



**Bienvenido a Reaxys**

[www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com)



**reaxys**<sup>®</sup>

# Agenda

---

## Reaxys

- ¿Qué es?
- ¿Cuál es su contenido?
- ¿Para qué y para quien esta hecho?
- ¿Como aporta valor a diferentes usuarios?
- Resumen de capacidades y soluciones al usuario



# ¿Qué es Reaxys?

- **Una innovadora solución orientada a los flujos de trabajo de investigadores en química orgánica sintética & medicinal y disciplinas científicas relacionadas.**
- Un amplio repositorio de **datos de reacciones y propiedades de sustancias químicas.**
- **Una fuente de datos validados “experimentalmente”** presentada en forma de resúmenes tabulares comparativos (Perfiles de Sustancias & Reacciones).
- Una aplicación que integra **datos de búsqueda de sustancias y reacciones con una herramienta de planificación de síntesis** – desarrollada para apoyar la optimización de los procedimientos sintéticos.
- Una fuente de datos de alta calidad con herramientas de **ranking y filtros inteligentes** que permiten determinar casi al instante la mejor respuesta o la más relevante.
- **Una interfase web intuitiva** que hace la química sintética, el desarrollo de fármacos y la investigación asociada más eficiente, permitiendo mejores resultados.
- **Sin límite de usuarios** – una sola suscripción da acceso a toda su organización.
- Fácil acceso vía web visitando la página [www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)



# Reaxys – ¿Cuál es su contenido?

---

- Datos medidos experimentalmente y confiables, producidos al combinara el contenidos de las prestigiosas bases de datos **CrossFire Beilstein**, **Gmelin y Patent Chemistry Database**
  - Reacciones Químicas
  - Sustancias Químicas
  - Información Propiedades Medidas de las Sustancias
    - Fisicoquímicas, bioquímicas, campos de aplicación

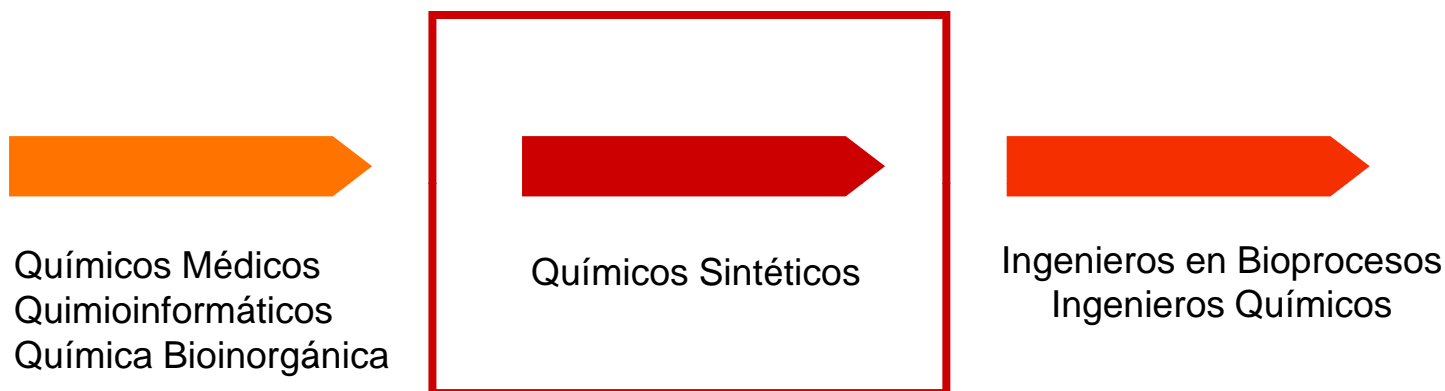
## Cobertura

- Revistas principales del área química orgánica, inorgánica, bioinorgánica (desde **1771**).
- Publicaciones de Patentes y Solicitudes Seleccionadas (desde **1889**).



