Особенности баз Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry и примеры решения исследовательских задач.

Моисеев Алексей Александрович
Директор по развитию и обслуживанию клиентов направления химико-биологических решений Elsevier S&T
a.Moiseev@elsevier.com +79251131255

План

- Особенности и покрытие базы данных Reaxys.
- Оптимальная стратегия поиска литературы.
- Свойства веществ в Reaxys
- Химические реакции в Reaxys
- Биологическая активность и медицинская химия в Reaxys
- Вопросы

Особенности и покрытие базы данных Reaxys.

Источники информации

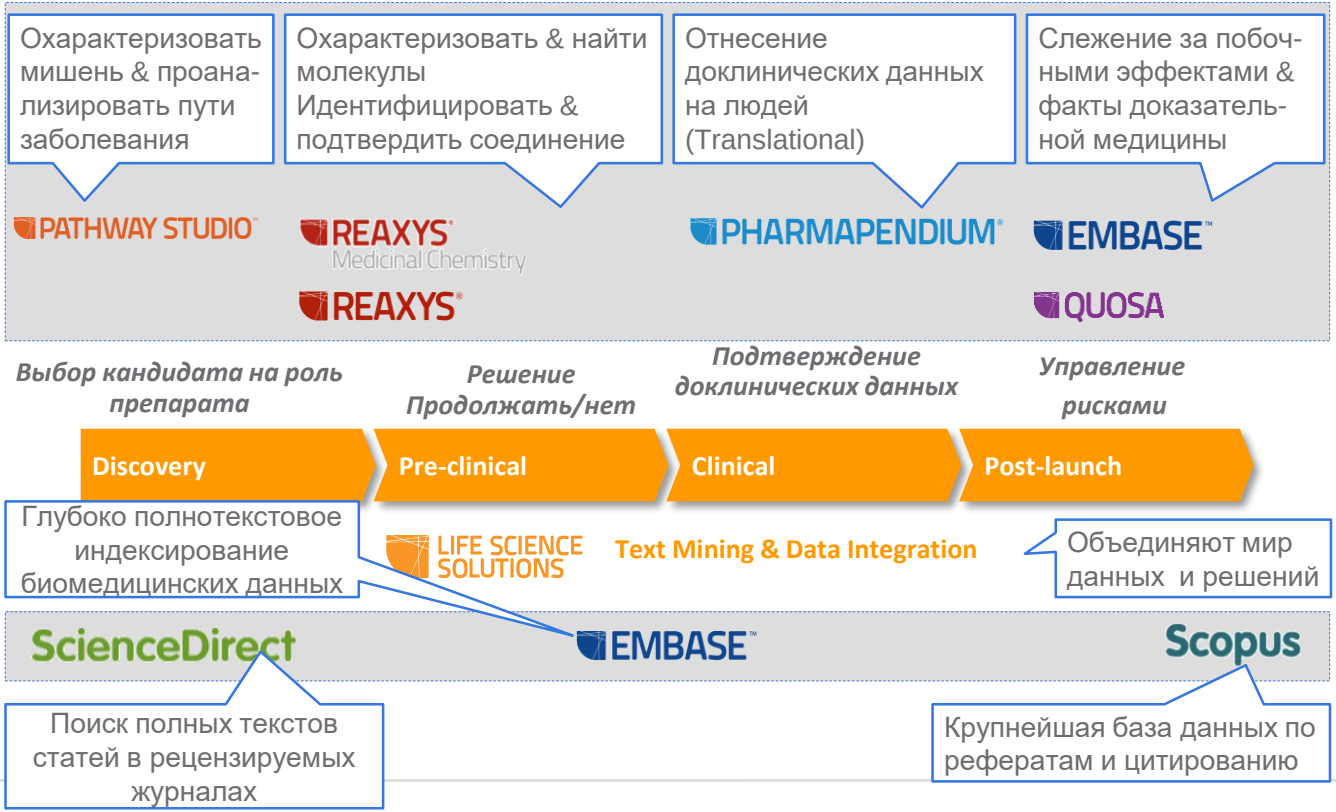
Индексация

Извлечение данных

08,08,2019
Моисеев Алексей Александрович
a.Moiseev@elasevier.com +79251131255

Решения в области life sciences

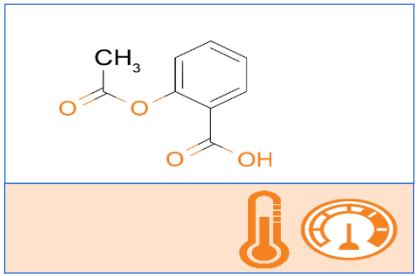
НАПРАВЛЕНЫ НА КЛЮЧЕВЫЕ ПРОБЛЕМЫ В R&D



Продукты Elsevier охватывают всю цепочку "От геномов к лекарству in silico"

Reaxys

Информационная система, построенная для отражения реального использования химических знаний



>105 Млн Записей **соединений** с **>500 Млн** извлеченных фактов об их **свойствах**: физические, химические, спектральные, экологические, биоактивность

>41 Млн Записей **реакций** включают извлеченные данные об условиях проведения реакций, растворителях, катализаторах, выходе

Основные принципы химии

Связь с

51.9 Млн записей Литературы из **16,000** периодических изданий описывая применения в области материало-ведения, биомедицины, наук о Земле, технических и экологических наук, фармакологии...

Применение в различных дисциплинах

ELSEVIER

Reaxys источники для научного контента

16.000 titles
(journals, books and patents)

56+mio articles

(Elsevier, ACS, Nature-Springer, Blackwell, Taylor and Francis,etc)

1,5+mio patents

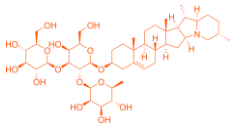
WPO, USPO, EPO [≈ mid 70´s >]

PO: JP, KR, CN, TW [2015 >]

380+k book chapters

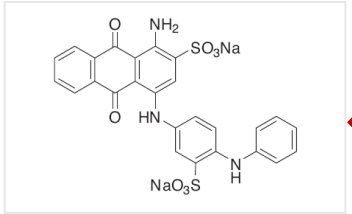
Beilstein, Gmelin,….

≈ 450 journals + PO
[manually excerpted]

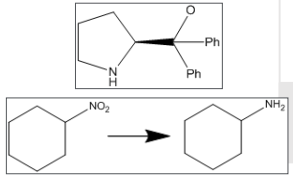


Химия как принцип организации данных

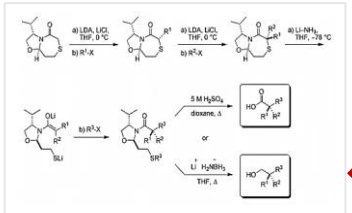
Из экспериментальных данных статей из рецензируемых журналов и патентов



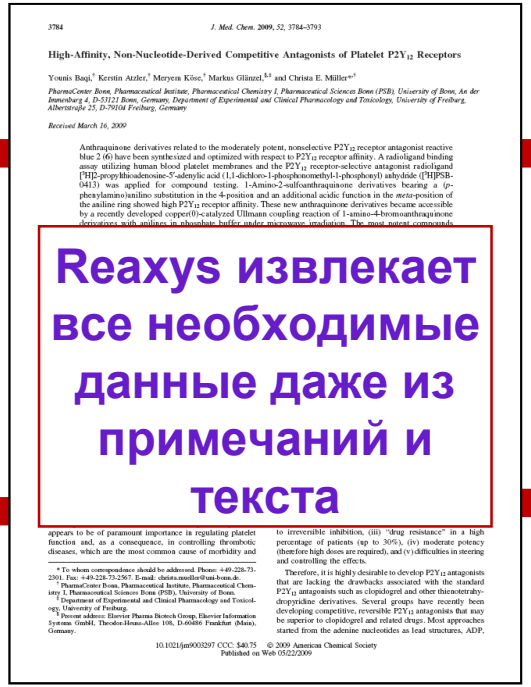
Химическая структура



- Физические свойства
- Спектры
- Биоактивность
- Природные материалы



Химический и биохимический синтез



3784 *J. Med. Chem.* 2009, *52*, 3784–3793

High-Affinity, Non-Nucleotide-Derived Competitive Antagonists of Platelet $P2Y_{12}$ Receptors

Younis Baqi,† Kerstin Atzler,† Meryem Köse,† Markus Glänzel,‡,§ and Christa E. Müller*,†

PharmaCenter Bonn, Pharmaceutical Institute, Pharmaceutical Chemistry I, Pharmaceutical Sciences Bonn (PSB), University of Bonn, An der Immenburg 4, D-53121 Bonn, Germany, Department of Experimental and Clinical Pharmacology and Toxicology, University of Freiburg, Albertstraße 25, D-79104 Freiburg, Germany

Received March 16, 2009

Anthraquinone derivatives related to the moderately potent, nonselective $P2Y_{12}$ receptor antagonist reactive blue 2 (6) have been synthesized and optimized with respect to $P2Y_{12}$ receptor affinity. A radioligand binding assay utilizing human blood platelet membranes and the $P2Y_{12}$ receptor-selective antagonist radioligand [^{3}H]2-propylthioadenosine-5′-adenylic acid (1,1-dichloro-1-phosphonomethyl-1-phosphonyl) anhydride ([^{3}H]PSB-0413) was applied for compound testing. 1-Amino-2-sulfoanthraquinone derivatives bearing a (*p*-phenylamino)anilino substitution in the 4-position and an additional acidic function in the *meta*-position of the aniline ring showed high $P2Y_{12}$ receptor affinity. These new anthraquinone derivatives became accessible by a recently developed copper(0)-catalyzed Ullmann coupling reaction of 1-amino-4-bromoanthraquinone derivatives with anilines in phosphate buffer under microwave irradiation. The most potent compounds

appears to be of paramount importance in regulating platelet function and, as a consequence, in controlling thrombotic diseases, which are the most common cause of morbidity and

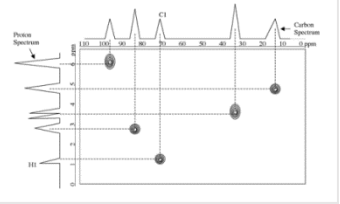
to irreversible inhibition, (iii) "drug resistance" in a high percentage of patients (up to 30%), (iv) moderate potency (therefore high doses are required), and (v) difficulties in steering and controlling the effects.

Therefore, it is highly desirable to develop $P2Y_{12}$ antagonists that are lacking the drawbacks associated with the standard $P2Y_{12}$ antagonists such as clopidogrel and other thienotetrahydropyridine derivatives. Several groups have recently been developing competitive, reversible $P2Y_{12}$ antagonists that may be superior to clopidogrel and related drugs. Most approaches started from the adenine nucleotides as lead structures, ADP,

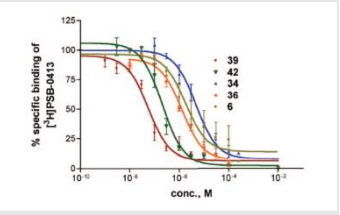
* To whom correspondence should be addressed. Phone: +49-228-73-2301. Fax: +49-228-73-2567. E-mail: christa.mueller@uni-bonn.de.
† PharmaCenter Bonn, Pharmaceutical Institute, Pharmaceutical Chemistry I, Pharmaceutical Sciences Bonn (PSB), University of Bonn.
‡ Department of Experimental and Clinical Pharmacology and Toxicology, University of Freiburg.
§ Present address: Elsevier Pharma Biotech Group, Elsevier Information Systems GmbH, Theodor-Heuss-Allee 108, D-60486 Frankfurt (Main), Germany.

10.1021/jm900297 CCC: $40.75 © 2009 American Chemical Society
Published on Web 05/22/2009

Reaxys извлекает все необходимые данные даже из примечаний и текста



Физико-химические свойства



Фармакологические свойства

Свойства химических соединений и их взаимодействия являются ключевыми для способа организации данных в базе данных.

Также индексируется информация о физико-химических и фармологических свойствах.

ELSEVIER

Reaxys

Это обширные, хорошо проиндексированные данные под рукой

Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах веществ в мире. Растворимость это только одно из **>500 полей данных для поиска** в Reaxys

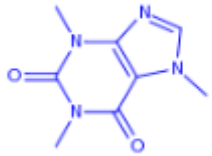
Melting point
Boiling point
Sublimation
Refractive index
Density
Adsorption
Association
Autoignition
Bound Surface Phenomena
Viscosity
Circular Dichromism
Complex Phase Equilibria
Compressibility
Conformation
Critical Density
Critical Micelle Concentration
Critical Pressure
Critical Temparature
Critical Volume
Electrical Data
Electrical Moment
Electrochemistry Data
Electron Binding
Energy Barriers
Energy Data
Enthalpy of Formation
Enthalpy of Sublimation
Flash Point
Gas Phase
Dissociation Energy
Crystal System
Crystal Phase
Heat Capacity
Henry Constat
Ionization Potential
Isoelectric Point
Kinematic Viscosity
Liquid Phase
Magnetic Data
Mechanical Properties
Molecular Deformation
Optical Data
Thermochemical Data
Solubility
Solution Behavior
Sound Properites
Static Dielectric Constat
Surface Tension
Transition Points
Transport Data
NMR Spectroscopy
IR Spectroscopy
Mass Spectroscopy
UV/VIS Spectroscopy
ESR Spectroscopy
NQR Spectroscopy
Raman Spectroscopy
Luminscence Spectroscopy
Fluorescence Spectroscopy
Exposure Assessment
Bioaccumulation
Biomagnification
Biodegradation
Degradation in Soil
Oxygen Demand
Uses
Isolation from Natural Prod.
Reaction Yield
Reaction Conditions
Reaction Type
Named Reaction
Pharmacological Data
Route of Administration
Concentration
Target
Substance Effect
Substance Action on Target
Substance Dose
Bioassay
Animal Model
Organs/Tissue
Cells/Cell Lines
Measurment Parameter
Endpoint of Effect
Ecotoxicology Data
Dielectric Constant
Dissociation Exponent
Dynamic Viscosity
Electrolytic Conductivity
Enthalpy of Fusion
Enthalpy of Vaporization
Explosion Limits
Interactomic Distance/Angle
Kinematic Viscosity
Liquid/Solid Systems
Liquid/Vapor Systems
Metarotation

Solubility

And many more...

ELSEVIER

Вы получаете данные непосредственно извлеченные данные



Physical Data - 766

- Melting Point - 43
- Sublimation - 2
- Refractive Index - 2
- Density - 9
- Adsorption (MCS) - 23
- Association (MCS) - 22
- Boundary Surface Phen
- Chromatographic Data
- Conformation - 1
- Crystal Phase - 7
- Crystal Property Descri

- Crystal System - 2
- Decomposition - 1

- Heat Capacity Cp - 2
- Heat Capacity Cp0 - 1

- Solubility (MCS) - 102
- Solution Behaviour (MCS) - 20

(s) - 7

1

Solubility, g·l^{-1}	Saturation	Temperature (Solubility (MC	Solvent (Solubility (MCS))	Comment (Solubility (MCS))	Reference
20.88		28	water		Singh, Neetu; Singh, Udai P.; Nikhil, Kumar; Roy, Partha; Singh, Hariji Full Text ↗ Details › Abstract ›
	in pure solvent	25	methanol	Solubility: 1.23 g/100g solvent	Guo, Kun; Sadiq, Ghazala; Seaton, Colin; Davey, Roger; Yin, Qiuxiang Full Text ↗ Cited 42 times ↗ Details › Abstract ›
	in pure solvent	25	ethanol	Solubility: 1.48 g/100g solvent	Guo, Kun; Sadiq, Ghazala; Seaton, Colin; Davey, Roger; Yin, Qiuxiang Full Text ↗ Cited 42 times ↗ Details › Abstract ›
	in pure solvent	25	acetone	Solubility: 1.51 g/100g solvent	Guo, Kun; Sadiq, Ghazala; Seaton, Colin; Davey, Roger; Yin, Qiuxiang Full Text ↗ Cited 42 times ↗ Details › Abstract ›

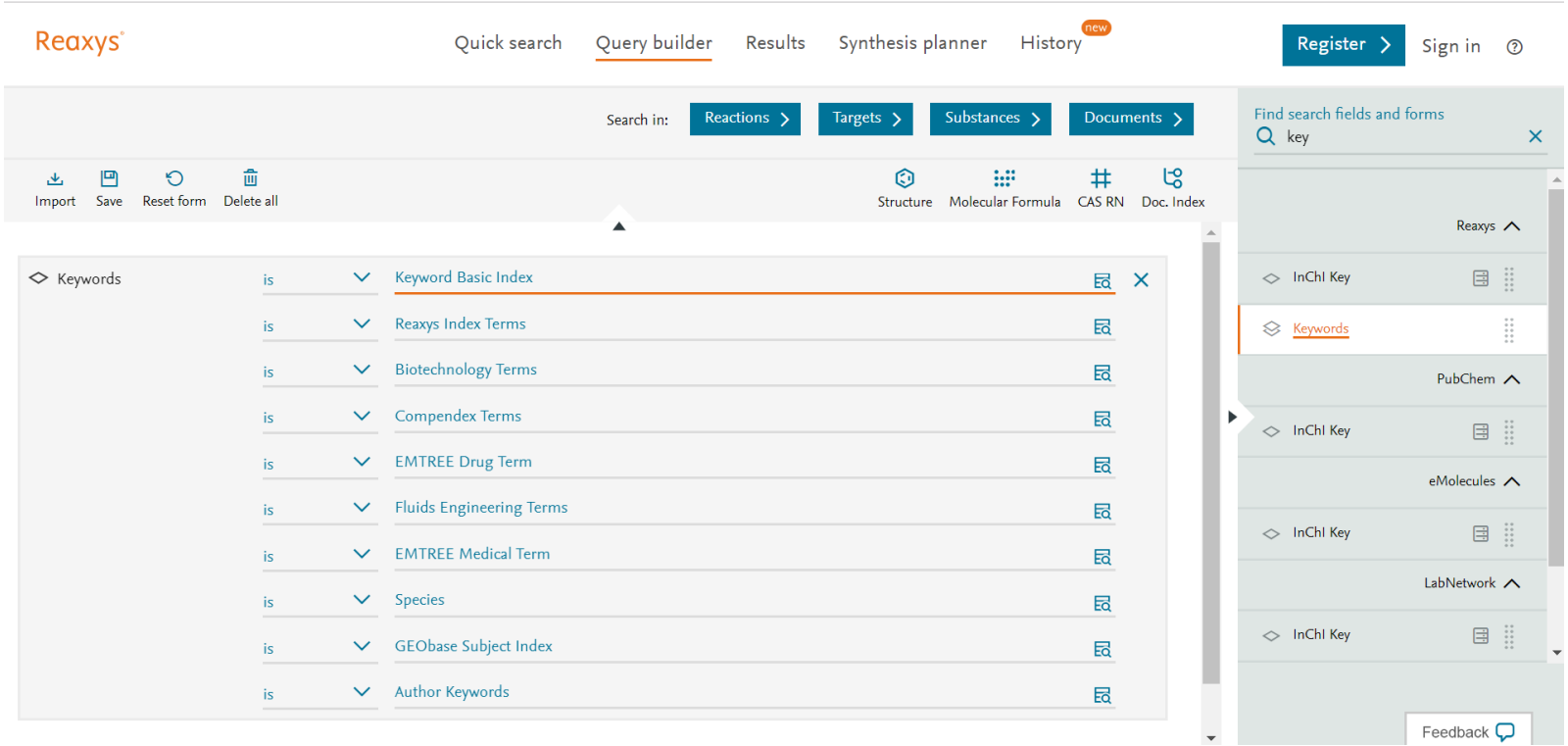
Оптимальная стратегия поиска литературы.

Как быстро и эффективно найти и проанализировать литературу, включая патенты, по различным направлениям химии?

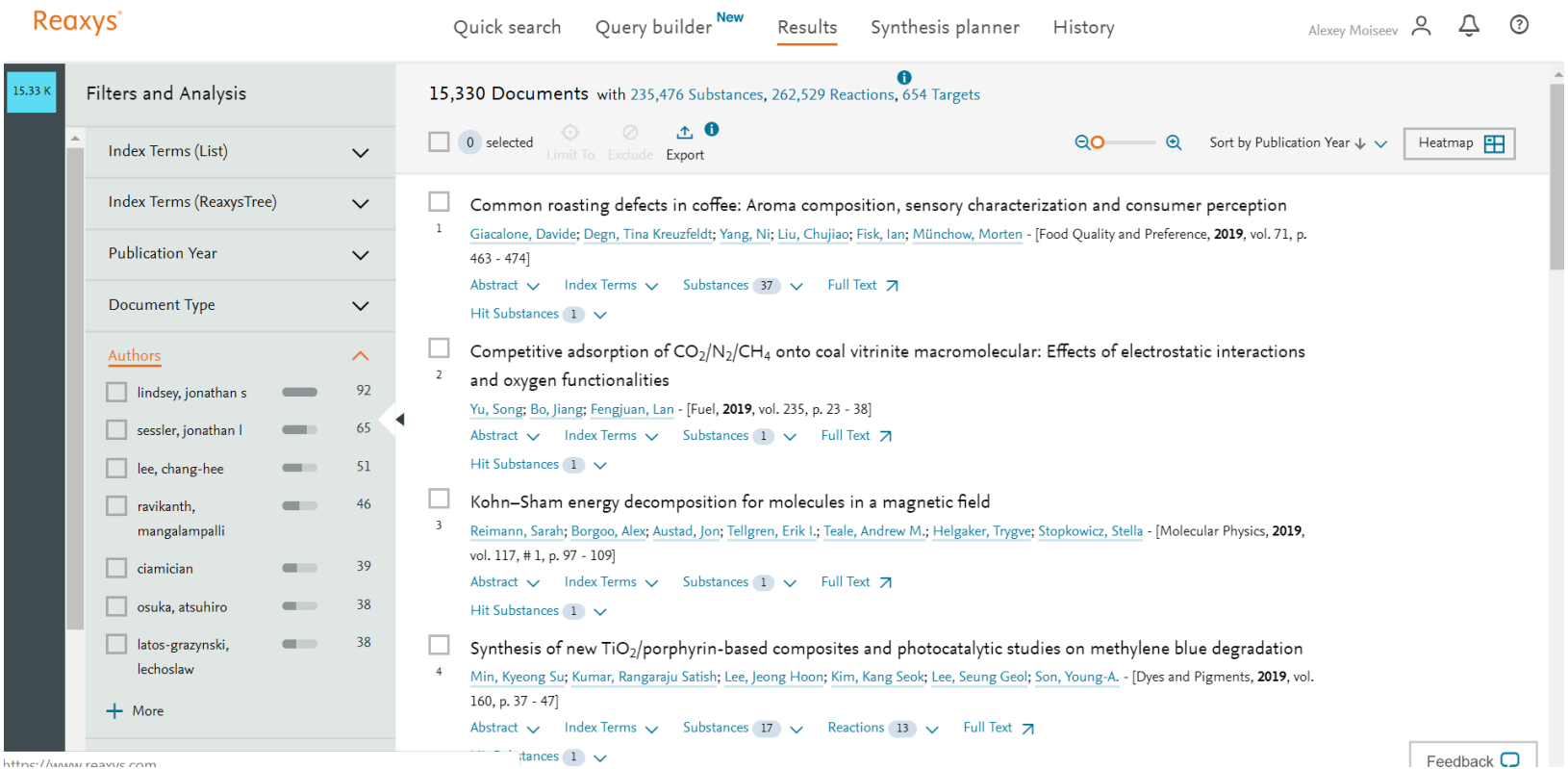
Какова оптимальная стратегия поиска литературы по данному соединению или классу соединений?

08,08,2019
Моисеев Алексей Александрович
a.Moiseev@elasevier.com +79251131255

Поиск литературы. Поиск по ключевым словам



ELSEVIER

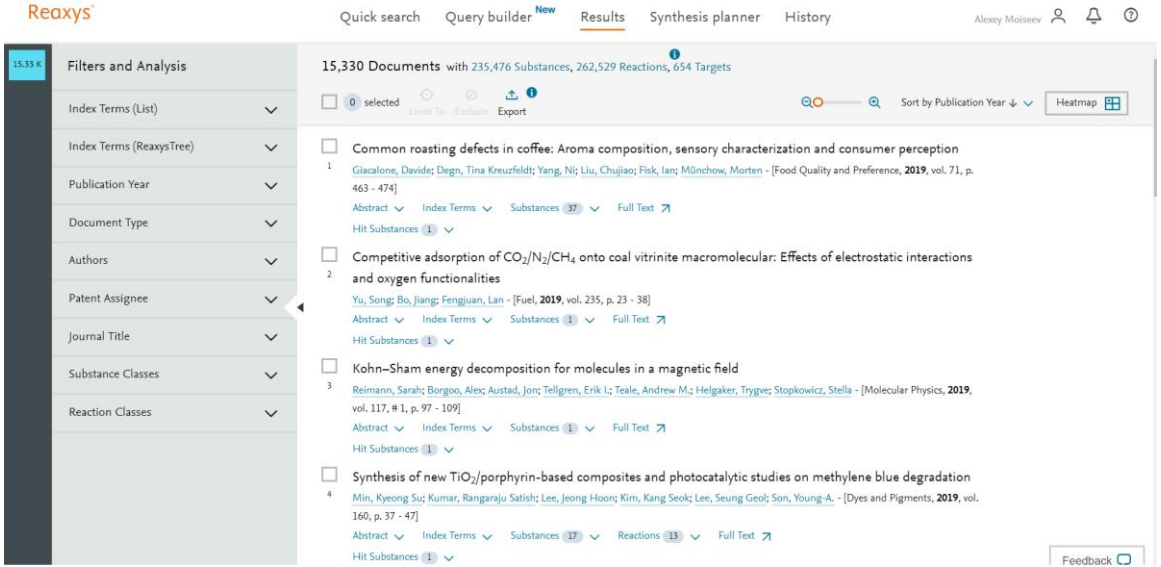


ELSEVIER

Reaxys

LIFE SCIENCE SOLUTIONS

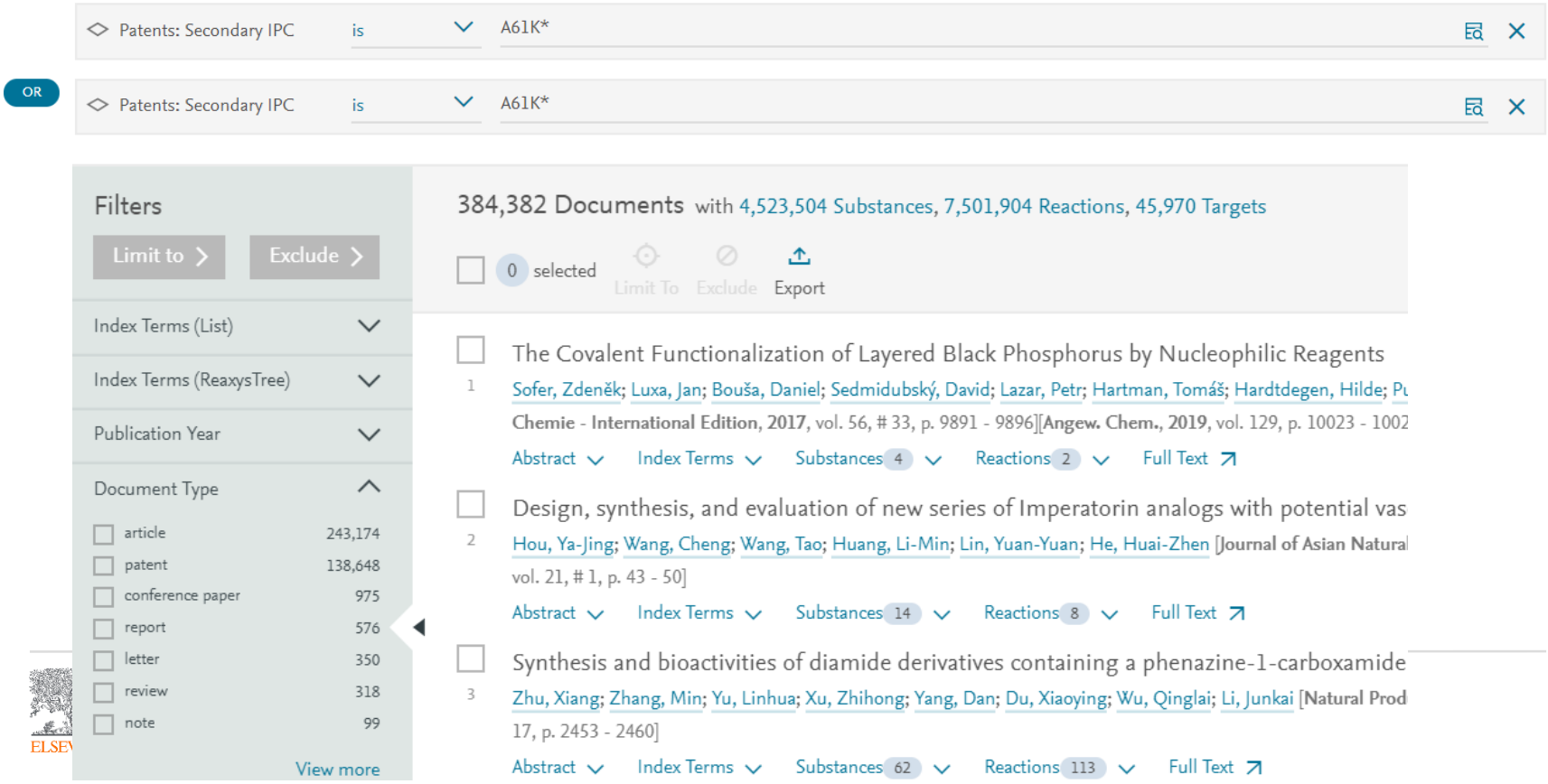
PATENT SEARCHING USING THE LITERATURE SEARCH FORM



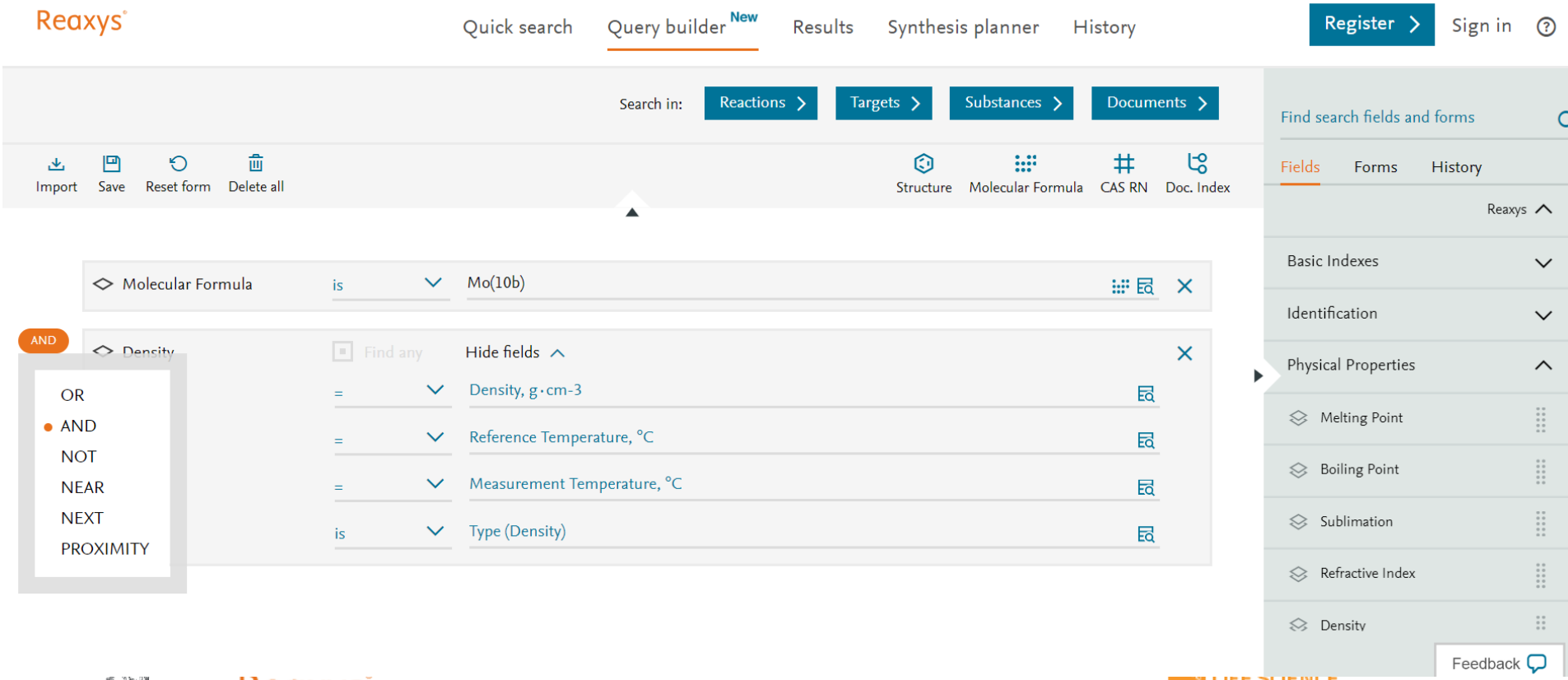

```
Patent:   US6147080 A1, 2000 ; (granted)
Patent:   US2005/9844 A1, 2005 ; (published application)
Patent:   US1996-34288P  (pre-published application number)
Patent:   US-109128 (pre-published application number no date)


WO2013091285a1 ->>>> wo2013*91285
20110281878 ->>>> *2011*281878
US6147080 ->>>> Direct
```

(IPC) A61K* -

препараты для медицины, стоматологии или косметики.



