Conozca Reaxys

ELSEVIER

reaxys®

Reaxys

Reaxys es la nueva herramienta de Elsevier desarrollada especialmente para investigadores de las áreas de química, bioquímica y farmacología.

Reaxys promueve la descubierta y la innovación integrando la investigación de propiedades de substancias y reacciones con la planificación de síntesis químicas.

- Consulte procedimientos experimentales y rendimientos de reacciones químicas en segundos
- Analice las propiedades físicas, farmacéuticas y de toxicidad de los compuestos extraídas de los artículos científicos y de patentes
- Desarrolle la mejor estrategia de síntesis con la exclusiva herramienta de síntesis de Reaxys

ELSEVIER

reaxys®

Reaxys - Contenido

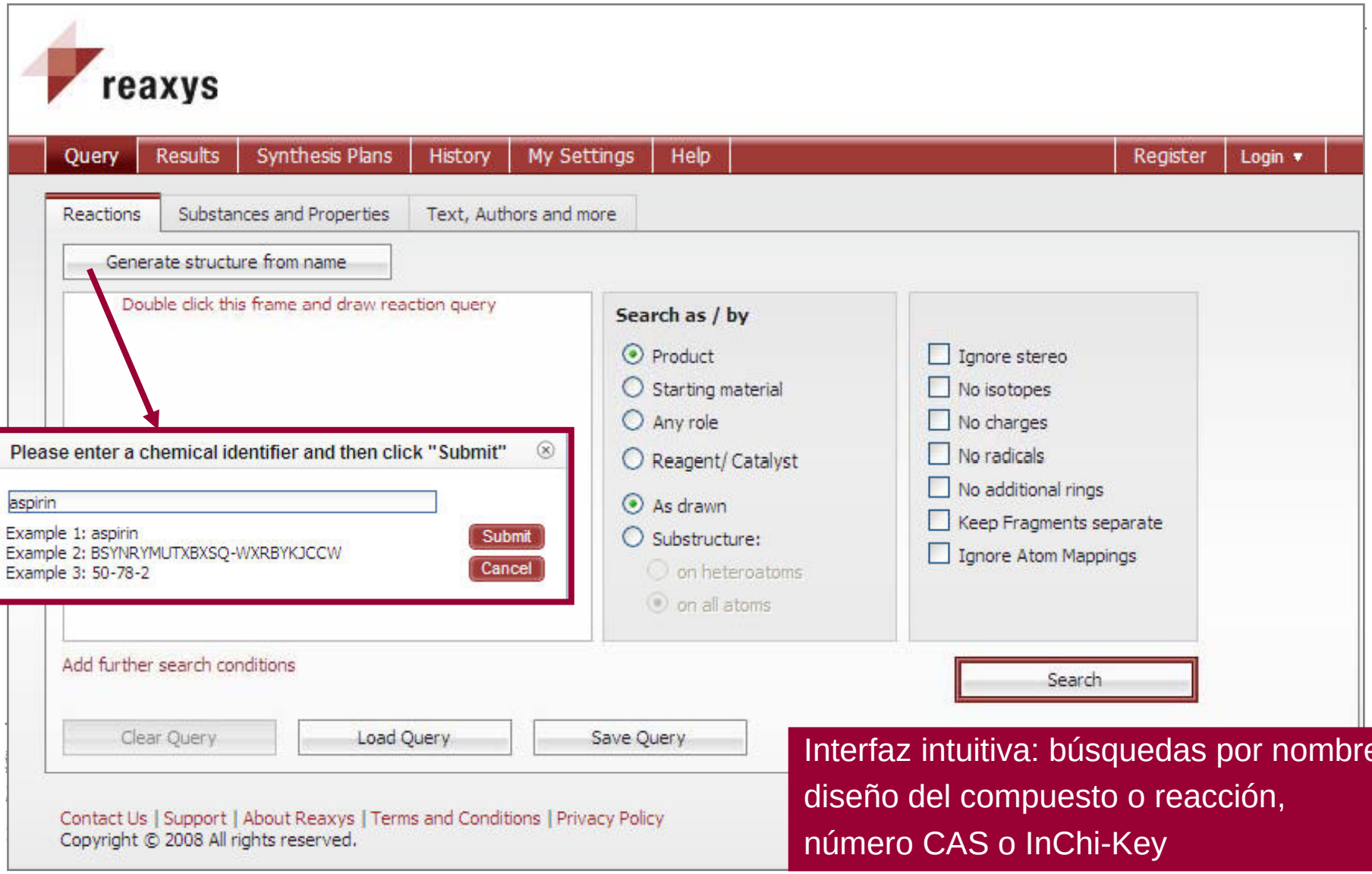
Reaxys reúne el contenido más relevante de la literatura científica y de patentes en química orgánica, inorgánica y órgano metálica a través de las consagradas bases de datos

