



Reaxys[®] Medicinal Chemistry

Guía de Inicio Rápido



Febrero de 2021

Bienvenido a su Guía de Inicio Rápido de Reaxys Medicinal Chemistry.

Reaxys Medicinal Chemistry es una solución web sin Java que se ejecuta en navegadores modernos. Existe una amplia variedad de navegadores disponibles. El equipo de Reaxys ha probado el sistema en los siguientes navegadores:

- Firefox (versión 49 o superior)
- Chrome (versión 53 o superior)
- Edge (versión 14 o superior)
- Safari (versión 9 o superior)
- Internet Explorer (versión 11)

Recomendamos utilizar uno de estos navegadores para lograr el mejor rendimiento. Si bien Reaxys Medicinal Chemistry se puede ejecutar en otros navegadores, es posible que algunas características y funcionalidades no operen correctamente.

Comuníquese con nosotros si tiene alguna inquietud sobre la compatibilidad con el navegador.



NOTA para todos los usuarios: Recomendamos no utilizar complementos ni extensiones o al menos reducir su número al mínimo absolutamente necesario. Todos estos componentes influyen en el rendimiento y el uso de la memoria de un navegador.

NOTA para los usuarios de Google Chrome: asegúrese de tener al menos 2 GB de espacio libre en el disco duro para obtener el rendimiento óptimo de Reaxys.

Búsqueda rápida

Navegue fácilmente entre **Búsqueda rápida**, **Generador de consultas**, **Resultados**, **Planificador de síntesis**, **Historial** y **Alertas**.

Cree un perfil de usuario para habilitar la visualización de resultados personalizados (visitas por página), alertas y búsquedas guardadas.

La opción de **búsqueda rápida** por texto acepta el uso de palabras clave* en lenguaje coloquial.

Truncamientos y comodines también pueden ser usados.

Haga clic en el signo de interrogación para acceder al Centro de Soporte de Reaxys, en dónde encontrará guías, material de capacitación y una lista con las preguntas más frecuentes.

Arrastre su archivo de estructura o haga clic aquí para buscarlo e importarlo.

The screenshot shows the Reaxys 'Quick search' interface. At the top, a navigation bar includes 'Quick search' (highlighted with an orange box), 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', 'History', and 'Alerts'. Below this is a header section with the text 'Search substances, reactions, documents and bioactivity data' and a list of sources: 'in Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork, SigmaAldrich and Commercial Substances'. The main search area features a 'Search Reaxys' input field with a 'Find >' button. Below the input field, an example search is shown: 'Substance ADME, e.g. Pharmacokinetic of Imatinib' followed by 'AND' and a 'Draw' button with a chemical structure icon. In the top right corner, there are icons for a user profile and a help/question mark. An 'Import' button with a cloud icon is also visible. Orange arrows point from the surrounding text blocks to these specific elements: the navigation bar, the search input field, the 'Draw' button, the user profile icon, the help icon, and the 'Import' button.

La **búsqueda por estructura** permite dibujar estructuras y reacciones químicas. Úsela como consulta principal o combínela con palabras clave* para una búsqueda más precisa. Consulte la Guía de Inicio Rápido de Reaxys para obtener más información sobre esta herramienta de búsqueda.

Búsqueda rápida: Vista previa de los resultados

Una vez ingresada la consulta haga clic en **Buscar**.