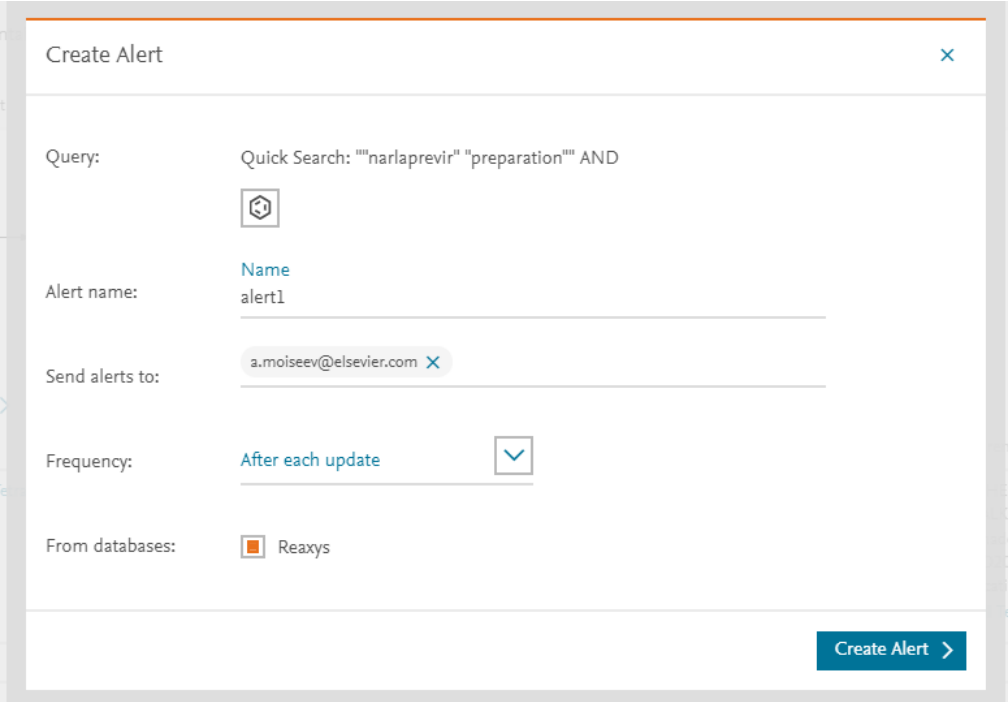
БЫСТРОЕ ОБЪЕДИНЕНИЕ ПОИСКОВЫХ ПОЛЕЙ ЛОГИКОЙ (OR,AND,NOT,NEXT)



ELSEVIER Reaxys LIFE SCIENCE SOLUTIONS

СОЗДАНИЕ ОПОВЕЩЕНИЙ

Можно создать оповещение для появления новых совпадений, о которых система вас будет оповещать по электронной почте.



Например, если появляются новые пути синтеза нужного вещества, Reaxys будет присылать Вам оповещение по электронной почте.

Свойства веществ в Reaxys

Как быстро найти экспериментальные свойства химических соединений, включая физико-химические, механохимические, электрохимический и многие другие? Как найти соединения с заданными свойствами?

Reaxys

Это обширные, хорошо проиндексированные данные под рукой

Reaxys является крупнейшим хранилищем данных о свойствах веществ в мире. Растворимость это только одно из **>500 полей данных для поиска** в Reaxys

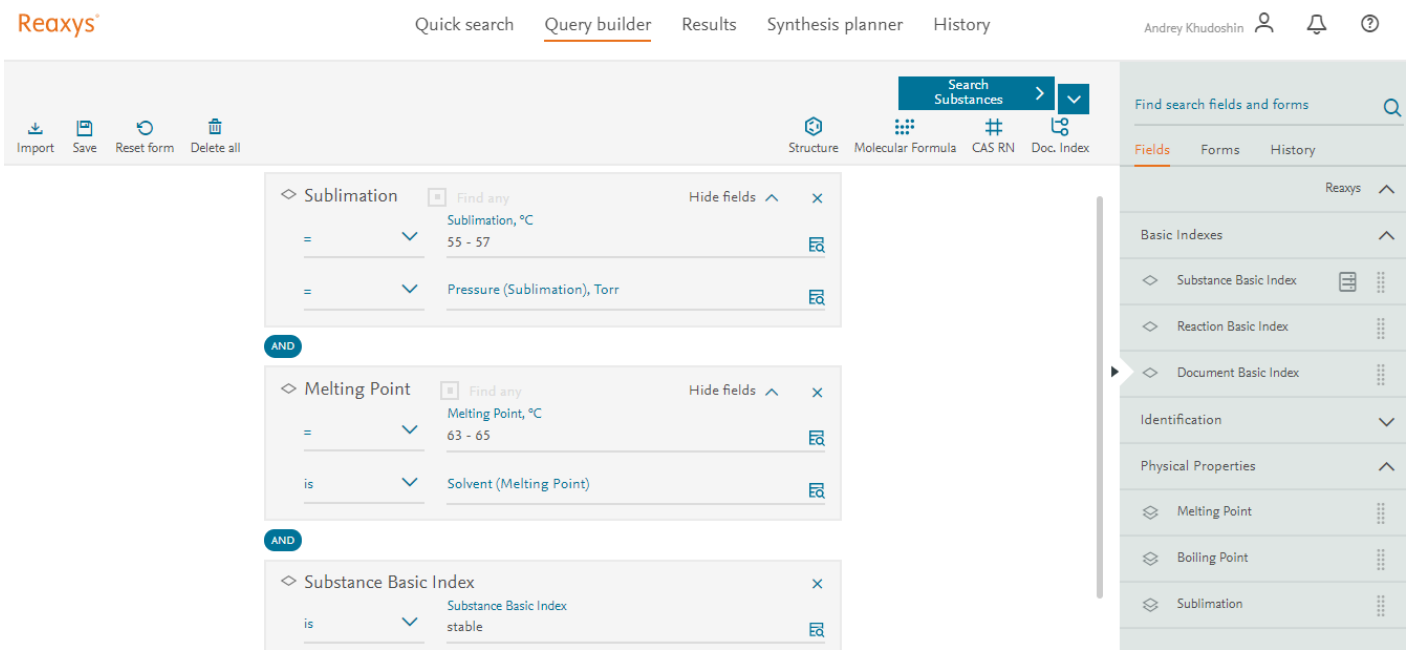
Melting point
Boiling point
Sublimation
Refractive index
Density
Adsorption
Association
Autoignition
Bound Surface Phenomena
Viscosity
Circular Dichromism
Complex Phase Equilibria
Compressibility
Conformation
Critical Density
Critical Micelle Concentration
Critical Pressure
Critical Temparature
Critical Volume
Electrical Data
Electrical Moment
Electrochemistry Data
Electron Binding
Energy Barriers
Energy Data
Enthalpy of Formation
Enthalpy of Sublimation
Flash Point
Gas Phase
Dissociation Energy
Crystal System
Crystal Phase
Heat Capacity
Henry Constat
Ionization Potential
Isoelectric Point
Kinematic Viscosity
Liquid Phase
Magnetic Data
Mechanical Properties
Molecular Deformation
Optical Data
Thermochemical Data
Solubility
Solution Behavior
Sound Properites
Static Dielectric Constat
Surface Tension
Transition Points
Transport Data
NMR Spectroscopy
IR Spectroscopy
Mass Spectroscopy
UV/VIS Spectroscopy
ESR Spectroscopy
NQR Spectroscopy
Raman Spectroscopy
Luminscence Spectroscopy
Fluorescence Spectroscopy
Exposure Assessment
Bioaccumulation
Biomagnification
Biodegradation
Degradation in Soil
Oxygen Demand
Uses
Isolation from Natural Prod.
Reaction Yield
Reaction Conditions
Reaction Type
Named Reaction
Pharmacological Data
Route of Administration
Concentration
Target
Substance Effect
Substance Action on Target
Substance Dose
Bioassay
Animal Model
Organs/Tissue
Cells/Cell Lines
Measurment Parameter
Endpoint of Effect
Ecotoxicology Data
Dielectric Constant
Dissociation Exponent
Dynamic Viscosity
Electrolytic Conductivity
Enthalpy of Fusion
Enthalpy of Vaporization
Explosion Limits
Interactomic Distance/Angle
Kinematic Viscosity
Liquid/Solid Systems
Liquid/Vapor Systems
Metarotation

Solubility

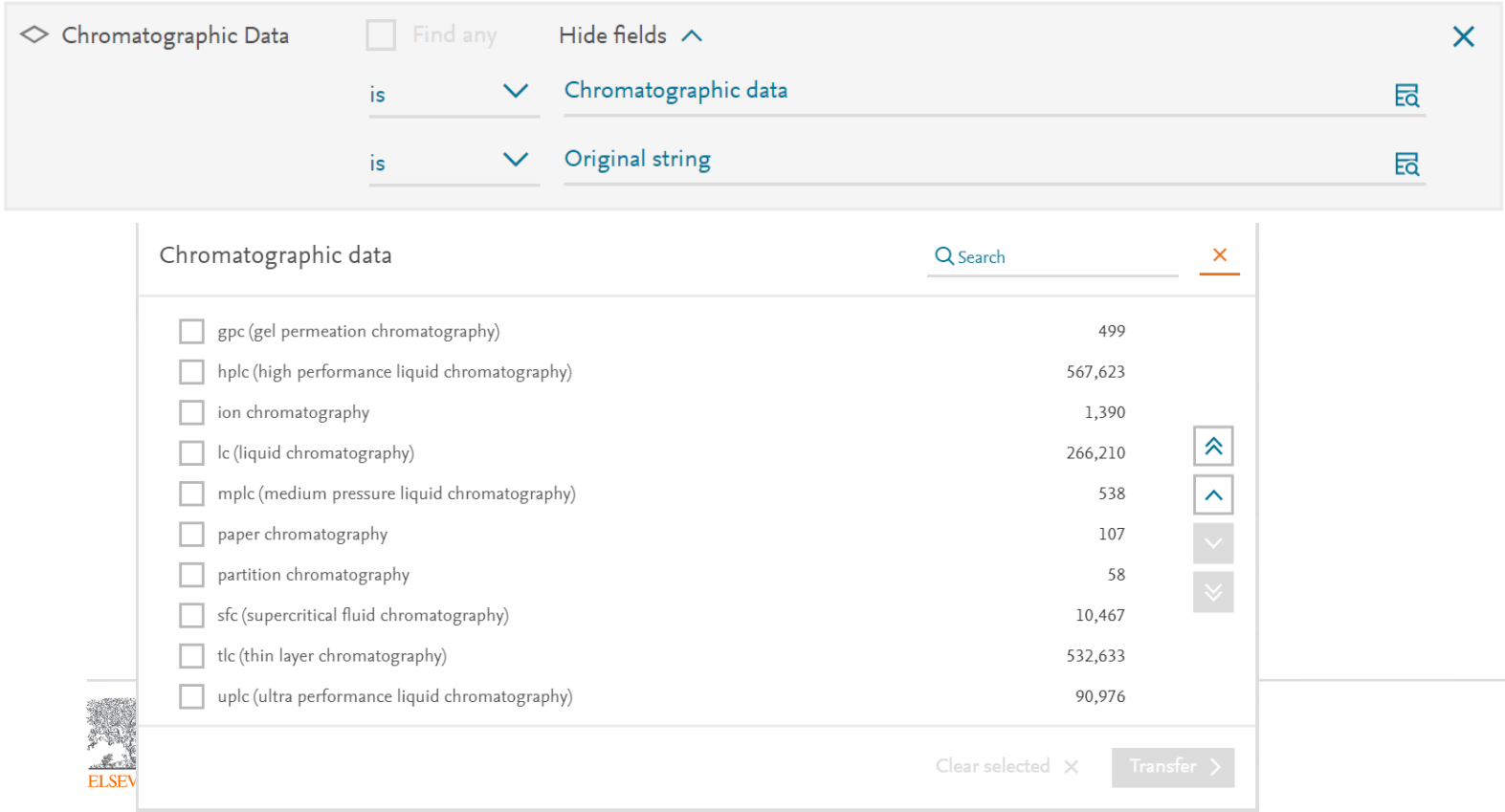
And many more...

ELSEVIER

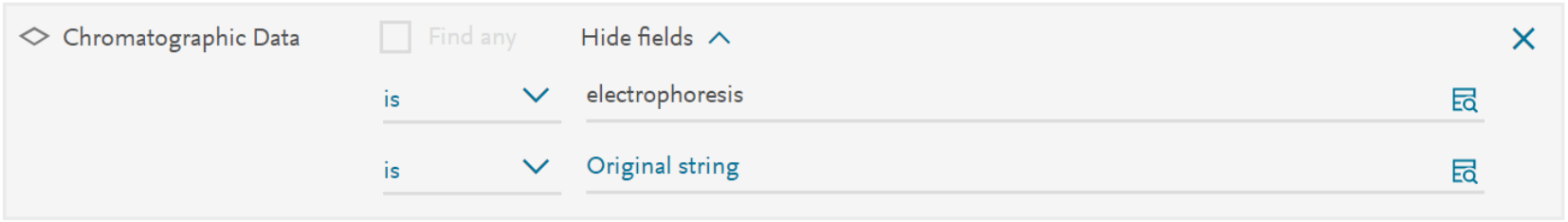
Как найти соединения с заданными свойствами?

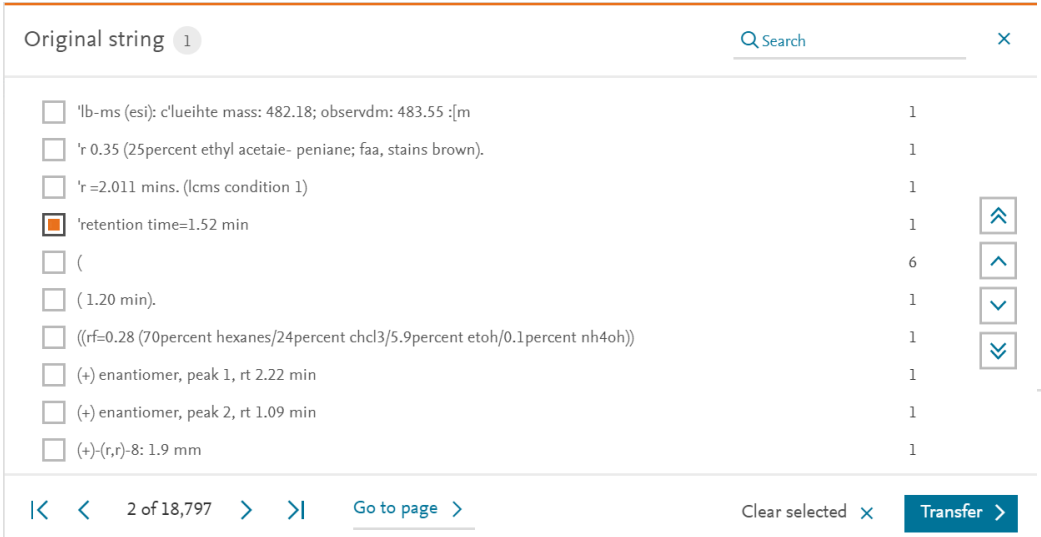


Поиск веществ с необходимыми хроматографическими свойствами

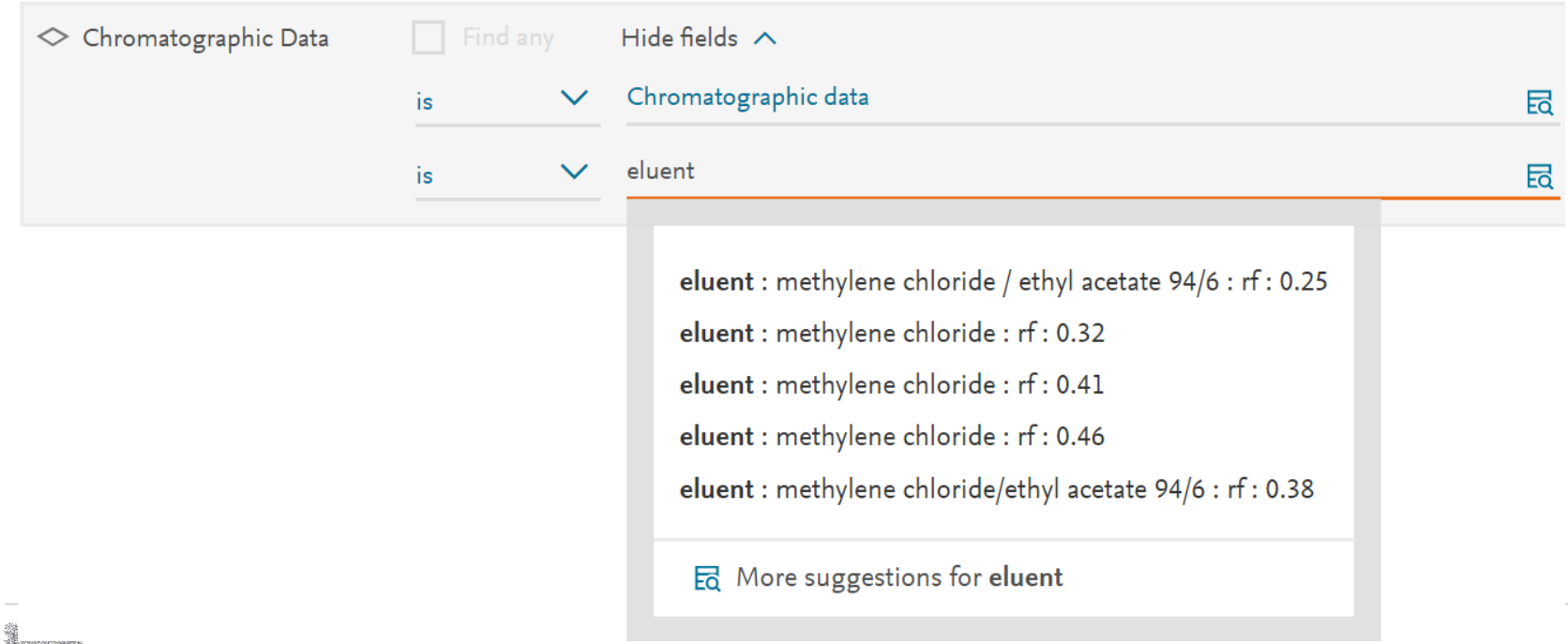


Время удерживания





Состав элюента



ELSEVIER

Химические реакции в Reaxys

-В какие реакции вступает заданное соединение? И в каких условиях (катализатор, растворитель, температура и др.) Как получить соединение или класс соединений? Как построить план синтеза данного соединения?

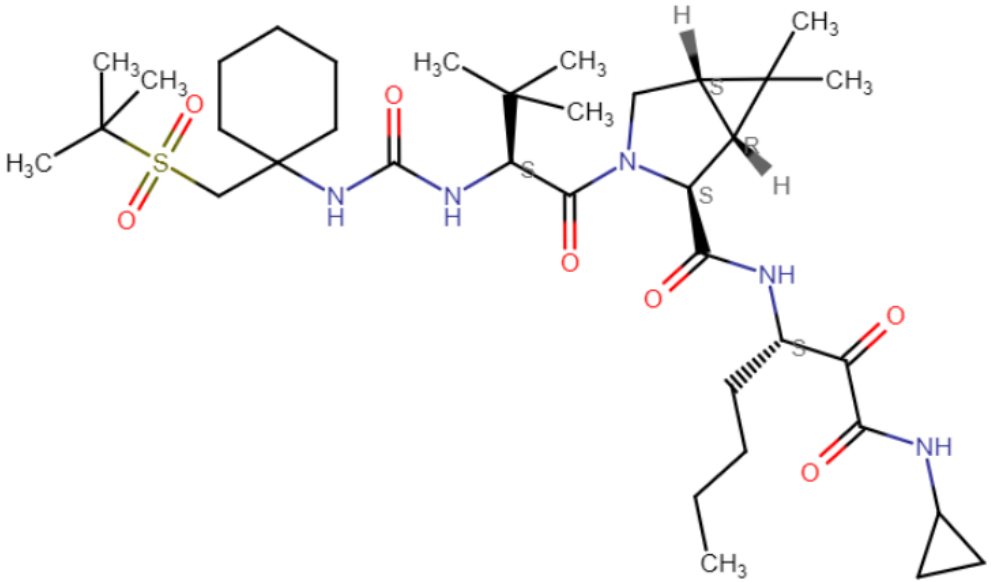
Как проверить доступность соединения

Разработка методики синтеза химических веществ (субстанций) в Reaxys

С помощью Reaxys можно решать задачу поиск оптимальных условий синтеза субстанций.

Допустим, Вас интересует данное соединение

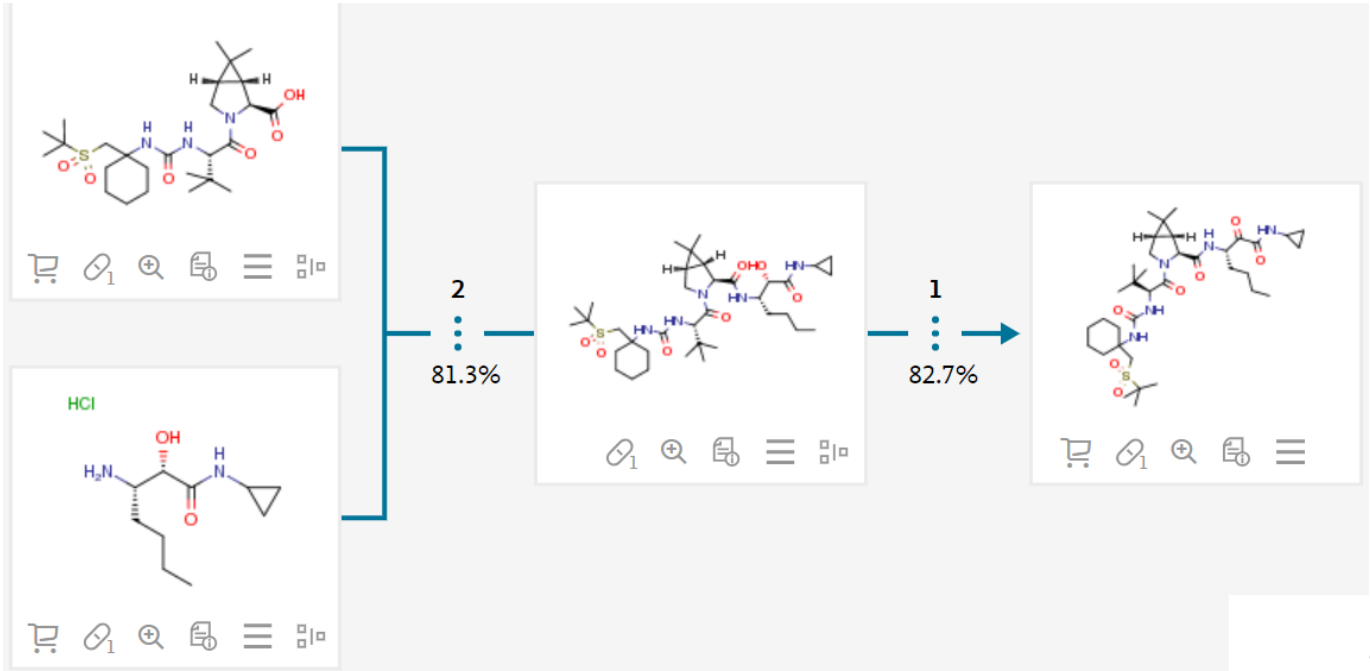
NARLAPREVIR



?

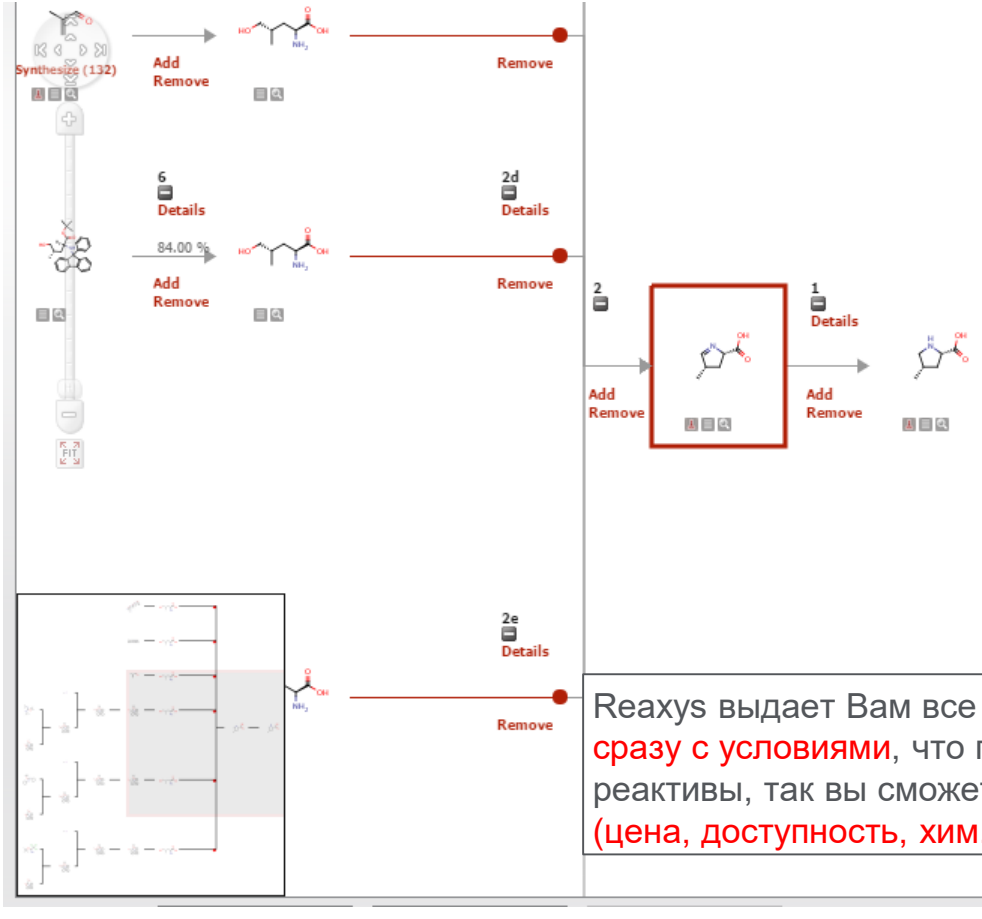
ELSEVIER

С помощью Reaxys можно гораздо эффективнее решать задачу поиск оптимальных условий синтеза субстанций.