- **CrossFire Beilstein – química orgánica**
- **CrossFire Gmelin – química inorgánica y órgano metálica**
- **Patent Chemistry Database**

ELSEVIER

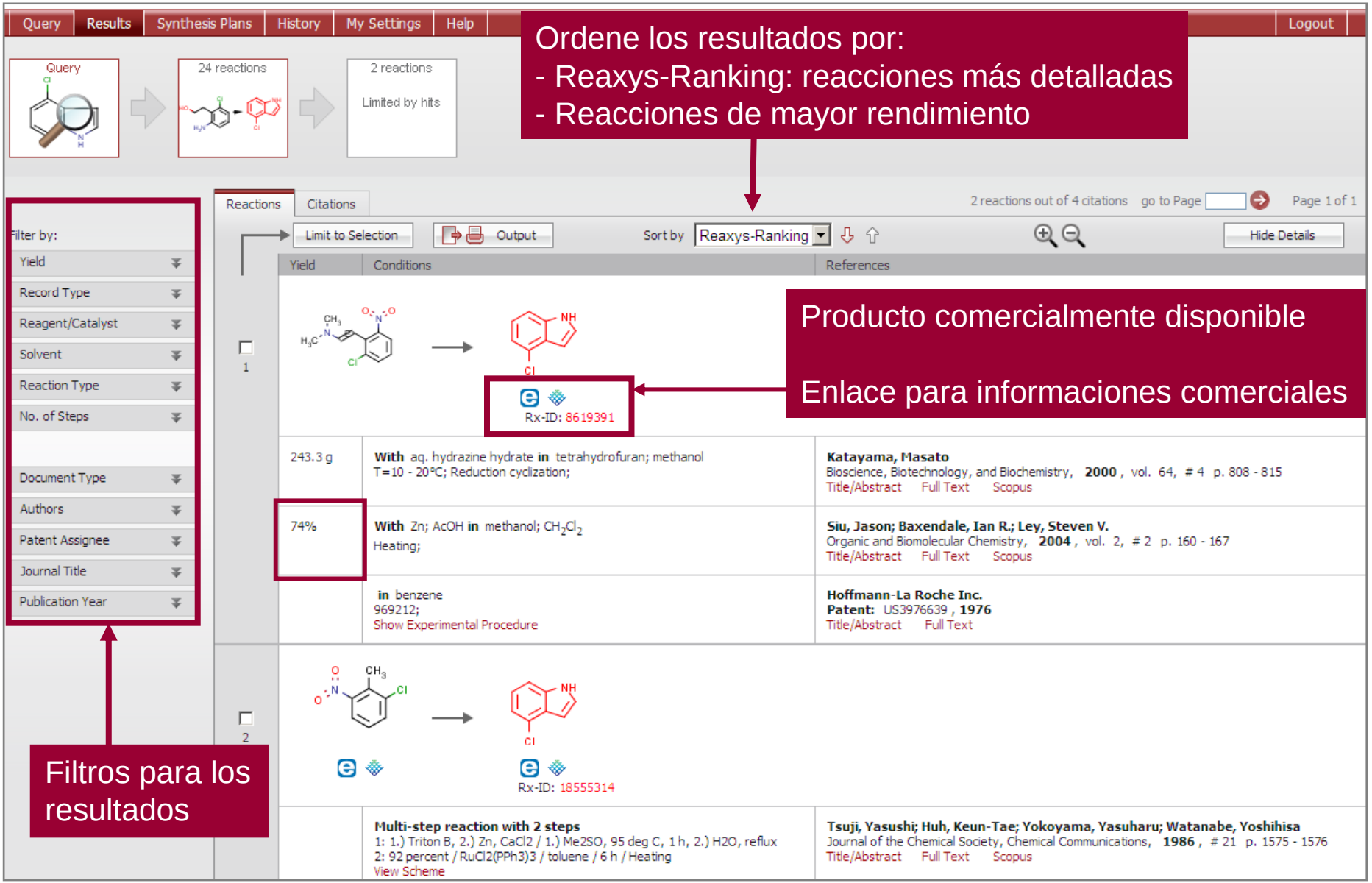