Search for pharmacokinetic of imatinib

Search Reaxys

pharmacokinetic of imatinib

Cell Lines Name, e.g. HEK293

AND

Draw

6 Targets Structure as drawn AND Bioassay Category pharmacokinetic

Top 3 results

Single protein
Cytochrome P450 2C8 (human, Wild)
Synonyms: ngbilb, opiolb, cytochrome p450 2c8, cytochrome p450 form L, cytochrome p450 2c2, cytochrome p450 mp-12, <2 more
Mutagenesis Details: Wild
UniProt: p20632
Show target details

Example structure

Substances: 1
Documents: 2

No quantitative value reported

Single protein
Cytochrome P450 2C8*3 (human, Wild)
Synonyms: cytochrome p450 2c8*3
Mutagenesis Details: Wild
Show target details

Example structure

Substances: 1
Documents: 1

No quantitative value reported

Single protein
Cytochrome P450 2C8*4 (human, Wild)
Synonyms: cytochrome p450 2c8*4
Mutagenesis Details: Wild
Show target details

Example structure

Substances: 1
Documents: 1

No quantitative value reported

Reaxys analiza la consulta ingresada en Búsqueda rápida y proporciona opciones basadas en la interpretación de la misma (en este caso Objetivos*, Sustancias, Documentos y Sustancias Comerciales. La opción Reacciones también puede encontrarse con los términos de búsqueda apropiados).

Results for pharmacokinetic of imatinib

6	Targets	Structure as drawn AND Bioassay Category pharmacokinetic	Preview Results View Results
6	Substances	Structure as drawn AND Bioassay Category pharmacokinetic	Preview Results View Results
1,394	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: "pharmacokinetic", "imatinib"	Preview Results View Results
446	Substances	Structure as drawn	Preview Results View Results
411,530	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: "pharmacokinetic"	Preview Results View Results
37,541	Documents	Titles, Abstracts, Keywords: "imatinib"	Preview Results View Results
7	Commercial Substances	Structure as drawn	Preview Results View Results

Para ver los tres resultados principales de una opción haga clic en **Previsualizar resultados**.

Para ver todos los resultados de una opción haga clic en **Ver resultados**.

Generador de Consultas: Panel de Campos, Formularios e Historial

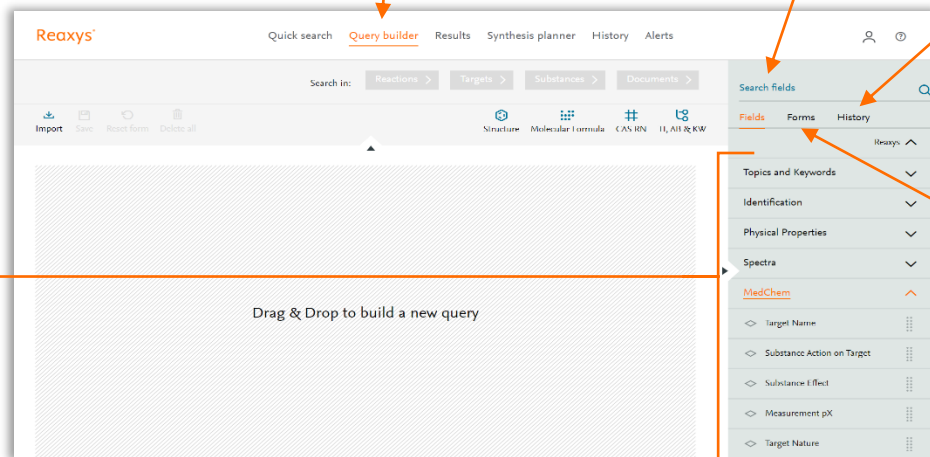
Para abrir el **Generador de consultas** haga clic aquí.

Para buscar **Campos** o **Formularios** de búsqueda, ingrese palabras clave* aquí. Por ejemplo, "target" ayudaría a encontrar todos campos relacionados con los objetivos moleculares.

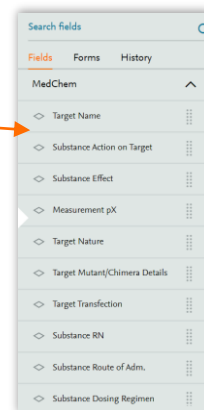
Para visualizar búsquedas recientes y guardadas haga clic en **Historial**. Estas búsquedas se pueden reutilizar en el **Generador de consultas** combinándolas entre sí o con otros campos de búsqueda.