ELSEVIER

Разработка методики синтеза химических веществ (субстанций)

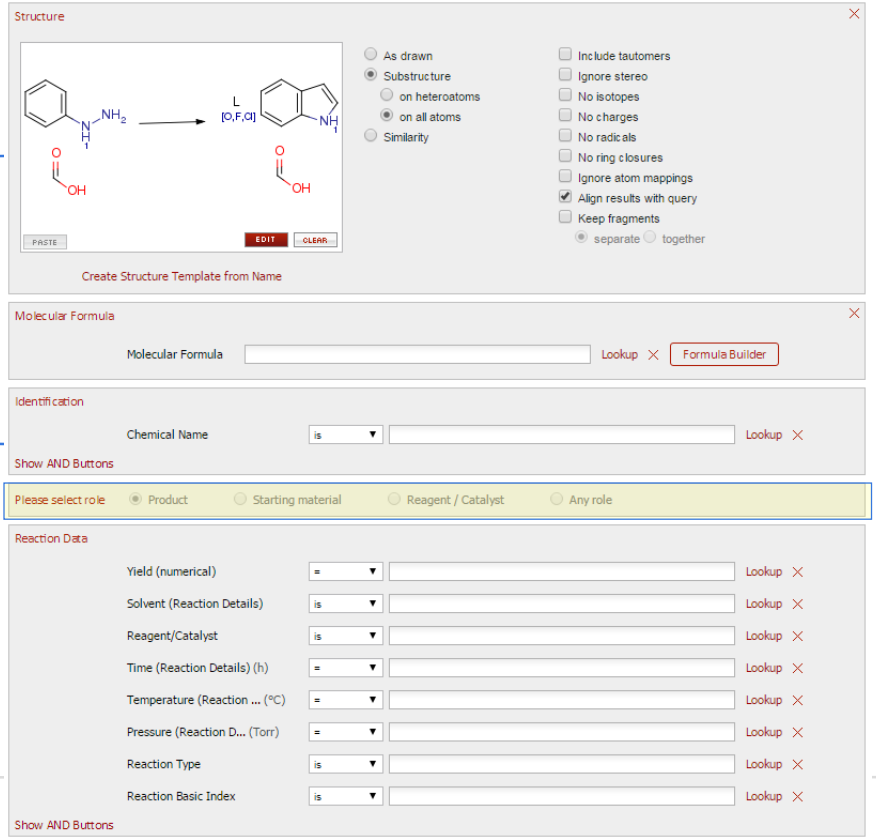


Также за секунды Reaxys может построить многостадийный план синтеза из базовых соединений, что сэкономит время сотрудников и позволит выбрать метод, в котором **не образуются опасные побочные продукты.**

Reaxys выдает Вам все реакции синтеза заданного соединения сразу с условиями, что позволит сэкономить деньги на реактивы, так вы сможете выбрать оптимальную методику (цена, доступность, хим. стабильность, токсичность и т.д.)

ПОИСК РЕАКЦИЙ

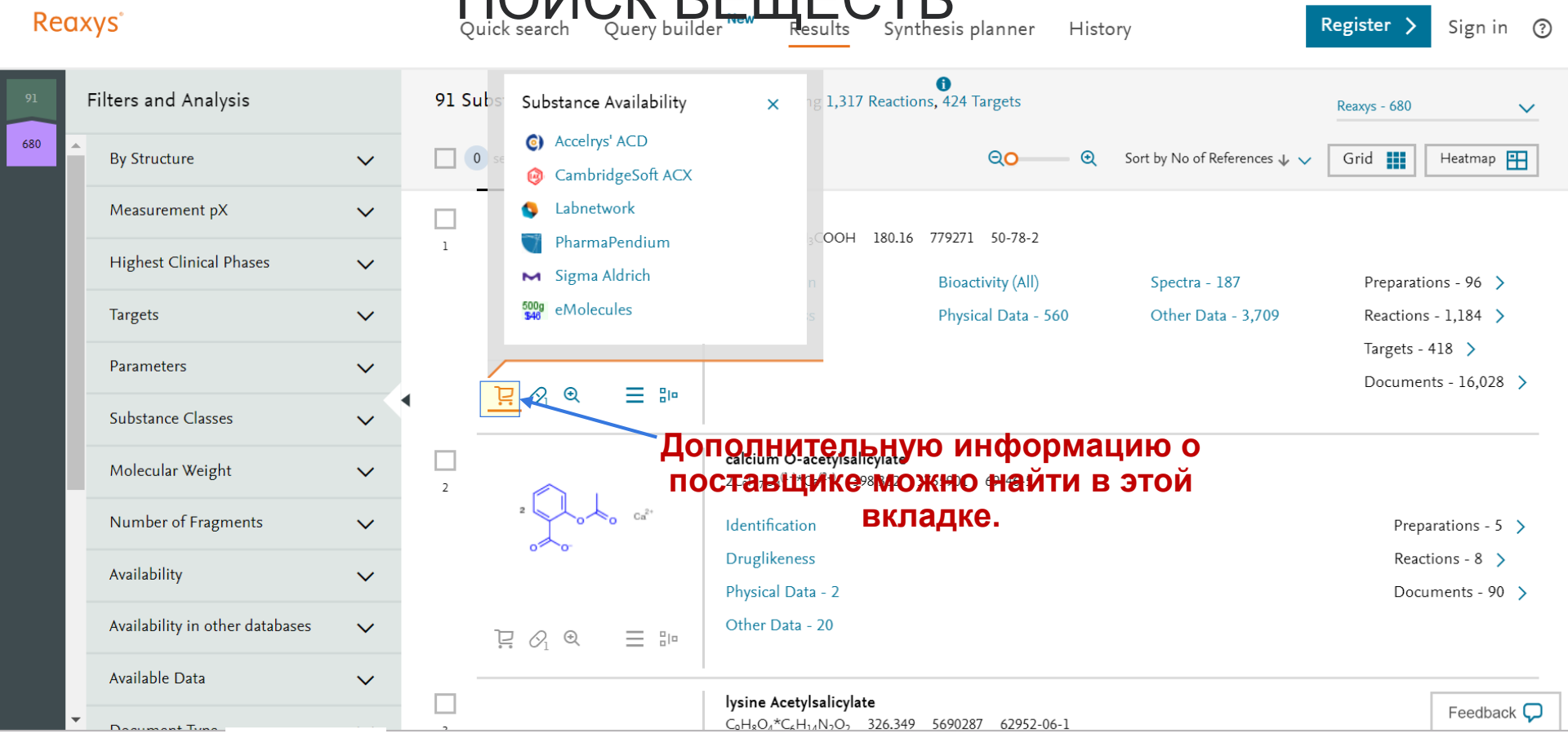
Можно либо нарисовать схему реакции, нарисовать одну структуру, затем определить ее роль, ввести название химического вещества и определить его роль, либо использовать построитель молекулярных формул и определить его роль.



ELSEVIER

Reaxys®

ПОИСК ВЕЩЕСТВ



Дополнительную информацию о поставщике можно найти в этой вкладке.

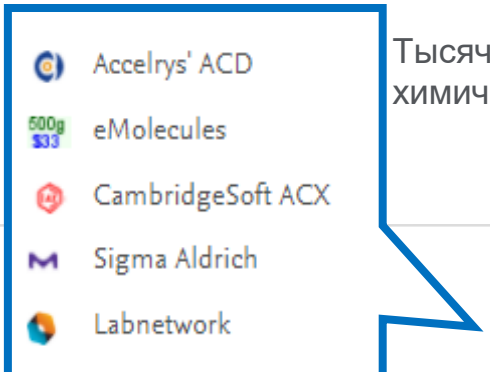
На что уходит время? Ждем пока придут нужные реагенты!!!

При планировании синтетической стратегии химики должны учитывать, как приобретать исходные материалы.

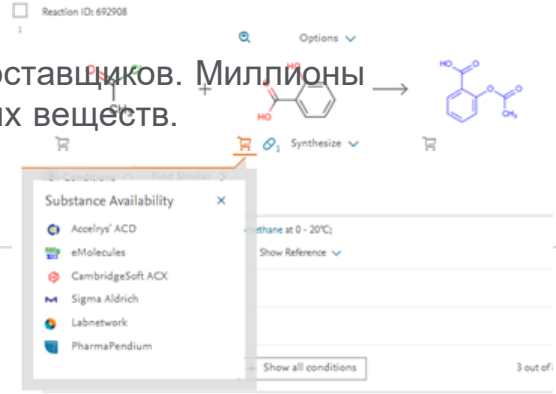
Три больших вопроса:
Есть ли этот материал на моей местном складе?

Есть ли материал присутствует на складе у любого поставщика?

Есть ли этот поставщик в моей системе покупки?



Тысячи поставщиков. Миллионы химических веществ.

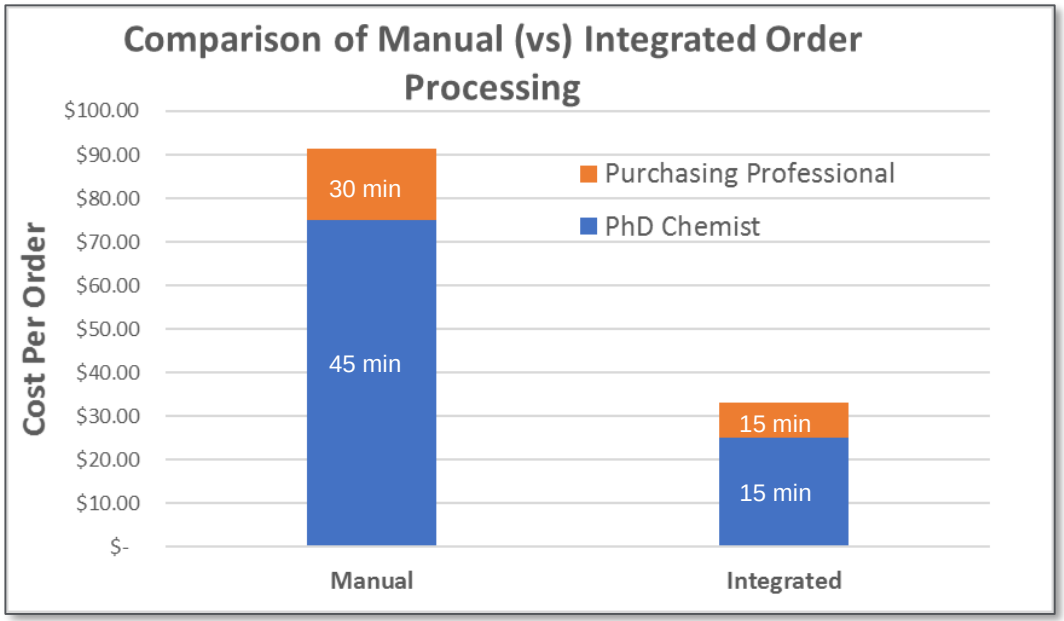


ELSEVIER

In addition to reinforcing negotiated discounts, procurement integration reduces the order process cost.

Synthesis Project Order Cost

60% Less



Order Process Time Savings:

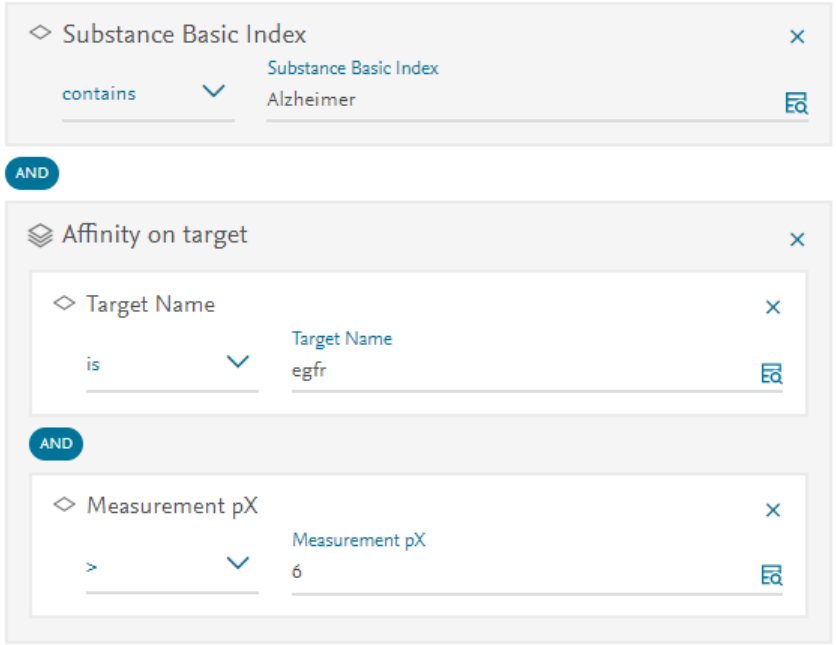
- Chemist saves 30 minutes per order
- Purchasing saves 15 minutes per order

ELSEVIER

Биологическая активность и медицинская химия в Reaxys

Как получить экспериментальные данные о биологической активности соединения и его производных? На какие биологические виды действует данное соединения? И какие соединения изучены на данном виде? Как оценить безопасность, активность и эффективность соединений?

Какие соединения, действующие на EGFR, могут быть использованы при заболевании Альцгеймера?



ELSEVIER

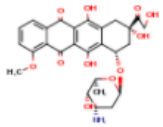
Какие соединения, действующие на EGFR, могут быть использованы при заболевании Альцгеймера?

72 Substances out of 537 Documents, containing 2,482 Reactions, 234 Targets

Reaxys - 72

0 selected | Limit To | Exclude | Export | Sort by No of References | Heatmap

1



doxorubicin

$C_{27}H_{29}NO_{11}$ 543.527 1445814 23214-92-8

Hit Data - 4 | Bioactivity (Hit Data) | Spectra - 198 | Preparations - 56

Identification | Bioactivity (All) | Other Data - 4,448 | Reactions - 292

Druglikeness | Physical Data - 141 | Targets - 301

Documents - 13,217

Hit Data - 4

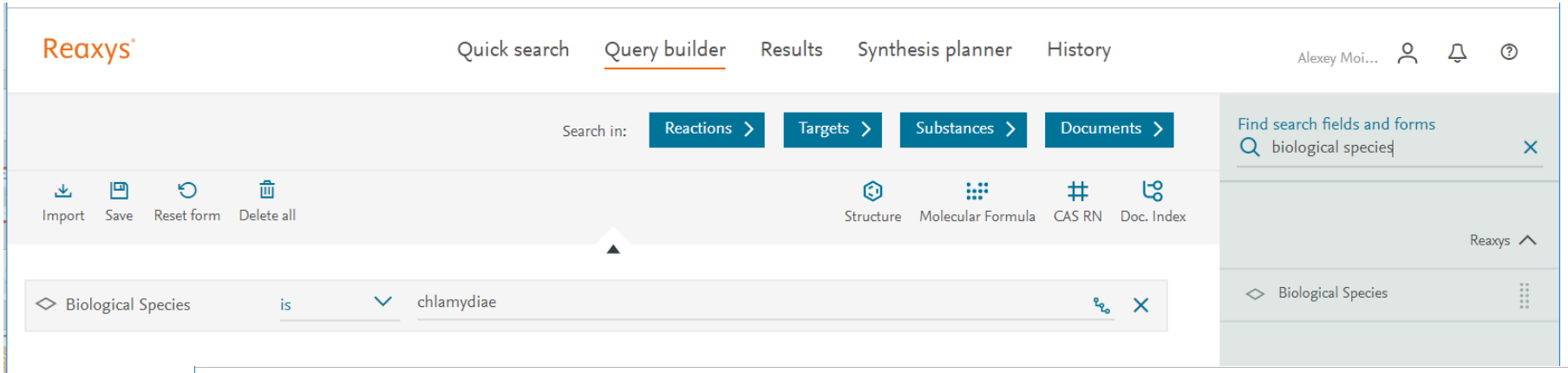
Use - 4 hits out of 4,438

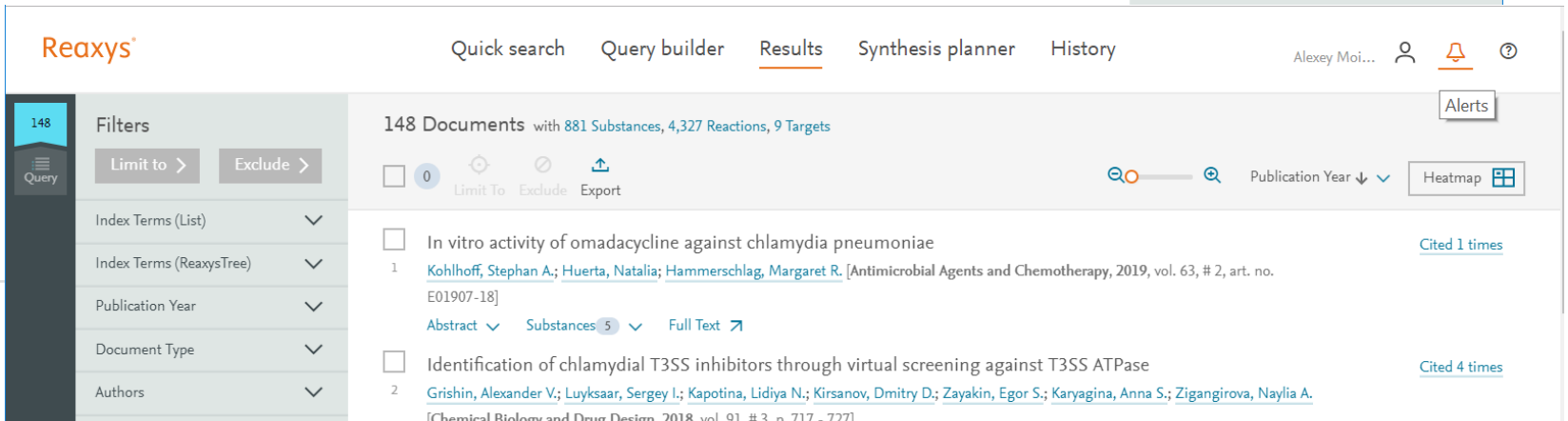
Show/Hide columns

Use Pattern	Reference
Alzheimer's Disease	NEXUSPHARMA INC. - WO2008/34039, **2008**, A2 Full Text ↗ Details > Abstract >

ELSEVIER

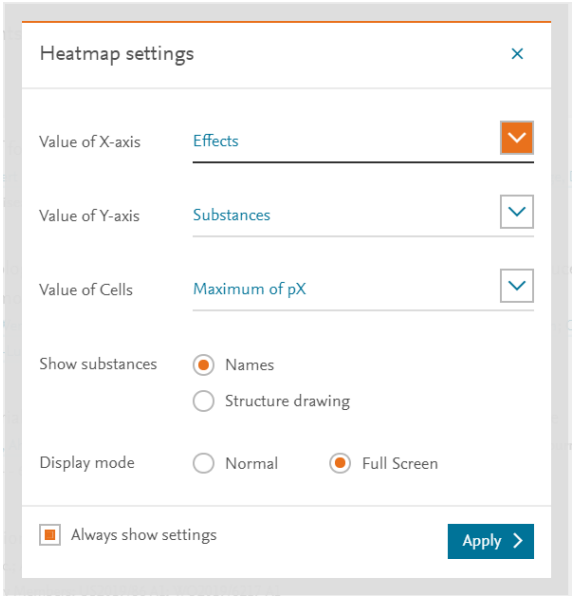
Как найти вещества для которых изучено взаимодействие с биологическими видами Chlamydiae. Фильтр Biological species





ELSEVIER

Вывод в виде тепловой карты



ELSEVIER

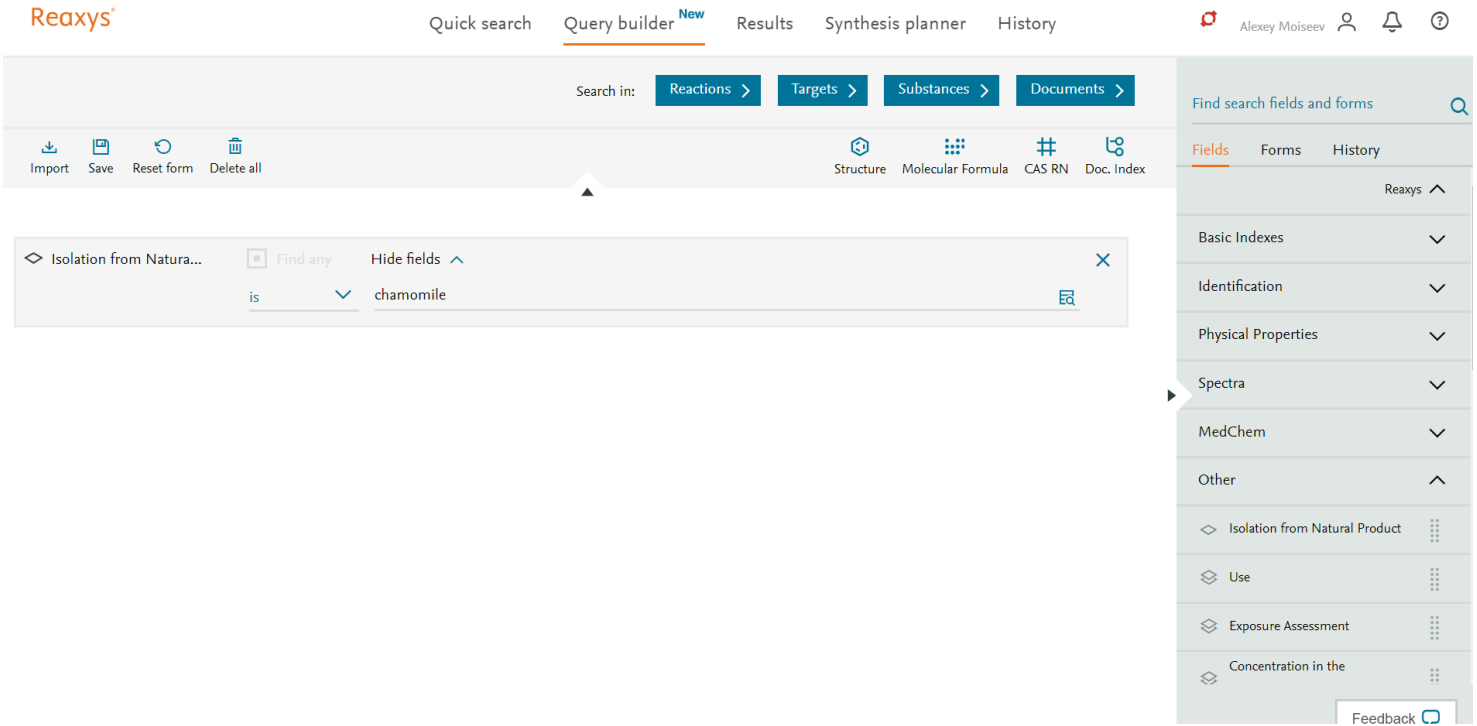
Другие примеры использования Reaxys

- Как найти вещества извлекаемые из природных компонентов

- О применении Reaxys для поиска информации о минералах.

- Как найти соединения, используемые в качестве катодных материалов или ингибиторов коррозии.

Форма поиска натурального продукта



Isolation from Natural Product Find any Hide fields

is

Isolation from Natural Product
camomile

17 Substances out of 569 Documents, containing 195 Reactions, 9 Targets

0 selected Limit To Exclude Export Sort by No of References Grid Heatmap

1

spathulenol

$C_{15}H_{24}O$ 220.355 4671447 6750-60-3

Hit Data - 1 | Bioactivity (All) | Other Data - 111 | Preparations - 15
Identification | Physical Data - 37 | Reactions - 19
Druglikeness | Spectra - 39 | Targets - 9
Documents - 406

Hit Data - 1

Isolation fror

9 Targets out of 26 Documents, 2 Substances, 15 Reactions

0 selected Limit To Exclude Export Sort by Target Details Heatmap

2

1 Single protein
Acetylcholinesterase (Wild)
Synonyms: acetylcholinesterase
Substances - 10
Documents - 1
Show target details

Most active substance:

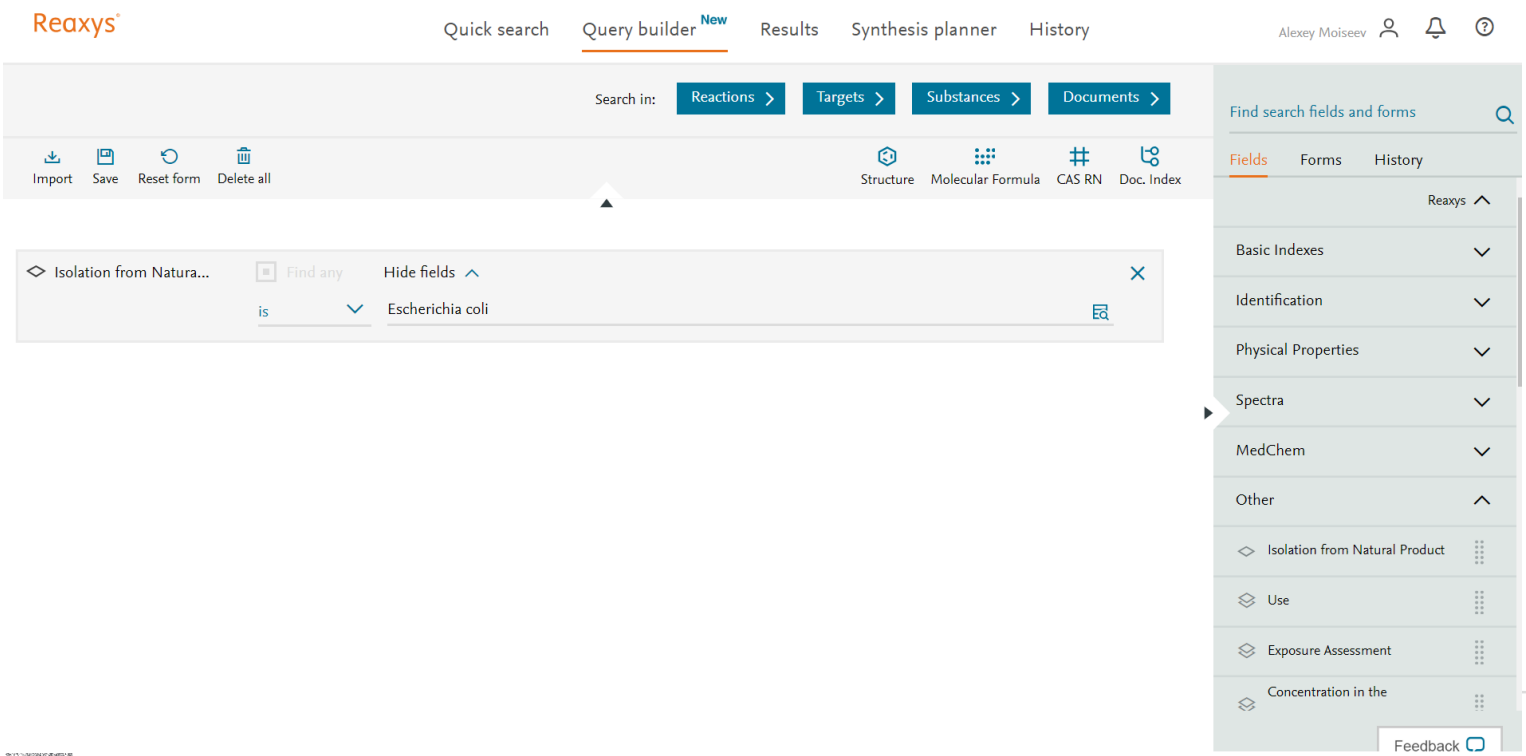
inhibition rate=49.1%

2 Single protein
Cannabinoid receptor 2 (Wild)
Synonyms: cannabinoid receptor 2
Substances - 5
Documents - 1

Most active substance:

ELSEVIER

Форма поиска натурального продукта (yeast, Escherichia coli, cell …)



Форма поиска натурального продукта

542

Filters and Analysis

- By Structure
- Measurement pX
- Highest Clinical Phases
- Targets
- Parameters
- Substance Classes
- Molecular Weight
- Number of Fragments
- Availability
- Availability in other databases
- Available Data
- Document Type

542 Substances out of 94,335 Documents, containing 28,875 Reactions, 1,688 Targets

0 selected | Limit To | Exclude | Export | Sort by No of References | Grid | Heatmap

1

cis-Octadecenoic acid

$C_8H_{17}CHCH(CH_2)7COOH$ 282.467 1726542 112-80-1

Hit Data - 4 | Bioactivity (All) | Other Data - 1,051 | Preparations - 134

Identification | Physical Data - 779 | Reactions - 2,979

Druglikeness | Spectra - 183 | Targets - 198

Documents - 24,667

Hit Data - 4

Isolation from Natural Product - 4 hits out of 173

Show/Hide columns

Isolation from Natural Product	Reference
Escherichia coli rpoD40 (KY1411) mutant cells	Suzuki; Kondo; Makise; Mima; Sakamoto; Tshuchiya; Mizushima - [Biological and Pharmaceutical Bulletin, **1998**, vol. 21, # 7, p. 657 - 661] Full Text Cited 3 times Details Abstract
Escherichia coli dnaE486 (ME8680) mutant cells	Suzuki; Kondo; Makise; Mima; Sakamoto; Tshuchiya; Mizushima - [Biological and Pharmaceutical Bulletin, **1998**, vol. 21, # 7, p. 657 - 661] Full Text Cited 3 times Details Abstract

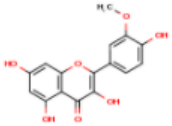
Feedback

ELSEVIER Reaxys LIFE SCIENCE SOLUTIONS

Какие соединения были найдены в тысячелистнике Yarrow?

