

Para obtener más información o solicitar una prueba gratis, visite:
www.info.reaxys.com

Empresas:

Elsevier Corporate - Latinoamérica
Tel: + 55 21 3970 9300
E-mail: corporate.sales.la@elsevier.com
www.elsevierforindustry.com

Instituciones Académicas y de Gobierno:

Elsevier - Latin America North Region
Sales & Marketing - A&G
Tel: + 52 55 91 71 11 26
Correo electrónico: infobasesdedatos@elseviermexico.com



¿Cómo fluye su trabajo?

Reaxys apoya su flujo de trabajo, mejora su productividad y aumenta la producción científica de su organización.



Reaxys® es una marca registrada de y protegida por Elsevier Properties SA, y utilizada bajo licencia

Corporate R&D



Reaxys fomenta el descubrir integrando la búsqueda de sustancias químicas con la. El acceso fácil a los resultados permite que usted acelere el flujo de trabajo y produzca

Facilidad de uso

The screenshot displays the Reaxys web application interface. At the top, the 'reaxys' logo is visible. Below it, a navigation bar includes 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'My Settings', and 'Help'. The main content area is divided into tabs: 'Reactions', 'Substances and Properties', and 'Text, Authors and more'. The 'Substances and Properties' tab is active, showing a 'Generate structure from name' section. A red box labeled '1' highlights this section. Below it, a red box labeled '2' highlights the instruction 'Double click this frame and draw structure query' and a chemical structure of Geldanamycin. A dialog box prompts the user to enter a chemical identifier and click 'Submit'. Below the frame, there are search filters for Substance Data, Identification Data, Physical Data, Spectroscopic Data, Bioactivity Data, Ecotoxicological Data, and Bibliographic Data. A 'Search' button is visible.

1. Generar estructuras químicas a partir de un nombre
2. Diseñar una consulta de estructura

Una interfaz intuitiva diseñada por químicos para químicos

Con Reaxys, usted puede estar seguro de que encontrará lo que necesita de forma rápida y sencilla. Eso se debe a que Reaxys fue diseñado en estrecha cooperación con químicos de diferentes disciplinas y regiones geográficas, y utiliza la química como principio de organización.

Socios de desarrollo

Para asegurar que Reaxys apoye cada paso en su flujo de trabajo, trabajamos estrechamente con socios de la industria farmacéutica y otras industrias, universidades e institutos gubernamentales relacionados con el área química.

Filtro de resultados

Es fácil encontrar, filtrar y analizar datos. Es posible tener una visión general de los resultados clasificados, a través de tablas prácticas, de modo que usted puede ver la información más importante rápidamente. Las herramientas para agrupar, filtrar y analizar resultados hacen más fácil clasificar los conjuntos de consultas y mostrar los resultados más relevantes. Y no sólo eso, los datos se organizan en perfiles de sustancia y reacción, y los que provienen de diferentes publicaciones se incorporan a un solo registro de resultados.

Interoperabilidad

Con Reaxys usted puede exportar estructuras y reacciones junto con sus datos, por ejemplo, las tablas de datos de reacción. Su integración fácil con otros sistemas le posibilita cargar estructuras/reacciones y datos/textos.

Reaxys puede ser integrado con otros productos Elsevier. Hacer enlace a Scopus, la mayor base de datos de resúmenes y citas, es tan rápido como un clic de mouse. Tan fácil como eso es acceder a la investigación básica encontrada en la base de textos completos de Elsevier: ScienceDirect.

Capacitación y Apoyo

Reaxys es tan fácil de usar que el tiempo dedicado a la capacitación es mínimo. Y estaremos con usted, acompañándolo en cada paso de la capacitación, ofreciéndole apoyo con seminarios virtuales, guías del usuario, preguntas frecuentes y mucho más.

imiento y la innovación
datos sobre reacciones y
planificación de síntesis.
datos relevantes y aplicables,
as etapas de su
resultados superiores.

Presentación de Reaxys

El tiempo es corto, la presión es fuerte y cuando hay mucha información para evaluar, no se puede ser eficaz. Reaxys ofrece resultados relevantes y aplicables. ¿Qué más podría desear de una herramienta de flujo de trabajo?

Herramientas de flujo de trabajo integradas

Reaxys integra la búsqueda de datos sobre reacciones y sustancias con la planificación de síntesis, así usted puede acelerar su flujo de trabajo.

Información pertinente

Reaxys ofrece una profundidad insuperable de información de calidad junto con excelentes herramientas de análisis, brindándole la seguridad de encontrar exactamente lo que necesita.

Procesos productivos

Reaxys ahorra tiempo valioso al incorporar información relevante y aplicable que le posibilitará contar con mejores resultados.

Compartimos mucho tiempo con químicos. Escucharlos y verlos trabajar nos ha dado una clara percepción de las frustraciones que enfrentan. Demasiado esfuerzo para encontrar y adquirir los datos que necesitan para empezar sus experimentos, mucho tiempo perdido en la validación de resultados, y demasiados comienzos fallidos.

En las siguientes páginas, le informaremos más acerca de Reaxys y de qué modo puede apoyarlo, mejorando su productividad y aumentando la producción científica de su organización. Podrá saber más acerca de cómo nuestras herramientas le hacen ahorrar tiempo. Le informaremos acerca de la extraordinaria calidad de información que ofrecemos y, por último, le mostraremos lo fácil que es usar Reaxys.

