

2019

Reaxys – Greek project: Engaging activity



Juan Pablo Aita Vassallo

Μετάφραση:

Maria Paradise, InterOPTICS AEE

mparadise@interoptics.com.gr

Εισαγωγή:

Είναι η αποστολή μας στον Elsevier να προχωρήσει η επιστήμη εξυπηρετώντας την ερευνητική κοινότητα. Είναι δέσμευσή μας να συμμετέχουμε σε επιλεγμένες chemical societies σε όλο τον κόσμο, με στόχο να αποκαλύψουμε μελλοντικούς τομείς συνεργασίας στον τομέα της επιστήμης μέσω αναλύσεων πληροφοριών και δεδομένων. Ως εκ τούτου, ο Elsevier θα ήθελε να προσφέρει μια ολοκληρωμένη δραστηριότητα με τις βάσεις δεδομένων **Reaxys** και **Reaxys Medicinal Chemistry** στα ελληνικά πανεπιστήμια.

Το έργο, όπως εξηγείται παρακάτω, βασίζεται στην ανατροφοδότηση που προέκυψε κατά την πρόσφατη συνάντηση του Elsevier με μερικά από τα μέλη της Επιτροπής Περιοδικών του ΣΕΑΒ (Heal Link) στο Ρέθυμνο της Κρήτης.

Ο Elsevier αντιλαμβάνεται ότι η απόφαση χρήσης της σωστής βάσης δεδομένων στην κοινότητα της χημείας είναι εξαιρετικά σημαντική για την Ελλάδα. Όχι μόνο αυτή η επιλογή θα επηρεάσει το μέλλον της επόμενης γενιάς νέων φοιτητών χημείας, αλλά θα διαδραματίσει επίσης βασικό ρόλο σε μια στρατηγική σε επίπεδο χώρας που θα οδηγήσει σε καλύτερη ποιότητα των ερευνητικών επιδόσεων της χημείας στην Ελλάδα. Ως εκ τούτου, **στόχος αυτής της πρωτοβουλίας** είναι η περαιτέρω διερεύνηση της Reaxys και της Reaxys Medicinal Chemistry σε μια ομάδα πανεπιστημίων από την Ελλάδα. Ως εκ τούτου, η Elsevier θα ήθελε να προσφέρει **έξι μήνες ελεύθερη πρόσβαση και στις δύο βάσεις δεδομένων** και να ασχοληθεί με τα παρακάτω πανεπιστήμια στην Ελλάδα.

- Αριστοτέλειο πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης.
- Εθνικό & Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
- Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
- Πολυτεχνείο Κρήτης.
- Πανεπιστήμιο Πατρών.
- Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.
- Πανεπιστήμιο Κρήτης.

Η προσέγγιση και τα οφέλη αυτού του έργου εξηγούνται παρακάτω:

1. Η προσέγγιση:

Ο Elsevier θα επιτρέψει την ελεύθερη πρόσβαση σε Reaxys και Reaxys Medicinal Chemistry **για έξι μήνες σε κάποια πανεπιστήμια στην Ελλάδα**. Κατά τη διάρκεια της συμμετοχικής δραστηριότητας, θα παρακολουθούμε ενεργά και θα συλλέγουμε σχόλια και τη στατιστική χρήση αυτής της ομάδας πανεπιστημίων. Μελετώντας τα δεδομένα αυτά, τα πανεπιστήμια θα έχουν περισσότερα στοιχεία για να λάβουν την τελική τους απόφαση, να αποκτήσουν την Reaxys μέσω συμφωνίας σε εθνικό επίπεδο.

Από τον Δεκέμβριο του 2019, ο Elsevier θα ασχοληθεί με καθηγητές, φοιτητές και βιβλιοθηκονόμους στις σχολές χημείας. Ο στόχος του έργου είναι να επιτρέψει στα παραπάνω ελληνικά πανεπιστήμια να δοκιμάσουν την Reaxys για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα αξιολογώντας την πιθανή αξία του

προκειμένου να αποφασίσουν αν η συνδρομή στο Reaxys - Reaxys Medicinal Chemistry είναι επιθυμητή για το ίδρυμά τους.

2. Χρονοδιάγραμμα και δραστηριότητες αυτού του προγράμματος:

Από τις 2 Δεκεμβρίου 2019 έως τις 31 Μαΐου 2020.

Οι δραστηριότητες του Elsevier με τα Reaxys και Reaxys Medicinal Chemistry:

- **Έναρξη Προγράμματος Reaxys:** Στις 4 και 5 Δεκεμβρίου 2019, ο Elsevier θα προσφέρει ένα ηλεκτρονικό σεμινάριο (webinar) στα Reaxys και Reaxys Medicinal Chemistry για να συστήσει στους χρήστες και τις δύο βάσεις δεδομένων.

- **Επίδειξη στις Πανεπιστημιούπολεις:** Από τις 13 έως τις 17 Ιανουαρίου. Κατά τη διάρκεια αυτής της εβδομάδας ένας εκπρόσωπος του Elsevier θα επισκεφθεί κάθε ένα από τα πανεπιστήμια που συμμετέχουν σε αυτό το πρόγραμμα προκειμένου να διδάξουν στους χρήστες τους πώς να χρησιμοποιήσουν το Reaxys.