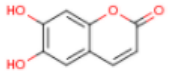
Isolation from Natural Product Find any Hide fields

contains Isolation from Natural Product: Yarrow



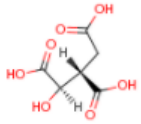
isorhamnetin
$C_{16}H_{12}O_7$ 316.267

Hit Data - 1
Identification
Druglikeness
Bioactivity (All)



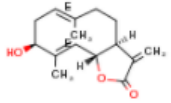
aesculetin
$C_9H_6O_4$ 178.144 152788

Hit Data - 1
Identification
Druglikeness
Bioactivity (All)



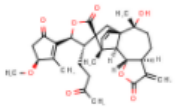
threo-D-isocitric acid
$C_6H_8O_7$ 192.125 1727947

Hit Data - 1
Identification
Druglikeness
Bioactivity (All)



hanphyllin
$C_{15}H_{20}O_3$ 248.322 1623169

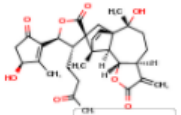
Hit Data - 1
Identification
Druglikeness
Bioactivity (All)



achillinin B
$C_{31}H_{38}O_8$ 538.638

Hit Data - 1
Identification
Druglikeness

Options



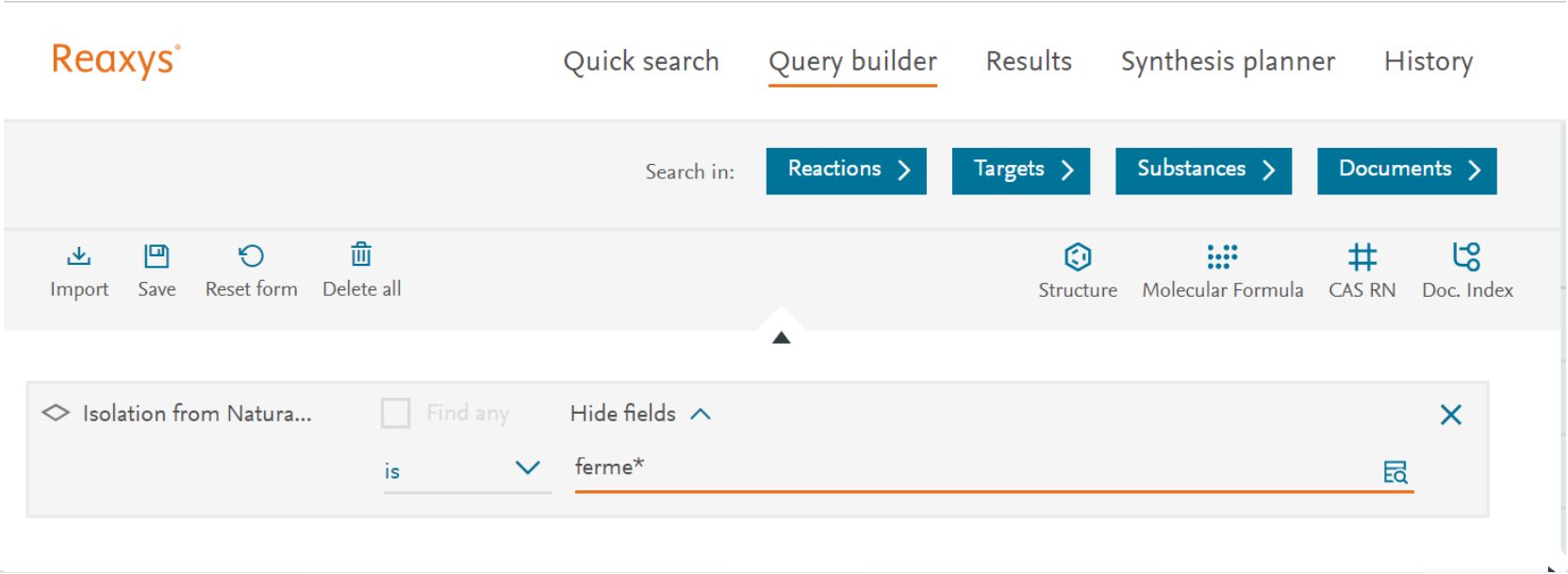
Synthesize

achillinin C
$C_{30}H_{36}O_8$ 524.611

Hit Data - 1
Identification
Druglikeness

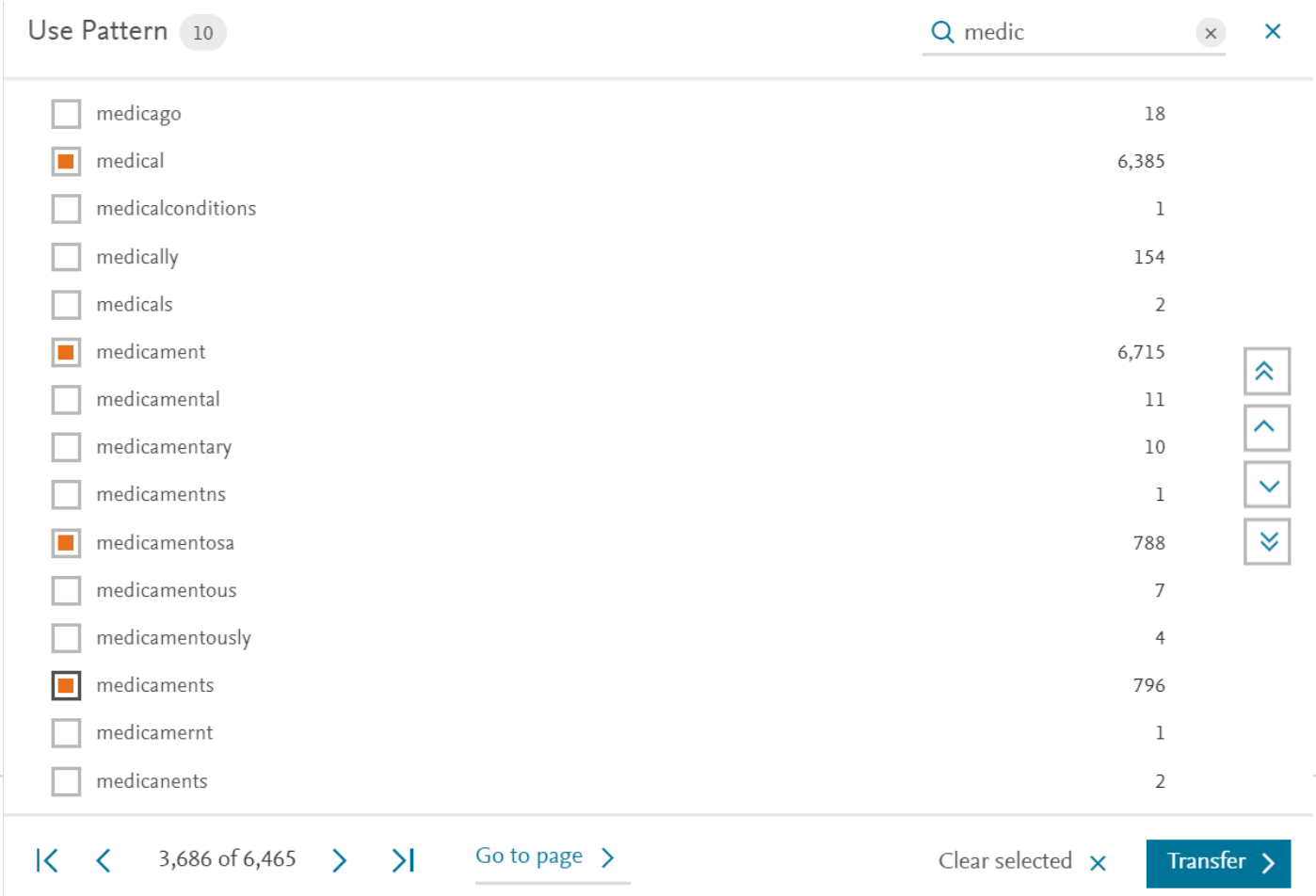
ELSEVIER

Все вещества получаемые с помощью ферментации.

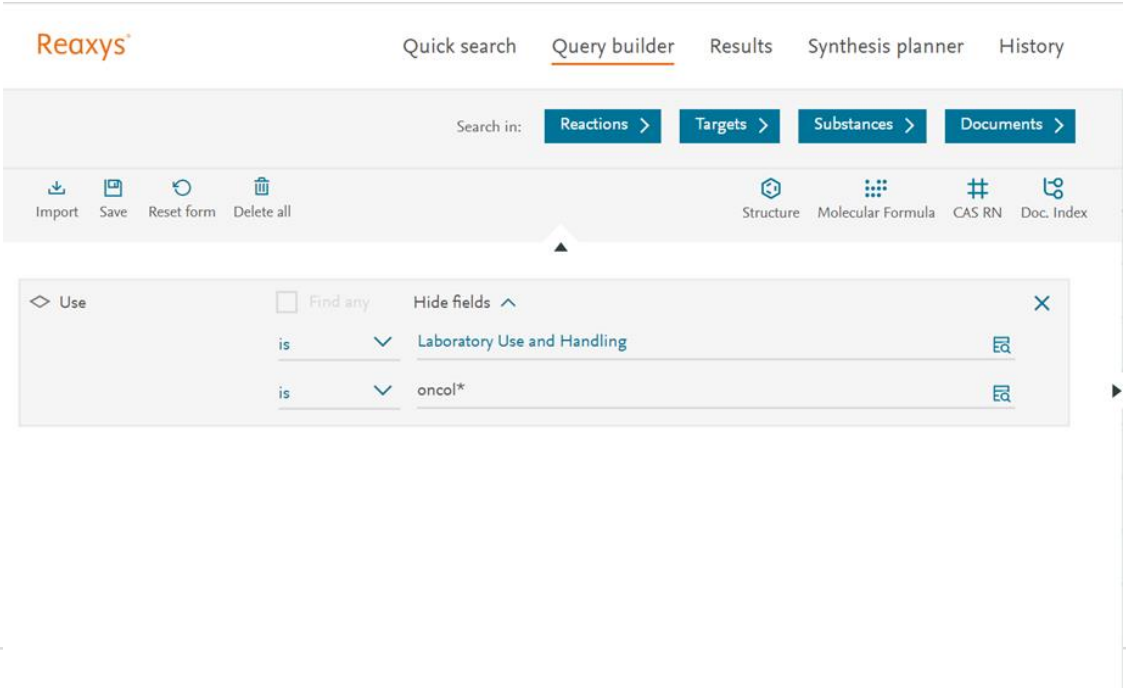


ELSEVIER

Поиск применимости веществ в медицине и фармацевтике

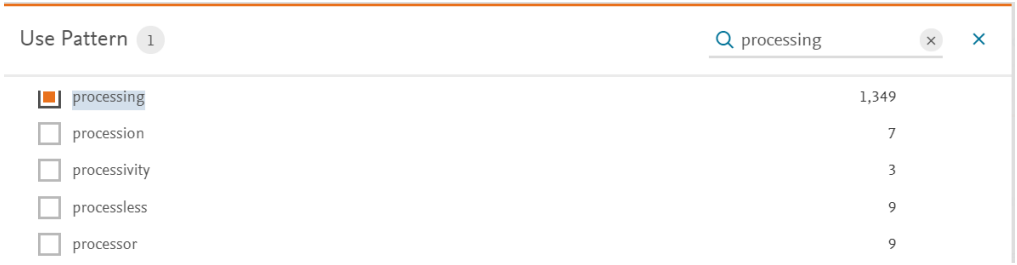


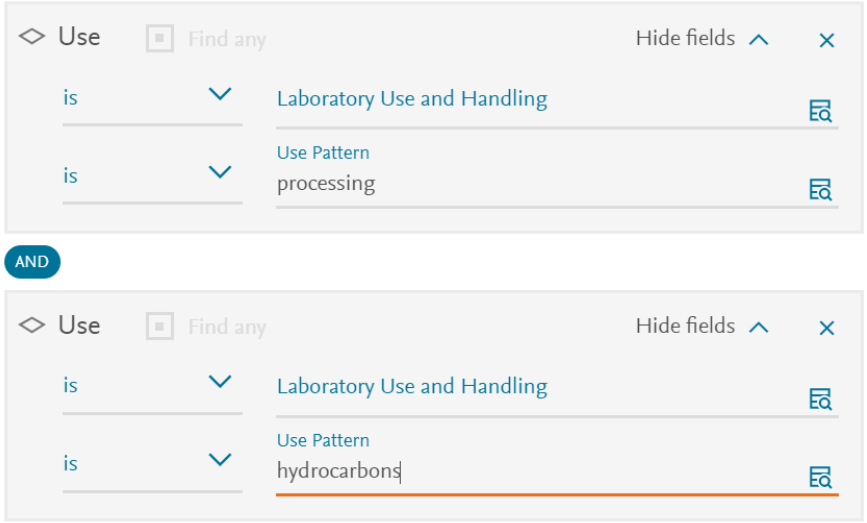
Вещества использующиеся в онкологии



ELSEVIER

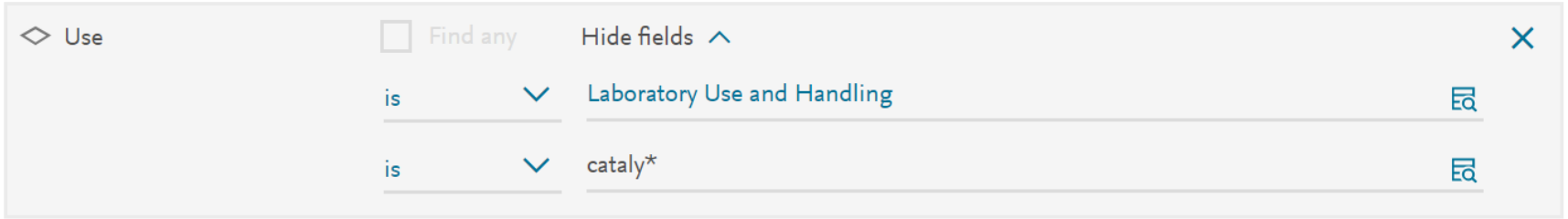
добычи и глубокой переработки углеводородного сырья





ELSEVIER

Use “cataly*”



ELSEVIER

Какие соединения используются в качестве ингибиторов коррозии?

Use | Find any | Hide fields

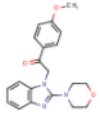
is | Laboratory Use and Handling

is | Use Pattern: (corros* NEAR inhib*) OR (anticorr*)

251 Substances out of 356,601 Documents, containing 531,983 Reactions, 610 Targets

0 selected | Limit To | Exclude | Export | Sort by

1



Reaxys ID: 8160472

$C_{20}H_{21}N_3O_3$ 351.405 8160472

Hit Data - 1

Identification

Druglikeness

Other Data - 1

Hit Data - 1

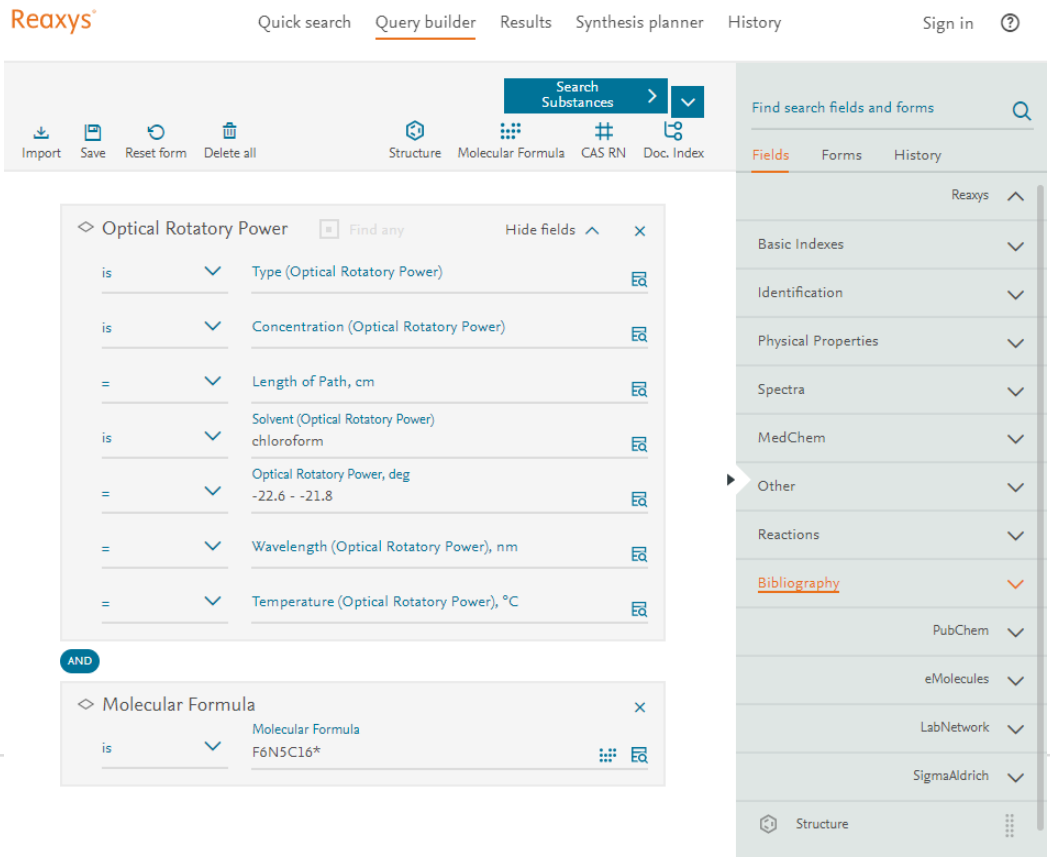
Use - 1 hits out of 1

Use Pattern	Reference
corrosion inhibitor	Starchak; Anishchenko; Kuzina; Priimenko; Boiko; Chelyabieva; Tsybulya - Russian Journal of Applied Chemistry, **1997**, vol. 70, # 5, p. 732 - 736 Full Text ↗ Details › Abstract ›

Определить неизвестное соединение X:

1. Элементный анализ показал следующее соотношение атомов C:F:N = 16:6:5
2. Угол оптического вращения раствора X с концентрацией 1 г на 100 г хлороформа при длине волны 589 нм при 20°C составляет -22.6 - -21.8
3. Какими дополнительными методами можно подтвердить предположение?

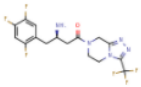
Определить неизвестное соединение X:



ELSEVIER

Определить неизвестное соединение X:

1



sitagliptin

$C_{16}H_{15}F_6N_5O$ 407.318 9962060 486460-32-6

Hit Data - 3	Physical Data - 46	Preparations - 153
Identification	Spectra - 75	Reactions - 236
Druglikeness	Other Data - 914	Targets - 68
Bioactivity (All)		Documents - 421

Hit Data - 3

Optical Rotatory Power - 3 hits out of 7

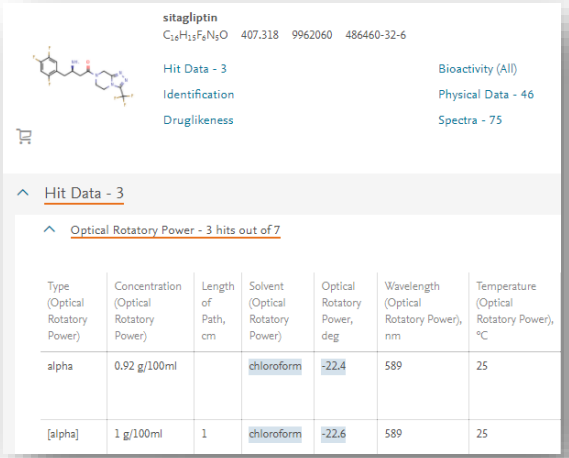
Show/Hide columns

Type (Optical Rotatory Power)	Concentration (Optical Rotatory Power)	Length of Path, cm	Solvent (Optical Rotatory Power)	Optical Rotatory Power, deg	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm	Temperature (Optical Rotatory Power), °C	Location	Reference
alpha	0.92 g/100ml		chloroform	-22.4	589	25	Page/Page column 28	COUNCIL OF SCIENTIFIC and INDUSTRIAL RESEARCH; BARUA, Nabin Chandra; SAIKIA, Bishwajit; BORAH, Preetismita; BAISHYA, Gakul - WO2015/189862, **2015**, A1 Full Text Details Abstract
[alpha]	1 g/100ml	1	chloroform	-22.6	589	25	supporting information	Zhou, Shengbin; Wang, Jiang; Chen, Xia; Acena, Jose Luis; Soloshonok, Vadim A.; Liu, Hong - Angewandte Chemie - International Edition, **2014**, vol. 53, # 30, p. 7883 - 7886, Angew. Chem., **2014**, vol. 126, # 30, p. 8017 - 8020 Full Text Details Abstract
[alpha]	1 g/100ml	10	chloroform	-22	589	25	supporting information	Davies, Stephen G.; Fletcher, Ai M.; Lv, Linlu; Roberts, Paul M.; Thomson, James E. - Tetrahedron Letters, **2012**, vol. 53, # 24, p. 3052 - 3055 Full Text Cited 24 times Details Abstract

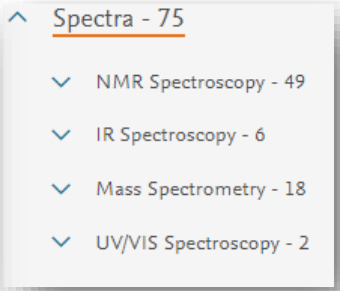
ELSEVIER

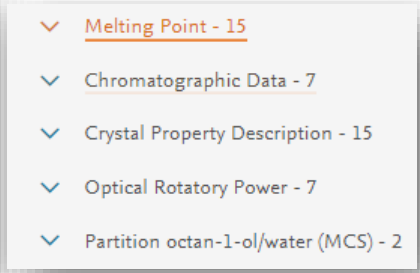
Определить неизвестное соединение X.

Какими дополнительными методами можно подтвердить предположение?



Type (Optical Rotatory Power)	Concentration (Optical Rotatory Power)	Length of Path, cm	Solvent (Optical Rotatory Power)	Optical Rotatory Power, deg	Wavelength (Optical Rotatory Power), nm	Temperature (Optical Rotatory Power), °C
alpha	0.92 g/100ml		chloroform	-22.4	589	25
[alpha]	1 g/100ml	1	chloroform	-22.6	589	25





Chemical shifts	1H		d(4)-methanol	400	^{1}H NMR (CH_3OD, 400MHz): 1.37 (s, 9H), 2.61~3.00 (m, 4H), 3.92~4.30 (m, 5H), 4.93 (s, 1H), 4.95~5.12 (m, 1H), 5.22~5.35 (br, 1H), 6.83~6.95, (m, 1H), 7.02~7.12 (m, 1H)	Paragraph 0211

Melting Point, °C	Solvent (Melting Point)	Location
117.4		
118 - 120		Paragraph 0039; 0040

UV/VIS Spectroscopy - 2

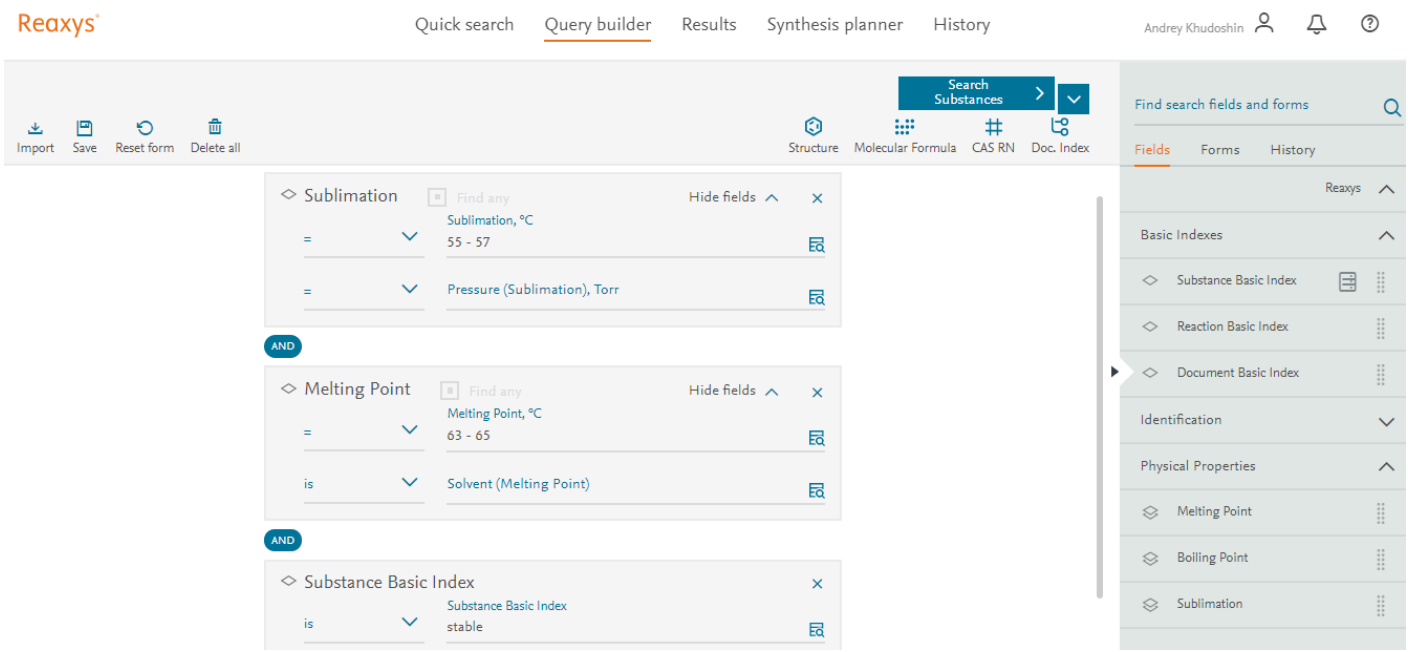
Description (UV/VIS Spectroscopy)	Solvent (UV/VIS Spectroscopy)	Absorption Maxima (UV/VIS), nm
Spectrum	dimethyl sulfoxide	580

ELSEVIER

Определить неизвестное соединение Y:

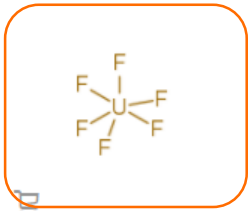
1. Температура сублимации при атмосферном давлении составляет ~56,5 °C
2. Температура плавления 64 °C
3. Обнаружено, что данное соединение является стабильным (не разлагается) при нагревании до 2000 K
4. Элементный анализ показал отсутствие атомов C или O в соединении

Определить неизвестное соединение Y:



