

FECHA

focused

PRESENTACIÓN DE REAXYS 2014

¿QUÉ INCLUYE UN DOCUMENTO TÍPICO DE QUÍMICA (PUBLICACIÓN O PATENTE)?

Tema científico, autor

ELSEVIER Journal of Physical Chemistry Letters 294 (1998) 499–506

LETTERS

Se puede buscar como texto completo, pero resulta difícil buscar el término de búsqueda correcto

Received 4 June 1998

Abstract

Dimers constituting differing porphyrin basicities undergo selective demetallation or protonation of one unit of the dimer. The efficiency of singlet excited energy transfer from neutral free-base/zinc(II) porphyrin to diprotonated porphyrin unit could be fine tuned by varying acidity in the covalently linked dimers. © 1998 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Covalently linked porphyrin dimers have furnished important models to elucidate mechanisms of excitation energy transfer and photoinduced electron transfer in natural photosynthetic processes [1–8]. In addition, some of these models are potentially important materials for use in molecular-scale electronic devices [9–11]. Recently, a molecular optoelectronic gate consisting of an array of porphyrins has been reported [12]. Two basic photophysical properties have been exploited in the design of molecular devices, (i) singlet–singlet energy transfer and (ii) photoinduced electron transfer. We made use of the differential basicity of the inner imino nitrogens of the meso-fluoroarylporphyrin and meso-tetraethylporphyrin to construct simple dimeric porphyrins wherein absorption of a photon of visible light by a neutral porphyrin leads to an emission of a photon from diprotonated porphyrin with very high efficiency ($\phi > 95\%$). The occurrence of such processes can be easily tuned by the acidity of the medium, fundamentals of which could be used in the construction of artificial photonic devices.

The substitution of pentafluoroaryl groups in the meso positions of the porphyrin confers unique inertness of the inner imino nitrogens towards protonation and metallation reactions. The fluorinated porphyrins exhibit interesting optical and electrochemical properties [13]. We synthesised porphyrin dimers (Fig. 1) comprising of meso-fluoroarylporphyrin and meso-tetraethylporphyrin which are covalently linked to each other through a covalent bridge to accommodate the differential basicity of the imino nitrogens in the dimeric porphyrin molecule.

Corresponding author. Department of Inorganic and Physical Chemistry, Indian Institute of Science, Bangalore 560012, India. E-mail: vkpsc@ipc.iisc.ernet.in

A. Sen, V. Krishnan / Chemical Physics Letters 294 (1998) 499–506

No se puede buscar por términos como texto completo

Estructura química

Reacciones químicas

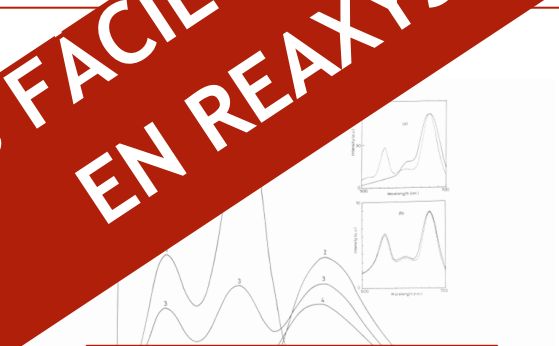
No se puede buscar por términos como texto completo

$$\text{ZnF}_5\text{-H}_4+2\text{H}_5\text{ DM} \xrightarrow{\text{H}^+} \text{H}_4+2\text{F}_5\text{-H}_4+2\text{H}_5\text{ DM} \xleftarrow{\text{H}^+} \text{ZnF}_5\text{-H}_4+2\text{H}_5\text{ DM}$$

pk < 0.1

$\text{ZnF}_5\text{-H}_4+2\text{H}_5\text{ DM} \xrightarrow{h\nu} \text{ZnF}_5\text{-H}_4^+ + 2\text{H}_5\text{ DM}^{\bullet-}$

Fig. 2. Schematic representation of the photoinduced electron transfer process.



No se puede buscar por términos como texto completo

Fig. 3. The fluorescence emission spectra (λ_{exc} at 290 nm) of (a) ZnF₅-H₄-CH₂-CH₂-MeOH, (v/v) (1) ZnF₅-OCH₃, (2) ZnH₂-OCH₃, (3) intermolecular mixture of ZnF₅-OCH₃ and ZnH₂-OCH₃, and (4) ZnF₅-ZnH₂ DM. Inset shows the comparison of the corrected excitation spectrum (solid line) and absorption spectrum (dotted line) of the (i) intermolecular mixture of ZnF₅-OCH₃ and ZnH₂-OCH₃, and (ii) ZnF₅-ZnH₂ DM.

