

CAS steigert mit der Einführung eines bahnbrechenden Retrosyntheseplaners in SciFindern die Produktivität von Forschung und Entwicklung

Die Kombination fortschrittlicher Technologie mit CAS' unerreichter Datensammlung zu chemischen Reaktionen steigert bei der Planung chemischer Synthesen die Effizienz.

Columbus, Ohio (ots/PRNewswire) - CAS, eine auf Lösungen für wissenschaftliche Informationen spezialisierte Geschäftseinheit der American Chemical Society, hat eine Lösung für die computergestützte retrosynthetische Analyse eingeführt, die systematisch neue Wege zu chemischen Verbindungen identifiziert. Diese Fähigkeit der nächsten Generation, die jetzt allen Anwendern von SciFindern zur Verfügung steht, versetzt Chemieforscher in aller Welt in die Lage, alternative synthetische Wege schnell identifizieren, vergleichen und priorisieren zu können.

"Die Pharmaindustrie benötigt zur Entdeckung und Entwicklung von Medikamenten ganz klar fortschrittliche Fähigkeiten in der synthetischen Chemie. Neue Moleküle erschaffen sich gewöhnlich nicht selbst - sie sind das kumulative Endprodukt eines komplizierten Prozesses aus Hypothese, Entwurf und Synthese", so Dr. Nick Terrett, Scientific Associate Vice President und European Chemistry Lead bei Merck Sharp & Dohme.

Der Retrosyntheseplaner in SciFindern unterstützt Chemiker beim Syntheseteil dieses Prozesses. Forscher bestätigen, dass diese neue Funktion die Forschungsarbeit beschleunigt, die Produktivität verbessert und ihnen hilft, neue Produkte wie Pharmazeutika, Agrochemikalien und Veredlungchemikalien schneller auf den Markt zu bringen.

Für jedes bekannte Molekül können Chemiker nun mit SciFindern Reaktionsschritte verknüpfen, die in Millionen Publikationen aus aller Welt präsentiert wurden, sodass sie sich schnell einen umfassenden, intuitiv organisierten Retrosyntheseplan für ihre Anwendung erstellen können. Ganz gleich, ob Anwender nach optimalen synthetischen Wegen zu bekannten Zwischenprodukten suchen, nach hochmodernen Lösungen zum Ersetzen älterer Wege suchen oder Ideen für Prozesse des Hochskalierens erforschen: Die neue Funktion zur Retrosyntheseplanung in SciFindern reduziert den Zeitaufwand für das Auffinden, Validieren und Priorisieren synthetischer Wege von Stunden auf Minuten. Darüber hinaus bietet der Retrosyntheseplaner in SciFindern direkten Zugang zu verwandten Referenzen und kommerziellen Anbietern, sodass Forscher ihren gesamten Arbeitsfluss der Syntheseplanung in nur einer Lösung abwickeln können.

Mit Zeitrahmen für die Markteinführung neuer Chemieprodukte, die in Jahren, und Investitionen in Forschung und Entwicklung, die in Milliarden (<https://c212.net/c/link/?t=0&l=de&o=2512059-1&h=916866176&u=https%3A%2F%2F2fc212.net%2F%2Flink%2F%3Ft%3D0%26l%3Den%26o%3D2512059-1%26h%3D361503031%26u%3Dhttps%253A%252F%252Fwww.forbes.com%252Fsites%252Fmatthewherper%252F2017%252F10%252F16%252Fthe-cost-of-developing-drugs-is-insane-a-paper-that-argued-otherwise-was-insanely-bad%252F%25235bd1c4522d45%26a%3Dbillions&a=Milliarden>) gemessen werden, suchen Organisationen für chemische Forschung und Entwicklung ständig nach neuen Lösungen, um die Produktivität zu verbessern und Durchbrüche schneller auf den Markt zu bringen. Da die Menge und Komplexität der veröffentlichten wissenschaftlichen Informationen jedoch von Jahr zu Jahr exponentiell zunehmen, ist Effizienz immer schwieriger zu erreichen. SciFindern nutzt die neueste Technologie, um Erkenntnisse zu vermitteln, die Chemikern deutlich Zeit sparen und Prozesse optimieren - mit hohem Nutzen für Forschungsleiter.