# ¿Para qué esta hecho Reaxys?


Reaxys apoya el proceso de descubrimiento en las área de la **síntesis química** y **disciplinas relacionadas**.



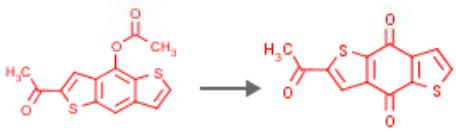
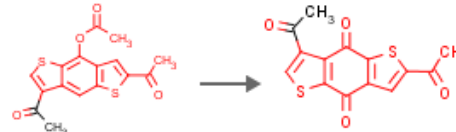
Reaxys es útil para estudiantes (pregrado, posgrado, PhD, Post-Doc), académicos investigadores, y cualquier científico del área.



# Soluciones para los Químicos Sintéticos

Actividad de Investigación	Criterios/Parámetros	Solución Reaxys
<ul style="list-style-type: none"><li>• Sintetizar un nuevo compuesto A</li><li>• Buscar nuevas formas de sintetizar A a partir de B</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Encontrar método de reacción</li><li>• Encontrar detalles de procedimientos de reacción</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Fuente de datos de reacciones</b> extensa y superior</li><li>• <b>Resúmenes comparativos:</b> Perfiles de reacción que reúne datos de varias fuentes en un resumen.</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Desarrollar una estrategia sintética de varios pasos</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Crear planes de síntesis utilizando los mejores métodos</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Planificador de Síntesis:</b> seleccione las mejores reacciones desde distintas publicaciones y desarrolle su propio plan de síntesis.</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Encontrar métodos más eficientes para obtener el compuesto</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Crear productos (o material de partida) en vez de sintetizarlos</li><li>• Comprar a un menor precio</li><li>• Aislar sustancias a partir de productos naturales en vez de sintetizarlos</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Marcas de <b>disponibilidad comercial</b> para los compuestos con links hacia proveedores &amp; precios.</li><li>• <b>Procedimientos de aislamiento</b> desde fuentes naturales.</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• Encontrar un método de reacción más económico</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Menos pasos de reacción</li><li>• Menos productos secundarios</li><li>• Mejores rendimientos</li><li>• Materiales menos tóxicos</li><li>• Como purificar producto, como remover productos secundarios</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Limitar</b> resultados por <b>numero pasos</b></li><li>• Rankear resultados por <b>rendimiento</b></li><li>• Datos de <b>toxicidad y seguridad</b></li><li>• Datos de <b>purificación</b>.</li></ul>
 <ul style="list-style-type: none"><li>• Identificar productos y productos secundarios</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• ¿Hay datos fisicoquímicos anotados?</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Datos de <b>espectrometría</b> (peaks) y datos <b>fisicoquímicos</b> para identificar productos secundarios.</li></ul>