Μετά από αυτές τις δύο δραστηριότητες (την πρώτη εβδομάδα του Μαρτίου). Ο Elsevier θα συλλέξει τη χρήση και τα σχόλια για να αξιολογήσει εάν υπάρχει ενδιαφέρον από τα πανεπιστήμια για το Reaxys. Ο Elsevier μπορεί να αποφασίσει να διακόψει την πρόσβαση και στις δύο βάσεις δεδομένων σε περίπτωση που τα στατιστικά στοιχεία χρήσης και η δέσμευση είναι χαμηλά κατά το τέλος της περιόδου επιθεώρησης.

- **Τελευταίο webinar:** Κατά τον Απρίλιο (σε ημερομηνίες που θα οριστούν), ο Elsevier θα προσφέρει το τελικό διαδικτυακό σεμινάριο στις Reaxys και Reaxys Medicinal chemistry.

Αμφότερα Οφέλη:

Αυτά είναι μερικά από τα οφέλη που μπορεί να αποκτήσει ο Elsevier και τα ελληνικά πανεπιστήμια με την συμμετοχή τους στο εν λόγω έργο /δραστηριότητα:

- Πλήρης κατανόηση της αξίας των Reaxys και Reaxys Medicinal Chemistry σε εκείνα τα πανεπιστήμια όπου θα δοκιμαστεί το Reaxys.
- Θα αποκτήσετε καλύτερη κατανόηση των συγκεκριμένων ιδρυματικών αναγκών όσον αφορά στη χρήση της σωστής βάσης δεδομένων χρησιμοποιώντας το Reaxys.
- Συμπερίληψη προγράμματος συμμετοχής για ερευνητές από τα πανεπιστήμια που πάρουν μέρος στη δοκιμαστική χρήση (διαδικτυακά σεμινάρια και επιδείξεις στην πανεπιστημιούπολη). Το πρόγραμμα αυτό θα περιλαμβάνει επίσης τη συνεργασία με βιβλιοθηκονόμους σε κάθε ίδρυμα.
- Η Reaxys θα συμβάλει στον εμπλουτισμό της ποιότητας της έρευνας στην Ελλάδα (κατά τη διάρκεια αυτών των μηνών δοκιμής).

4. Οφέλη του προϊόντος:

Το Reaxys έχει σχεδιαστεί για να ικανοποιεί τη ζήτηση για ταχεία πρόσβαση στη σχετική βιβλιογραφία, συμπεριλαμβανομένων των άρθρων και διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας, των πειραματικών διαδικασιών και των δεδομένων σχετικά με την ιδιότητα και την αντίδραση των ουσιών.

- Οι σπουδαστές και οι καθηγητές θα έχουν απεριόριστη πρόσβαση στα Reaxys και Reaxys Medicinal Chemistry από τα ιδρύματά τους στην Ελλάδα.
- Πρόσβαση σε ακριβείς οδούς σύνθεσης ουσιών με ολοκληρωμένες συνδέσεις με δημόσιες και ιδιόκτητες βάσεις δεδομένων για τη διαθεσιμότητα ουσιών.
- Εξοικονόμηση χρόνου / αποτελεσματικότητα που επιτυγχάνεται στην τρέχουσα ροή εργασιών αναζήτησης αντιδράσεων.
- Πρόσβαση σε ροές εργασίας που έχουν σχεδιαστεί για χρήση σε αίθουσες διδασκαλίας με προπτυχιακούς και μεταπτυχιακούς φοιτητές.

Το Reaxys έχει αποδειχθεί ότι:

- Ενισχύει την έμπιστη και διεξοδική διερεύνηση των σχετικών θεμάτων.
- Βοηθά τους χρήστες να βρίσκουν απαντήσεις πιο γρήγορα από ό, τι με άλλες λύσεις έρευνας χημείας.
- Ενεργοποιεί ευρύτερη ανακάλυψη σχετικής πληροφορίας από ένα ευρύτερο φάσμα περιεχομένου.
- Ενεργοποιεί όλους τους χρήστες, ανεξάρτητα από την εμπειρία του στη έρευνα
- Προσφέρει επιπλέον υποστήριξη για τους φοιτητές και τους αρχάριους χρήστες

Reaxys Medicinal Chemistry, βασικά οφέλη:

- Σίγουρη αξιολόγηση των σύνθετων επιδράσεων σε πρωτεΐνες στόχους
- Ποσοτικοποίηση των συγγενών ενώσεων και στόχων.
- Ταχεία αξιολόγηση μεγάλων σειρών αποτελεσμάτων.
- Άμεση χρήση δεδομένων χωρίς ανάγκη κανονικοποίησης.
- Εξαιρετικές επισκοπήσεις του ερευνητικού περιβάλλοντος

Περιεχόμενο και ανιχνευσιμότητα:

Το Reaxys παρέχει μοναδικά πρόσβαση σε πολλούς πόρους μέσω μιας διεπαφής χρήστη:

- Υψηλής ποιότητας επιστημονική peer-reviewed βιβλιογραφία από ένα ευρύ φάσμα περιοδικών χημείας και χημικών επιστημών, περιλαμβάνει αναγνωρισμένα Society περιοδικά
- Διπλώματα ευρεσιτεχνίας από τα γραφεία του Κόσμου, της ΕΕ, των ΗΠΑ, της Ιαπωνίας, της Ν. Κορέας, της Κίνας και της Ταϊβάν

- Βάσεις δεδομένων ουσιών με πληροφορίες διαθεσιμότητας και / ή πειραματικά δεδομένα, συμπεριλαμβανομένων των eMolecules, των εργαστηρίων ACD, της βάσης δεδομένων Sigma-Aldrich και της LabNetwork της WuXi AppTech

Το Reaxys Medicinal Chemistry περιλαμβάνει:

- Σχέδια σχέσης δομής-δραστηριότητας (Structure–activity relationship / SAR)
- Δεδομένα από in vivo μελέτες σε ζώα
- Δεδομένα αποτελεσματικότητας, φαρμακοκινητικής, τοξικότητας και ασφάλειας in vitro
- Προφίλ μεταβολισμού in vitro

Εμπειρία Χρήστη

Η διεπαφή χρήστη στο Reaxys έχει λάβει πολύ θετικές κριτικές, με τους επιστήμονες να δηλώνουν ότι τους αρέσει:

- Οι οθόνες αποτελεσμάτων που είναι εύκολα αντιληπτές.
- Οι διαισθητικές λειτουργίες γρήγορης αναζήτησης και Εργαλείο αναζήτησης.
- Η ευκολία πλοήγησης μεταξύ διαφόρων τύπων αποτελεσμάτων.

Το Reaxys είναι μια πλήρως ολοκληρωμένη ερευνητική λύση που επιτρέπει σε όλους τους χρήστες, από αρχάριους έως έμπειρους ερευνητές, να αξιοποιήσουν πλήρως την λειτουργικότητα της βάσης, βελτιώνοντας έτσι τη χρήση και υποστηρίζοντας τους στόχους έρευνας και εκπαίδευσης.

Το Reaxys επιτρέπει στους χρήστες να εξάγουν αποτελέσματα σε πολλαπλές μορφές και να αποθηκεύουν αναζητήσεις.

Βάση δεδομένων

Η συνεχιζόμενη ευρετηρίαση και εξαγωγή περιεχομένου ευρεσιτεχνίας από τα Ασιατικά γραφεία καθιστά την Reaxys έναν εξαιρετικά σημαντικό πόρο για την υποστήριξη ανταγωνιστικής Έρευνας & Ανάπτυξης: μόνο το 2% των διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας από τα Ασιατικά γραφεία εμφανίζονται στα διπλώματα ευρεσιτεχνίας του World Intellectual Property Organization, ενώ το περιεχόμενο των διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας αντιπροσωπεύει πάνω από το 50% της παγκόσμιας παραγωγής.

Η ενσωμάτωση των βάσεων δεδομένων Sigma-Aldrich, LabNetwork, ACD Labs, eMolecules και CambridgeSoft ACX είναι μοναδική και εξαιρετικά πολύτιμη. Οι χρήστες μπορούν να ελέγξουν τις σύνθετες λεπτομέρειες από όλες αυτές τις πηγές μέσα σε μία μόνο συνεδρία αναζήτησης χωρίς να χρειάζεται να πραγματοποιούν πολλαπλές και χρονοβόρες αναζητήσεις.

Η ανακάλυψη των οδών σύνθεσης διευκολύνεται από το χαρακτηριστικό της δημιουργίας οδού σύνθεσης, το οποίο επιτρέπει γρήγορες συγκρίσεις επιλογών και συνθηκών, υποστηρίζοντας τις αποφάσεις σύνθεσης-αγοράς.

Το εύρος του περιεχομένου που χρησιμοποιείται ως πηγή για τους Όρους και τις Ενώσεις του Ευρετηρίου διασφαλίζει την ολοκληρωμένη κάλυψη της βιβλιογραφίας και των ενώσεων που μπορούν να αναζητηθούν βάσει δομής. Η βαθιά χειρωνακτική ευρετηρίαση και εξαγωγή των σύνθετων δεδομένων από τα βασικά περιοδικά χημείας τρέχει επιτυχώς παράλληλα με τον αυτοματοποιημένο εμπλουτισμό περιεχομένου βάσει κανόνων για την περιεκτική συλλογή περιοδικών που σχετίζονται με την χημεία, εξασφαλίζοντας ότι κάθε αναζήτηση ανακτά πληροφορίες από το ευρύτερο σύνολο περιεχομένου.

Juan Pablo Aita Vassallo

Solution Sales Manager,

ELSEVIER | Life Sciences

j.vassallo.1@elsevier.com

t +31 623 50 56 44

Radarweg 29

1043 NX Amsterdam, The Netherlands