La vista inicial muestra las diferentes categorías disponibles de campos de búsqueda.

Existe una gran variedad de campos de búsqueda de química medicinal con parámetros diseñados para garantizar la precisión en la obtención de resultados.



Para acceder a formularios de búsqueda predefinidos o personalizados, incluyendo varios formularios enfocados en química medicinal, haga clic en **Formularios**.



Generador de Consultas

Guardar le permite guardar la consulta para reutilizarla más tarde.

Los campos y formularios seleccionados aparecen en el área de trabajo principal del **Generador de consultas**.

Una vez ingresada la consulta haga clic en buscar por **Reacciones**, **Objetivos**, **Sustancias** o **Documentos**.

The screenshot shows the Reaxys Query builder interface. Annotations include:

- An arrow pointing to the 'Save' icon in the top toolbar.
- An arrow pointing to the 'Reactions' tab in the 'Search in:' dropdown.
- An arrow pointing to the 'Target Name' field in the query builder.
- An arrow pointing to the 'Substance Action on T...' field in the query builder.
- An arrow pointing to the 'Substance Route of Adm...' field in the query builder.
- An arrow pointing to the 'Search fields' list on the right, specifically to 'Target Nature'.
- An arrow pointing to the 'Search fields' list on the right, specifically to 'Target Mutant/Chimeric Details'.

Below the screenshot, there is a box for logical operators:

AND

OR

• AND

NOT

NEAR

NEXT

PROXIMITY

HAGA CLIC PARA AÑADIR OPERADORES LÓGICOS:

- OR (O): contiene datos de al menos uno de los campos.
- AND (Y): contiene datos de ambos campos.
- NOT (NO): contiene los datos del primer campo y excluye los del segundo.
- PROXIMITY (PROXIMIDAD): asegura que el contenido de ambos campos se relacione entre sí (generalmente se usa con campos de parámetros, por ejemplo, punto de fusión y solvente).

Defina los criterios de búsqueda* aquí.

Nota: Si un campo o formulario contiene varios parámetros, estos se combinan automáticamente mediante el operador PROXIMIDAD.

Documentos: Página de Resultados

Utilice las opciones de **Filtros** para restringir los resultados. Puede emplear las opciones de **Limitar** o **Excluir**.

La clasificación predeterminada es por año de publicación descendente. Otras opciones disponibles son:

- Relevancia. | • Tipo de documento. | • Citado por.

Utilice los **Términos indexados (lista)** y/o los **Términos indexados (ReaxysTree)** para filtrar documentos por tema.

Haga clic en el nombre de un autor para explorar detalles sobre sus publicaciones y obtener opciones de análisis adicionales en **Scopus®**.

The screenshot shows the Scopus search results interface. On the left is a 'Filters' sidebar with options like 'Limit to', 'Exclude', 'Index Terms (List)', 'Index Terms (ReaxysTree)', 'Publication Year', 'Document Type', 'Authors', 'Patent Assignee', 'Patent Office', 'Journal Title', 'Substance Classes', and 'Reaction Classes'. There is also a checkbox for 'Manually processed content only'. The main area displays '1,394 Documents with 6,528 Substances, 7,192 Reactions, 1,449 Targets'. It includes a toolbar with 'Limit', 'Exclude', and 'Export' buttons, and a 'Publication Year' dropdown set to 'v'. A 'Heatmap' button is also present. The results list shows three entries, each with an abstract hit and index terms hit. Annotations with orange arrows point to various elements: one to the 'Filters' sidebar, one to the 'Export' button, one to the 'Publication Year' dropdown, one to the 'Heatmap' button, and one to the author name 'Murdoch, Joshua L.' in the first result.

Haga clic aquí para abrir el **Mapa de Calor** de los objetivos y/o las sustancias en estos documentos.