# Fuente de datos de reacciones superior

Yield	Conditions	
<input type="checkbox"/> 1  Rx-ID: 5168182	With HOAc, CrO <sub>3</sub> 1 h; Yield given;	<b>Chao, Yu-Hua; Kuo, Sheng-Chu; Wu, Chun-Hsiung; Lee, Chun-Yann; Mauger, Anthony; et al.</b> Journal of Medicinal Chemistry, <b>1998</b> , vol. 41, # 23 p. 4658 - 4661 <a href="#">Title/Abstract</a> <a href="#">Full Text</a> <a href="#">Scopus</a>
45%	With chromium(VI) oxide in acetic acid 1 h; 10773376; 506007; <a href="#">Hide Experimental Procedure</a>	<b>University of North Carolina at Chapel Hill</b> <b>Patent: US6337346, 2002</b> <a href="#">Title/Abstract</a> <a href="#">Full Text</a>
<p>Example 1            2-Acetyl-4,8-dihydrobenzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-4,8-dione (9)            To a stirring mixture of acetyl chloride (5.1 g, 65 mmol) and AlCl<sub>3</sub> (8.7 g, 65 mmol) in 1,2-dichloroethane (200 ML) was added 2-acetyl-4-acetoxy-2,3-dihydrobenzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-4,8-dione (7)7a (8 g, 32.3 mmol) in 1,2-dichloroethane (90 ML)..            After stirring for 4 h, this solution was poured into dilute HCl and the aqueous layer was extracted with CHCl<sub>3</sub> three times..            The combined extracts were washed with saturated NaHCO<sub>3</sub> and water, dried over anhydrous MgSO<sub>4</sub>, and concentrated under reduced pressure to give 7.5 g of the crude intermediate 4-acetoxy-2-acetylbenzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene (8).            To a suspension of crude 8 (7.5 g) in HOAc (30 ML) was added CrO<sub>3</sub> (5.7 g, 57 mmol)..            After stirring for 1 h, i-PrOH (20 ML) and CHCl<sub>3</sub> (300 ML) were added and stirred for 30 min..            The resulting solution was poured into ice water, and the aqueous layer was extracted with CHCl<sub>3</sub> three times..            The combined extracts were dried over anhydrous MgSO<sub>4</sub> and concentrated under reduced pressure..            The residue was purified by column chromatography (silica gel, CHCl<sub>3</sub>) to give 9 (mp 223-225 .deg. C.) in a 45percent yield. IR (KBr) 1650, 1670 (C=O) cm<sup>-1</sup>; <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 2.67 (s, 3H, CH<sub>3</sub>), 7.68 (d, J=5.1 Hz, 1H, H-7), 7.74 (d, J=5.1 Hz, 1H, H-6), 8.12 (s, 1H, H-3); <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ 26.9 (C-2-CH<sub>3</sub>), 126.9 (C-7), 129.4 (C-3), 134.3 (C-6), 170.0 (C-4), 174.4 (C-8), 190.7 (C-2-C=O); MS m/z 262 (M<sup>+</sup>); Anal. (C<sub>12</sub>H<sub>6</sub>O<sub>3</sub>S<sub>2</sub>) C, H.</p>		
<input type="checkbox"/> 2 		

1. No más acumulación manual de datos – Tablas comparativas fáciles de leer:  
 Reacciones con el mismo esquema, diferentes condiciones o publicaciones se unen en un solo perfil de reacción.

2. Texto de procedimientos obtenidos desde patentes brindan condiciones validadas inmediatamente.

- Desde revistas

- Desde Patentes

1

2

# Planificador de Síntesis: seleccione los mejores métodos publicados para desarrollar su propia estrategia de síntesis

The screenshot displays a synthesis planning interface for 'Synthesis 1'. At the top, there are buttons for 'Undo', 'Open', 'Save', and 'Copy plan to new page'. The 'Synthesis representation' is set to 'Left to Right'. The main workspace shows a reaction plan with three steps:

- Step 1: A chiral auxiliary reacts with a starting material to form an intermediate.
- Step 2: The intermediate reacts with  $\text{HO} \cdot \text{CH}_3$  to form another intermediate, with a yield of 94.7%.
- Step 3: The intermediate reacts with  $\text{SOCl}_2$  to form the final product.

Below the reaction plan is a table of references for each step:

Step	Yield	Conditions	References
2	<input type="checkbox"/> 94.7%	in $\text{CH}_2\text{Cl}_2$	<b>Koul, Surrinder; Koul, Jawahir Lal; Singh, Budh; Kapoor, Munish; Parshad, Rajinder; Manhas, Kuldeep S.; Taneja, Subhash C.; Qazi, Ghulam N.</b> Tetrahedron: Asymmetry, <b>2005</b> , vol. 16, # 15 p. 2575 - 2592 Title/Abstract Full Text Scopus
3	<input type="checkbox"/> 82%	With $\text{SOCl}_2$ in toluene T=90°C; 4 h;	<b>Bellucci, Giuseppe; Berti, Giancarlo; Bianchini, Roberto; Vecchiani, Sandra</b> Gazzetta Chimica Italiana, <b>1988</b> , vol. 118, # 6 p. 451 - 456 Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/>	With thionyl chloride in benzene 3 h; Heating;	<b>Rao, Ch Prasad; Srimannarayana, G; Sundaramurthy, V</b> Indian Journal of Chemistry, Section B: Organic Chemistry Including Medicinal Chem Title/Abstract Full Text Scopus
	<input type="checkbox"/>	With $\text{SOCl}_2$ T=90°C; 3 h;	<b>Gualtieri, Fulvio; Conti, Gabriele; Dei, Silvia; Giovannoni, Maria Paola; Nan</b> Journal of Medicinal Chemistry, <b>1994</b> , vol. 37, # 11 p. 1704 - 1711 Title/Abstract Full Text Scopus

