

CAS เปิดตัว Retrosynthesis Planner ในระบบ ฐานข้อมูล SciFinder-n



– การผนวกรวมเทคโนโลยีขั้นสูงเข้ากับคลังข้อมูลปฏิกิริยาทางเคมีที่ครอบคลุมที่สุดของ CAS จะช่วยเพิ่มประสิทธิภาพในการวางแผนการสังเคราะห์ทางเคมี

CAS แผนกหนึ่งของสมาคมเคมีอเมริกัน ซึ่งมีความเชี่ยวชาญในด้านการจัดการข้อมูลทางวิทยาศาสตร์ เปิดตัวโซลูชันการวิเคราะห์แบบย้อนกลับ (retrosynthetic) โดยใช้คอมพิวเตอร์ช่วย โซลูชันนี้จะช่วยให้นักวิจัยและนักวิทยาศาสตร์ค้นพบวิธีการสังเคราะห์แบบใหม่ ๆ เพื่อการหาสารประกอบทางเคมีได้อย่างเป็นระบบ ซึ่ง CAS พร้อมเปิดให้ผู้ใช้ระบบฐานข้อมูล SciFinder-n ทุกคนเข้าใช้ฟังก์ชันดังกล่าวแล้ววันนี้ ชีตความสามารถอันล้ำสมัยใหม่ล่าสุดนี้จะทำให้นักวิจัยเคมีทั่วโลกสามารถค้นพบ เปรียบเทียบ และลำดับความสำคัญของวิธีการสังเคราะห์แบบต่าง ๆ ได้อย่างรวดเร็ว

“เห็นได้ชัดว่า อุตสาหกรรมยาต้องการความสามารถขั้นสูงในด้านเคมีสังเคราะห์เพื่อการค้นคว้าและพัฒนา ยา โดยปกติแล้วโมเลกุลใหม่ ๆ ไม่ได้เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติ แต่เกิดจากระบวนการตั้งสมมติฐาน การออกแบบ และการสังเคราะห์ที่ซับซ้อน” ดร.นิค เทอร์เรตต์ รองประธาน Scientific Associate และหัวหน้าฝ่ายเคมีประจำยุโรปของ Merck Sharp & Dohme กล่าว

Retrosynthesis Planner ในระบบ SciFinder-n จะช่วยนักเคมีในด้านการสังเคราะห์ของกระบวนการนี้ โดยขณะนี้ บรรดานักวิจัยสามารถใช้งานเพื่อยืนยันว่า ฟังก์ชันใหม่นี้ทำให้การวิจัยเร็วขึ้น เพิ่มผลิตภาพ และจะช่วยให้พวกเขาพัฒนาผลิตภัณฑ์ใหม่ ๆ อาทิ เวชภัณฑ์ สารเคมีที่ใช้ในการเกษตร และเคมีภัณฑ์สมรรถนะสูง เพื่อวางจำหน่ายในตลาดได้เร็วขึ้นหรือไม่

สำหรับโมเลกุลที่เป็นที่รู้จักกันอยู่แล้วนั้น นักเคมีสามารถใช้ SciFinder-n ในการเชื่อมโยงขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยาเคมีที่มีการเผยแพร่ผ่านทางสิ่งพิมพ์นับล้านฉบับทั่วโลก เพื่อวางแผนการวิเคราะห์แบบย้อนกลับที่มีการจัดระเบียบ

อย่างครอบคลุมและง่ายต่อการใช้งาน ดังนั้น ไม่ว่าผู้ใช้งานต้องการหาเส้นทางสารสังเคราะห์สารมัธยันตร์ (intermediate) ที่รู้อยู่แล้ว ค้นหาโซลูชันที่ทันสมัยเพื่อนำมาใช้แทนวิธีการแบบเก่า ๆ หรือสำรวจแนวคิดเพื่อกระบวนการที่ใหญ่ขึ้น ฟังก์ชันการวางแผนการวิเคราะห์แบบใหม่ใน SciFinder-n จะช่วยย่นระยะเวลาในการค้นพบ พิสูจน์ และจัดลำดับความสำคัญของวิธีการสังเคราะห์ที่เหลือเพียงไม่กี่นาทีจากเดิมที่ต้องใช้เวลาหลายชั่วโมง นอกจากนี้ ฟังก์ชันการวางแผนการวิเคราะห์แบบย้อนกลับใน SciFinder-n ยังเป็นช่องทางตรงในการเข้าถึงแหล่งอ้างอิงที่เกี่ยวข้องและกลุ่มผู้จัดจำหน่ายเชิงพาณิชย์ ดังนั้น นักวิจัยจึงสามารถดำเนินการวางแผนการสังเคราะห์ทั้งกระบวนการได้เสร็จสมบูรณ์ในโซลูชันเดียว