ELSEVIER

Определить неизвестное соединение Y:



uranium hexafluoride

F_6U 352.019 14965871 7783-81-5

Hit Data - 11 | Bioactivity (All) | Other Data - 66 | Preparations - 208

Identification | Physical Data - 451 | Reactions - 485

Druglikeness | Spectra - 115 | Documents - 845

Sublimation - 1 hits out of 3

Hit Data - 11

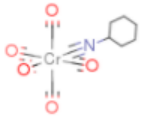
Melting Point - 2 hits out of 4

Sublimation - 1 hits out of 3

Use - 8 hits out of 13

Melting Point, °C
63.94

Sublimation, °C	Pressure (Sublimation), Torr
56.54	760



$Cr(CNCy)(CO)_5$

$C_{12}H_{11}CrNO_5$ 301.219 16967578 19706-05-9

Hit Data - 3 | Druglikeness | Sublimation - 1 hits out of 1 | Preparations - 15

Identification | Physical Data - 9 | Reactions - 33

Documents - 15

Melting Point, °C
65

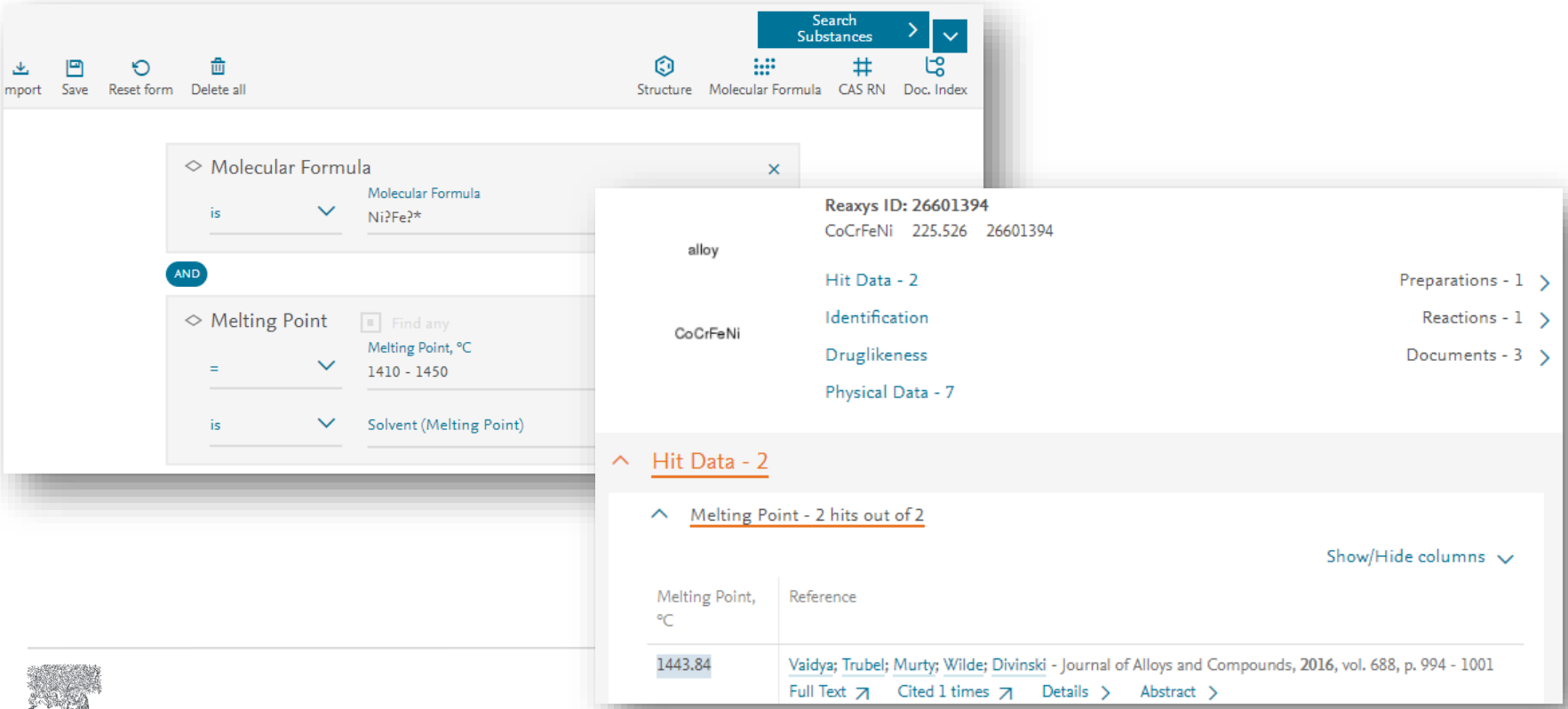
Sublimation, °C	Pressure (Sublimation), Torr
40 - 60	0.1

ELSEVIER

Определить сплав Z:

1. Сплав содержит железо
2. Сплав содержит кобальт
3. Температура плавления 1410-1450 °C

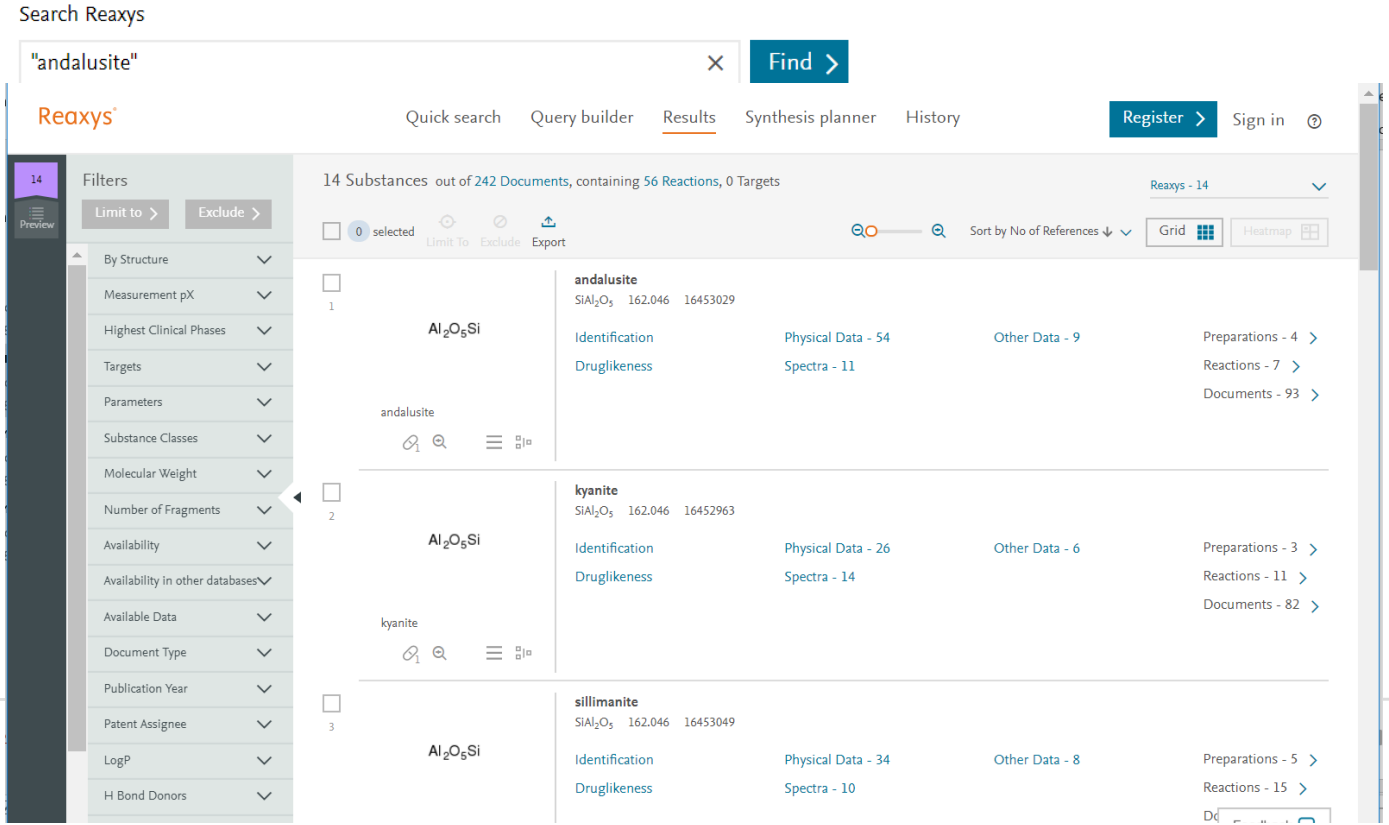
Определить сплав Z:



ELSEVIER

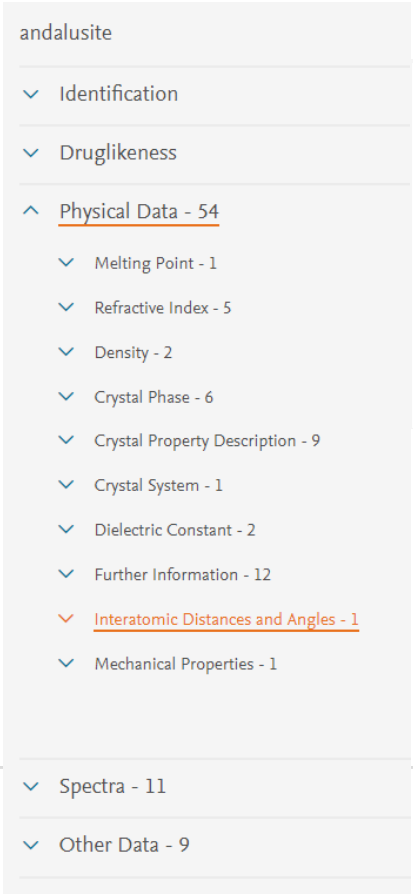
Поиск информации о минералах

АНДАЛУЗИТ И ДРУГИЕ МИНЕРАЛЫ



Поиск информации о минералах

СВОЙСТВА АНДАЛУЗИТА
ANDALUSITE



Density - 2

Show/Hide columns

Density, g·cm^{-3}	Measurement Temperature, °C	Type (Density)	Reference
3.151	-158.16	crystallographic	Bryant, Pamela L.; Harwell, Chris R.; Wu, Katherine; Fronczek, Frank R.; Hall, Randall W.; Butler, Leslie G.[**Journal of Physical Chemistry A, 1999**, vol. 103, # 27, p. 5246 - 5252] Full Text Cited 45 times Details Abstract
3.1 - 3.2		crystallographic	Mark, H.; Rosbaud, P.[**1926**, vol. 54, p. 127 - 127] Full Text Details Rosbaud, P.[**Zeitschrift fuer Elektrochemie, 1926**, vol. 32, p. 317 - 317]

Refractive Index - 5

Show/Hide columns

Refractive Index	Wavelength (Refractive Index), nm	Comment (Refractive Index)	Reference
			Mark, H.; Rosbaud, P.[**1926**, vol. 54, p. 127 - 127] Full Text Details Rosbaud, P.[**Zeitschrift fuer Elektrochemie, 1926**, vol. 32, p. 317 - 317] Full Text Details No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.A1, 10, page 41 - 43] Full Text Details
1.629	589.3	α	Mark, H.; Rosbaud, P.[**1926**, vol. 54, p. 127 - 127] Full Text Details Rosbaud, P.[**Zeitschrift fuer Elektrochemie, 1926**, vol. 32, p. 317 - 317] Full Text Details No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.A1, 10, page 41 - 43] Full Text Details
1.6328	589.3	β	Mark, H.; Rosbaud, P.[**1926**, vol. 54, p. 127 - 127] Full Text Details Rosbaud, P.[**Zeitschrift fuer Elektrochemie, 1926**, vol. 32, p. 317 - 317] Full Text Details No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.A1, 10, page 41 - 43] Full Text Details

Поиск информации о минералах

Transition Point(s) of Crystalline Modification(s)

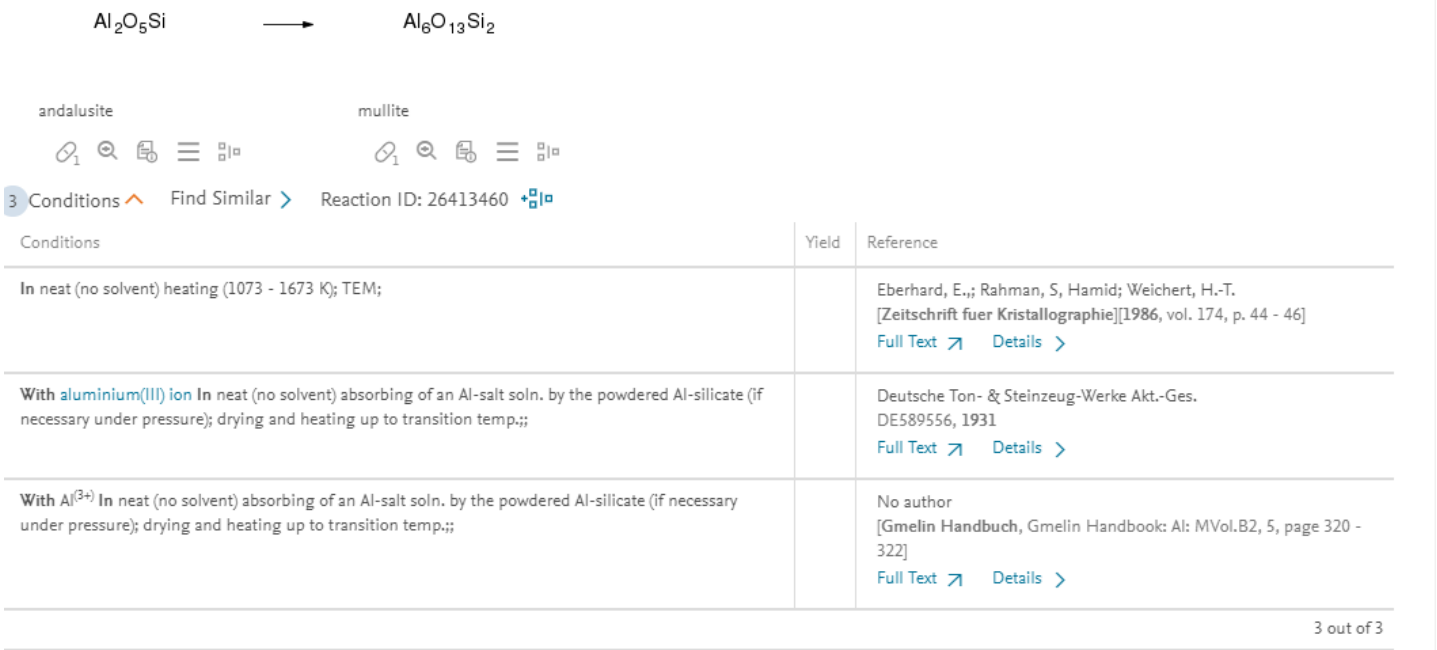
ПРЕВРАЩЕНИЯ АНДАЛУЗИТА
ANDALUSITE

Temperature (Transition Point(s) of Crystalline Modification(s)), °C	Change of Modification	Reference
1600		Norton, J. F.[**Journal of the American Ceramic Society, 1925**, vol. 8, p. 636 - 636] Full Text ↗ Details › No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.B2, 1, page 309 - 312] Full Text ↗ Details ›
1200 - 1300		Vernadsky, W.[**1889**, vol. 12, p. 447 - 447] Full Text ↗ Details › Vernadsky, W.[**1889**, vol. 12, p. 447 - 447] Full Text ↗ Details › No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.B2, 1, page 309 - 312] Full Text ↗ Details ›
1400 - 1550	from andalusite to sillimanite	No author[**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.B2, 1, page 309 - 312] Full Text ↗ Details › Eitel, W.[**Physikalisch-chemische Mineralogie und Petrologie in: Wissenschaftliche Forschungsberichte, Dresden-Leipzig 1925, Bd. 13, S. 43**] Full Text ↗ Details ›

ELSEVIER

Поиск информации о минералах

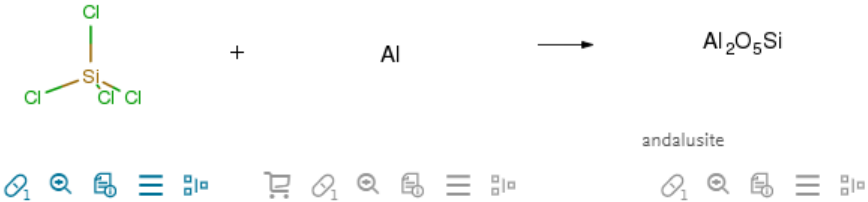
ПРЕВРАЩЕНИЯ АНДАЛУЗИТА В МУЛЛИТ



ELSEVIER

Поиск информации о минералах

ПОЛУЧЕНИЕ АНДАЛУЗИТА



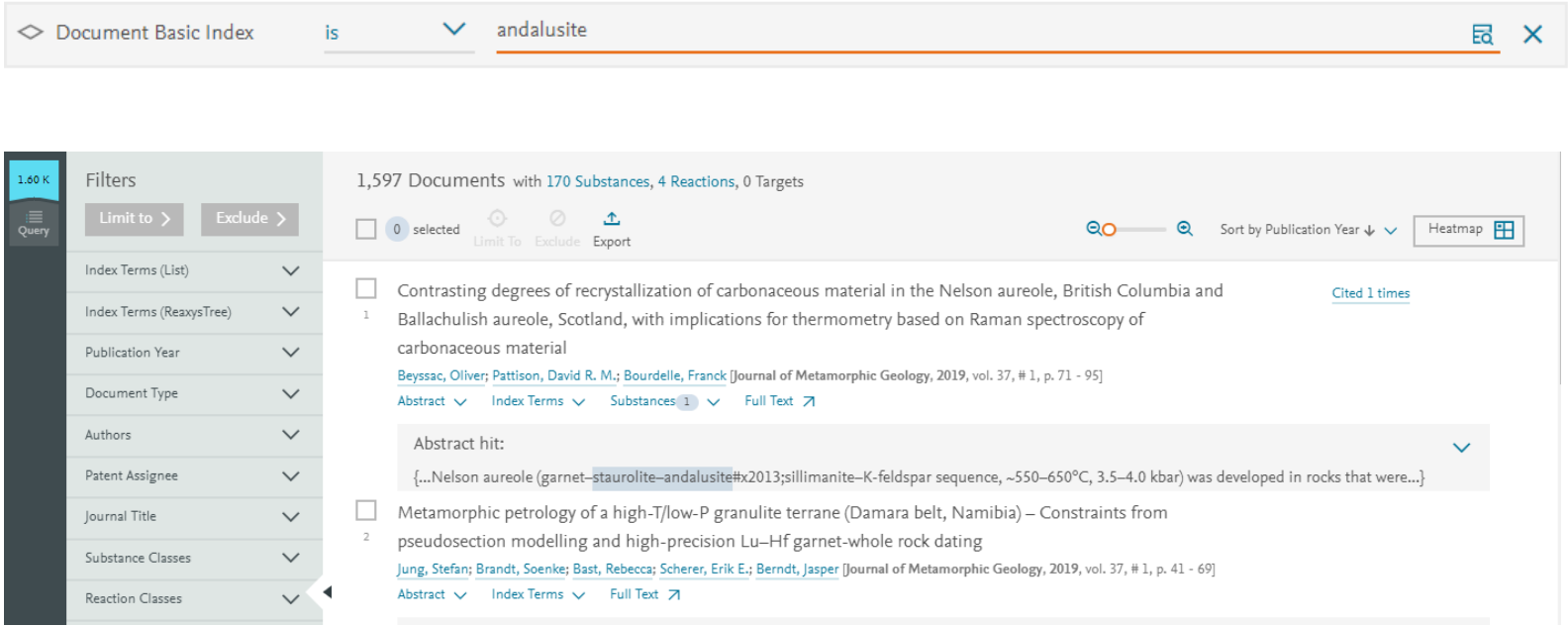
2 Conditions Find Similar Reaction ID: 26430724

Conditions	Yield	Reference
In neat (no solvent) in presence of water formation of prisms of andalusite (or cyanite) at red heat;;		Daubree, G. A. [**Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, 1854**, vol. 39, p. 135 - 135] Full Text Details Meunier, S. [**Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, 1882**, vol. 90, p. 1010 - 1010] Full Text Details
In neat (no solvent) in presence of water formation of prisms of andalusite (or cyanite) at red heat;;		No author [**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Al: MVol.B2, 2, page 313 - 315] Full Text Details

2 out of 2

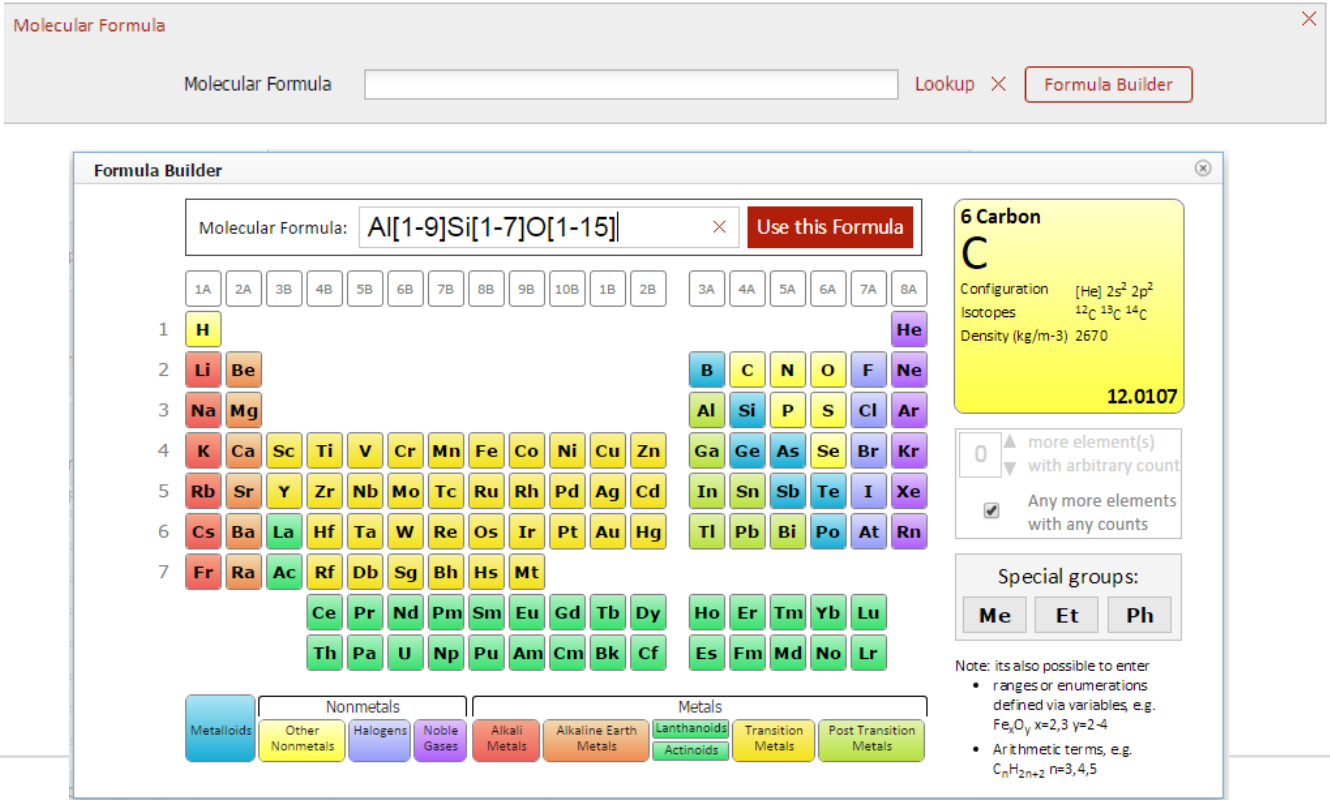
Поиск информации о минералах

ПОИСК ЛИТЕРАТУРЫ ПО АНДАЛУЗИТУ



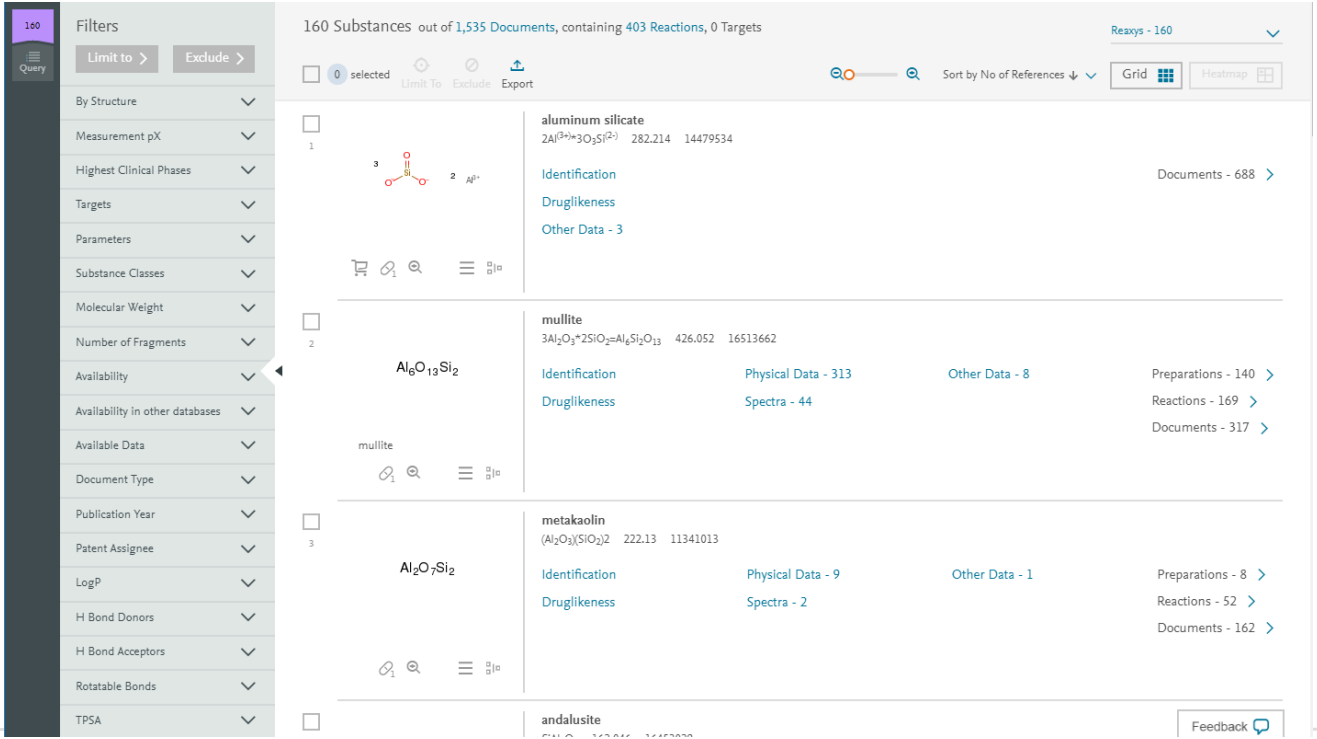
ELSEVIER

Анализ вещественного состава



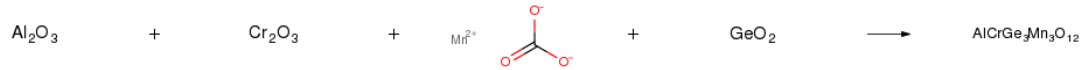
ELSEVIER

Анализ вещественного состава



Получение вещества

$AlCrGe_3Mn_3O_{12}$



1 Conditions | Find Similar | Reaction ID: 26074679

Conditions	Yield	Reference
In neat (no solvent) triturating MnCO3, Cr2O3, Al2O3 and GeO2, molding, heating on air for 2-25 h to 1200 °C;		Hrichova, R. [**Kristallografiya, 1973**, vol. 18, p. 534 - 535][**Kristallografiya, 1973**, vol. 18, p. 847 - 848] Full Text Details No author [**Gmelin Handbuch**, Gmelin Handbook: Mn: MVol.C3, 2.11.11.1.6, page 197 - 204] Full Text Details

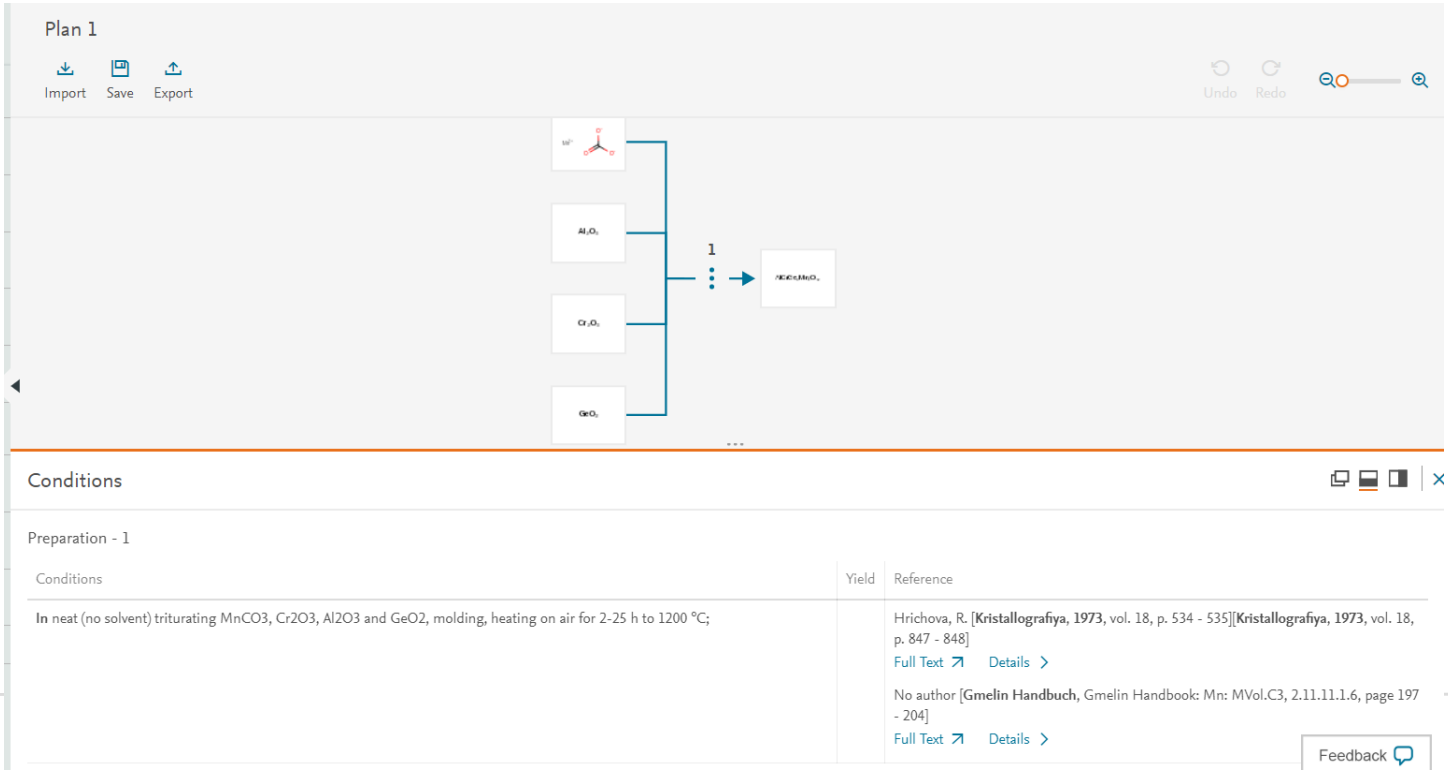
1 out of 1

ELSEVIER

$AlCrGe_3Mn_3O_{12}$

AUTOPLAN:

АВТОМАТИЗИРУЕТ ПРОЦЕСС СОЗДАНИЯ ПЛАНА СИНТЕЗА ВЕЩЕСТВА



ELSEVIER

План

- Особенности и покрытие базы данных Reaxys.
- Оптимальная стратегия поиска литературы.
- Свойства веществ в Reaxys
- Химические реакции в Reaxys
- Биологическая активность и медицинская химия в Reaxys
- Вопросы

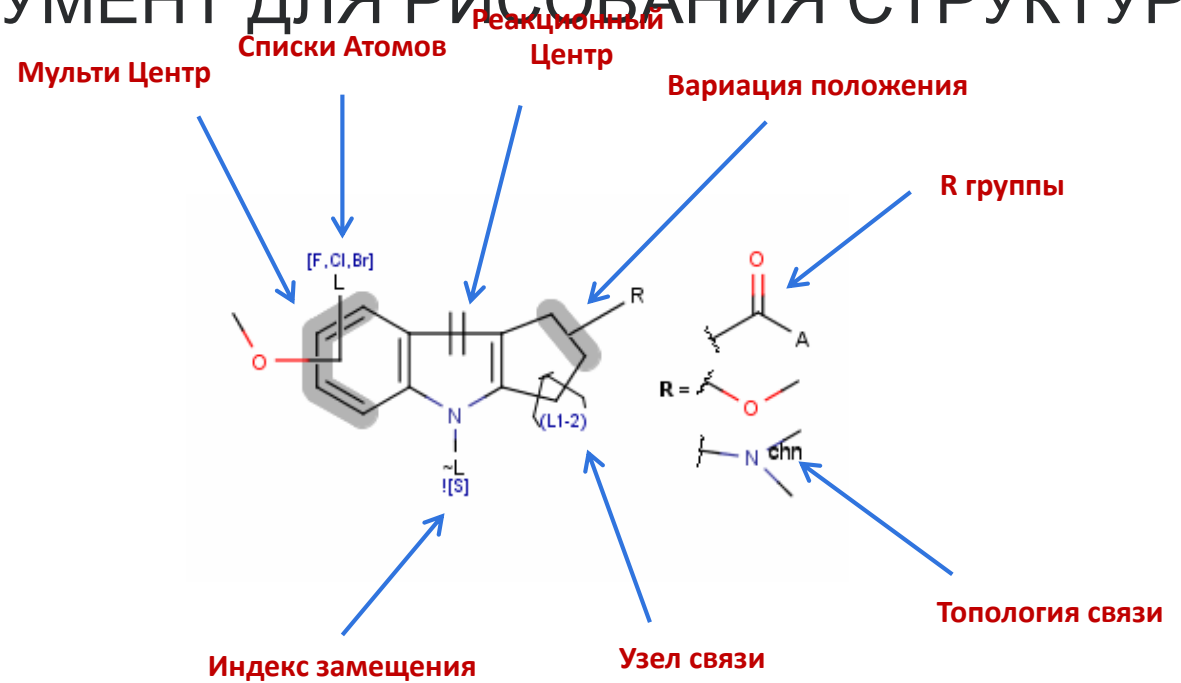
РИСОВАНИЕ СТРУКТУРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ MARVIN JS

ELSEVIER

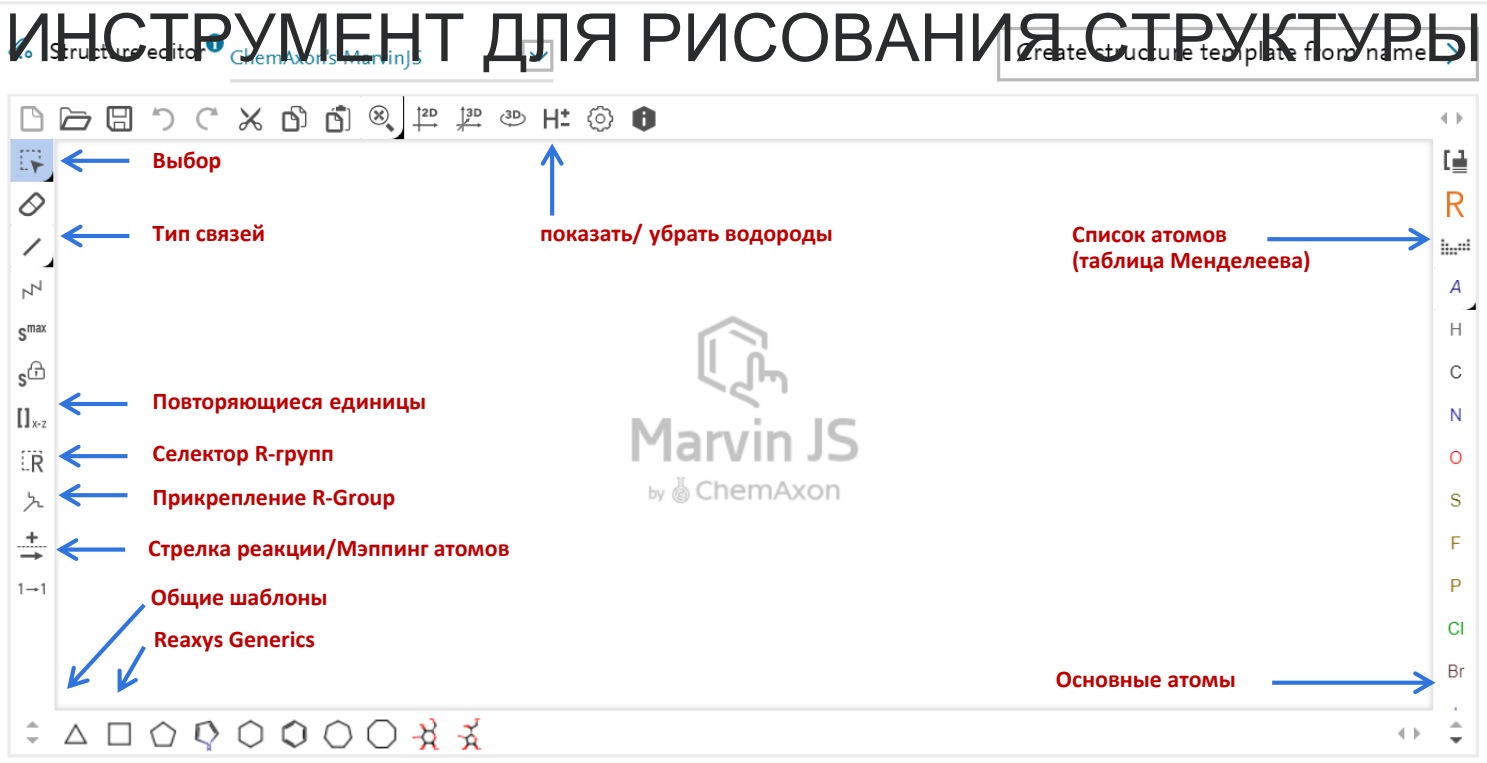
Reaxys®

LIFE SCIENCE SOLUTIONS

MARVIN SKETCH – НАДЕЖНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РИСОВАНИЯ СТРУКТУРЫ

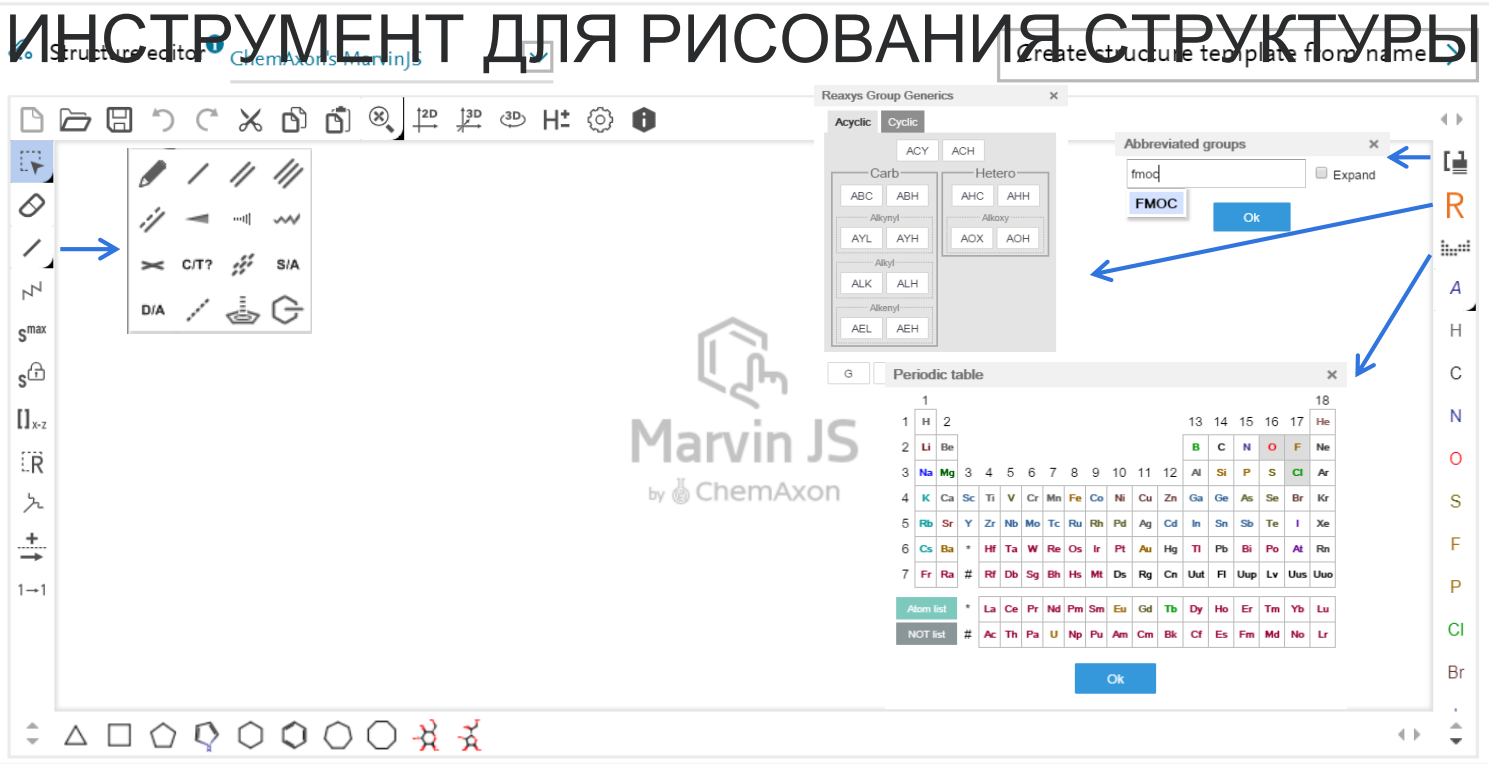


MARVIN SKETCH – НАДЕЖНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РИСОВАНИЯ СТРУКТУРЫ



ELSEVIER Reaxys LIFE SCIENCE SOLUTIONS

MARVIN SKETCH – НАДЕЖНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РИСОВАНИЯ СТРУКТУРЫ



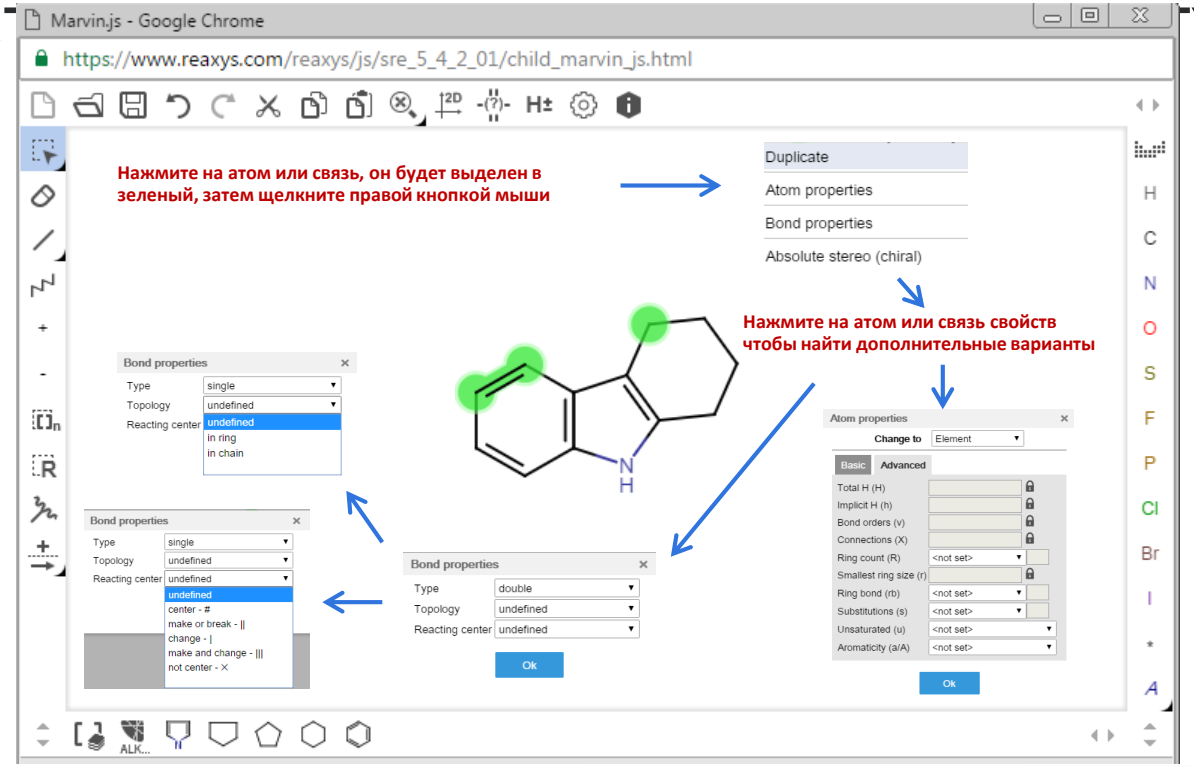
ELSEVIER

Reaxys

LIFE SCIENCE SOLUTIONS

MARVIN SKETCH – НАДЕЖНЫЙ

ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РИСОВАНИЯ СТРУКТУРЫ



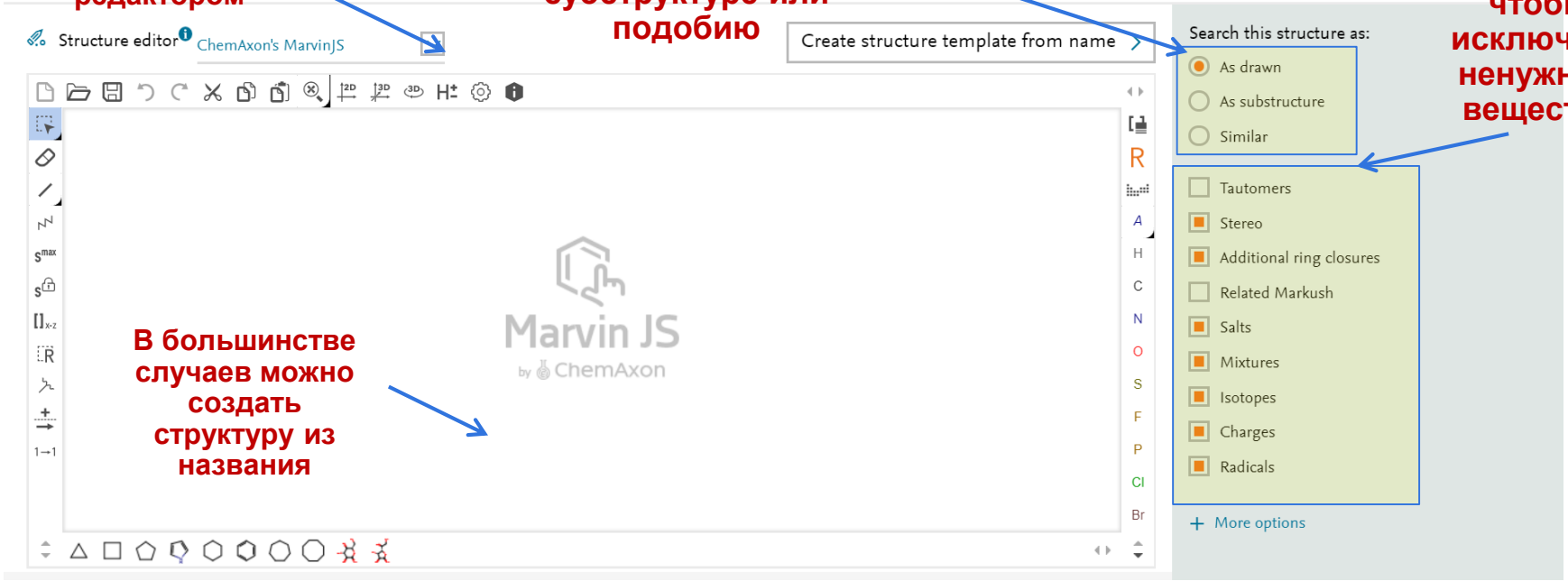
ELSEVIER Reaxys LIFE SCIENCE SOLUTIONS

ПОИСК ВЕЩЕСТВ

Нажмите на редактор структуры, чтобы выбрать редактор по выбору. Java Free Marvin PS является предпочтительным редактором

Можно выполнить точный поиск, поиск по субструктуре или подобию

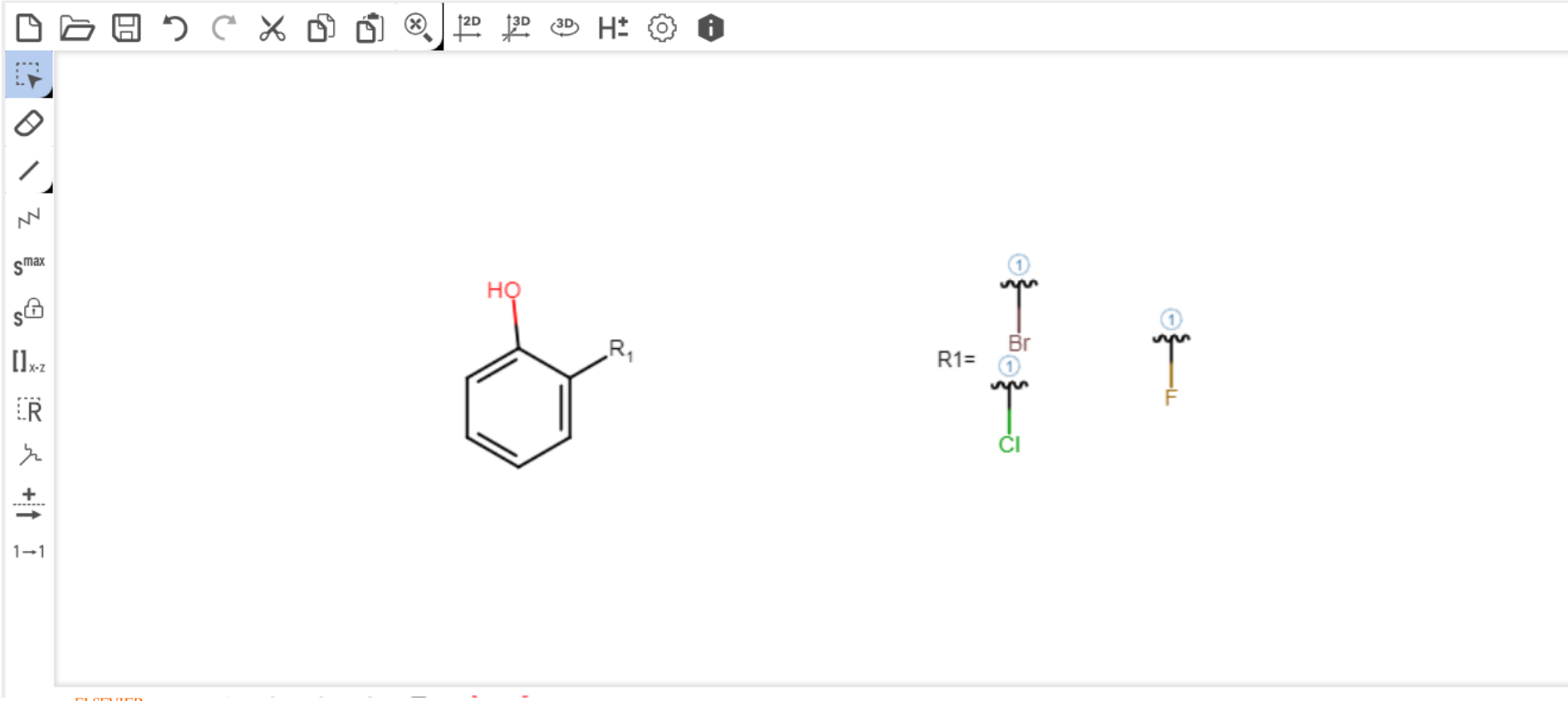
Используйте эти функции, чтобы исключить ненужные вещества

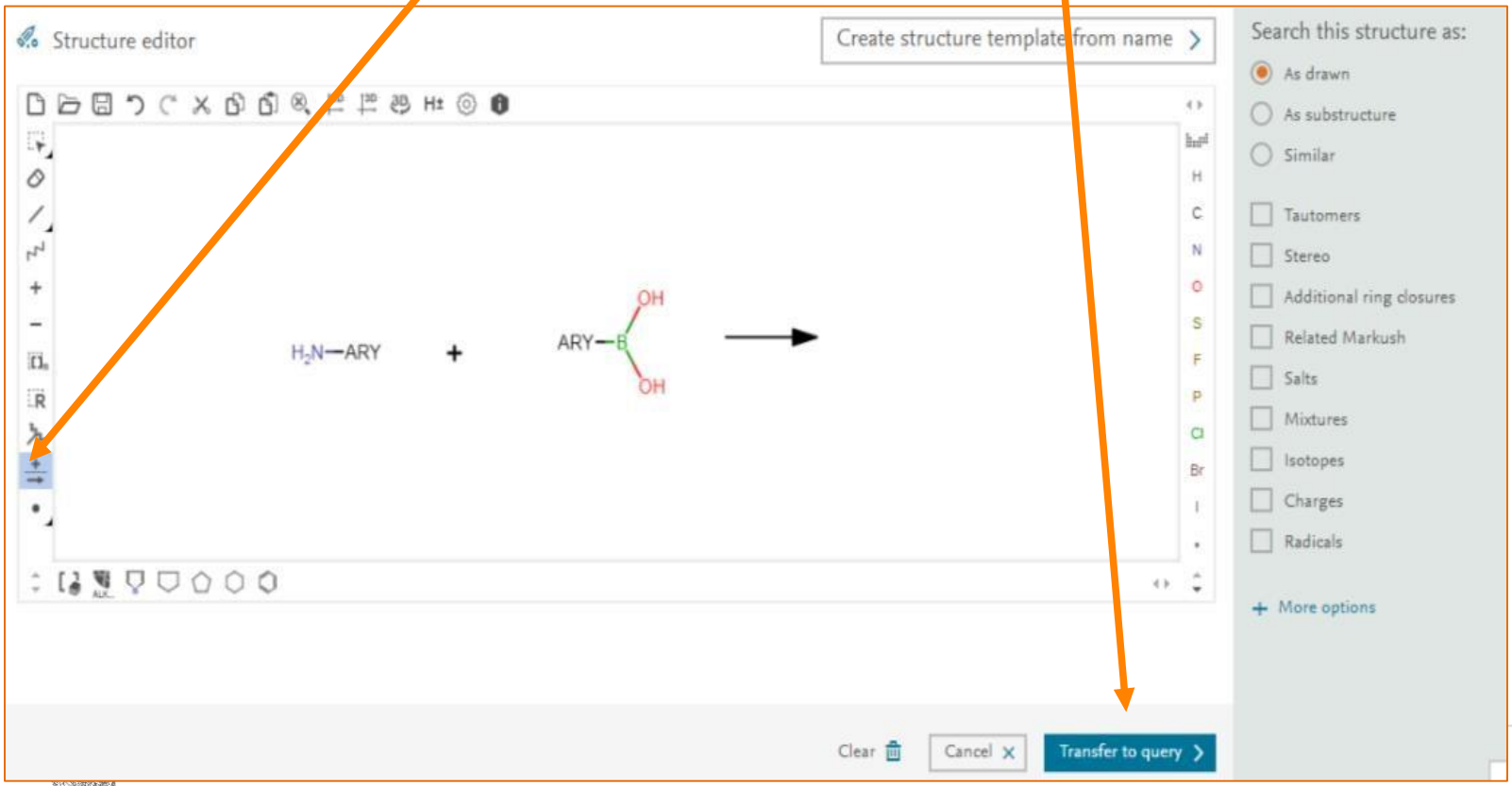


В большинстве случаев можно создать структуру из названия

ELSEVIER

Пример использования smart R-grpoup

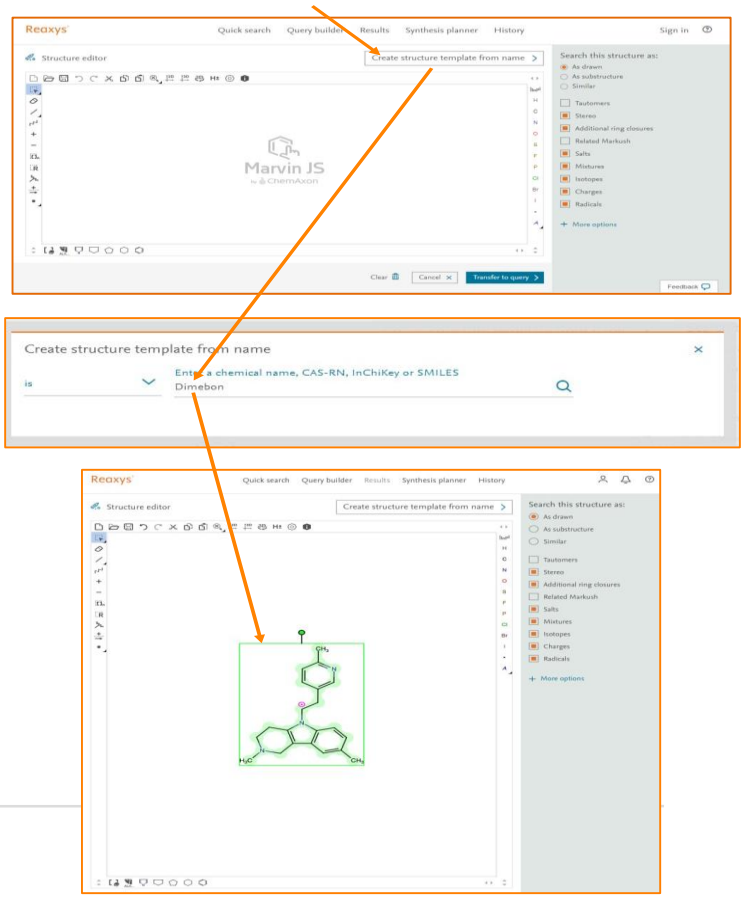



Structure editor
Create structure template from name
H2N—ARY
ARY—B
OH
OH
Search this structure as:
As drawn
As substructure
Similar
Tautomers
Stereo
Additional ring closures
Related Markush
Salts
Mixtures
Isotopes
Charges
Radicals
More options
Clear
Cancel
Transfer to query