A red arrow points from the 'Add' button in the filter section to the 'Synthesize' button in the reaction plan. A red box highlights the 'Add' button. A red box highlights the 'Synthesize' button in the reaction plan. A red box highlights the 'Add' button in the filter section.

At the bottom, there is a search bar and a filter section. The filter section includes options for 'Yield', 'Record Type', 'Reagent/Catalyst', 'Solvent', 'Reaction Type', and 'No. of Steps'. The 'Add' button is highlighted in red. The search bar shows 'Sort by Reaxys-Ranking' and 'Hide Details'.

At the bottom right, there is a red box with the text: 'Selecciones las mejores reacciones entre diferentes publicaciones y cree su propia estrategia 😊'.

# Encuentre los “mejores” resultados rápidamente usando herramientas de ranking y filtros inteligentes.

Query Results Synthesis Plans History My Settings Help Logout

Query 24 reactions 2 reactions Limited by hits

Ordenar por:  
- Ranking-Reaxys: reacción “mejor” descrita  
- Rendimiento: reacción de mejor rendimiento

2 reactions out of 4 citations go to Page Page 1 of 1

Filter by:  
Yield  
Record Type  
Reagent/Catalyst  
Solvent  
Reaction Type  
No. of Steps  
Document Type  
Authors  
Patent Assignee  
Journal Title  
Publication Year

Reactions Citations

Limit to Selection Output Sort by Reaxys-Ranking

Yield Conditions References

1

74%

243.3 g

With aq. hydrazine hydrate in tetrahydrofuran; methanol  
T=10 - 20°C; Reduction cyclization;

With Zn; AcOH in methanol; CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>  
Heating;

in benzene  
969212;  
Show Experimental Procedure

Katayama, Masato  
Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2000, vol. 64, # 4 p. 808 - 815  
Title/Abstract Full Text Scopus

Siu, Jason; Baxendale, Ian R.; Ley, Steven V.  
Organic and Biomolecular Chemistry, 2004, vol. 2, # 2 p. 160 - 167  
Title/Abstract Full Text Scopus

Hoffmann-La Roche Inc.  
Patent: US3976639, 1976  
Title/Abstract Full Text

2

Multi-step reaction with 2 steps  
1: 1.) Triton B, 2.) Zn, CaCl<sub>2</sub> / 1.) Me<sub>2</sub>SO, 95 deg C, 1 h, 2.) H<sub>2</sub>O, reflux  
2: 92 percent / RuCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>3</sub> / toluene / 6 h / Heating  
View Scheme

Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa  
Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, 1986, # 21 p. 1575 - 1576  
Title/Abstract Full Text Scopus

Rx-ID: 8619391

Rx-ID: 18555314

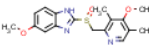
Información de disponibilidad comercial

Multiples Criterios FILTROS

# Identifique productos rapidamente observando las “huellas dactilares” provenientes de datos espectroscopicos o fisicoquimicos

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 1 substances out of 480 citations go to No.  Page 1

Limit to Selection  Sort by Molweight

Structure	Chemical Name	Available Data	N° of ref.	N° of prep.	Boiling Point
	5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)-methyl]sulphonyl]-1H-benzimidazole (-)-5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methylsulphonyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[(4-methoxy-3,5-dimethyl-pyridin-2-yl)-methylsulfinyl]benzimidazole 2-[[[3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl]-5-methoxybenzimidazole rac-omeprazole	Identification (70) Physical Data (41) Spectra (26) Bioactivity/ECotox (658) Use/Application (746)	480	15 prep out of 79 reactions.	