reaxys®

Facilidad de búsqueda

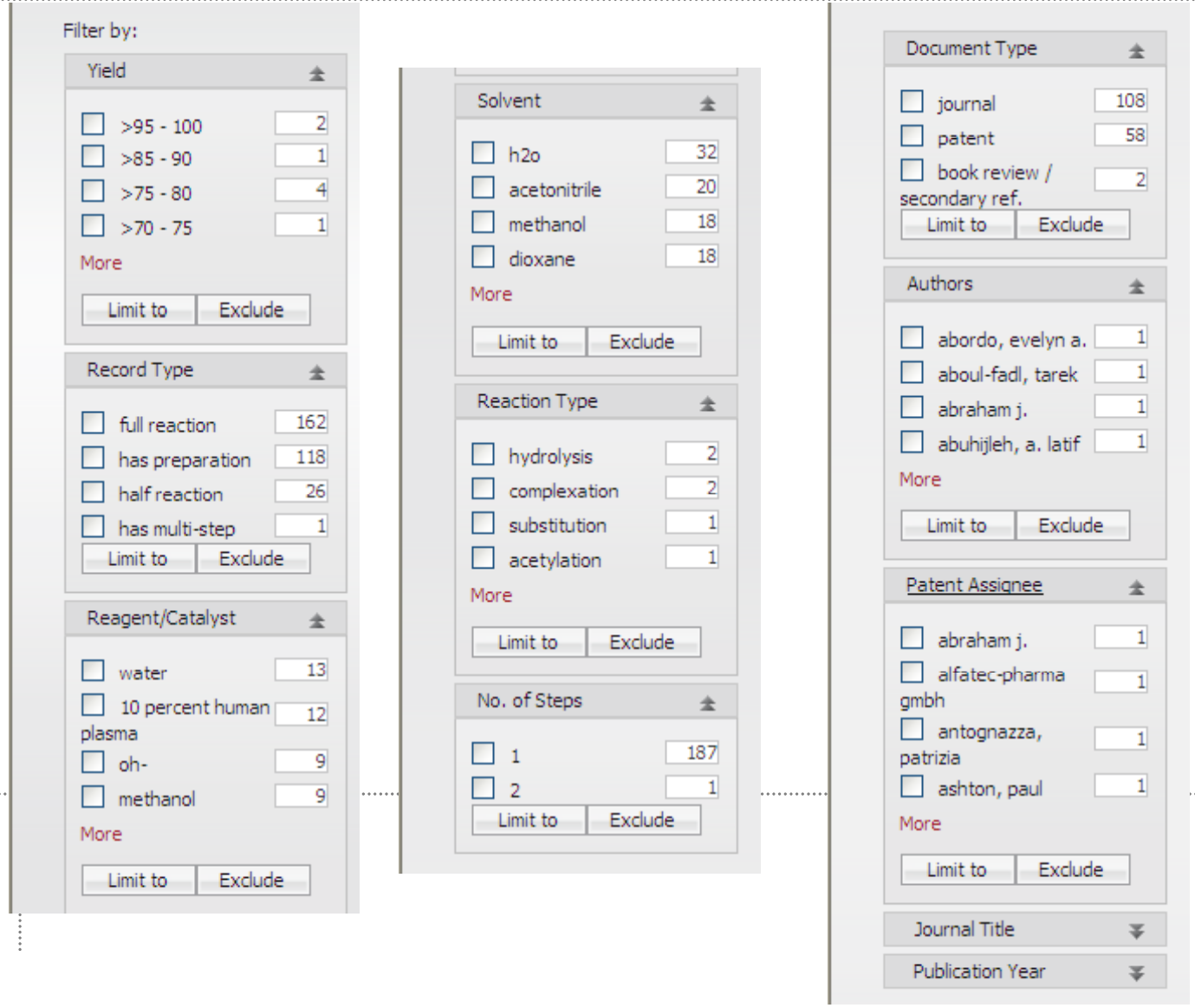


Interfaz intuitiva: búsquedas por nombre, diseño del compuesto o reacción, número CAS o InChi-Key

