



ELSEVIER

# Reaxys

Solução completa para a recuperação de dados químicos e de bioatividade da literatura científica, incluindo periódicos, patentes e conferências

Abril de 2021

Dra. María José Dávila-Rodríguez



# Reaxys: Uma solução – 6 Bases de dados

## Base de dados de Bioatividade

>39 milhões de dados de bioatividade experimentais

## Base de dados Bibliográfica

>63 milhões de registros (de ~16,000 revistas dif. editoras y 105 escritórios de patentes)

## Base de dados de Substâncias

>120 milhões de substâncias (conteúdo total)  
~ 105 milhões de substâncias únicas

## Base de dados de Alvos

> 30.000 alvos moleculares, incluindo informação das espécies

Reaxys®

## Base de dados de Reações Químicas

>60 milhões de reações de etapas únicas e múltiplas

## Base de dados de Propriedades

> 500 milhões de propriedades experimentais; > 500 campos; > 130 áreas

# Reaxys: Uma solução – 6 Bases de dados



# Reaxys: Uma solução – 6 Bases de dados

Base de datos  
de  
Bioactividad

>39 millones de datos de  
bioactividad  
experimentales

Base de datos

Biblioteca de

>63 millones de reacciones  
(de ~120 campos)

Química medicinal

Química orgánica

Química analítica

Química inorgánica

Química física

Química de coordinación

Química de estado sólido

Química de superficies

Química ambiental

Química supramolecular

Química de materiales

Química de polímeros

Química de nanotecnología

Química de biotecnología

Química de farmacología

Química de toxicología

Química de limnología

Química de hidrología

Environmental sciences

Geological sciences

Material sciences

Clinical sciences

Cellular Biology

Food sciences

Paleontology

Biomedicine

Toxicology

Limnology

Hydrology

Archeology

Biochemistry

Biotechnology

**Pharmacology**

Surface science

Nanotechnology

Molecular Biology

**Agricultural sciences**

**& More...**

Base de datos  
de Dianas  
Moleculares

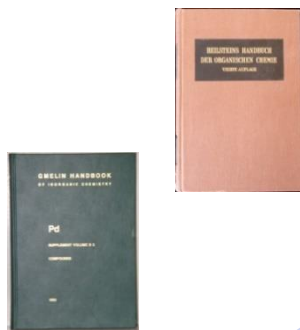
> 30.000 dianas,  
incluyendo información  
de las especies



Work smarter



# Reaxys



**1817:** 1.<sup>a</sup> edição do Manual Gmelin

**1881:** 1.<sup>a</sup> edição do Manual Beilstein

**1989:** Bases de dados Beilstein & Gmelin On-line

**1992:** Lançamento do CrossFire

**2009:** Lançamento do **Reaxys**

**2013/2014:** Remodelação completa do Reaxys e ampliação do conteúdo para incluir RMC

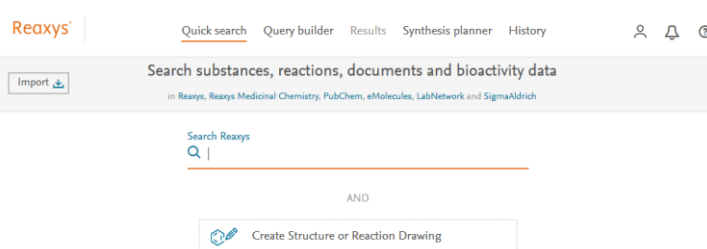
**2016:** Lançamento do novo **Reaxys Medicinal Chemistry (RMC)**

**2017:** Lançamento do módulo **Reaxys Medicinal Chemistry (RMC)**

**2020:** Reaxys Commercial Substances

**2021:** Ampliação do conteúdo de patentes do Reaxys (+100 escritórios e 170 IPCs)

**A partir de 2021:** Módulo de **Retrosíntese Preditiva** (Predição de sínteses baseada na IA)



**Functionalization of indole at C-5 or C-7 by palladium-catalyzed double carbonylation: A facile synthesis of indole keto-carbonyls and carboxamide dimers**

Atsiko Takase<sup>1,2</sup>, Hisao Maruyama<sup>1</sup>, Hirotaka Kohji<sup>1</sup>, Kazumasa Demizu<sup>1</sup>, Takao Kato<sup>1</sup>, Naoyuki Imai<sup>1</sup>, Naoki Komatsu<sup>1</sup>, Masaru Inoue<sup>1</sup>, Masahito Kuroda<sup>1,2,3</sup>