**Structure/Compound Data**

**Reaxys Registry Number:** 3628192  
**CAS Registry Number:** 73590-58-6 119141-88-7 119141-89-8 131959-78-9 326602-80-6  
**Chemical Name:** 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)-methyl]sulphonyl]-1H-benzimidazole, (-)-5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methylsulphonyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[(4-methoxy-3,5-dimethyl-pyridin-2-yl)-methylsulfinyl]benzimidazole, 2-[[[3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl]-5-methoxybenzimidazole, rac-omeprazole  
**Type of Substance:** heterocyclic

**Molecular Formula:** C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>S  
**Linear Structure Formula:** C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>SN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>  
**Molecular Weight:** 345.422  
**InChi Key:** SUBDBMMJDZJVOS-LILDPLRNC

- Identification
- Physical Data
  - Melting Point (4)
- Conformation (2)
- Crystal Property Description (1)
- Crystal Phase (1)
- Crystal System (1)
- Space Group (1)
- Density of the Crystal (1)
- Optics (1)
- Optical Rotatory Power (3)
- Electrochemical Behaviour (2)
- Dissociation Exponent (7)
- Electrochemical Characteristics (2)
- Solubility (MCS) (2)
- Partition octan-1-ol/water (MCS) (3)
- Energy Data (MCS) (3)
- Adsorption (MCS) (1)
- Association (MCS) (6)
- Spectra
  - NMR Spectroscopy (8)
  - IR Spectroscopy (7)
  - Mass Spectrometry (1)
  - UV/VIS Spectroscopy (10)
- Bioactivity/ECotox
  - Pharmacological Data (681)
  - Ecotoxicology (1)
  - Abiotic Degradation, Hydrolysis (7)
  - Abiotic Degradation, Photolysis (1)
- Use/Application

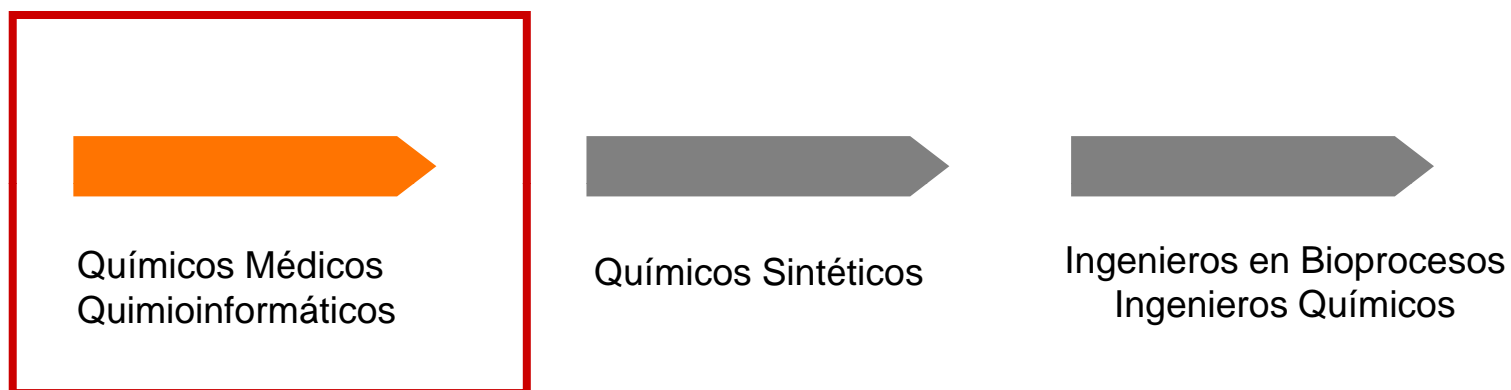
**Peaks de Espectrometría Ej. Desplazamientos RMN**

1H	chloroform-d3	300MHz	1H NMR (300 MHz, CDCl3): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mbroad), 7.08 (1H, mbroad), 6.96 (1H, dd), 4.78and4.60 (2*1H, system AB, s), 3.87 (3H, s), 3.72 (3H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)



# ¿Para quién esta hecho Reaxys?

Reaxys apoya el proceso de descubrimiento en las área de la **síntesis química** y disciplinas relacionadas.