Recursos inteligentes para filtrar y ordenar resultados

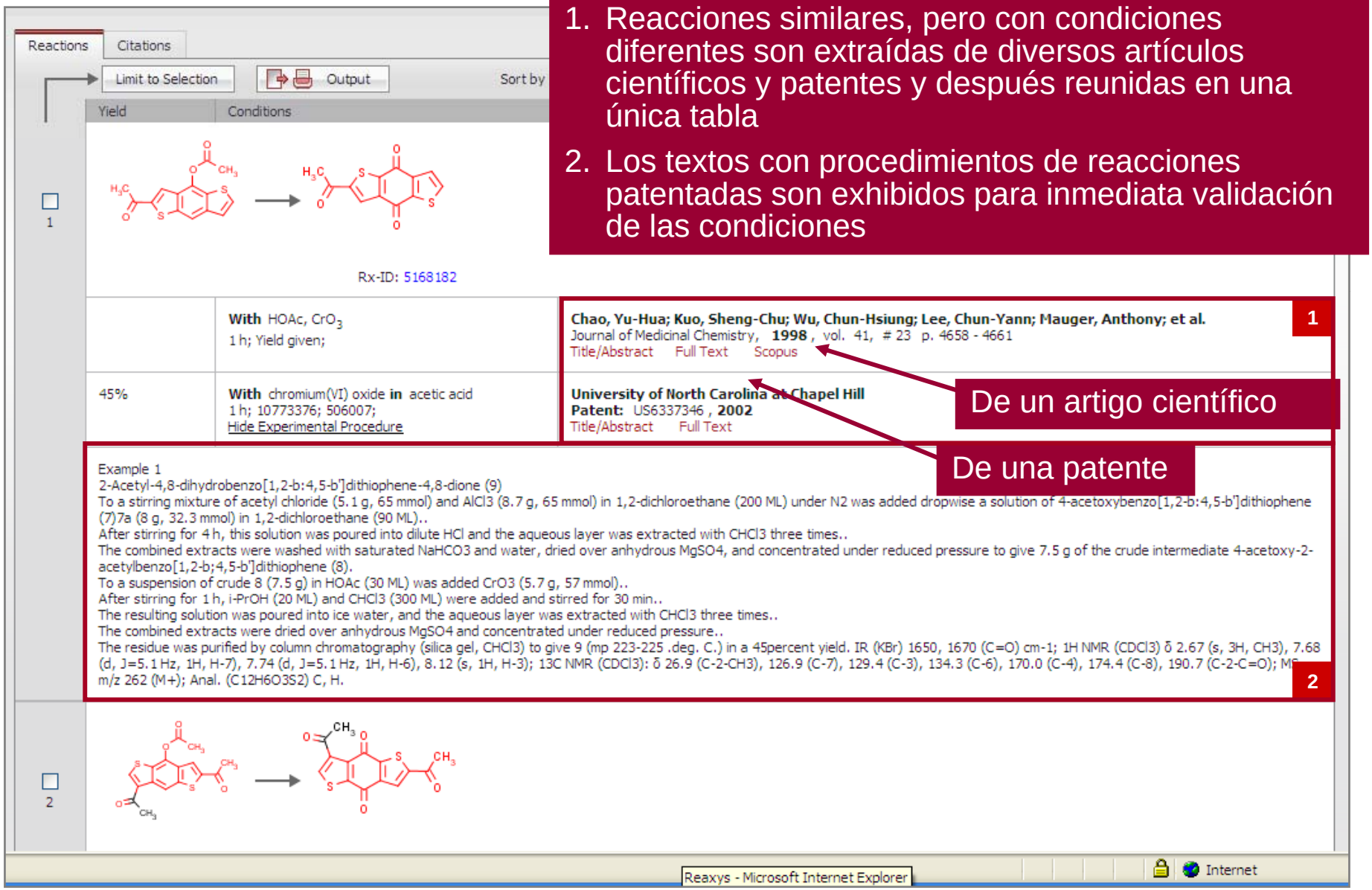


Recursos inteligentes para filtrar y ordenar resultados



La mejor fuente para investigar reacciones químicas

1. Reacciones similares, pero con condiciones diferentes son extraídas de diversos artículos científicos y patentes y después reunidas en una única tabla
2. Los textos con procedimientos de reacciones patentadas son exhibidos para inmediata validación de las condiciones



Beneficios para la química medicinal

Evite procedimientos de laboratorio dispendiosos para a validación de datos calculados

- Reaxys contiene datos experimentales extraídos de la literatura científica:
- Puntos de fusión / ebullición, solubilidad
- Coeficiente de partición octanol/water logP
- Constantes de disociación pKa

Datos de bioactividad y toxicidad, por ejemplo:

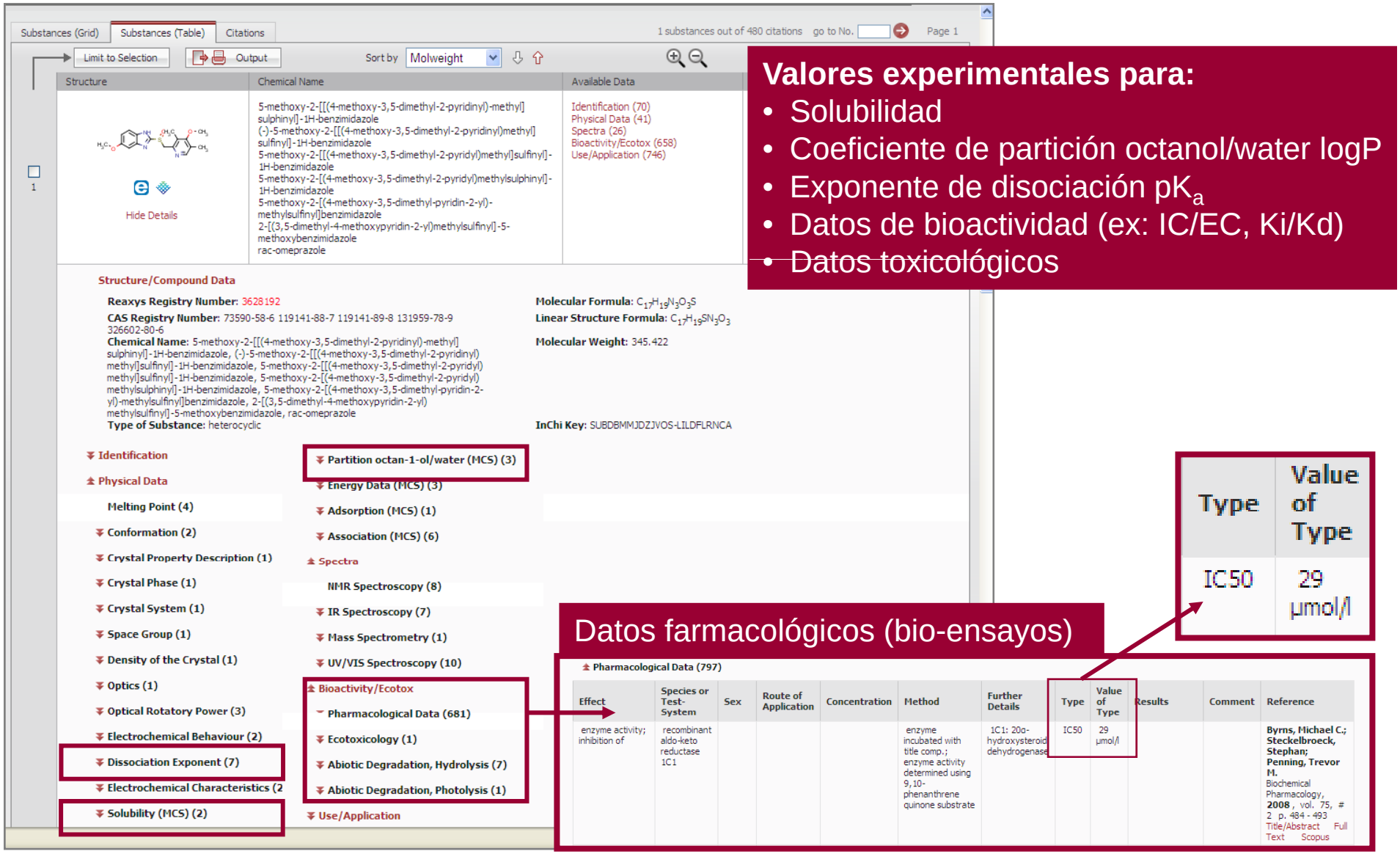
- Inhibición / concentración efectiva (e.g. IC/EC50)
- Constantes de unión / disociación (Ki/kd)

Evite el trabajo de coleta manual de informaciones usando el recurso "Substance Profiles" y obtenga todos los dados de una sustancia en un único registro

ELSEVIER

reaxys®

Evite procedimientos de laboratorio dispendiosos



Valores experimentales para:

- Solubilidad
- Coeficiente de partición octanol/water logP
- Exponente de disociación pK_a
- Datos de bioactividad (ex: IC/EC, Ki/Kd)
- Datos toxicológicos

Datos farmacológicos (bio-ensayos)

Type	Value of Type
IC50	29 µmol/l

Propiedades experimentales

Ejemplos de datos experimentales encontrados para un compuesto buscado:

Los números representan el número de resultados encontrados en esta busqueda para cada propriedad