Espectros químicos

2. Experimental

...d porphyrin dimer was synthesized by the method of Little [14]. We have used 10,15,20-triphenylporphyrin (mesityloxyphenyl)-10,15,20-triphenylporphyrin (H₂F₅OCH₃) as reference porphyrin for comparison studies. Hereafter the porphyrins will be designated as tetraethylporphyrin (TEHP) and pentafluoroarylporphyrin (PFAP). The porphyrins were characterised by UV–VIS, ¹H-NMR

Se puede buscar como texto completo, pero usted no desea leer todo el ensayo, ya que solo le interesa esta sección

Procesos experimentales

Compound	λ_{abs} (nm; log ϵ) ^a	λ_{em} (nm) ^b
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707

Table 1
Optical data

Compound	λ_{exc} (nm)	λ_{em} (nm)	ϕ_{ET} (%)	τ_{exc} (ps)	τ_{em} (ns)	τ_{ET} (ps)
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₂	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₂	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₂	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₂	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₃	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100
H ₂ F ₅ OCH ₂	415(5.45), 509(4.28), 543(3.60), 584(3.82), 640(3.23)	644, 707	95	100	1.1	100

^a In 1:1 (MeOH/v/v).

^b In 1:1 (MeOH/v/v).

^c In 1:1 (MeOH/v/v).

^d Electrochemical redox data of the porphyrins in CH₂Cl₂, solution containing 0.1 M TBAAP. Potential values are referenced to internal Fe³⁺/Fe couple. All the potentials observed involve one electron oxidation/reduction processes unless otherwise mentioned.

^e In presence of TFA acid.

^f Involves more than one electron process.

Sustancias y sus propiedades fisicoquímicas

¿QUÉ ES REAXYS 2014?

CONTENIDO: MUCHAS BASES DE
COMPILADAS EN UNA SOLA

Una base de datos bibliográfica

Más de 46 millones
de registros
(provenientes de
aproximadamente 16 000
títulos de publicaciones más
registros de organizaciones
de patentes claves)

Una base de datos de sustancias

Más de 78 millones de
sustancias (en total)
Aproximadamente
57 millones de sustancias
(únicas)

Reaxys
2014

Una base de datos de reacciones químicas

Más de 36 millones de
reacciones de un solo paso
y de varios pasos

Una base de datos de propiedades

Más de 500 millones de
propiedades experimentales
de más de 400 campos de
más de 130 áreas temáticas

BUSQUEDA

- ¿Cuáles son las opciones de búsqueda?
- Sustancias
- Reacciones
- Bibliografía
- Propiedades
- ¿Existe “búsqueda inteligente”?
- Truncamiento
- Proximidad
- Interpretación algorítmica de la consulta de lenguaje natural

BÚSQUEDA

REAXYS: BÚSQUEDAS MÁS SIMPLES, MÁS INFORMACIÓN DETECTABLE

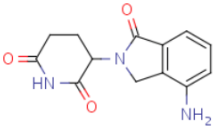
The screenshot shows the REAXYS website interface. At the top, there is a navigation bar with links: Query, Results, Synthesis Plans, History, Report, My Alerts, My Settings, Help, Register, and Login. Below the navigation bar is a search bar with the text "Ask Reaxys" and "Enter a keyword, concept or author". Below the search bar is a row of five main search categories: Reactions, Substances, Names, Formulas, Medicinal Chemistry, Literature, and ReaxysTree. Below these categories is a section for "You can also search directly by these common property groups:" with buttons for Chemical, Spectra, Natural Products, and Advanced. Callout boxes point to various features: "Preguntar a REaxys, una 'búsqueda de conceptos' por temas fácil y rápida" points to the search bar; "Abrir formulario de búsqueda Reacciones" points to the Reactions category; "Formulario de búsqueda de datos por 'propiedad'" points to the property group buttons; "Abrir una estructura formulario de búsqueda" points to the Substances, Names, Formulas category; "Buscar mediante identificadores químicos" points to the Medicinal Chemistry category; "Acceso a Biodata detallada y a funciones específicas de MedChem" points to the Medicinal Chemistry category; "Realizar una búsqueda bibliográfica" points to the Literature category; and "Explorar la base de datos mediante taxonomías en lugar de buscar en la base de datos" points to the ReaxysTree category.

BUSCAR SUSTANCIAS

BUSCAR ESTRUCTURA, NOMBRE O FÓRMULA, TEXTO COMPLETO O PARTE

ESTRUCTURA

Structure



As drawn
 Substructure
 on heteroatoms
 on all atoms
 Similarity

By name translation EDIT ...CLEAR...