Reaxys es para estudiantes (pregrado, posgrado, Ph.D., post-doc), académicos investigadores, y cualquier científico del área.



# Soluciones para la Química Medicinal y Quimioinformática

---

Evite experimentos innecesarios debido a datos calculados erróneamente, usando datos proveniente de **medidas experimentales validadas**.

**Datos de Sustancias** directamente a su escritorio,

- Puntos de Ebullición/Fusión, Solubilidad
- Coeficiente de Partición octanol/agua logP
- Constantes de Ionización  $pK_a$
- Datos de Actividad Biológica y Toxicológica, como por ejemplo:
  - Concentración Inhibitoria/Efectiva (Ej. IC/EC50)
  - Constantes de afinidad/disociación ( $K_i/k_d$ )

Evite la engorrosa colección manual de datos utilizando los "Perfiles de Sustancia" que acumulan toda la información disponible en un solo registro

Compare fácilmente la influencia de los cambios estructurales en las propiedades calculadas para las sustancias

- Exportando la estructura de los compuestos y su datos en tablas: **XLS, WORD, PDF**
- Uniendo los **datos de Reaxys con datos internos/externos** usando formatos como **SDF** (Structure-Data-File), **RDF** (Reaction-Data-File), MolFiles, SMILES, **XML**

Explore conceptos relacionados en otras publicaciones usando los links de información "citado-por" de Scopus.



# Soluciones para la Química Medicinal y Quimioinformática

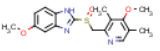
Actividades de Investigación	Criterio / Parámetro	Solución Reaxys
Analizar relaciones estructura-actividad con datos físicos/bioactividad	Encontrar sustancias con datos físicos o farmacológicos específicos	Buscar por propiedades o efectos de la sustancia
Seleccionar líderes basados en las propiedades/características estructurales	Comparar los datos físicos o farmacológicos con la estructura	Exportar sustancias y datos a tablas para analizar relaciones
Entender el efecto de los fármacos Y sus interacciones con el receptor	Encontrar información sobre un target específico y comparar fármacos	Buscar bioactividad (efecto, target, especies, etc.)
Analizar el espacio químico	Analizar los resultados para encontrar estructuras relacionadas aún no publicadas	Comparar sustancias y sus datos exportados a tablas
Encontrar productos naturales utilizados como fármacos que hayan sido publicados	Encontrar sustancias aisladas de productos naturales	Campo de datos "Aislado de producto natural"



# Evite experimentos innecesarios usando una variedad de datos de sustancias altamente indexados.

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 1 substances out of 480 citations go to No.  Page 1

Limit to Selection  Sort by Molweight

Structure	Chemical Name	Available Data
	5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)-methyl]sulphonyl]-1H-benzimidazole (-)-5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[[4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methylsulphonyl]-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-[[4-methoxy-3,5-dimethyl-pyridin-2-yl)-methylsulfinyl]benzimidazole 2-[[3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl]-5-methoxybenzimidazole rac-omeprazole	Identification (70) Physical Data (41) Spectra (26) Bioactivity/ECotox (658) Use/Application (746)

**Structure/Compound Data**

Reaxys Registry Number: 3628192  
CAS Registry Number: 73590-58-6 119141-88-7 119141-89-8 131959-78-9 326602-80-6  
Chemical Name: 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)-methyl]sulphonyl]-1H-benzimidazole, (-)-5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[[(4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridyl)methylsulphonyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[4-methoxy-3,5-dimethyl-pyridin-2-yl)-methylsulfinyl]benzimidazole, 2-[[3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl]-5-methoxybenzimidazole, rac-omeprazole  
Type of Substance: heterocyclic

