

Reaxys®

药物化学模块

## Fact Sheet: Reaxys Medicinal Chemistry

推进靶点识别和先导化合物优化，助力早期药物研发走向成功



### 先导化合物识别和优化的基本数据

Reaxys Medicinal Chemistry为早期药物开发提供标准化的靶点亲和力数据和综合药代动力学、药效、毒理、安全性和代谢特征数据。该数据库旨在使初学者和专家能够建立同等强大的检索，揭示物质的潜在活性，使其成为系列计算机建模工作流程的一部分。

### 介绍

Reaxys Medicinal Chemistry为靶点识别和先导化合物优化提供标准化的物质-靶点亲和力数据和综合药代动力学、药效、毒理、安全性和代谢特征数据。该数据库结合了世界最大、数据构架最完美的生物活性数据，并配备了强大的靶点评价及数据导出功能，使输出数据到现有的计算机环境成为可能，有助于内部和外部数据的统一分析。

### Reaxys Medicinal Chemistry能帮助回答关键的检索问题：

- 有哪些物质对我的靶点具有生物活性？
- 我的化合物和靶点之间是怎样的作用？
- 其他具有相似结构的化合物具备哪些作用类型？
- 不同化合物对我的靶点的比较亲和力是什么？
- 已经对类似化合物进行了那些表型筛选？
- 在候选药物之中，哪一个候选成功的几率最高？
- 研究类似化学结构和靶点的重要研究者有哪些？

>3,520万  
生物活性数据点

>680万  
具有生物活性的  
独特物质

> 27,000  
药物靶点

>65,000  
生物物种

所有数据来自：

> 133,000  
药物化学专利

>370,000  
药物化学出版文献

>5,000  
药物研究和  
药学期刊



## 特征

全球最大、数据架构最完美的药物化学数据库

内容包括：

- 构效关系（SAR）数据
- 体外药效，药代动力学，毒性和安全性数据
- 体内动物实验数据
- 体外代谢数据

所有数据，包括来自第三方数据库的内容，均使用Reaxys化学品、靶点和生物活性标准进行协调统一。Elsevier生命科学专家对数据进行格式统一；概念和词汇表标注；并删除不一致的数据和重复出现的内容。

## 快速直观的检索功能

为了促进生物活性数据和引文的快速检索，Reaxys Medicinal Chemistry可为用户提供快速检索：一个接受包含自然语言关键词和/或物质结构或反应图的查询的直观界面（图1）。智能检索算法理解和解释文本，为用户提供检索结果类型预览（图2）。该功能可让初学者和专家们能够快速找出药物研发问题的答案。

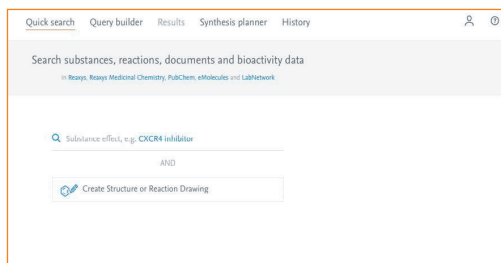


图1：快速检索关键词和/或化合物结构

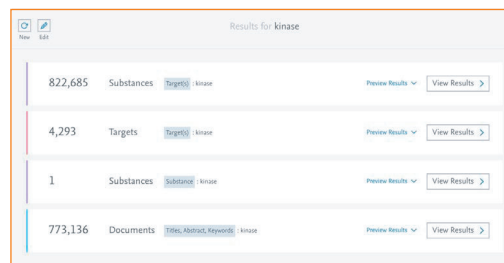


图2：结果预览可以帮助用户直接获取所需的信息

## 灵活强大的检索结构

数据库提供了直观的Query Builder功能（图3），可以使用文本输入和化学结构进行高级查询的直接拖放操作。它还包括19个用于优化检索的专用检索选项列表。通过精确定义查询参数并获取相关答案，Reaxys Medicinal Chemistry能为用户提供强大的检索功能。

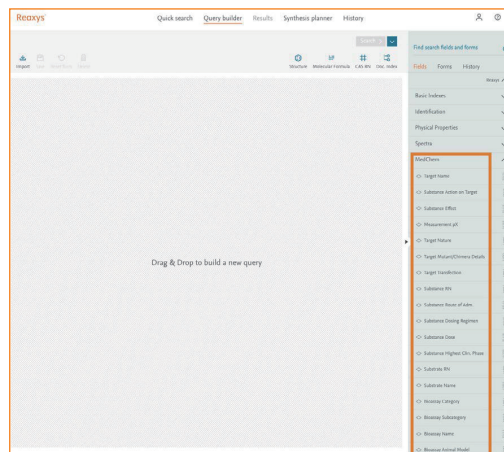


图3：Query Builder可以直接构建高级查询，并包括用于主要优化检索工作的19个专用检索选项

## 轻松访问详细信息

检索结果以易于阅读的方式呈现。Filters过滤器（图4A）可以快速筛选检索结果，获取最相关的物质、靶点或文献。点击以获得关于物质（图4A和B）的准确的理化性质和生物活性的信息以及靶点的相关信息（图4C）。