เนื่องด้วยการนำเคมีภัณฑ์ใหม่ ๆ ออกสู่ตลาดนั้นใช้เวลาหลายปี ขณะที่การลงทุนด้าน R&D ก็ต้องใช้งบประมาณสูงถึงหลายพันล้าน บรรดาองค์กรวิจัยและพัฒนาเคมีจึงพยายามค้นหาโซลูชันใหม่ ๆ อยู่เสมอ เพื่อปรับปรุงประสิทธิภาพการผลิต และเร่งการนำสินค้าออกสู่ตลาดได้เร็วขึ้น แต่เนื่องจากข้อมูลทางวิทยาศาสตร์ที่มีการตีพิมพ์เผยแพร่ในแต่ละปีนั้นเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วทั้งในแง่ของปริมาณและความซับซ้อน ส่งผลให้ประสิทธิภาพของข้อมูลยังคงเป็นเรื่องท้าทาย ทั้งยังดูเหมือนว่าจะยิ่งท้าทายมากขึ้นอีกด้วย อย่างไรก็ตาม SciFinder-n ใช้เทคโนโลยีล่าสุดเพื่อให้ข้อมูลเชิงลึก จึงช่วยประหยัดเวลาให้กับนักเคมีได้เป็นอย่างมาก ตลอดจนปรับปรุงกระบวนการต่าง ๆ ให้ดีขึ้น ซึ่งนับเป็นประโยชน์อย่างสูงต่อบรรดาผู้นำการวิจัย

“นวัตกรรมล่าสุดนี้ใน SciFinder-n เป็นการรวมความสามารถหลักของ CAS เข้าไว้ด้วยกัน ไม่ว่าจะเป็นเนื้อหาที่ครอบคลุมที่สุด เทคโนโลยีด้านข้อมูลทางเคมีเฉพาะด้าน และความชำนาญที่ไม่เหมือนใคร เพื่อช่วยให้องค์กรวิจัยและพัฒนาเคมีสามารถปรับปรุงประสิทธิภาพให้ดีขึ้นได้” มานูเอล กัชแมน ซีอีโอของ CAS กล่าว “นี่ถือเป็นเหตุการณ์สำคัญสำหรับ CAS ขณะที่เรายังคงเดินทางสู่การเปิดรับศักยภาพของ AI และแมชชีนเลิร์นนิงอย่างเต็มรูปแบบ เพื่อยกระดับเคมีสังเคราะห์ให้แก่มูลค่าของเราในระบบ SciFinder-n”

คลังเนื้อหาทางวิทยาศาสตร์ของ CAS ที่รวบรวมโดยมนุษย์ ได้รับการยอมรับว่ามีขนาดใหญ่ที่สุด และมีคุณภาพมากที่สุดในโลก โดยเป็นการรวบรวมข้อมูลที่เกิดขึ้นตลอดระยะเวลากว่า 110 ปีที่ผ่านมาไว้อย่างเป็นระเบียบ ซึ่งปริมาณและคุณภาพของข้อมูลนั้น ถือเป็นปัจจัยสำคัญต่อการสนับสนุนเทคโนโลยีเกิดใหม่ อาทิ AI และแมชชีนเลิร์นนิง เป็นต้น ทั้งนี้ ด้วยเหตุที่พีเจอาร์การวางแผนการสังเคราะห์ในระบบ SciFinder-n สนับสนุนปฏิกิริยาทางเคมีเกือบ 120 ปฏิกิริยา นักเคมีจึงสามารถมองเห็นความเป็นไปได้ต่าง ๆ อย่างรอบด้านด้วยโซลูชันนี้เพียงโซลูชันเดียว

นอกจากนี้ CAS ยังร่วมมือกับบริษัท John Wiley and Sons, Inc. เพื่อมอบคุณประโยชน์ที่มากขึ้นแก่นักวิจัยในวงการเคมี โดย CAS ประสบความสำเร็จในการพัฒนาความสามารถด้านการวิเคราะห์แบบย้อนกลับนี้ ส่วนหนึ่งเป็นเพราะใช้เทคโนโลยี ChemPlanner ที่ได้รับรางวัลของ Wiley

เกี่ยวกับ CAS

CAS เป็นหน่วยงานหนึ่งของสมาคมเคมีอเมริกัน CAS เป็นพันธมิตรกับองค์กรการวิจัยและพัฒนา (R&D) หลาย

แห่งเพื่อมอบข้อมูลเชิงลึกทางวิทยาศาสตร์ที่สามารถนำไปใช้งานได้ เพื่อช่วยให้องค์กรเหล่านี้วางแผน สร้างนวัตกรรม ปกป้องนวัตกรรมที่สร้างขึ้น ตลอดจนทำนายการเปลี่ยนแปลงของตลาดและโอกาสใหม่ ๆ ที่จะเกิดขึ้นได้ นักวิจัยด้านวิทยาศาสตร์ ผู้เชี่ยวชาญด้านสิทธิบัตร และผู้นำธุรกิจทั่วโลก ทั้งในแวดวงการค้า วิชาการ และภาครัฐต่างไว้วางใจในโซลูชันและบริการของเราเพื่อช่วยในการค้นพบและการวางแผนกลยุทธ์ การใช้เนื้อหาที่ครอบคลุมที่สุด เทคโนโลยีเฉพาะทาง และความชำนาญของมนุษย์ในการปรับแต่งโซลูชันตามความต้องการ จะทำให้องค์กรของคุณมีความได้เปรียบในด้านข้อมูล และไม่มีใครรู้ข้อมูลทางวิทยาศาสตร์มากกว่า CAS อีกแล้ว ดูข้อมูลเพิ่มเติมได้ที่ 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

โทร. 614-447-3600

cas-pr@cas.org

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