Molecular Formula: C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>S  
Linear Structure Formula: C<sub>17</sub>H<sub>19</sub>SN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>  
Molecular Weight: 345.422  
InChI Key: SUBDBMMJZJVOS-LILDPLRNC

- Identification
- Physical Data
  - Melting Point (4)
  - Conformation (2)
  - Crystal Property Description (1)
  - Crystal Phase (1)
  - Crystal System (1)
  - Space Group (1)
  - Density of the Crystal (1)
  - Optics (1)
  - Optical Rotatory Power (3)
  - Electrochemical Behaviour (2)
  - Dissociation Exponent (7)
  - Electrochemical Characteristics (2)
  - Solubility (MCS) (2)
- Partition octan-1-ol/water (MCS) (3)
- Energy Data (MCS) (3)
- Adsorption (MCS) (1)
- Association (MCS) (6)
- Spectra
  - NMR Spectroscopy (8)
  - IR Spectroscopy (7)
  - Mass Spectrometry (1)
  - UV/VIS Spectroscopy (10)
- Bioactivity/ECotox
  - Pharmacological Data (681)
  - Ecotoxicology (1)
  - Abiotic Degradation, Hydrolysis (7)
  - Abiotic Degradation, Photolysis (1)
  - Use/Application

## Valores medidos de:

- Solubilidad
- Coeficiente de partición octanol/agua logP
- Constantes de disociación/ionización pK<sub>a</sub>
- Datos de Actividad Biológica (e.g. IC/EC, Ki/Kd)
- Datos de Toxicidad

Nota: nombre del target puede aparecer en el campo efecto

Type	Value of Type
IC50	29 µmol/l

## Datos farmacológicos (bio-ensayo)

Pharmacological Data (797)											
Effect	Species or Test-System	Sex	Route of Application	Concentration	Method	Further Details	Type	Value of Type	Results	Comment	Reference
enzyme activity; inhibition of	recombinant aldo-keto reductase 1C1				enzyme incubated with title comp.; enzyme activity determined using 9,10-phenanthrene quinone substrate	1C1: 20α-hydroxysteroid dehydrogenase	IC50	29 µmol/l			Byrns, Michael C.; Steckelbroeck, Stephan; Penning, Trevor M. Biochemical Pharmacology, 2008, vol. 75, # 2 p. 484-493 Title/Abstract Full Text Scopus

# Compare fácilmente las relaciones estructura actividad en sustancias relacionadas

**reaxys**

**Output Substance Results**

**Output**  Substance Grid  Substance Details Table  Substance Citations Table

**to**  PDF/Print  XML  Microsoft Word  Microsoft Excel

RD File  SD/Molfile  Smiles

Literature Management Systems (e.g. ReferenceManager, EndNote etc.)

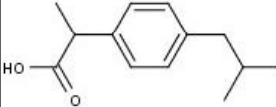
Include the following headline

**Output range**  All Hits  Selected hits  Range:  e.g. 1, 2-5, 10

**Output contains**  include Structures  All available data  Identification data only  Select data

Exporte en formatos SD-/RD-/XML- a sistemas compatibles

... exportando las estructuras y tabla de datos a: Excel, Word, PDF

Structure	Reaxys RegNo	CAS Registry Number	Pharmacological Data: Effect	Species or Test-System	Method	Further Details	Type	Value of Type	References
	2049713	15687-27-1; 51146-56-6; 51146-57-7; 58560-75-1	enzyme activity; inhibition of	recombinant aldo-keto reductase 1C1	enzyme incubated with title comp.; enzyme activity determined using 9,10-phenanthrene quinone substrate	1C1: 20 $\alpha$ -hydroxysteroid dehydrogenase	IC50	29 $\mu$ mol/l	Journal: Byrns, Michael C.; Steckelbroeck, Stephan; Penning, Trevor M.; Biochemical Pharmacology; vol. 75; 2; (2008); p. 484 - 493;

# Explore conceptos relacionados en otras publicaciones: link a información “citado por” en Scopus

The image shows a composite screenshot of two web interfaces. The top interface is Reaxys, displaying a search query with 1982 citations and a 'No structure' result. The bottom interface is Scopus, showing search results for a query. A red box highlights a citation in the Scopus results table, with a red arrow pointing to a text box on the right.