**ARTICLE INFO**

**ABSTRACT**

**1. Introduction**

**2. Results and Discussion**

**3. Conclusions**

**4. Experimental Section**

**5. Acknowledgements**

**6. References**

**7. Supplementary Information**

Indexação

## Registro bibliográfico

Catalytic cycloaddition of 2-hydroxy ketones with 1,1-dicyanoalkenes

Tsunai, Shiroji; Seo, Tada; Takano, Yugo; Suzuki, Itaru; Shibata, Ryo-ya - *Organic and Biomolecular Chemistry*, 2016, vol. 14, # 1, p. 1107 - 1114

Abstract

A tin-catalyzed reaction of *o*-hydroxy ketones with 1,1-dicyanoalkenes produced 2-amino-4,5-dihydrofuran-3-nitriles. In the catalytic reaction, tin enolates were generated from *o*-hydroxy ketones as active catalytic species. The highly basic ability of the Sn-O bonds played an important role in the reactions. This tin-catalyzed reaction was highly atom-economical and required no other *in situ* reagents.

Index terms

Compounds Terms: 2-hydroxy ketones, [Catalytic reactions](#), Catalytic species, [Catalyzed reactions](#), Enolates

Compounds Terms: [Catalysis](#), Chemical reactions, Tin

Reaxys Index Terms: [catalyst](#), [catalytic reaction](#), [cycloaddition](#)

Extração

## Registro da substância

piperidine

C4H10N 85.149 10248 110-89-4

Identification      Physical Data - 955      Preparations - 528 >

Druglikeness      Spectra - 139      Reactions - 46,234 >

Bioactivity (Al)      Other Data - 95      Targets - 7 >

Documents - 25,353 >

piperidine

Identification

Druglikeness

## Registro da reação

Reaction ID: 43421770

Find Similar >

ID	Conditions	References
A 3396	With palladium diacetate, triethylamine, triphenylphosphine at 100°C, under 750-875 Torr, for 24h; inert atmosphere.	Takase, Atsiko; Maruyama, Hisao; Kohji, Hirotaka; Demizu, Kazumasa; Kato, Takao; Imai, Naoyuki; Komatsu, Naoki; Inoue, Masaru; Kuroda, Masahito - <i>Organic and Biomolecular Chemistry</i> , 2016, vol. 14, # 1, p. 1107 - 1114

Experimental Procedure >

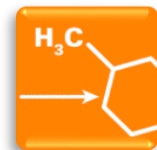
General procedure: In a typical experiment Pd(OAc)<sub>2</sub> (3.0 mg, 0.055 mmol), triisobutylphosphine (3.3 mg, 0.055 mmol), 7-iodoindole (24.0 mg, 0.110 mmol), 2-hydroxyacetone (32.0 mg, 1.00 mmol), acrylo nitrile (2.00 mmol) of 0.2 mmol of 1, 1, 1-trifluoroethane (0.2 mL) were dissolved in DMSO (20 mL) under argon in a three-necked flask equipped with a gas inlet, reflux condenser with a balloon (filled with argon) at the top. The atmosphere was changed to carbon monoxide. The mixture was sonicated for the given reaction time upon stirring at 100°C and analyzed by GC-MS (internal standard: naphthalene). The mixture was then concentrated and evaporated to dryness. The residue was dissolved in chloroform (20 mL) and washed with water (20 mL). The organic phase was dried over Na<sub>2SO</sub>4, filtered and evaporated to a residue. Residual or a very viscous oil compounds were subjected to column chromatography (Silagel 60 (Merck), 0.063-0.200 mm), EtOAc/hexane, or hexane/EtOAc. The exact ratios are specified in Section Characterization Data for each compound.

- Pesquisa de substâncias:
  - Estrutura;
  - Nome;
  - Propriedades físico-químicas e de bioatividade;
- Pesquisa de reações:
  - Estrutura;
  - Texto;
  - Condições;
- Busca e recuperação de informação e bibliografia:
  - Estrutura;
  - Tipo de publicação;
  - Ano;
  - Autor;
  - Palavras-chave;
- Informação sobre disponibilidade comercial;
- Criação de alertas.





ELSEVIER



ReactionFlash by Reaxys®  
Named Chemical Reactions



# Muito obrigada!

Dra. María José Dávila-Rodríguez

Customer Consultant

✉ [m.davilarodriguez@elsevier.com](mailto:m.davilarodriguez@elsevier.com)

📷 @ElsevierPesquisa    📘 Elsevier Pesquisa    🐦 @ElsevierPesquisa

🌐 Elsevier Pesquisa    📺 Elsevier Pesquisa