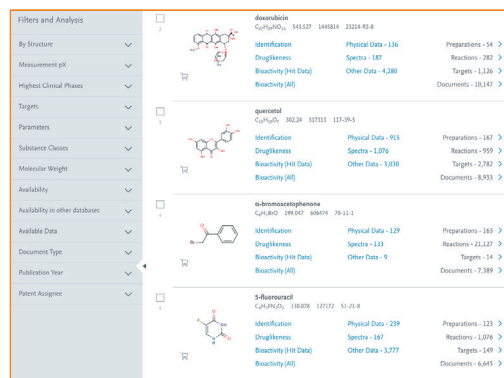


图4A 检索结果可通过过滤器和下拉选项进一步筛选

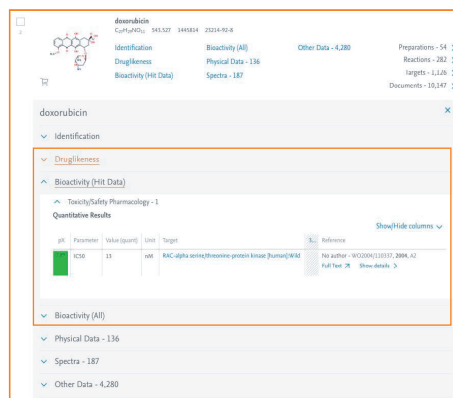


图4B 物质信息包括类药性和生物活性信息

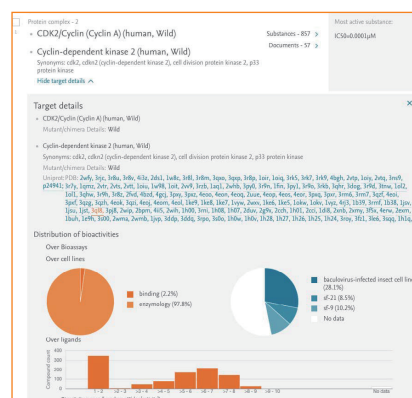


图4C 靶点信息包括生物活性分布的直观图表

### 快速评估物质和靶点的相互关系

热图 (图5) 根据不同的参数, 直观的展望物质与生物靶点之间的活性关系。使您对研究中化合物的构效关系一目了然。并且可以通过调节不同的参数进行分析, 以获得之前未被发现, 作用于其他细胞株的新活性。

### 清晰地定量物质和靶点的亲和力

为了便于比较不同出版物、不同生物模型的实验数据, Reaxys Medicinal Chemistry中的所有数据点都使用了标准化的pX参数。通过pX可以轻松比对来自不同来源的数据内容, 方便各方面数据的整合。pX是统一的化合物活性量化标准参数, 使用者可以通过其对不同化合物的活性进行量化比对。Heatmap热图会显示pX值 (图5), 使用者可以轻松判读。

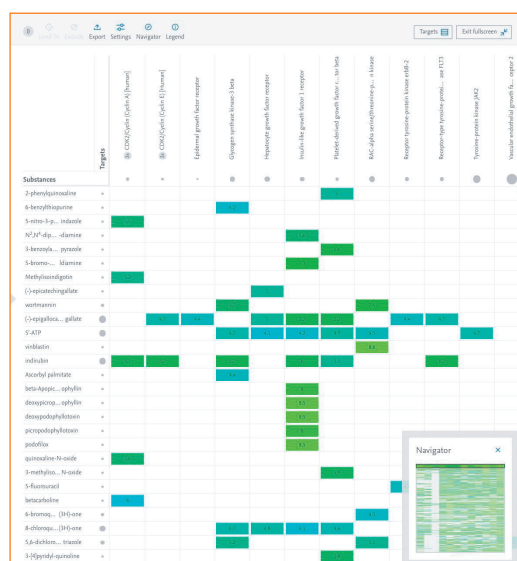


图5 热图可以快速评估物质-靶点的相互作用

### 与内部和外部合作者分享您的数据和发现

Reaxys Medicinal Chemistry支持多种格式导出检索结果, 可以完全契合到您的工作流程中, 方便使用者利用来源不同的可视化分析软件进行数据分析。使用者也可以标注或评论检索结果, 并可直接与其他研究者共享。

### 将Reaxys Medicinal Chemistry整合到现有的工作流程中

应用编程接口 (API) 允许灵活的信息传递和对内容和系统的实时编程方式访问。Flat File提供用于内部使用的化合物结构, 相关反应数据和生物活性信息, 例如QSAR / QSPR建模和化学空间分析。Elsevier研发解决方案团队随时准备确保Reaxys Medicinal Chemistry可在现有工具环境中无缝运行。