Create Structure Template from Name

- Include tautomers
 - Ignore stereo
 - No salts
 - No mixtures
 - No isotopes
 - No charges
 - No radicals
 - No ring closures
 - Align results with query
- More options
- Include related Markush
 - Keep fragments
 - separate together
 - (type values in fields e.g. 3-5)
 - # of Atoms
 - # of Fragments
 - # of Ring Closures

Como está dibujado ✓

Subestructura ✓

Similitud ✓

NOMBRE QUÍMICO

Chemical Name Lookup ✕

Chemical Name Segment Lookup ✕

Reaxys PubChem eMolecules

Search for: TAXOL

- taxol (1203)
- taxol174 (1)
- taxoleic (2)
- taxolformate (1)
- taxoprexin (1)
- taxoquinon (1)
- taxotere (94)
- taxoterereg (1)
- taxpropellane (1)
- taxtgcacatgc (2)
- taxuchin (2)
- taxucustin (1)
- taxumaiglucoside (3)
- taxumain (2)
- taxumairin (1)
- taxumairol (31)
- taxumairone (1)
- taxus (56)
- taxusabietane (3)
- taxusecone (1)

Transfer

Reset

Cancel

Nombre químico ✓

Parte del nombre químico ✓

Reaxys ayuda sobre la marcha ✓✓

FÓRMULA

Molecular Formula Lookup ✕

Search MF Range Lookup ✕

Element Counts Lookup ✕

Element Symbols Lookup ✕

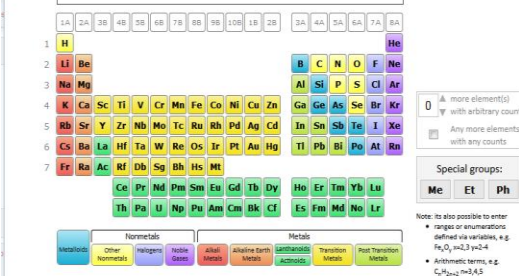
Number of Atoms Lookup ✕

Number of Elements Lookup ✕

Generador de fórmulas: forma simple de buscar sustancias en la Tabla periódica

Formula Builder

Click any element, group, or series to start building your query:



Special groups: Me Et Ph

Note: It is also possible to enter ranges or enumerations defined via variables, e.g. Fe₀₋₂, m=2-4
* Acronymic terms, e.g. C₂H_{2n-2}, m=3,5

Fórmula ✓

Parte de la fórmula ✓

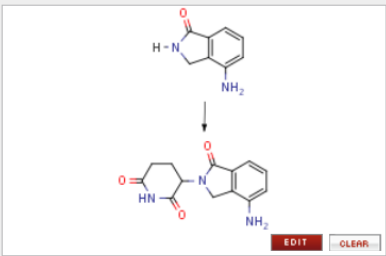
Reaxys ayuda sobre la marcha ✓✓

BUSCAR REACCIONES

BUSCAR POR ESTRUCTURA, DATOS O TIPO

ESTRUCTURA

Structure



As drawn
 Substructure
 on heteroatoms
 on all atoms
 Similarity

Create Structure Template from Name

Please select role Product Starting material Reagent / Catalyst Any role

Mapeo atómico
Formación/ruptura
de enlaces

Buscar reacciones
por estructura



DATOS

Reaction Data

Yield (numerical)	=		Lookup X
Solvent	is		Lookup X
Reagent/Catalyst	is		Lookup X
Time (h)	=		Lookup X
Temperature (°C)	=		Lookup X
Pressure (Torr)	=		Lookup X
Reaction Type	is		Lookup X
Reaction Basic Index	is		Lookup X

Buscar reacciones
por condiciones



TIPO

Reaction Data

Reaction Type is starts with ends with contains ✓
SONOGASHIRA Lookup X

Reaxys

Search for: SONOGASHIRA

- sonogashira (13)
- sonogashira coupling (1)
- sonogashira cross-coupling reaction (5)
- sonogashira reaction (1)
- sonogashira -hagihara coupling (5)
- sonogashira alkylation (1)
- sonogashira alkylation (49)
- sonogashira and castro reaction (1)
- sonogashira carbonylation (1)
- sonogashira condensation (4)
- sonogashira conditions (1)
- sonogashira contions (1)
- sonogashira couplig reaction (6)
- sonogashira coupling (18540)
- sonogashira coupling - wittig reaction (3)
- sonogashira coupling reaction (1152)
- sonogashira coupling-benzannulation reaction (13)
- sonogashira coupling-cyclization (29)
- sonogashira coupling-isomerization reaction (28)
- sonogashira coupling-michael addition-cyclocondensation-sulfur extrusion

Transfer
Reset
Cancel

Buscar reacciones
por tipo o nombre



BUSCAR BIBLIOGRAFÍA

NUESTRO OBJETIVO: HACER QUE EL CONTENIDO SEA MÁS DETECTABLE, MÁS FÁCILMENTE.