стратегия синтеза

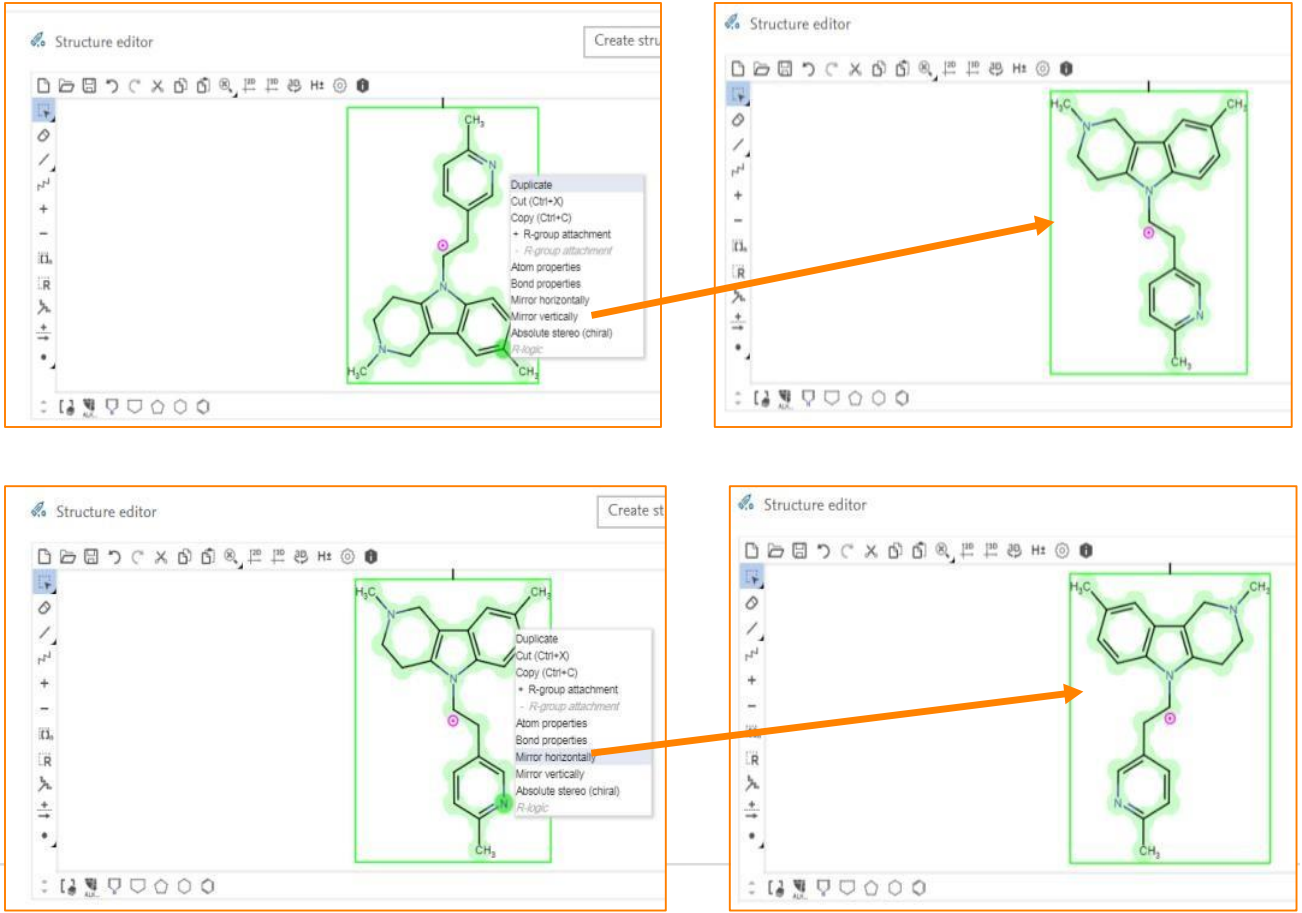
аналогов димебона

Dimebon



ELSEVIER

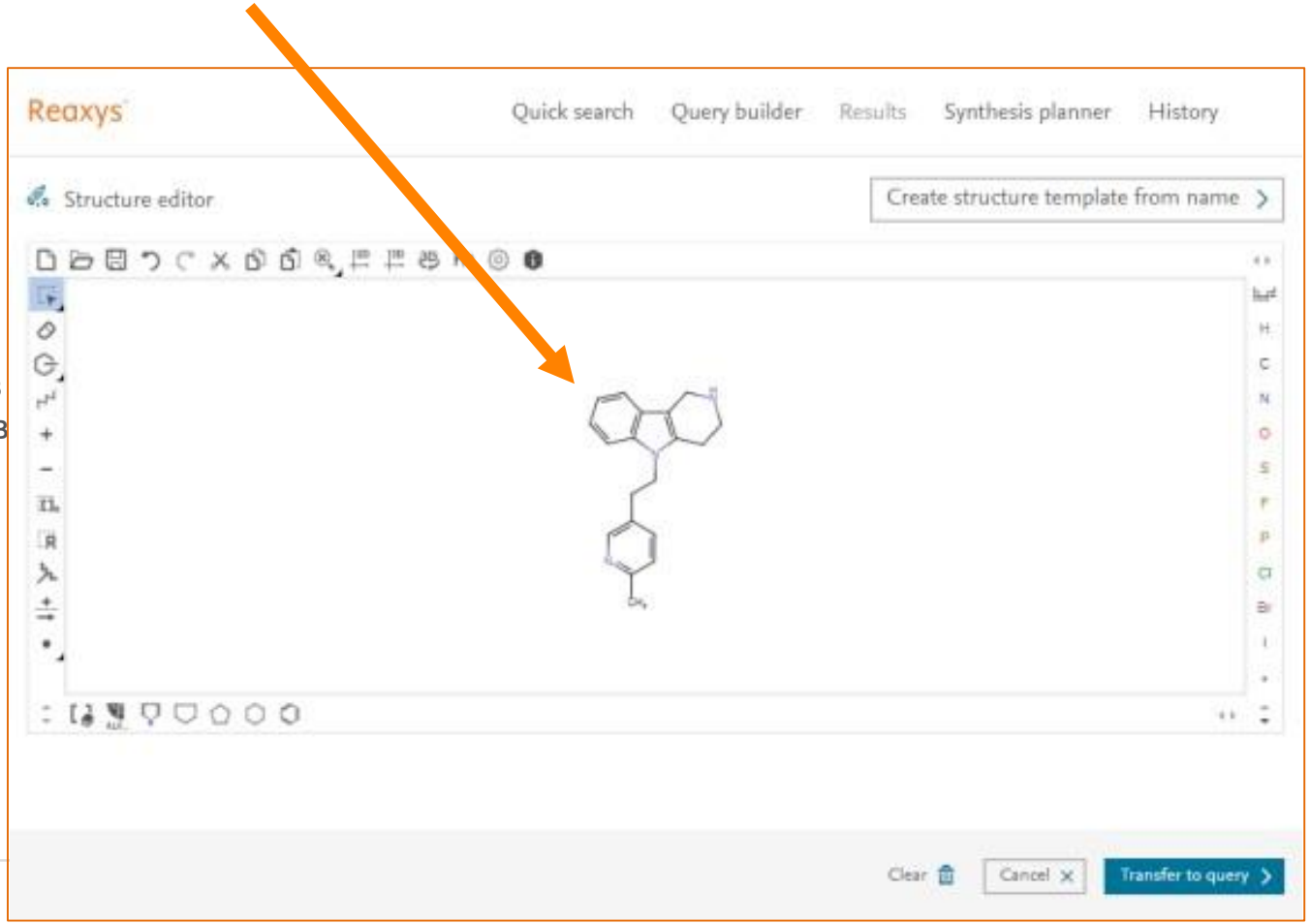
Чтобы изменить ориентацию структуры, щелкните правой кнопкой мыши на любом атоме и выберите «Отразить по вертикали» или «Отразить по горизонтали». Нужный участок структцтуры или вся чтруктцра длжны быть выделены



ELSEVIER

Вы можете отрегулировать размер структуры, прокручивая вверх или вниз.

Удалите две метильные группы из верхних колец, нажав C и нажав Delete на клавиатуре.

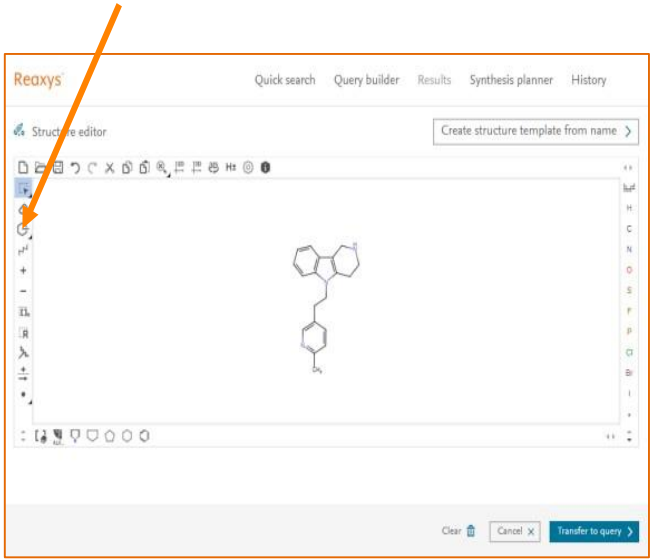


ELSEVIER

Задайте позиции плавающих связей

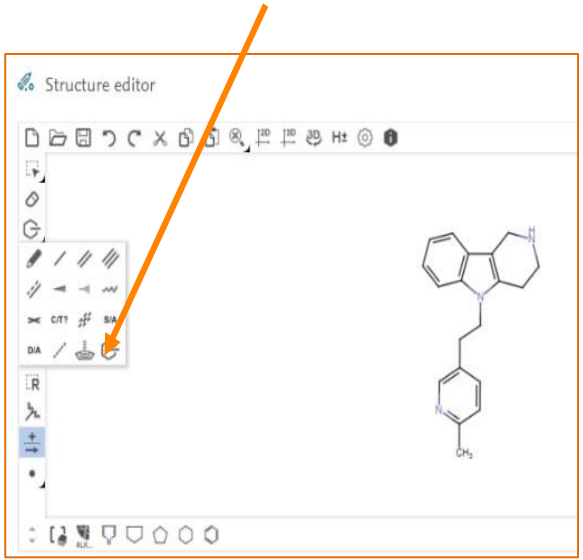
Открыть панель инструментов

a . Click here to open the tool panel.

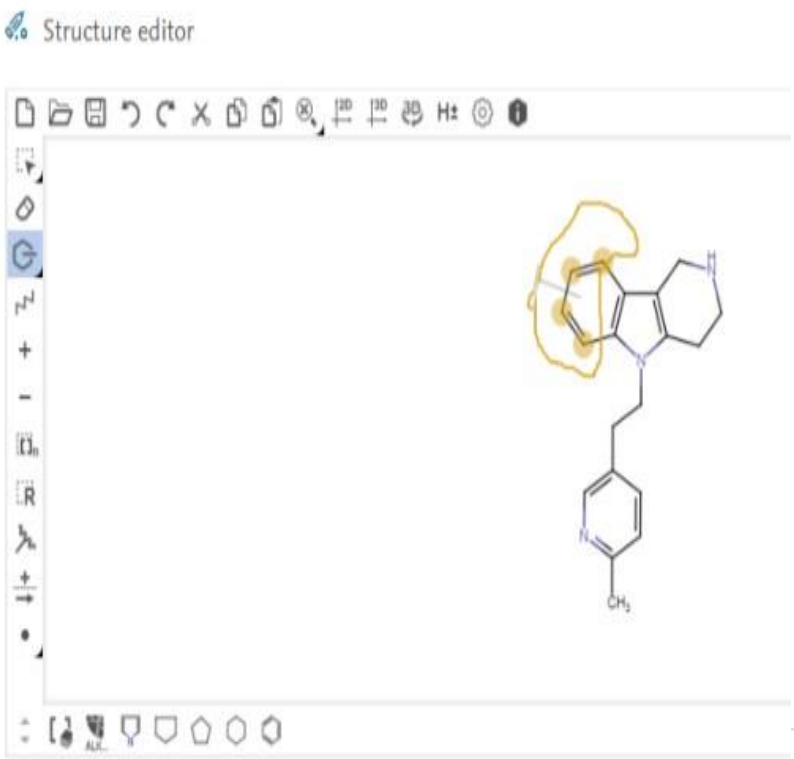


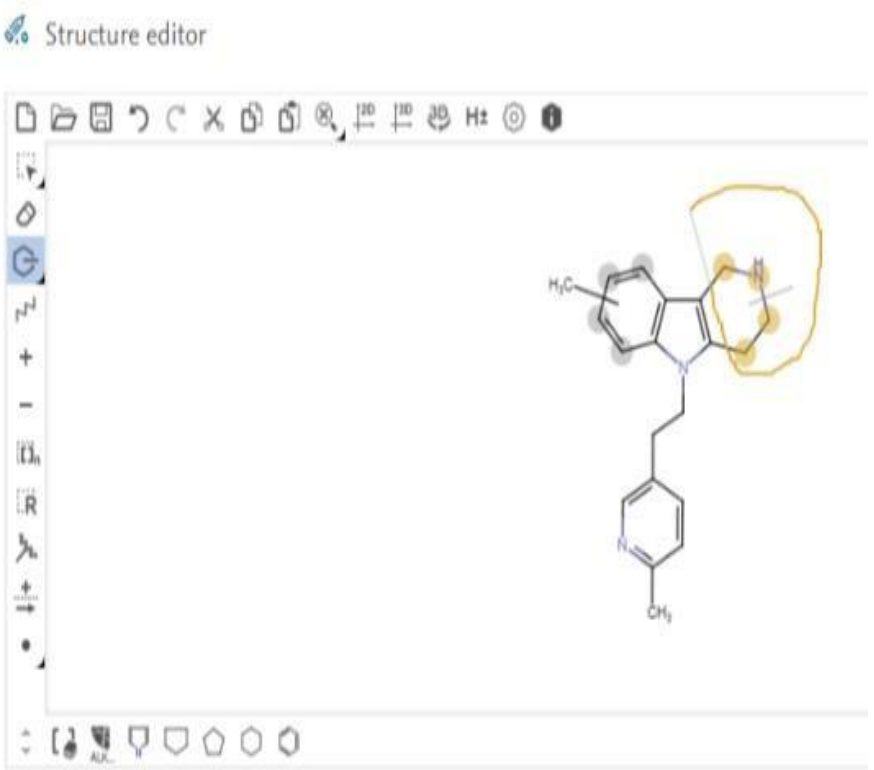
Открыть инструмент позиционирования плавающих связей

b . Select the position variation bond.



Выберите атомы для включения, нарисовав линию

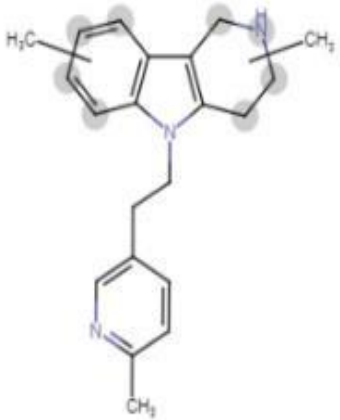




ELSEVIER

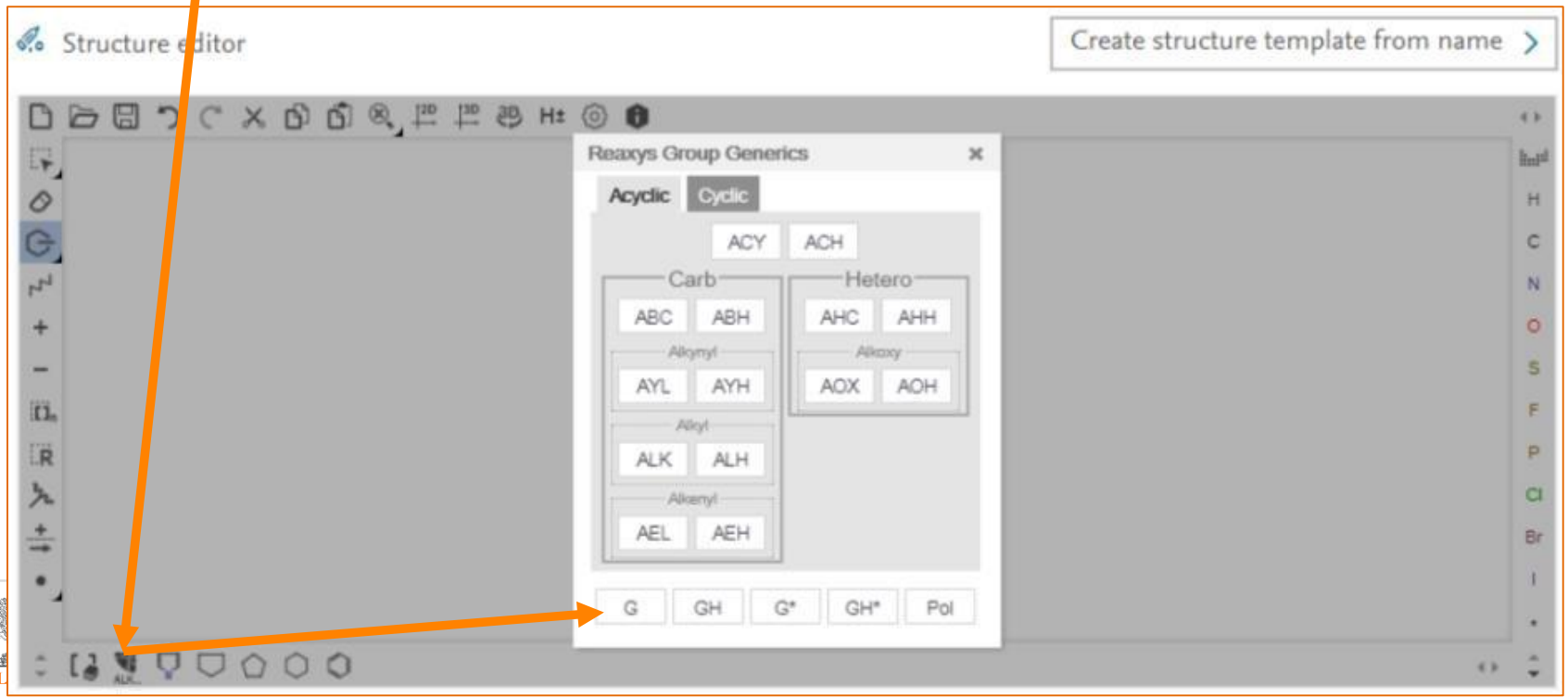
Structure editor

Create structure template from name

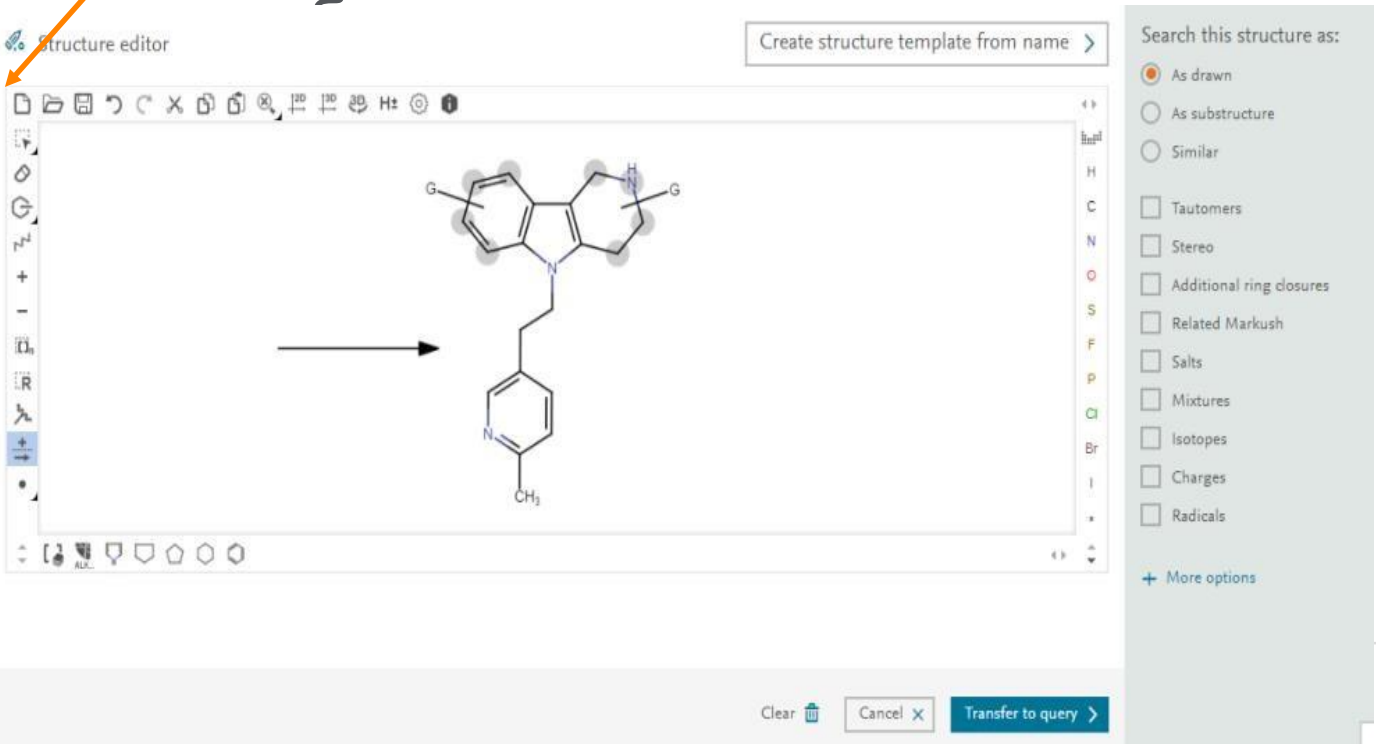


Откройте диалоговое окно Group Generics с помощью кнопки на нижней панели. Выберите G

Это позволяет добавлять любую группу в качестве запроса в связи с изменением позиции.

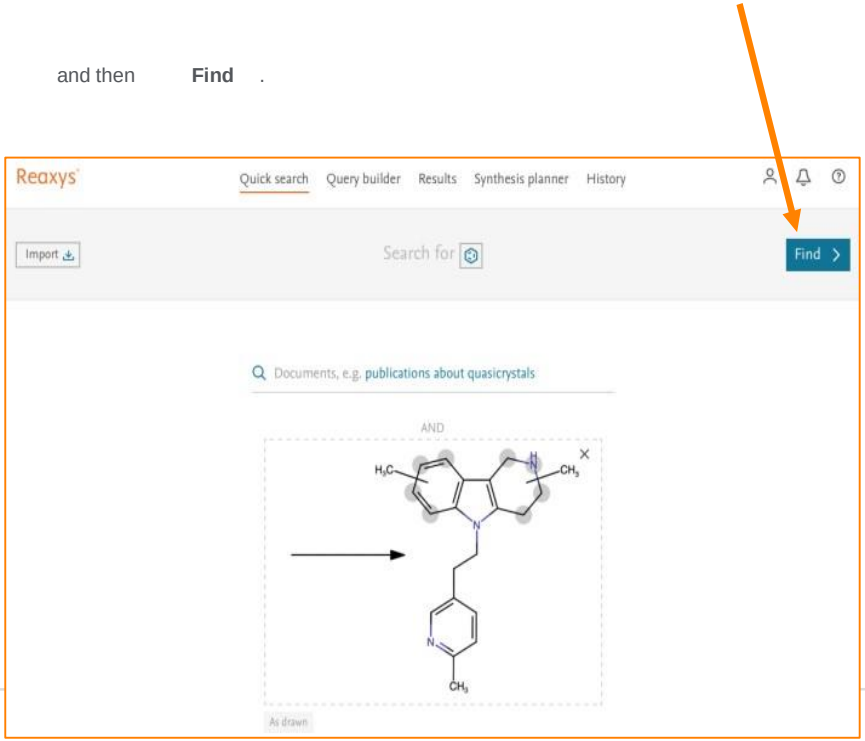


Добавьте стрелку реакции на левой панели, чтобы в запросе ваша структура

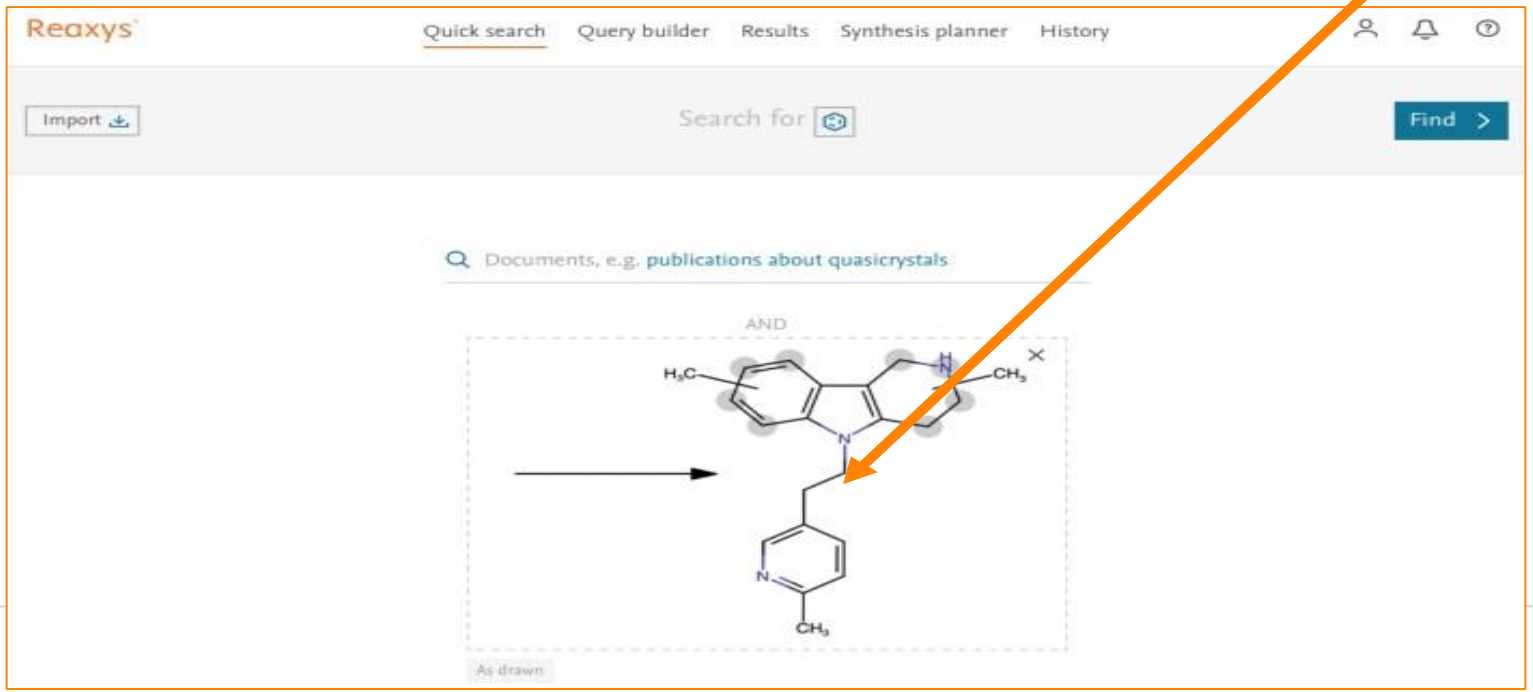


Нажмите find

Click **Transfer to query** and then **Find** .