**Reaxys Interface:**

- Query: 1982 citations
- Result: No structure
- Filter by: Document Type
- Sort by: Publication Year

**Scopus Interface:**

- Search: Sources, Analytics, My Alerts, My List, My Profile
- Quick Search: [input] Go
- Scopus: 8 Web (1) Patents (0) SelectedSources (0)
- 8 Documents that cite: [Cailly, T., Fabis, F., Lemaitre, S., Bouillon, A., Rault, S.](#) *Synthesis of ortho-substituted cyanopyridines through lithio intermediate trapping* (2005) *Tetrahedron Letters*, 46 (1), pp. 135-137.
- Refine Results: Source Title, Author Name, Year, Document Type, Subject Area
- Results: 8

**Citation Table (Scopus):**

Document	Year	Source	Times cited
as; Fabis, Frederic; Lemaitre, Stephane; xandre; Rault, Sylvain	2005	<b>Tetrahedron Letters</b> , 2005, vol. 46, # 1 p. 135 - 138	

**Text Box:** Links “citado-por” en Scopus  
8 publicaciones citan esta referencia anotada en Reaxys

# Resumen de las soluciones de Reaxys

---

- **“Un solo tablero”** que le da acceso a tres productos altamente aceptados, que antes venían por separado: **CrossFire Beilstein, Gmelin y Patent Chemistry Database**
- **Sin limite de usuarios:** suscripción permite el acceso de todo un campus.
- **Fuente de datos superior, altamente validada:** datos unificados, estandarizados y organizados en la forma de “Perfiles de Sustancias” y “Perfiles de Reacción”
- **Literatura histórica desde 1771,** no disponible en otras fuentes
- **Encuentre respuestas relevantes más rápido** gracias a las herramientas de ranqueo y filtros inteligentes
- **No necesita entrenamiento sofisticado** debido a su interfaz web sumamente intuitiva
- **No necesita mantención:** Reaxys esta alojado por Elsevier
- Vínculos a publicaciones de texto completo (incl. ScienceDirect) y oficinas de patentes
- Acceda a su propio sistema de biblioteca usando **OpenURL**
- Compatible con todos los sistemas operativos Windows, MacOSX, Linux



# Resumen de las soluciones de Reaxys cont.

---

## Reaxys

- Le da acceso a los investigadores a una fuente de información efectiva y validada
- Ayuda a los científicos a encontrar información relevante más rápido y fácil: aumente sus publicaciones/solicitudes de patente en el mismo tiempo, sea más productivo y eficaz
- Ayuda a profesores, estudiantes, e investigadores a hacer carrera más rápidamente: más proyectos/publicaciones con el mismo presupuesto o personal de apoyo
- Ayuda a los estudiantes a prepararse para trabajar al utilizar herramientas estándar de la industria
- **Reaxys ayuda a los estudiantes, científicos y académicos investigadores, a ser más exitosos en un menor tiempo y con un menor costo!**



# ¿Quiere conocer Reaxys?

---

- Obtenga acceso a Reaxys si tiene alguna licencias existentes o solicite un trial de 30 días para evaluar esta nueva herramienta.
- Apreciamos sus comentarios y lo mantendremos informados de futuros desarrollos.
- Estimule a sus colegas en su Departamento a saber más de Reaxys, dénos sus comentarios e inscríbese para recibir novedades en [www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com)



# Reaxys

---

¿Cuál es tu reacción?