Pregúntele a Reaxys

Ask Reaxys

BETA

Enter a keyword, concept or author

Pregúntele a Reaxys proporciona experiencia nueva para el usuario en materia de búsqueda de textos: contenido más fácilmente detectable, respuestas disponibles de forma más inmediata

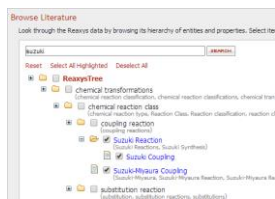
Interpretación inteligente de la consulta temática



Árbol de Reaxys

ReaxysTree

BETA



ReaxysTree permite que los usuarios “exploren” la base de datos por taxonomías: ayuda con la precisión de la búsqueda y la comprensión de las respuestas

Explorar taxonomías



Usted ejerce el control

Bibliographic Data

Document Type	is	<input type="text"/>	Lookup X
Authors	is	<input type="text"/>	Lookup X
Common Patent Number	is	<input type="text"/>	Lookup X
Patent Country Code	is	<input type="text"/>	Lookup X
Journal Title	is	<input type="text"/>	Lookup X
Publication Year	=	<input type="text"/>	Lookup X
DOI	is	<input type="text"/>	Lookup X
Title	is	<input type="text"/>	Lookup X
Abstract	is	<input type="text"/>	Lookup X
Keywords	is	<input type="text"/>	Lookup X
Citation Basic Index	is	<input type="text"/>	Lookup X

Show AND Buttons

También se puede buscar con truncamiento o proximidad; como se hace en otras interfaces

Usar truncamiento o proximidad si se desea



BUSCAR PROPIEDADES

MÁS DE 500 MILLONES DE PROPIEDADES EXPERIMENTALES, MÁS DE 400 CAMPOS, MÁS DE 130 ÁREAS TEMÁTICAS

PREPROGRAMADO

The Preprogramado interface features three main categories: Physical, Spectra, and Natural Product. Below these are icons for Substances, MedChemistry, Literature, ReaxysTree, Physical, Spectra, and Natural Product. A list of search fields is provided, each with a checkbox and a 'Lookup' button:

- NMR Spectroscopy exists
- Nucleus Lookup
- IR Spectroscopy exists
- Description Lookup
- Mass Spectrometry exists
- Description Lookup
- UV/VIS Spectroscopy exists
- Description Lookup
- ESR Spectroscopy exists
- Description Lookup

At the bottom, there are buttons for Structure, Molecular Formula, Alloy, and Add/Remove Fields...

GENERE SU PROPIO

The Genere Su Propio interface allows users to create custom search queries. It features a search bar and a list of properties to select from:

- Ecological Data
 - Exposure Assessment exists
 - Concentration in the Environment exists
 - Transport and Distribution exists
 - Bioaccumulation, Biomagnification and Biomonitoring exists
 - Biodegradation exists
 - Abiotic Degradation, Hydrolysis exists
 - Abiotic Degradation, Photolysis exists
 - Stability in Soil exists
 - Oxygen Demand exists
 - Use/Application
- Exposure Assessment (in Reaxys)
- Bioaccumulation, Biomagnification and Biomonitoring (in Reaxys)
- Biodegradation (in Reaxys)
- Stability in Soil (in Reaxys)
- Oxygen Demand (in Reaxys)

Buttons for Add >>, Remove, Remove all, and Add Default are available. A 'Save' button is at the bottom right.

Below the selection area, a summary of the selected properties is shown with checkboxes and 'x' icons:

- Exposure Assessment exists
- Bioaccumulation, Biomagnification and Biomonitoring exists
- Biodegradation exists
- Stability in Soil exists
- Oxygen Demand exists

Buttons for Show AND Buttons, Add to Query, Structure, Molecular Formula, Alloy, and Add/Remove Fields... are at the bottom.

MedChem

The MedChem interface is designed for medicinal chemistry searches. It features a list of search fields, each with a dropdown menu and a 'Lookup' button:

- Substance Route
- Bioassay Category
- Putative action on target
- Effect
- Cells/Cell lines
- Organs/Tissues
- Target Name
- Target Subunit Name
- Target Nature
- Species
- pH

Buttons for Show AND Buttons, Add to Query, Structure, Molecular Formula, and Add/Remove Fields... are at the bottom.