Exportar resultados:

- Haga clic en **Exportar** en la barra de herramientas.
- Defina el formato, rango, datos a exportar y las opciones adicionales.
- Haga clic en Exportar: el progreso se mostrará en la parte inferior derecha de la pantalla.
- Cuando se complete la exportación, haga clic en **Descargar**.

Nota: Para seleccionar resultados individuales, utilice las casillas de verificación.

Objetivos: Página de Resultados

Utilice estos enlaces para ir directamente a la sustancia a la que se hace referencia en este registro o a los documentos fuente de esta información.

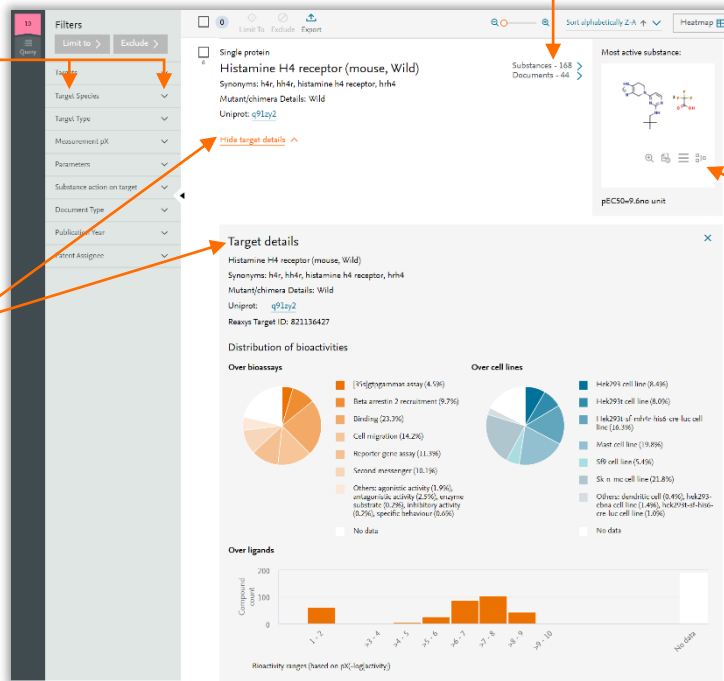
Haga clic en el texto o en la flecha para expandir el filtro.

Haga clic en **Mostrar detalles del objetivo** para ver la distribución de bioactividades.

Haga clic aquí para abrir el **Mapa de calor** de los objetivos y/o sustancias.

Pase el puntero sobre la estructura para revelar el **Carrito de compras**, el enlace al **Planificador de síntesis** y otras opciones.

Haga clic en el **Carrito de compras** para ver la información de disponibilidad de esta sustancia.
Haga clic en el **Planificador de síntesis** para planear manual o automáticamente la ruta sintética de esta sustancia.



Usando filtros

1. Haga clic en el texto o en la flecha para expandir el filtro.

2. Haga clic en **Ver más** para mostrar opciones de filtro adicionales.

3. Haga clic en **Limitar** para ver únicamente los resultados concernientes a la tasa o porcentaje de unión o **Excluir** para ver todos los resultados excepto los concernientes a la tasa o porcentaje de unión.

