BIO GOSTAR интегрирована в контент Reaxys. Она охватывает все ключевые направления исследований по медицинской химии, включая данные об исследованиях на животных в естественных и в лабораторных условиях, информацию по фармакокинетике и токсичности. Вся база данных индексируется и структурирована, что обеспечивает легкий и быстрый поиск. Контент GVK BIO GOSTAR приведен в соответствие со стандартами Reaxys для нормализации всех данных, карт и глоссариев, а также во избежание противоречивых данных и повторяющейся информации.

База данных Reaxys Medicinal Chemistry содержит:

27,5 млн.

Единиц данных по биологической активности

5,5 млн.

уникальных веществ

11000

мишеней, поддающихся воздействию

5720

видов

Источниками этого уникального набора данных является:

320000

Публикаций по медицинской химии включая:

90000

Патентов

230000

статей по мед. химии

5000

журналов по разработке лекарств

Гибкие поисковые запросы

В пользовательском интерфейсе Reaxys Medicinal Chemistry вы можете производить поиск в разделе «Биологическая активность» (“Bioactivity”), «Вещества» (“Substances”) и «Литература» (“Literature”) (Рис. 1). Возможен поиск по текстовому запросу, а также при помощи химической структуры. Кроме того, специальные фильтры позволяют улучшить результаты поиска.

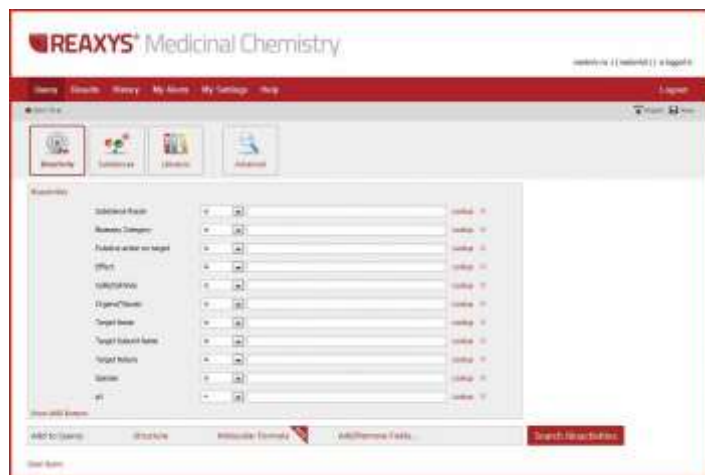


Рис. 1. Пользовательский интерфейс Reaxys Medicinal Chemistry.

С легкостью оценивайте взаимодействия веществ

«Тепловая карта» (Heatmap View) (Рис. 2) предоставляет обзор связей между веществами и их мишенями в разрезе различных параметров. Это позволяет быстро определить наиболее релевантные связи типа «вещество-мишень». Можно менять настройки параметров для определения новых связей между веществами и клеточными линиями.



Рис. 2. «Тепловая карта» в Reaxys Medicinal Chemistry.

Определяйте количественно аффинность веществ и мишеней

Reaxys Medicinal Chemistry содержит значения pX для каждой единицы данных, что позволяет с легкостью сравнивать биоданные из различных публикаций и типов анализа. Это позволяет легко объединить данные из разных источников (напр., из GVK BIO GOSTAR). Значения pX –это нормированная величина, позволяющая сравнивать воздействие соединений и мишеней. Для удобства они показаны в «Тепловой карте».



Делитесь своими открытиями

Reaxys Medicinal Chemistry характеризуется гибкими возможностями экспорта результатов поиска в различных форматах, которые полностью совместимы со сторонним программным обеспечением (моделирование, рабочие процессы, визуализация данных). Также вы можете делать пометки в результатах и напрямую отправлять их вашим коллегам.

Интегрируйте Reaxys Medicinal Chemistry с вашей системой

SAR Flat File позволяет интегрировать Reaxys Medicinal Chemistry в вашу внутреннюю систему. Кроме того, с помощью Application Programming Interface можно прорабатывать конкретные химические реакции и заявки на исследование соединения, чтобы персонализировать и увеличить возможности исследователя.

Полная интеграция с Reaxys

Reaxys Medicinal Chemistry полностью интегрируется с Reaxys, в результате чего вы можете получить доступ к структуре и физико-химическим свойствам известных соединений, увеличить охват доступной литературы, воспользоваться автоматическим генератором путей синтеза для работы над выбранными веществами. Оформите подписку на оба решения и пользуйтесь ими в едином интуитивном пользовательском интерфейсе (Рис. 3).



Рис. 3. Интуитивный пользовательский интерфейс для обоих решений Reaxys.

ОСНОВНЫЕ ПРЕИМУЩЕСТВА

Reaxys Medicinal Chemistry позволяет:

- Уверенно оценивать эффект, оказываемый соединением на целевые протеины
- Количественно определять аффинность соединений и мишеней
- Проводить быструю оценку взаимодействия веществ
- Использовать данные без необходимости в их нормализации
- Получать полные обзоры исследовательской среды

Более подробная информация доступна на elsevier.com/reaxys

elsevier.com/reaxys