Propiedades experimentales

Ejemplos de datos experimentales encontrados para un compuesto buscado:

NMR Spectroscopy (22)

Description	Nucleus	Solvents	Frequency	Original Text	Reference
CPMAS (Cross Polarization Magic-Angle Spinning) Solid phase	13C			20.5+/-0.5 ppm; 19.8 (+/-0.5 ppm) ppm	**SCICONCEPT GMBH** **Patent:** WO2008/37289 , **2008** Title/Abstract Full Text
CPMAS (Cross Polarization Magic-Angle Spinning) Solid phase	13C				**SCICONCEPT GMBH** **Patent:** WO2008/37289 , **2008** Title/Abstract Full Text
Chemical shifts	1H	CDCl3	300MHz		**Rastrelli, Federico; Bagno, Alessandro** Journal of Magnetic Resonance, **2006** , vol. 182, # 1 p. 29 - 37 Title/Abstract Full Text Scopus
	1H	CDCl3		1H NMR (CDCl3), 2.37 (s, 3H), 5.83 (s, 2H), 7.12 (m, 1H), 7.34 (m, 1H), 7.62 (m, 1H), 7.72 (d, 2H), 8.05 (dd, 1H)	**Ashton, Paul; Cynkowska, Grazyna; Cynkowski, Tadeusz; Smith, Thomas J.** **Patent:** US2003/170286 , **2003** Title/Abstract Full Text **Control Deliver Systems, Inc.** **Patent:** US2005/164994 , **2005** Title/Abstract Full Text
	1H	CDCl3		1H NMR (CDCl3): 8.21 (1H,dd); 7.66 (1H,dt); 7.42 (3H,m); 7.20 (3H,m); 5.40 (2H, s), 2.25 (3H,s)	**Del Soldato, Piero** **Patent:** US2004/23890 , **2004** Title/Abstract Full Text
	1H		200MHz	1H NMR (200 MHz) (CDCl3): 8.10 (2H, m); 7.7 (1H, t); 7.56(2H, d); 7.48 (1H, t); 7.30(1H, d); 5.74 (2H, s); 5.43 (2H, s); 2.20 (3H, s)	**Del Soldato, Piero; Benedini, Francesca; Antognazza, Patrizia** **Patent:** US2004/23933 , **2004** Title/Abstract Full Text
Spectrum	1H	tetradeuteriomethanol			**Leo, Gregory C.; Krikava, Aaron; Caldwell, Gary W.** Analytical Chemistry, **2003** , vol. 75, # 8 p. 1954 - 1957 Title/Abstract Full Text Scopus

Propiedades experimentales

Ejemplos de datos experimentales encontrados para un compuesto buscado:

Pharmacological Data (1775)

Effect	Species or Test-System	Sex	Route of Application	Concentration	Method	Type	Value of Type	Results	Reference
protein expression; effect on	umbilical vein endothelial cells of human			2.5 - 5 mmol/l	cells treated with 100 or 300 µg/ml ox-LDL for 16 h; cells pre-incubated with title comp. for 30 min; effect of title comp. on COX-2 expression induced by ox-LDL			cells pre-incubated with title comp. signif. reduced COX-2 expression induced by ox-LDL; fig.	**Zhao, Jinjing; Qi, Ruomei; Li, Rui; Wu, Wei; Gao, Xin; Bao, Li; Lu, Shuzheng** Journal of Cardiovascular Pharmacology, **2008** , vol. 51, # 1 p. 32 - 37 Title/Abstract Full Text Scopus
protein expression; effect on	umbilical vein endothelial cells of human			2.5 - 5 mmol/l	cells treated with 100 or 300 µg/ml ox-LDL for 16 h; cells pre-incubated with title comp. for 30 min; effect of title comp. on ICAM-1 expression induced by ox-LDL			title comp. almost completely suppressed ICAM-1 expression induced by ox-LDL; title comp. alone had no effect on ICAM-1 expression in unstimulated cells; fig.	**Zhao, Jinjing; Qi, Ruomei; Li, Rui; Wu, Wei; Gao, Xin; Bao, Li; Lu, Shuzheng** Journal of Cardiovascular Pharmacology, **2008** , vol. 51, # 1 p. 32 - 37 Title/Abstract Full Text Scopus
protein expression; effect on	umbilical vein endothelial cells of human			2.5 - 5 mmol/l	cells treated with 100 or 300 µg/ml ox-LDL for 16 h; cells pre-incubated with title comp. for 30 min; effect of title comp. on ICAM-1 expression induced by ox-LDL detd. by using western blot			title comp. almost completely suppressed ICAM-1 expression induced by ox-LDL; fig.	**Zhao, Jinjing; Qi, Ruomei; Li, Rui; Wu, Wei; Gao, Xin; Bao, Li; Lu, Shuzheng** Journal of Cardiovascular Pharmacology, **2008** , vol. 51, #

