

# CAS เปิดตัวความสามารถด้านการสังเคราะห์ย้อนกลับเชิงทำนายในโซลูชัน SciFinder-n



– โซลูชันที่ได้รับการยกระดับเพื่อทำให้เกิดการสร้างโมเลกุลใหม่ได้เร็วขึ้น และเร่งประสิทธิภาพในการพัฒนาสารสังเคราะห์ทางเคมีใหม่ ๆ

ด้วยความมุ่งมั่นอย่างต่อเนื่องเพื่อช่วยให้ผู้นำในแวดวง R&D ค้นพบทางวิทยาศาสตร์ได้เร็วขึ้น CAS ซึ่งเป็นหน่วยงานหนึ่งของสมาคมเคมีอเมริกัน จึงได้ประกาศเปิดตัวความสามารถด้านการสังเคราะห์ย้อนกลับ (retrosynthetic) ในโซลูชัน SciFinder-n โดยโซลูชันออกแบบการสังเคราะห์ที่ใช้คอมพิวเตอร์ช่วย (computer-aided synthetic design (CASD)) นี้ ใช้เทคโนโลยี AI ซึ่งขับเคลื่อนด้วยคอลเลกชันสารปฏิกิริยาของ CAS ที่คัดสรรและดูแลโดยนักวิทยาศาสตร์ และใช้เทคโนโลยี ChemPlanner ที่ได้รับรางวัลของบริษัท John Wiley and Sons, Inc. เพื่อช่วยให้ค้นพบเส้นทางการสังเคราะห์ย้อนกลับที่ทำนายไว้ได้ ทั้งสารเคมีที่รู้จักกันอยู่แล้ว และสารประกอบที่ค้นพบใหม่

“การวางแผนการสังเคราะห์เป็นขั้นตอนที่สำคัญในกระบวนการ R&D และบ่อยครั้งที่เกิดปัญหาคอขวดซึ่งขัดขวางการเร่งนำนวัตกรรมออกสู่ตลาด” Tim Wahlberg รองประธานฝ่ายการจัดการผลิตภัณฑ์ของ CAS กล่าว “ลูกค้าให้การตอบรับขีดความสามารถใหม่ด้านการสังเคราะห์ย้อนกลับที่เราเปิดตัวใน SciFinder-n เมื่อปีที่แล้วกันอย่างกระตือรือร้น และเราตื่นเต้นที่ได้ยกระดับเทคโนโลยีนี้ขึ้นไปอีกขั้นด้วยความสามารถในการวิเคราะห์เชิงทำนายที่ช่วยให้นักเคมีสามารถคิดค้นได้มากขึ้น เชื่อมั่นได้มากขึ้น และมีประสิทธิภาพมากขึ้น”

การวางแผนการสังเคราะห์แบบย้อนกลับใน SciFinder-n ใช้เครื่องมือสังเคราะห์ย้อนกลับขั้นสูง เพื่อสร้างเส้นทางไปยังสารประกอบที่ต้องการ โดยประกอบด้วยขั้นตอนการทำปฏิกิริยาเคมีเชิงทดลองและเชิงทำนายจากสารปฏิกิริยา 121 ล้านตัวในคอลเลกชัน CAS ที่สะสมรวบรวมจากการวิจัยทางเคมีมานานกว่า 110 ปี สารทางวิทยาศาสตร์ของ CAS ที่คัดสรรและดูแลโดยมนุษย์นั้น ได้รับการยอมรับว่ามีความครอบคลุมที่สุดในโลก เมื่อจับคู่ AI กับชุดข้อมูลคุณภาพสูงนี้แล้ว จะช่วยเพิ่มพลังอำนาจด้านเทคโนโลยีของ CASD ให้ถึงขีดสุด ซึ่งจะก่อให้เกิดข้อมูลเชิงลึกที่จะช่วยแก้ปัญหาด้านการสังเคราะห์ที่ยุ่งยากและท้าทาย