Ahorro de tiempo

The screenshot displays the Reaxys web application interface. At the top, there's a navigation bar with 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'My Settings', and 'Help'. Below this, a 'Synthesis 1' workflow is shown with three steps: 1. Starting with HO-CH3, 2. Intermediate product, and 3. Final product. Each step has a 'Synthesize' button. Below the workflow is a table with columns for Step, Yield, Conditions, and References. The first step shows a 92% yield and conditions: 'With RuCl2(PPh3)3 in toluene; 6 h; Heating; Rate constant;'. The references list 'Tsuji, Yasushi; Kotachi, Shinji; Huh, Keun-Tae; Watanabe, Yoshihisa' and 'Tsuji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshihisa'. A detailed view of a reaction is shown below, featuring a chemical structure and an 'Add' button. The reaction conditions are 'With aqueous HCl' and the reference is 'Romeo et al. Helvetica Chimica Acta, 1955, vol. 38, p. 463,465'.

1. Buscar reacciones y planificar una síntesis
2. Verificar la disponibilidad comercial y los datos del proveedor para conocer los otros componentes que intervienen en la reacción

Herramientas para evaluar conjuntos de resultados y proyectar estrategias de síntesis

Ya es tiempo. Ahorrarlo y maximizarlo para que usted avance con confianza y facilidad desde una idea básica hasta un compuesto. Y hacerlo según su conveniencia: a cualquier hora, en cualquier lugar.

Registros únicos de resultados

Un único registro de resultado – de todos los datos disponibles para el compuesto o la reacción – elimina las barreras entre fuentes de información separadas. Las reacciones con el mismo reactante y producto, pero con diferentes reactivos, solventes y condiciones, se funden en un único registro de reacción. A partir de este mismo registro, usted puede acceder a otras propiedades, evaluar rutas de síntesis óptimas y perder menos tiempo eliminando manualmente la duplicación de sus resultados.

El texto de procedimiento de las publicaciones de patentes reduce la necesidad de ir al texto completo de la patente para verificar su relevancia.

Planificador de síntesis

Un planificador de síntesis exclusivo auxilia la evaluación de rutas sintéticas alternativas y permite identificar y combinar pasos de reacción seleccionados para generar la estrategia de síntesis más eficaz.

A cualquier hora, en cualquier lugar

Por una tarifa única, usted y los otros químicos de su organización pueden obtener la información que necesitan de modo inmediato y simultáneo. Reaxys se basa en tecnología web, esto les permite trabajar a cualquier hora y desde cualquier lugar. Y al no ser necesaria la instalación de algún software, es menos trabajo para usted.

Cómo Reaxys apoya el flujo de trabajo en Investigación y Desarrollo (I y D) relacionados con la química



Datos de sustancias y reacciones validados experimentalmente

Los químicos necesitan información relevante, de alta calidad, y confiable. Con Reaxys, usted accede a datos de sustancias y reacciones validados experimentalmente, ahorrándole tiempo cuestionando sus resultados y evitando comienzos fallidos.

Amplia Cobertura:

Reaxys posee amplia cobertura de información fidedigna en química orgánica, organometálica e inorgánica, incluyendo:

- Datos de reacción única y en pasos múltiples
- Información sobre catalizadores
- Información sobre la propiedad de sustancias experimentales
- Indicador de disponibilidad comercial

Reacciones en múltiples pasos

Reaxys proporciona la más completa información acerca del recorrido de una reacción. Con reacciones en pasos múltiples, usted tiene una mejor percepción de los pasos intermedios en un proceso sintético. Identificar las reacciones precursoras específicas mejorará su flujo de trabajo.

Patrimonio valioso

Reaxys combina el contenido de las prestigiosas bases de datos **CrossFire Beilstein**, **CrossFire Gmelin** y **Patent Chemistry Database**. Con ese patrimonio valioso, aprobado a lo largo del tiempo, usted puede estar seguro que la información encontrada atiende a sus estándares de calidad.

Selección de expertos

Químicos expertos extraen cuidadosamente datos de sustancias y reacciones validadas experimentalmente de selectas publicaciones periódicas y de patentes.

Información de calidad

The screenshot displays the Reaxys interface for a specific chemical compound. The main view shows the chemical structure and name: 5-methoxy-2-[[[4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl]sulphonyl]-1H-benzimidazole. The interface includes a filter sidebar on the left, a table of available data, and a detailed view of the compound's properties.

Available Data	Nº of ref.	Nº of prep.	Boiling Point
Identification Physical Data (41) Spectra (26) Bioactivity/ECotox (690) Use/Application (1040)	528	15 prep out of 80 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)methyl]sulfinyl]-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-[[[4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridin-2-yl)methyl]sulfinyl]benzimidazole, 2-[[[3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methyl]sulfinyl]-5-methoxybenzimidazole, rac-omeprazole
Type of Substance: heterocyclic

Molecular Formula: C₁₇H₁₉N₃O₃S
Linear Structure Formula: C₁₇H₁₉N₃O₃S
Molecular Weight: 345.422
InChi Key: SUBDBMMUDZJVOS-LILDFLRNC

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)

Adsorption (MCS) (1)

Association (MCS) (6)

Spectra

NMR Spectroscopy (8)

Description	Nucleus	Solvents	Temperature	Frequency	Original Text
Chemical shifts	1H	tetradedeuteriomethanol			
	1H	chloroform-d3		300MHz	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mbroad), 7.06 (mbroad), 6.96 (1H, dd), 4.78 and 4.60 (2*1H, system AB), 3.87 (3H, (3H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)
	1H	chloroform-d3		300MHz	1H NMR (300 MHz, CDCl ₃): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mbroad), 7.06 (mbroad), 6.96 (1H, dd), 4.78 and 4.60 (2x1H, system AB), 3.87 (3H, (3H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)
Chemical shifts	13C	acetone-d6	26.9°C		
Chemical shifts	1H	acetone-d6	6.9 - 26.9°C		

Acceso a datos minuciosos, validados experimentalmente, no calculados, extraídos de publicaciones.