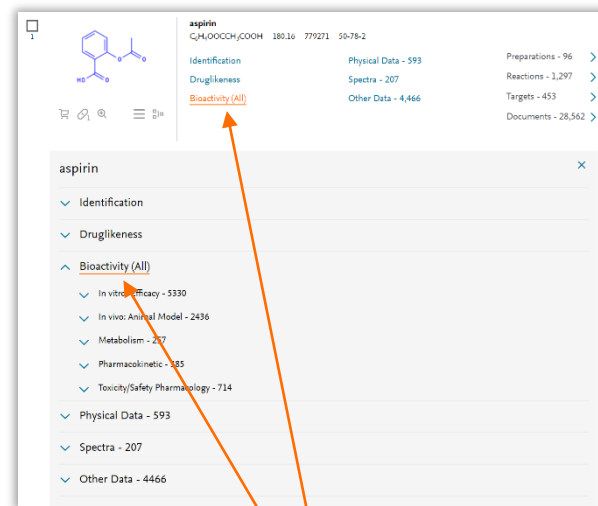
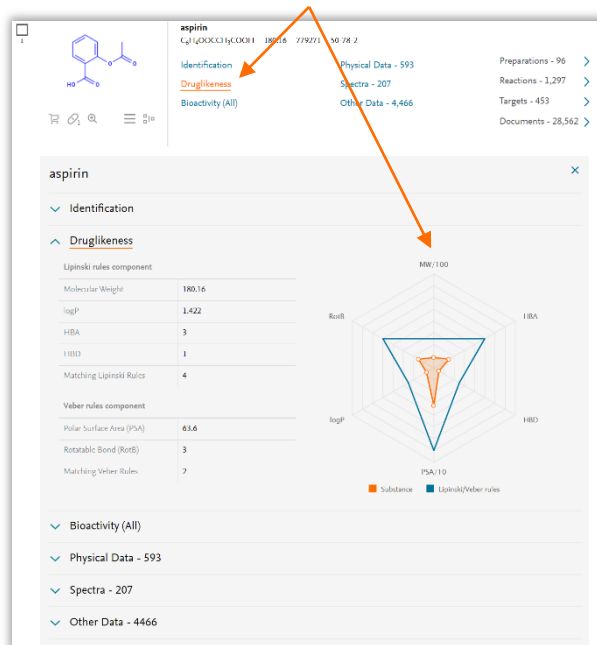
The screenshot displays a web application interface for filtering search results. The interface is divided into three main sections:

- Filters (Left Sidebar):** Contains a list of filters with expand/collapse arrows. The 'Parameters' filter is expanded, showing a list of parameters with checkboxes and counts. The 'View more' link is visible at the bottom of the list.
- 30 Targets (Main List):** Displays a list of targets with their names, synonyms, and details. The first target is 'Protein complex - 4', which includes 'G-alpha i 2 subunit (Wild)', 'G-protein gamma 2 subunit (Wild)', and 'Histamine H4 receptor (human, Wild)'. The second target is 'Protein complex - 2', which includes 'Histamine H3 receptor (human, Wild)'. The 'Show target details' link is visible at the bottom of the list.
- Parameters (Right Panel):** A detailed view of the 'Parameters' filter, showing a list of parameters with checkboxes and counts. The 'binding rate' and 'binding percentage' parameters are selected. The 'Limit to' and 'Exclude' buttons are visible at the bottom.

Orange arrows indicate the steps described in the text: 1. Clicking on the 'Parameters' filter to expand it. 2. Clicking on the 'View more' link to show additional filter options. 3. Clicking on the 'Limit to' button to filter results by the selected parameters.

Información sobre Bioactividad de Sustancias

En el registro de una sustancia, haga clic en **Druglikeness** para obtener datos sobre el perfil de fármaco de la misma, incluyendo una representación gráfica de las reglas de Lipinski/Verber



Haga clic en **Bioactividad** para ver la eficacia, toxicidad, perfil metabólico y farmacocinético de la sustancia.

Mapa de Calor

Se ofrecen varias opciones para trabajar con el **Mapa de calor**, que incluyen limitar y excluir las columnas seleccionadas, exportar los resultados, cambiar la configuración de la pantalla, activar o desactivar el panel del **Navegador** y activar o desactivar la leyenda asociada a los colores.