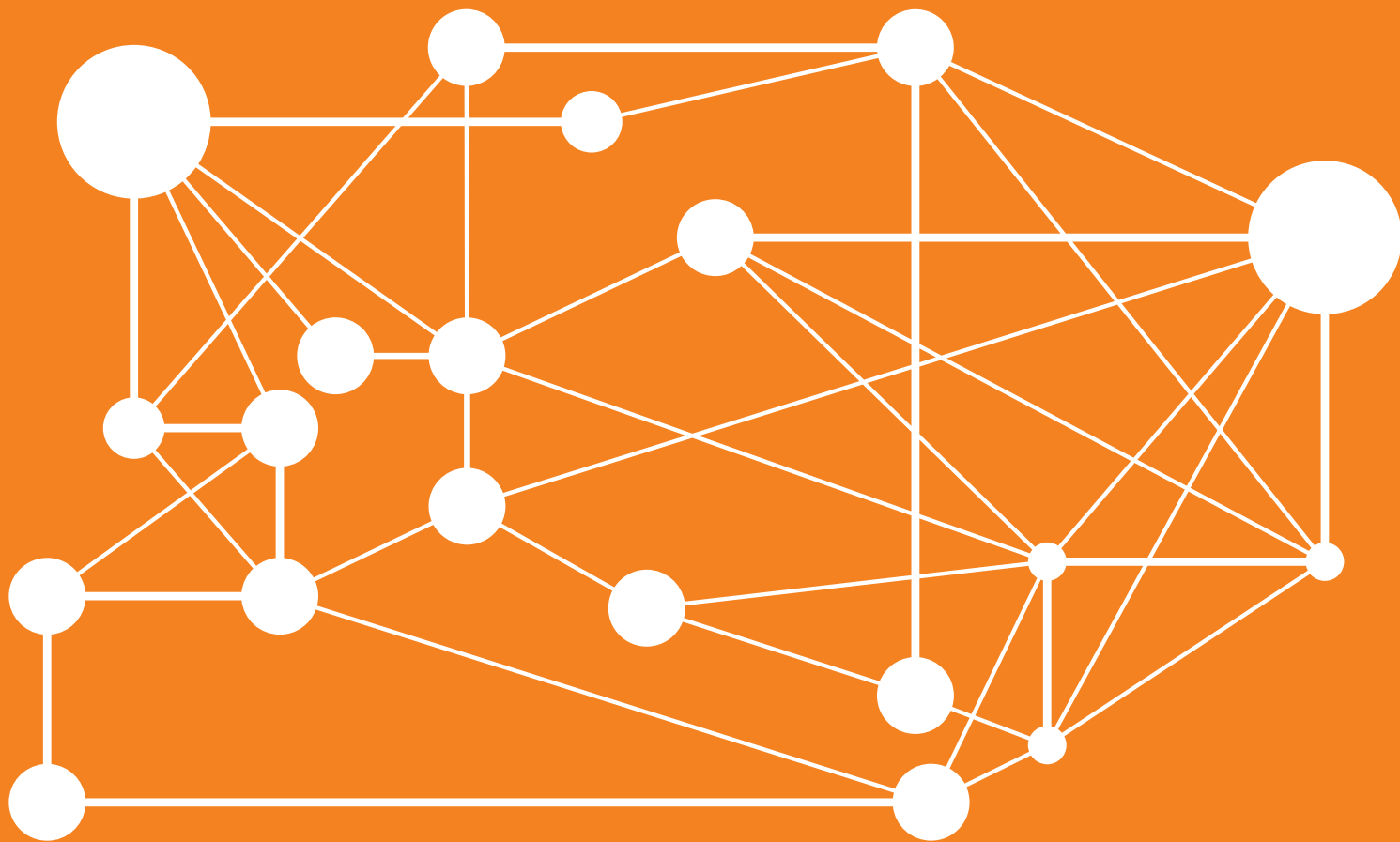
### 探索合成路线和化学性质

Reaxys Medicinal Chemistry可以与Reaxys完全整合, 能深入探索已知化合物的结构和理化性质, 并提供化学反应和合成路线信息。两个解决方案的订阅者可以通过单个简化的用户界面访问这些数据。

### 主要优势

Reaxys Medicinal Chemistry可以使您

- 明确评估化合物对蛋白靶点的生物活性
- 量化分析化合物与靶点之间的作用参数
- 快速进行高通量评价筛选
- 直接获取标准化活性数据
- 完美评估项目研发近况



## Reaxys Medicinal Chemistry

帮助客户通过提供标准化物质-靶点数据和综合药代动力学，功效，毒性，安全性和代谢特征的最短路径，帮助客户实现更有效的命中鉴定和优化。

### 了解详情：

如需详细了解产品信息或产品演示，请发送邮件至 [elseviermarketing@elsevier.com](mailto:elseviermarketing@elsevier.com)

如您在产品的使用过程中有任何疑问，请通过以下方式与我们的客服联系：

励德爱思唯尔信息技术(北京)有限公司

地 址：北京市东城区东长安街1号东方广场W1座701

电 话：+ 86 10 8520 8800

电 邮：[sginfo@elsevier.com](mailto:sginfo@elsevier.com)