แผนงานแบบอินเทอร์เน็ตที่พัฒนาใน SciFinder-n ช่วยให้นักวิทยาศาสตร์พิจารณาขั้นตอนการทำปฏิกิริยาทางเลือกได้ง่าย ซึ่งจะจุดประกายให้เกิดความคิดใหม่ สามารถประเมินกลยุทธ์การสังเคราะห์ทางเลือก และเปรียบเทียบรูปแบบกลวิธี ความสามารถด้านการสังเคราะห์ย้อนกลับของ SciFinder-n รองรับกระแสนงาน R&D ทางเคมีที่มีความสำคัญอย่างยิ่ง ซึ่งรวมถึงการสังเคราะห์นวัตกรรมโมเลกุลใหม่ ขยายการทำปฏิกิริยา ตลอดจนมองเห็นโอกาสสำหรับการค้นพบใหม่ ๆ ในด้านการพัฒนาวิธีการ การเริ่มดำเนินขั้นตอนที่สำคัญเหล่านี้ในกระบวนการ R&S จะช่วยให้ลูกค้าของ SciFinder-n สามารถคิดค้นนวัตกรรมใหม่ ๆ เพื่อนำออกสู่ตลาดได้เร็วยิ่งขึ้น

## เกี่ยวกับ CAS

CAS เป็นหน่วยงานหนึ่งของสมาคมเคมีอเมริกัน ซึ่งมีความเชี่ยวชาญในด้านโซลูชันข้อมูลทางวิทยาศาสตร์ โดยร่วมมือเป็นพันธมิตรกับองค์กรการวิจัยและพัฒนา (R&D) ทั่วโลกเพื่อมอบข้อมูลเชิงลึกที่สามารถนำไปใช้งานได้ เพื่อช่วยให้องค์กรเหล่านี้วางแผน สร้างนวัตกรรม ปกป้องนวัตกรรมที่สร้างขึ้น ตลอดจนทำนายการเปลี่ยนแปลงของตลาดและโอกาสใหม่ ๆ ที่จะเกิดขึ้นได้ นักวิจัยด้านวิทยาศาสตร์ ผู้เชี่ยวชาญด้านสิทธิบัตร และผู้นำธุรกิจทั่วโลก ทั้งในแวดวงการค้า วิชาการ และภาครัฐ ต่างไว้วางใจในโซลูชันและบริการของเราเพื่อช่วยในการค้นพบและการวางแผนกลยุทธ์ การใช้เนื้อหาที่ครอบคลุมที่สุด เทคโนโลยีเฉพาะทาง และความชำนาญของมนุษย์ในการปรับแต่งโซลูชันตามความต้องการ จะทำให้องค์กรของคุณมีความได้เปรียบในด้านข้อมูล และไม่มีใครรู้ข้อมูลทางวิทยาศาสตร์มากไปกว่า CAS อีกแล้ว ดูข้อมูลเพิ่มเติมได้ที่ [www.cas.org](http://www.cas.org)

## เกี่ยวกับ SciFinder-n

SciFinder-n เป็นโซลูชันใหม่ล่าสุดและทันสมัยที่สุดในตระกูล SciFinder(R) ที่ช่วยให้นักวิจัยสามารถจัดปัญหาขอขาด้านประสิทธิภาพการผลิต และเร่งผลักดันนวัตกรรมออกสู่ตลาดได้เร็วขึ้น SciFinder-n นำเสนอช่องทางที่ดีที่สุดในการเข้าถึงคลังเนื้อหาของ CAS ทั้งยังมาพร้อมโซลูชันการวางแผนการสังเคราะห์แบบย้อนกลับ และเครื่องมือการอ้างอิงทางเคมีที่ทันสมัยที่สุดในวงการ SciFinder-n จึงเป็นพันธมิตรห้องปฏิบัติการที่นักวิทยาศาสตร์ไว้วางใจเพื่อทำการวิจัยที่ดีที่สุด ในระยะเวลาที่เร็วที่สุด

ข้อมูลติดต่อ CAS สำหรับสื่อมวลชน:

Tina Tomeo  
614-447-3600  
[cas-pr@cas.org](mailto:cas-pr@cas.org)

โลโก้ - [https://mma.prnewswire.com/media/1029755/CAS\\_Logo.jpg](https://mma.prnewswire.com/media/1029755/CAS_Logo.jpg)