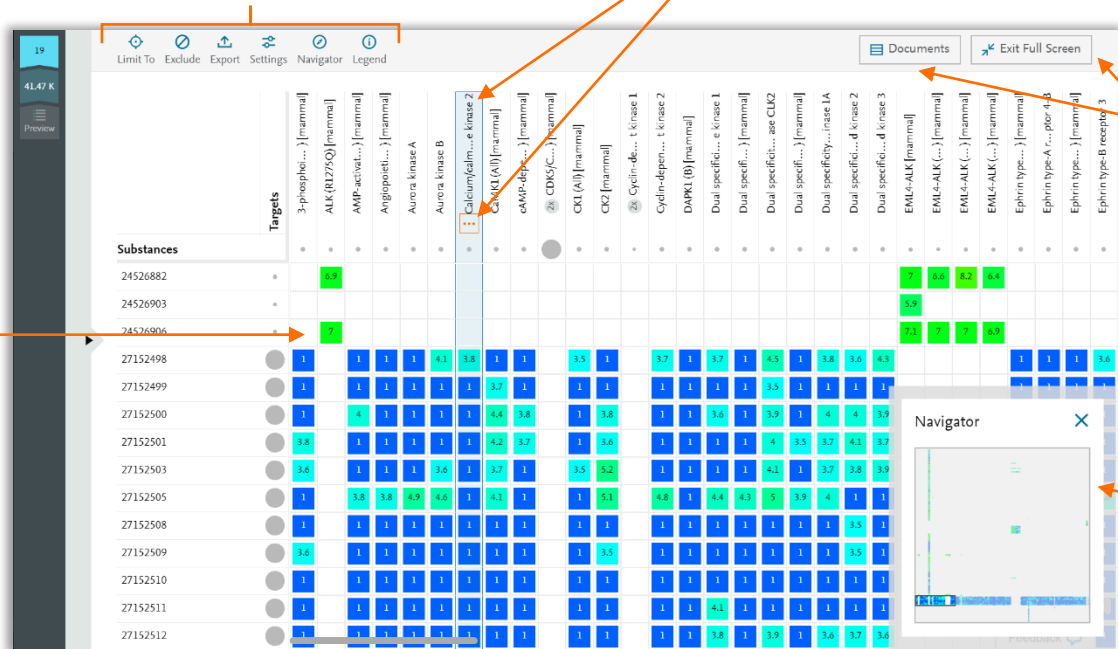
Seleccione un objetivo o sustancia para resaltar su columna o fila. Al hacer clic en los tres puntos al lado de los nombres se exhibe un menú que permite ordenar el mapa de calor por actividad, limitar los resultados a la selección, excluir la selección, entre otros.

El **Mapa de calor** relaciona las **sustancias** (en este ejemplo en el eje Y) con los **objetivos** (en este ejemplo el eje X) en términos de la fuerza de su interacción (afinidad relativa).

En el **Mapa de calor**, a todas las sustancias se les asignan **valores pX** estandarizados. Estos representan el valor relativo de afinidad de la sustancia por el objetivo.

Colores "más calientes" de pX representan una mayor afinidad.

Si no se conocen interacciones publicadas entre una sustancia y el objetivo, no se da ningún valor.



Active o desactive la vista de **pantalla completa** o vuelva a los resultados de **Objetivos**, **Sustancias** o **Documentos**.

Al salir de la vista de pantalla completa se abrirá el panel de **Filtros** al lado izquierdo de la pantalla.

El **Navegador** muestra el mapa de calor completo y permite explorar áreas con conglomerados de resultados interesantes.



ELSEVIER

Reaxys® Medicinal Chemistry

Inicie sesión en <https://www.reaxys.com>.

Visite el [Centro de soporte de Reaxys](#) para obtener más información útil sobre el uso de Reaxys.

 @elsevierlatam  @ElsevierLATAM
 @ElsevierLATAM  Elsevier LATAM

REAXYS es una marca comercial de RELX Intellectual Properties SA, utilizada bajo licencia. Scopus es una marca comercial de Elsevier BV Copyright © 2017, Elsevier BV
Febrero 2021



ReactionFlash by Reaxys®
Named Chemical Reactions