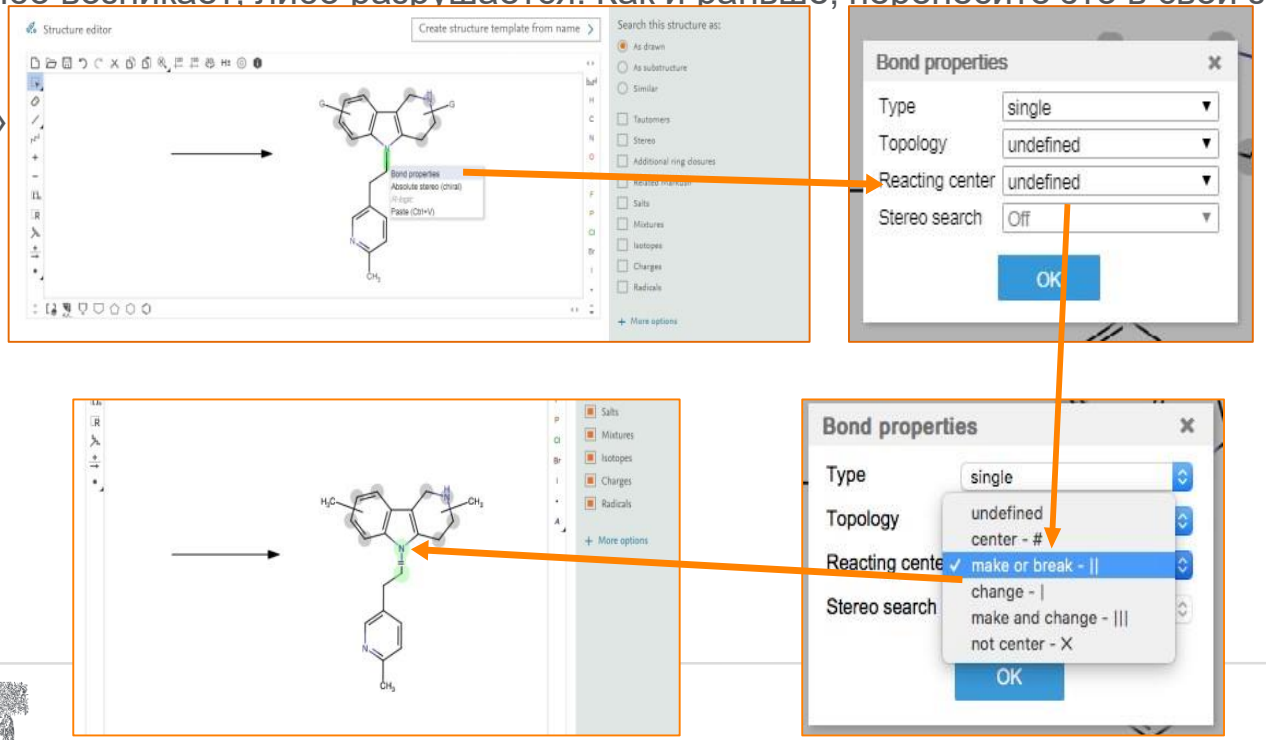


Исследуйте реакции вокруг определенных связей

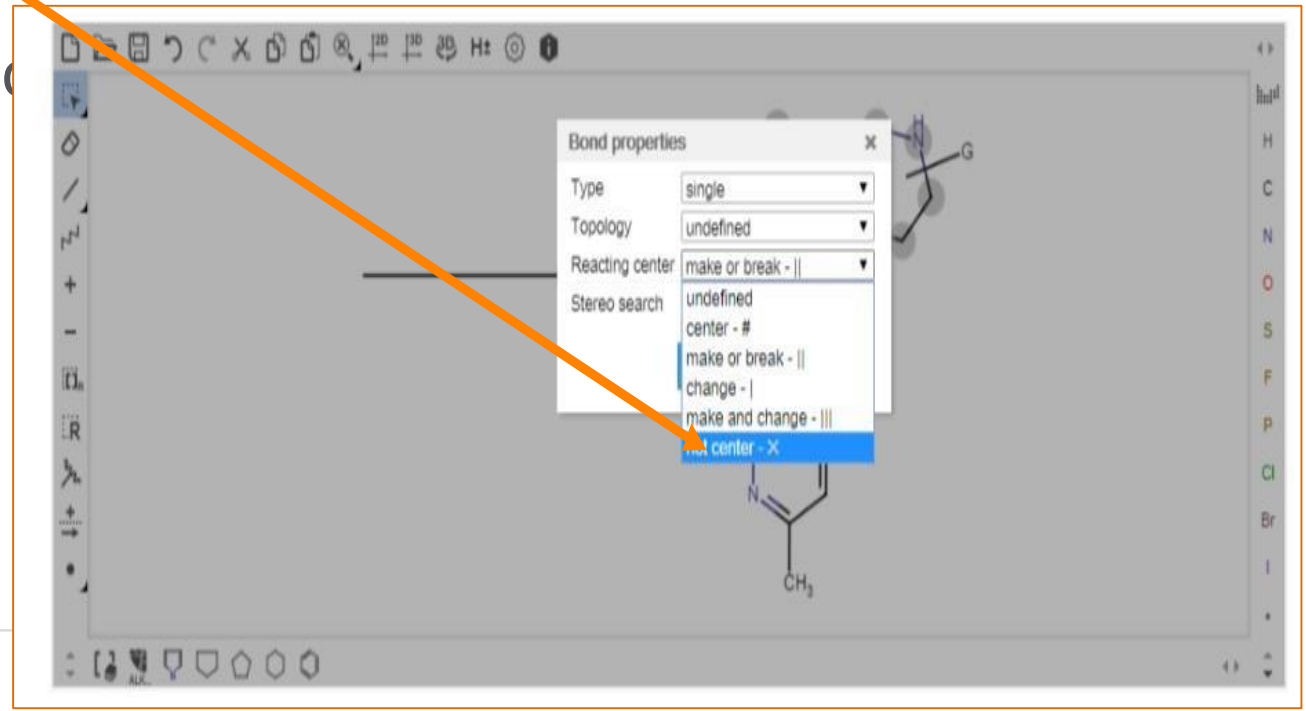


ELSEVIER

Щелкните правой кнопкой мыши на связи и выберите Свойства связи. Нажмите на выпадающее меню для Recting center и определите его как make или break. Это позволит искать те реакции, в которых эта связь либо возникает, либо разрушается. Как и раньше, перенесите это в свой запрос и нажмите «Найти»



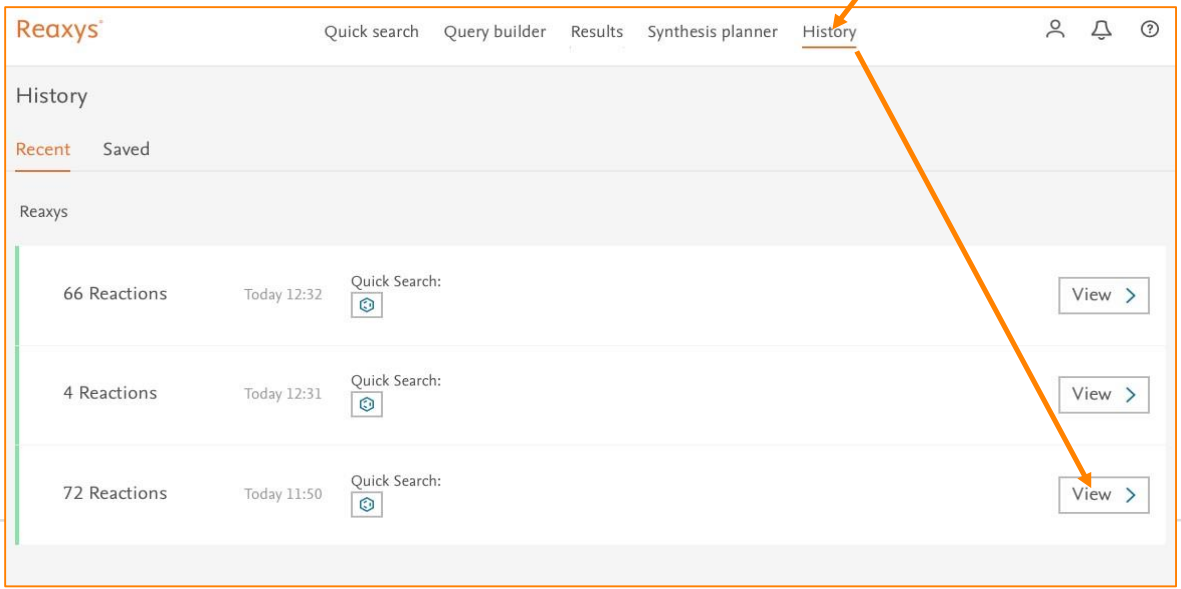
Чтобы найти реакции, в которых связь не задействована, откройте структуру запроса и выберите Не центр в раскрывающемс



ELSEVIER

Фильтрация результатов для конкретных промежуточных продуктов или реагентов.

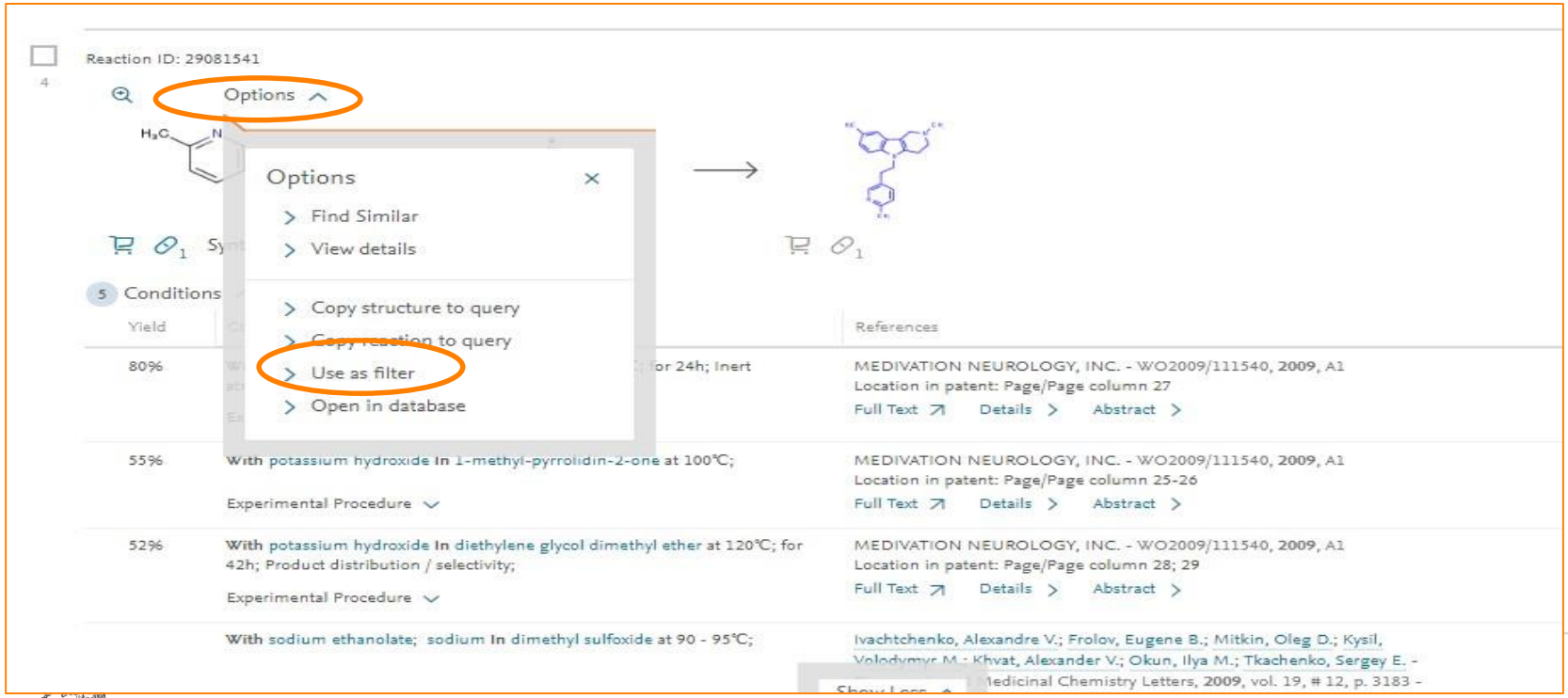
View for the first set of results.



ELSEVIER

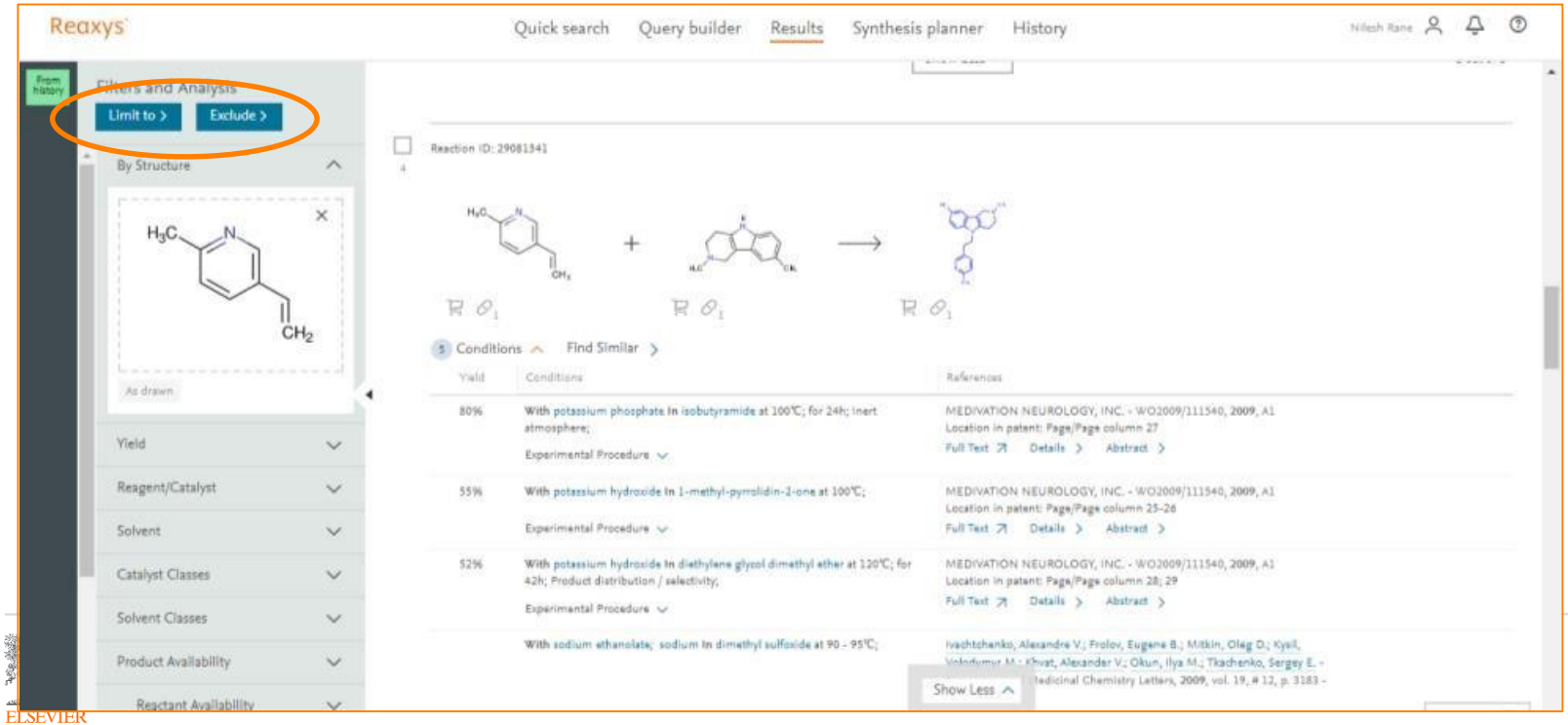
Откройте меню «Параметры» для данного реагента и выберите

«Использовать как фильтр». Это автоматически добавит в фильтр по

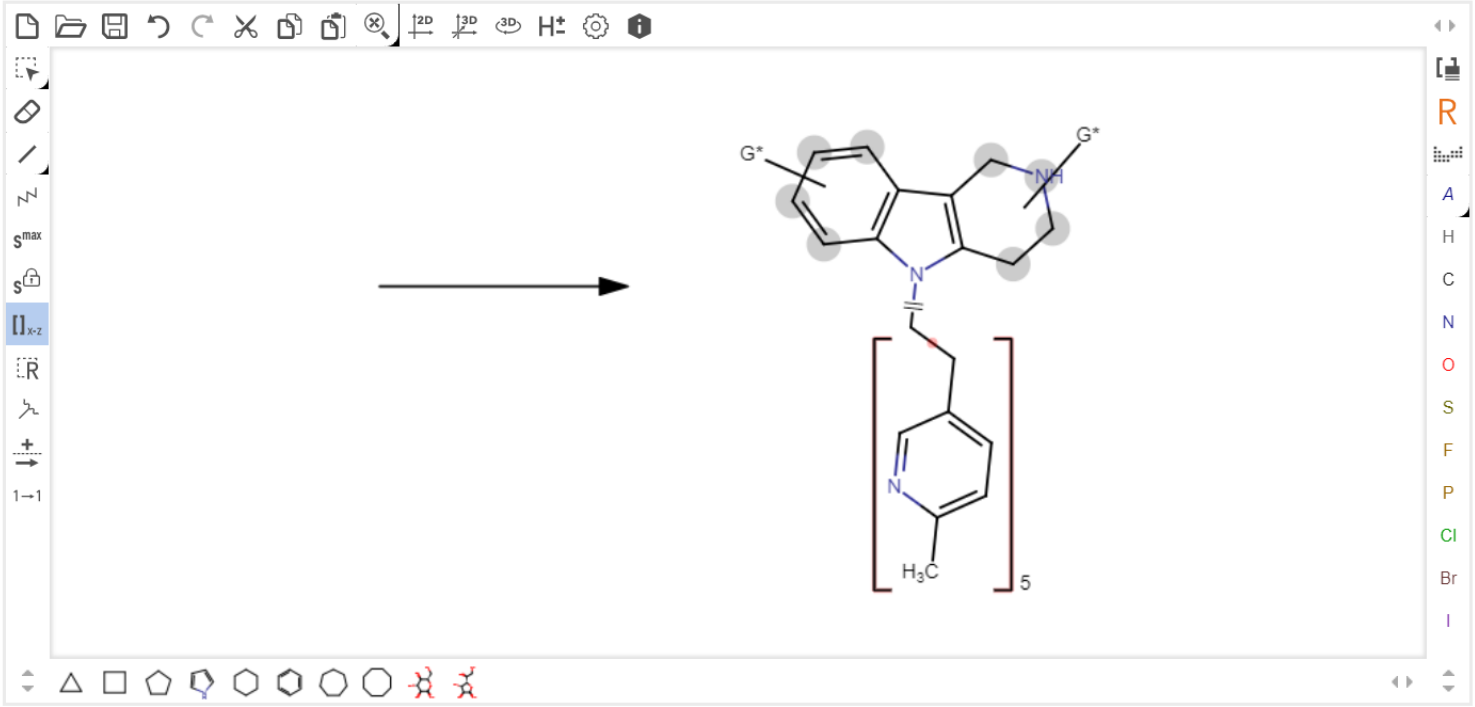


Выберите Exclude (Исключить), чтобы просмотреть все реакции, которые не включают выбранную структуру в качестве реагента. Выберите

Limit to to «ограничить», чтобы просмотреть все реакции, которые включают выбранную структуру в качестве реагента.



Повторяющиеся фрагменты



ELSEVIER

Поиск плана синтеза crystal system

Search in: Reactions > Targets > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all

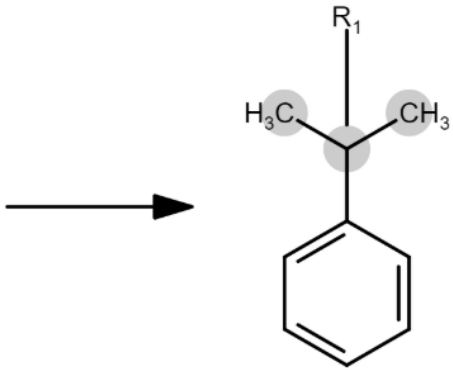
Structure Molecular Formula CAS RN Doc. Index

Crystal System Find any Hide fields

is trigonal

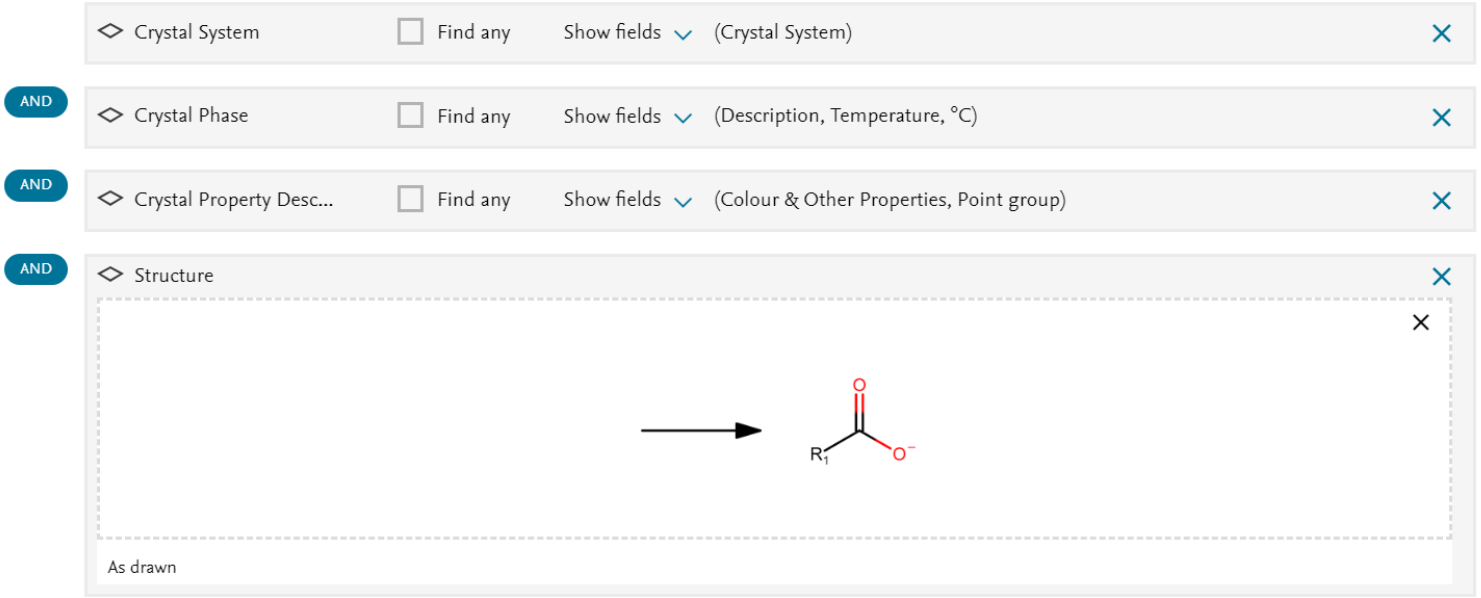
AND

Structure



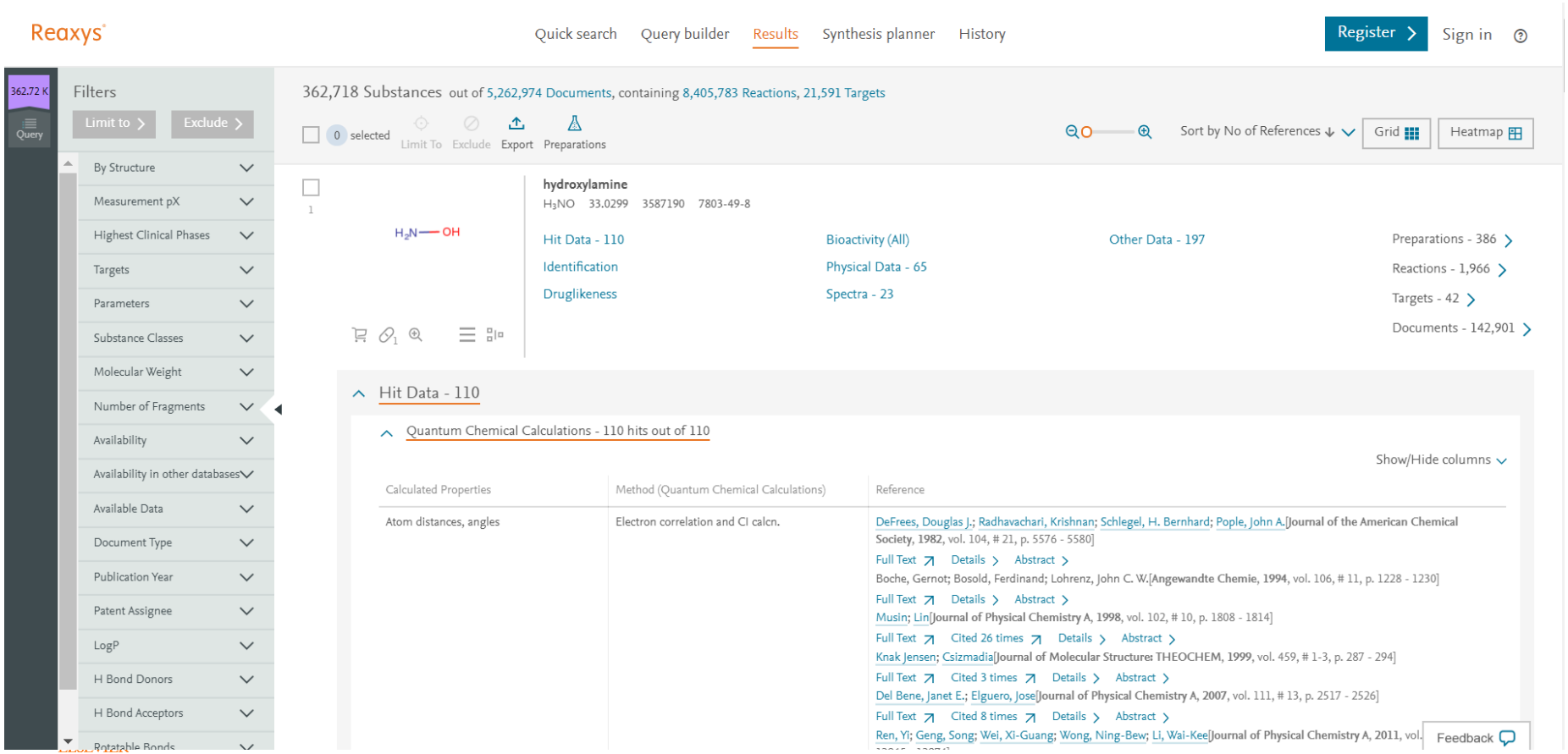
As drawn

crystal system, crystal phase, crystal properties…



ELSEVIER

Квантово-химические расчеты



Экспорт полной записи в PDF. Теплопроводность оксида алюминия..

Reaxys

1500 - 1800	from α-Al2O3 to β-Al2O3			**Goldschmidt, V. M.; Barth, T.; Lunde, G.**; Skr. Nor. Vidensk. - Akad., Kl. 1: Mat. - Naturvidensk. Kl.; nb. 7; (1925); p. 39, View in Reaxys; **vol.** Al: MVol.B1; 2.9.1, page 78 - 80 ; (from Gmelin), View in Reaxys

Transport Data (92)		
Description (Transport Data)	Comment (Transport Data)	References
Thermal conductivity	0.164 W/(m*K); T = 298 K; Solid	**Kim, Jieun; Lee, Doohwan**; Chemistry of Materials; **vol.** 28; nb. 8; (2016); p. 2786 - 2794, View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 6.3 J/(m*s*K)	**Wang, Wei-Li; Bi, Jian-Qiang; Sun, Kang-Ning; Du, Ming; Long, Na-Na; Bai, Yu-Jun**; Journal of the American Ceramic Society; **vol.** 94; nb. 8; (2011); p. 2304 - 2307 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 35.7 J/(m*s*K); 25 Deg C	**Hostasa, Jan; Pabst, Willi; Matejicek, Jiri**; Journal of the American Ceramic Society; **vol.** 94; nb. 12; (2011); p. 4404 - 4409 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 5.4 J/(m*s*K); 298 K	**Bakshi, Srinivas R.; Balani, Kantesh; Agarwal, Arvind**; Journal of the American Ceramic Society; **vol.** 91; nb. 3; (2008); p. 942 - 947 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 26 J/(m*s*K)	**Shi, Rui-Xia; Yin, Yan-Sheng; Li, Jia; Wang, Dong-Zhi**; Materials Research Bulletin; **vol.** 43; nb. 10; (2008); p. 2544 - 2553 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 30 J/(m*s*K)	**Osborne; Norton**; Journal of Materials Science; **vol.** 33; nb. 15; (1998); p. 3859 - 3865, View in Reaxys; **Sim; Ramanan; Ismail; Seetharamu; Goh**; Thermochimica Acta; **vol.** 430; nb. 1-2; (2005); p. 155 - 165, View in Reaxys; **Zhou, Wenying; Qi, Shuhua; An, Qunli; Zhao, Hongzhen; Liu, Nailiang**; Materials Research Bulletin; **vol.** 42; nb. 10; (2007); p. 1863 - 1873 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 39 J/(m*s*K)	**Manisha; Basu, Bikramjit**; Journal of the American Ceramic Society; **vol.** 90; nb. 6; (2007); p. 1858 - 1865 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 37 J/(m*s*K); 298 K	**Takeuchi; Kato; Hanada; Koizumi; Aose**; Journal of Physics and Chemistry of Solids; **vol.** 66; nb. 2-4; (2005); p. 521 - 525 ; (from Gmelin), View in Reaxys
Thermal conductivity	thermal conductivity = 25.9 J/(m*s*K); 25 Deg	**Smith, David S.; Fayette, Sylvain; Grandjean, Sylvie; Martin, Christian; Telle, Rainer; Tonnessen, Thorsten**; Journal of the American Ceramic Society; **vol.** 86; nb. 1; (2003); p. 105 - 111 ; (from Gmelin), View in Reaxys

Прогнозный ретросинтез

- Мы использовали наши данные для сотрудничества с некоторыми ведущими мировыми учеными в области хеминформатики, такими как профессор Марк Уоллер, для разработки возможности прогнозного ретросинтеза и доведения ее до наших клиентов. Очень скоро исследователи и химики смогут спросить ReaxysAI о том, как сделать молекулу

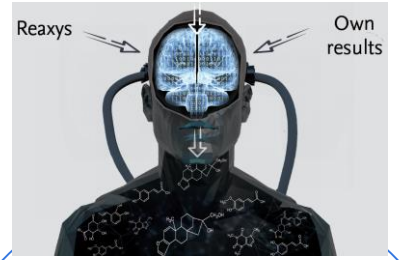
Reaxys предлагает своим клиентам лучший в своем классе AI. Нужно синтезировать молекулу? Спросите у Reaxys AI как!

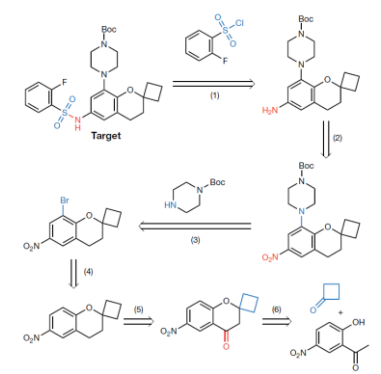
Одна из наиболее цитируемых работ в области прогнозирующего ретросинтеза стала возможной благодаря партнерству между Elsevier и профессором Марком Уоллером, и мы предлагаем это нашим клиентам.

Инструмент ретросинтеза, разработанный в сотрудничестве с профессором Марком Уоллером, расширит синтез малых органических молекул прогностическим моделированием ранее неопубликованных синтетических путей.

Система решает задачи ретросинтеза для почти в два раза большего числа молекул

В тридцать раз быстрее, чем традиционные компьютерные методы





https://www.nature.com/articles/nature25978.pdf

Прогнозирующий ретросинтез: переосмысление химии и изменение синтетических маршрутов

Harvard Business Review

DATA

If Your Data Is Bad, Your Machine Learning Tools Are Useless

by Thomas C. Redman

APRIL 02, 2018

ALAN SCHEIN PHOTOGRAPHY/GETTY IMAGES

соотношение правильных / неправильных прогнозов

Extended Data Table 1 | Metrics for the supervised neural network policies

Policy	# rules	Coverage	Matching rules/mol[b]	Accuracy[a]	top10Acc[a]	top50Acc[a]
Expansion	301,671	0.79	46,175	0.310	0.633	0.725
Rollout	17,134	0.52	321	0.501	0.891	0.964

Top10Acc/top50Acc is the ratio of correct/incorrect predictions if we allow the system to make 10 or 50 predictions.
[a]Accuracy is calculated on the molecules covered by the respective rulebase.
[b]Matching rules/mol corresponds to the branching factor.

https://www.nature.com/articles/nature25978.pdf

Вопросы?

Моисеев Алексей Александрович
a.moiseev@elsevier.com +79251131255

Спасибо за внимание!

Моисеев Алексей Александрович
a.moiseev@elsevier.com +79251131255