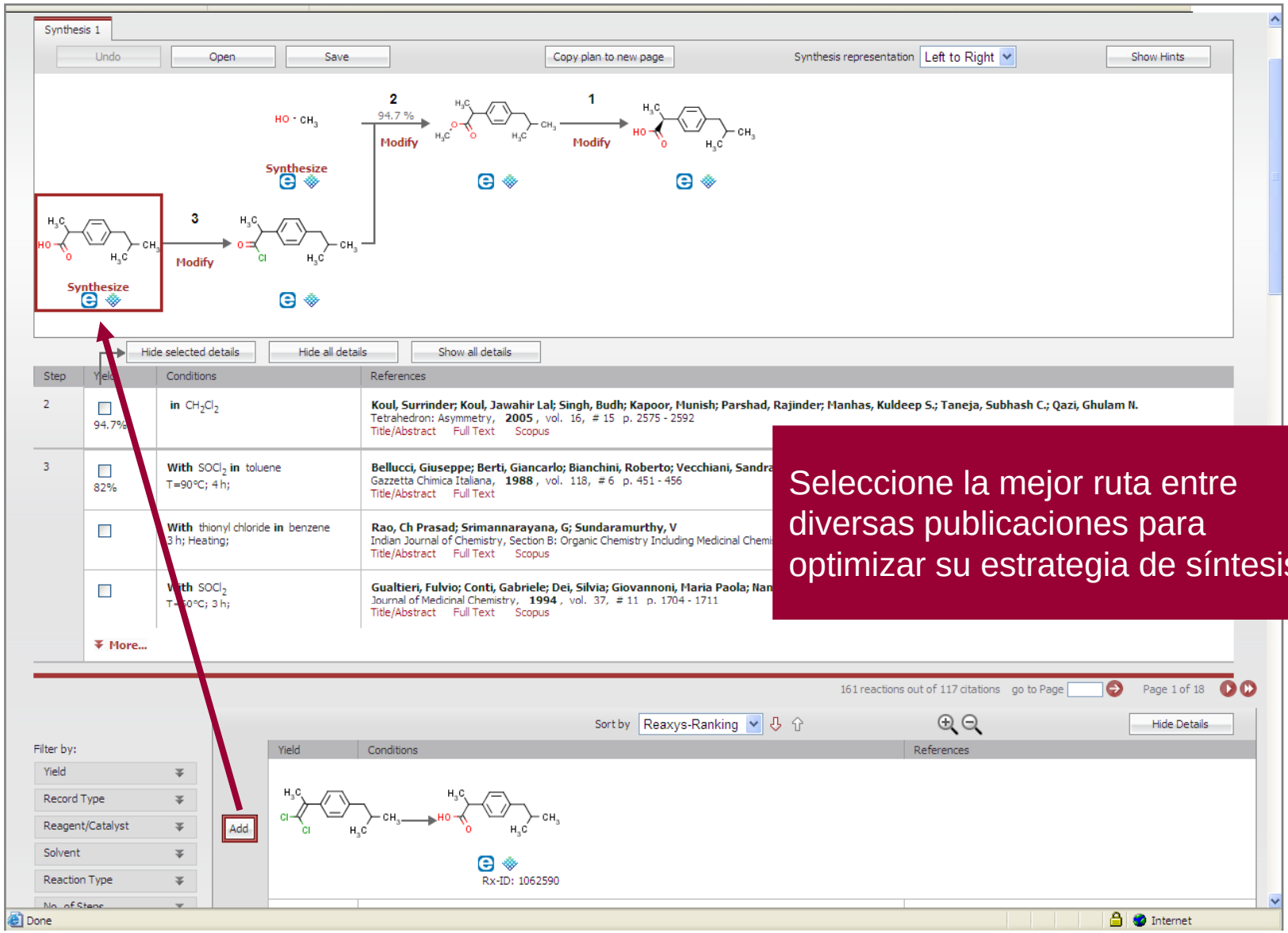
Beneficios para los químicos medicinales