"Diese jüngste Innovation in SciFindern kombiniert die Kernkompetenzen von CAS - unsere unerreichte Inhaltssammlung, spezialisierten Chemieinformationstechnologien und unsere einzigartige Expertise -, um eine bedeutende Effizienzchance zu nutzen, die sich Organisationen für chemische Forschung und Entwicklung bietet", so CAS-CEO Manuel Guzman. "Die Lösung ist ein wichtiger Meilenstein für CAS - während wir weiter daran arbeiten, das Potenzial künstlicher Intelligenz und maschinellen Lernens voll auszuschöpfen, um unseren Kunden in SciFindern neue Möglichkeiten für die synthetische Chemie zu bieten."

Die CAS-Sammlung von Menschen kuratierter wissenschaftlicher Inhalte gilt als die größte und hochwertigste der Welt. Sie enthält eine Fülle von Daten, die in den letzten 110+ Jahren organisiert worden sind. Die Datenmenge und -qualität sind entscheidende Voraussetzungen für die Entwicklung neuer Technologien, darunter u. a. künstliche Intelligenz und maschinelles Lernen. Mit fast 120 Millionen Reaktionen, die der Syntheseplanungsfunktion in SciFindern als Basis dienen, kann diese wertvolle Lösung Chemikern auf einzigartige Weise einen umfassenden Überblick über die jeweils relevanten Möglichkeiten liefern.

CAS hat auch mit John Wiley and Sons, Inc. zusammengearbeitet, um Chemieforschern mehr Nutzen bieten zu können. CAS hat diese neue experimentelle Retrosynthesefähigkeit zum Teil mit Wileys preisgekrönter "ChemPlanner"-Technologie entwickelt.

Informationen zu CAS

CAS, eine Geschäftseinheit der American Chemical Society, arbeitet mit Organisationen für Forschung und Entwicklung zusammen, um umsetzbare wissenschaftliche Erkenntnisse zu liefern, die diesen helfen, ihre Innovationen zu planen, zu erneuern und zu schützen - sowie vorherzusagen, wie sich neue Märkte und Chancen entwickeln werden. Wissenschaftliche Forscher, Patentexperten und Unternehmensführer rund um den Globus, die in wirtschaftlichen, wissenschaftlichen und Verwaltungssektoren arbeiten, verlassen sich zu ihrer Unterstützung in Entdeckung und Strategie auf unsere Lösungen und Dienstleistungen. Nutzen Sie unsere unerreichten Inhalte, spezialisierten Technologien und unsere unerreichte menschliche Expertise, um Lösungen anzupassen, die Ihrem Unternehmen einen Informationsvorsprung verschaffen. Niemand weiß mehr über wissenschaftliche Informationen als CAS. Weitere Informationen finden Sie unter www.cas.org.

Informationen zu SciFindern

SciFindern (<https://c212.net/c/link/?t=0&l=de&o=2512059-1&h=4007461833&u=https%3A%2F%2Fc212.net%2F%2Fc%2Flink%2F%3Ft%3D0%26l%3Den%26o%3D2512059-1%26h%3D1447122159%26u%3Dhttps%253A%252F%252Fwww.cas.org%252Fproducts%252Fscifinder-n%26a%3DSciFindern&a=SciFindern>), die neueste und fortschrittlichste Lösung der SciFinder®-Reihe, ermöglicht es Forschern, Produktivitäts-Flaschenhälse zu beseitigen und ihre Innovationen schneller auf den Markt zu bringen. Mit seinem optimierten Zugang zur unerreichten CAS-Inhaltssammlung, seinen Lösungen zur Retrosyntheseplanung sowie der fortschrittlichsten Chemie-Relevanz-Engine der Branche ist SciFindern der Laborpartner des Wissenschaftlers, der es diesem ermöglicht, beste Forschungsarbeit in Rekordzeit zu leisten.

CAS-Medienkontakt:

Tina Tomeo

614-447-3600

cas-pr@cas.org

Logo - https://mma.prnewswire.com/media/691740/CAS_Logo.jpg

Diese Meldung kann unter <https://www.presseportal.ch/de/pm/100016164/100829815> abgerufen werden.