Below the search fields, there is a section for 'Select index items and click Transfer':

Reaxys
Search for: STREP

- streptallotheichus hindustanus (12)
- streptobacillus (40)
- streptococcus (856)
- streptococcus 72 (5)
- streptococcus acidominimus (4)
- streptococcus agalactiae (3015)
- streptococcus alactolyticus (12)
- streptococcus albus (11)
- streptococcus alvarez (5)
- streptococcus anginosus (71)
- streptococcus aranson (2)
- streptococcus aureus (33)
- streptococcus bovis (97)
- streptococcus capitis (20)
- streptococcus constellatus (57)
- streptococcus cristatus (2)
- streptococcus defectivus (2)
- streptococcus durans (27)
- streptococcus dysgalactiae (296)
- streptococcus entericus (56)

Buttons for Transfer, Reset, and Cancel are at the bottom right.

PROPIEDADES



fácil de configurar

CONTENIDO



fácil de buscar

CAMPOS



QUÉ NECESITAN LOS CIENTÍFICOS DE UN SISTEMA DE BÚSQUEDA

¿DE QUÉ MANERA CLASIFICA REAXYS 2014?

Función		
BÚSQUEDA	RESPUESTAS	POSPROCESO
<ul style="list-style-type: none">• ¿Cuáles son las opciones de búsqueda?• Sustancias• Reaccion• Bibliogra• Propiedad• ¿Existe “búsqueda inteligente”?• Truncami• Proximida• Interpret	<ul style="list-style-type: none">• ¿Cómo se muestran las respuestas?• ¿Qué tan fácil es pasar de una respuesta	<ul style="list-style-type: none">• ¿Existen formas sistemáticas de realizar lo siguiente?• Acotar las respuestas
<ul style="list-style-type: none">• Interpretación algorítmica de la consulta de lenguaje natural		<ul style="list-style-type: none">• y subcategorías

DESEAMOS QUE REAXYS 2014 SEA DE SU AGRADO y ESPERAMOS QUE LO PRUEBE PRONTO

NUEVAS CARACTERÍSTICAS Y FUNCIONES MÁS IMPORTANTES

NUESTRO OBJETIVO: HACER QUE EL CONTENIDO SEA MÁS DETECTABLE, MÁS FÁCILMENTE.

Pregúntele a Reaxys

Ask Reaxys



Enter a keyword, concept or author

Pregúntele a Reaxys proporciona experiencia nueva para el usuario en materia de búsqueda de textos: contenido más fácilmente detectable, respuestas disponibles de forma más inmediata

Árbol de Reaxys

ReaxysTree

Browse Literature
Look through the Reaxys data by browsing its hierarchy of entities and properties. Select from

ReaxysTree

- chemical transformations
 - chemical reaction classification: chemical reaction classifications, chemical trees
 - chemical reaction class
 - chemical reaction type: reaction class, reaction classification, reaction class
 - coupling reaction
 - coupling reaction (organic synthesis)
 - Suzuki Reaction
 - Suzuki Reaction (Suzuki-Miyaura Reaction), Suzuki-Miyaura Reaction
 - Suzuki-Miyaura Coupling
 - Suzuki-Miyaura Coupling (Suzuki-Miyaura Reaction), Suzuki-Miyaura Reaction
 - substitution reaction
 - substitution: substitution reactions, substitutions

ReaxysTree permite que los usuarios “exploren” la base de datos por taxonomías: ayuda con la precisión de la búsqueda y la comprensión de las respuestas

Generador de fórmulas

Formula Builder

Click any element, group, or series to start building your query.

1 H He
2 Li Be B C N O F Ne
3 Na Mg Al Si P S Cl Ar
4 K Ca Sc Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu Zn Ga Ge As Se Br Kr
5 Rb Sr Y Zr Nb Mo Tc Ru Rh Pd Ag Cd In Sn Sb Te I Xe
6 Cs Ba La Hf Ta W Re Os Ir Pt Au Hg Tl Pb Bi Po At Rn
7 Fr Ra Ac Rf Db Sg Bh Hs Mt

Special groups:
Me Et Ph

Note: It is also possible to enter
 • ranges or enumerations
 Fe₂O₃, n=2,3, n=2-4
 • Arithmetic terms, e.g.
 C₁₋₂₀, n=2, n=3, n=5

El Generador de fórmulas mejora la posibilidad de búsqueda de sustancias mediante fórmulas moleculares: forma fácil de buscar sustancias en la Tabla periódica