Actividad	Beneficios de Reaxys
Encontrar substancias con determinadas propiedades o drogas con ciertos efectos	Búsqueda por propiedad o efecto de la sustancia
Comprender los efectos de una droga e interacciones droga-objetivo biológico	Investiga bioavtividad (effectos, blancos, especies, etc.)
Analizar resultados de búsquedas para encontrar nuevas substancias con estructuras similares	Exporta substancias y sus datos para planillas y analiza sus relacciones
Encontrar substancias separadas de los productos naturales	Campo de Datos “Isolation from natural product”

ELSEVIER

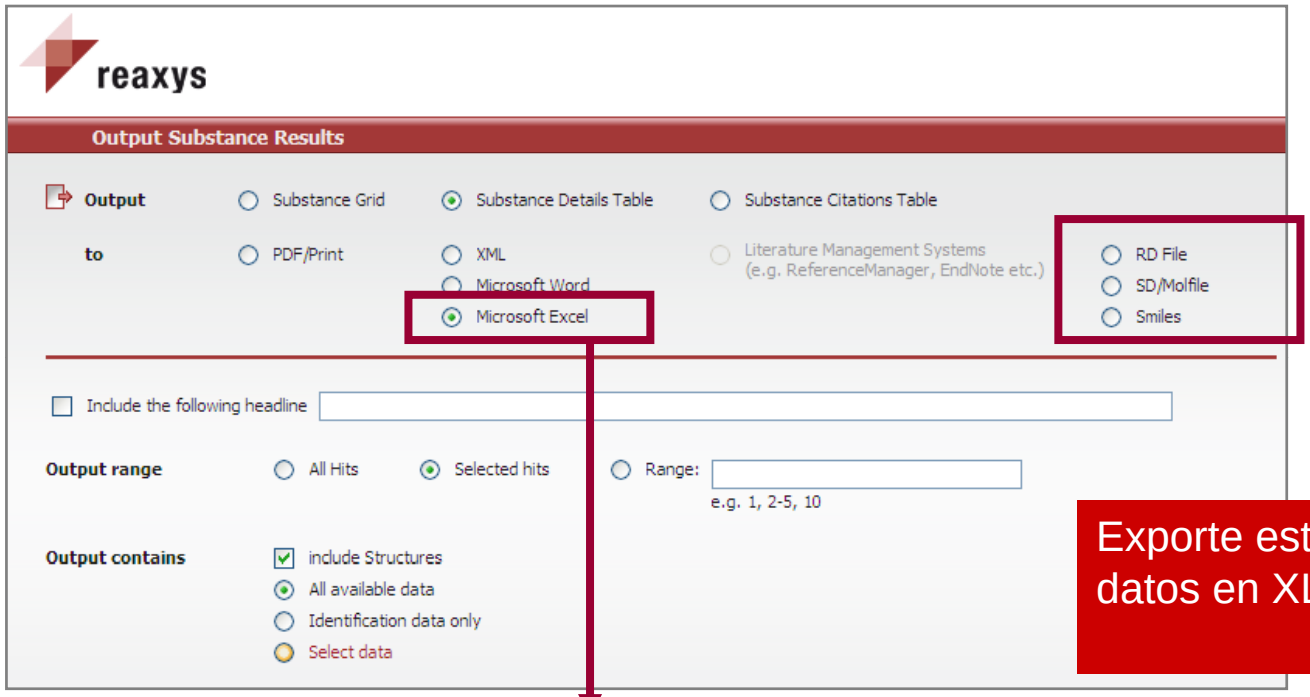
xys®

Herramienta para planificación de síntesis

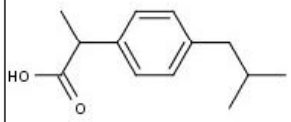


Seleccione la mejor ruta entre diversas publicaciones para optimizar su estrategia de síntesis.

Compare estructuras y sus datos



Exporte estructuras y sus datos en XLS, 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: 20α-hydroxysteroid dehydrogenase	IC50	29 µmol/l	Journal; Byrns, Michael C.; Steckelbroeck, Stephan; Penning, Trevor M.; Biochemical Pharmacology; vol. 75; 2; (2008); p. 484 - 493;

Resumiendo

- Reaxys reduce el tiempo necesario para encontrar resultados relevantes
- Interfaces simples, poderosa herramienta de búsqueda y contenido indexado con foco en la síntesis química
- Extenso repositorio de propiedades químicas y datos experimentales de reacciones
- Información extraída de la literatura científica y de patentes

ELSEVIER

reaxys®

www.reayxs.com

www.info.reaxys.com