

CAS führt neue prognostische Retrosynthese-Kapazitäten in SciFinder-n ein

Ohio (ots/PRNewswire) -

Lösung der nächsten Generation beschleunigt Ideenfindung und Effizienz bei der Entwicklung neuer chemischer Synthesen weiter

Im Zuge des fortlaufenden Engagements, führende Kräfte in Forschung und Entwicklung bei der Beschleunigung wissenschaftlicher Entdeckungen zu unterstützen, hat CAS, ein Bereich der American Chemical Society, heute die Einführung einer bahnbrechenden Retrosynthese-Funktion in SciFindern angekündigt. Diese computergestützte Lösung für synthetisches Design (CASD) nutzt künstliche Intelligenz mit der unerreichten Sammlung wissenschaftlich zusammengestellter Reaktionsinhalte von CAS und dazu den preisgekrönten ChemPlanner von John Wiley and Sons Inc., um jetzt prognostizierte Retrosyntheserouten für bekannte und neue Verbindungen zu identifizieren.

"Synthetische Planung ist im Verlauf von Forschung und Entwicklung ein entscheidender Schritt und bei der Beschleunigung der Markteinführung oftmals ein signifikanter Engpass", sagt Tim Wahlberg, Vice President für Product Management bei CAS. "Die Kunden haben die neuen Retrosynthese-Kapazitäten in SciFindern im letzten Jahr begeistert angenommen und wir sind erfreut, diese Technologie mit Prognosekapazitäten auszubauen, mit denen Chemiker deutlich innovativer, zuversichtlicher und effizienter sein können."

Der Retrosynthese-Planer von SciFindern nutzt eine hoch entwickelte Retrosynthese-Engine, um Wege zu gewünschten Verbindungen zu erzeugen. Dazu kommen experimentelle und prognostizierte Reaktionsschritte aus 121 Millionen Reaktionen in der Sammlung von CAS zum Einsatz, die aus 110 Jahren chemischer Forschung stammen. Die von Wissenschaftlern zusammengetragenen Inhalte von CAS gelten weltweit als die umfassendsten. Die Vereinigung von künstlicher Intelligenz mit diesem einzigartigen Datensatz hoher Qualität maximiert die Leistung von CASD-Technologie für neue Erkenntnisse zur Lösung hartnäckiger Syntheseprobleme.

Die dynamischen und interaktiven Pläne, die in SciFindern entwickelt werden, ermöglichen Chemikern die problemlose Prüfung alternativer Reaktionsschritte, stellen ein intuitives Mittel für neues Denken bereit, prüfen alternative synthetische Strategien und vergleichen taktische Ansätze. Die Retrosynthese-Kapazitäten von SciFindern unterstützen entscheidende Arbeitsabläufe in der chemischen Forschung und Entwicklung, darunter die Synthese von Innovationen molekularer Einheiten, das Hochskalieren von Reaktionen und das Finden von Möglichkeiten für neue Durchbrüche in der Entwicklung von Methoden. Die Beschleunigung dieser entscheidenden Schritte im Ablauf von Forschung und Entwicklung ermöglicht Nutzern von SciFindern, Innovationen schneller auf den Markt zu bringen.

Informationen zu CAS

CAS, eine Geschäftseinheit der American Chemical Society, die sich auf Lösungen wissenschaftlicher Informationen spezialisiert, arbeitet mit Organisationen für Forschung und Entwicklung auf der ganzen Welt zusammen, um umsetzbare wissenschaftliche Erkenntnisse zu liefern, die der Planung, Innovation und dem Schutz von Erfindungen dienen und dabei helfen vorherzusagen, wie sich neue Märkte und Chancen entwickeln. Wissenschaftliche Forscher, Patentexperten und Führungskräfte aus Wirtschaft, Wissenschaft und öffentlichem Sektor in aller Welt verlassen sich bei Forschungs- und Strategiefragen auf unsere Lösungen und Dienstleistungen. Mit einzigartigen Inhalten, spezialisierten Technologien und unübertroffenem Fachwissen entwickeln wir maßgeschneiderte Lösungen, die Ihrer Organisation einen Informationsvorsprung verschaffen. Mit mehr als 110 Jahren Erfahrung weiß niemand mehr über wissenschaftliche Informationen als CAS. Weitere Informationen erhalten Sie unter www.cas.org.

Informationen zu SciFindern

SciFindern (<https://c212.net/c/link/?t=0&l=de&o=2687726-1&h=1324168255&u=https%3A%2F%2Fc212.net%2F%2Flink%2F%3Ft%3D0%26l%3Den%26o%3D2687726-1%26h%3D390824462%26u%3Dhttps%253A%252F%252Fwww.cas.org%252Fproducts%252Fscifinder-n%26a%3DSciFindern&a=SciFindern>), die neueste und fortschrittlichste Lösung der SciFinder®-Reihe, ermöglicht Forschern, Produktivitätsengpässe zu beseitigen und ihre Innovationen schneller auf den Markt zu bringen. Mit seinem optimierten Zugang zur unerreichten CAS-Inhaltssammlung, seinen Lösungen zur Syntheseplanung sowie der fortschrittlichsten Chemie-Relevanz-Engine der Branche ist SciFindern der Laborpartner für Wissenschaftler zwecks bester Forschungsarbeit in Rekordzeit.

CAS - Medienkontakt:

Tina Tomeo
614-447-3600
cas-pr@cas.org

Logo - https://mma.prnewswire.com/media/1029755/CAS_Logo.jpg

Diese Meldung kann unter <https://www.presseportal.ch/de/pm/100016164/100839844> abgerufen werden.