



## ¿Cómo fluye su trabajo?

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



Reaxys fomenta el descubrimiento y la innovación integrando la búsqueda de datos sobre reacciones y sustancias químicas con la planificación de síntesis.

El acceso fácil a los resultados relevantes y aplicables, permite que usted acelere las etapas de su flujo de trabajo y produzca 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.

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

**Informática Química,  
Química Medicinal / Bioquímica**

**Química Sintética**

**Búsqueda de Información  
Búsqueda de Patente**

**Ingeniería de Proceso  
Ingeniería Química**

**Analizar las relaciones entre la estructura y sus datos**

Datos físicos, farmacéuticos y de toxicidad medidos  
Tablas de datos de estructura

**Buscar Reacciones Químicas**

Excelente base de datos de reacciones

**Verificar Novedades**

Reacciones de publicaciones periódicas desde 1771  
Reacciones de publicaciones de patentes desde 1889  
Textos de procedimiento de reacciones de documentos de patentes

**Optimizar Síntesis**

Rendimiento, condiciones, Textos de procedimiento de reacciones  
Disponibilidad comercial  
Datos de toxicidad

**Encontrar estructuras blanco con propiedades específicas**

Perfiles de sustancia:  
Gran acervo de datos de diferentes sustancias medidas

**Desarrollar la Mejor Estrategia de Síntesis**

Herramienta planificadora de síntesis  
Condiciones de reacción  
Herramientas para armar, clasificar y analizar

**Proveer Perfiles de Sustancias**

Datos de diferentes fuentes reunidos en el registro de una sustancia

**Procesos Exclusivos**

Rendimientos y Cantidades  
Condiciones de reacción  
Solubilidad, Datos de toxicidad, Datos de entalpía

**Optimizar Síntesis**

Rendimiento, condiciones, Textos de procedimiento de reacciones  
Disponibilidad comercial  
Datos de toxicidad

**Proveer informes de búsquedas inteligentes**

Visualizaciones inteligentes de datos tabulares, y exportación / presentación de informes flexible

**Identificar Productos**

Datos espectrales y físicos

# 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 intermediarios 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

Substances (0/1) Substances (Table) Citations 1 substances out of 528 citations go to Page Page 1 of 1

Filter by: Molecular Weight Number of Fragments Physical Data Spectroscopic Data Bioactivity Document Type Authors Patent Assignee Journal Title Publication Year

Limit to Selection Output Sort by Molweight Hide Details

Structure	Chemical Name	Available Data	Nº of ref.	Nº of prop.	Boiling Point
	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-pyridinyl)methyl)sulfinyl-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methylsulphonyl)-1H-benzimidazole 2-((3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl)-5-methoxybenzimidazole rac-omeprazole	Identification Physical Data (41) Spectra (26) Bioactivity/Toxbox (560) Use/Application (1140)	528	15 prep out of 80 reactions.	

Hide Details

**Structure/Compound Data**

**Reaxys Registry Number:** 3626192  
**CAS Registry Number:** 73590-58-6 119141-89-7 119241-89-8 131959-76-9 325602-80-6

**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-pyridinyl)methyl)sulfinyl-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methylsulphonyl)-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methylsulfinyl)-1H-benzimidazole, 2-((3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl)-5-methoxybenzimidazole, rac-omeprazole  
**Type of Substance:** heterocyclic

**Molecular Formula:** C<sub>17</sub>H<sub>21</sub>N<sub>3</sub>O<sub>5</sub>  
**Linear Structure Formula:** C<sub>17</sub>H<sub>21</sub>ShyO<sub>5</sub>  
**Molecular Weight:** 345.422

**InChI Key:** SUDDH002/VOS-LJLDFURNCA

**Identification**

**Physical Data**

- Melting Point (4)
- Conformation (2)
- Crystal Property Description (3)
- Crystal Phase (1)
- Crystal System (1)
- Space Group (1)
- Density of the Crystal (3)
- 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) (3)**

**Association (MCS) (6)**

**Spectra**

**NMR Spectroscopy (8)**

Description	Nucleus	Solvents	Temperature	Frequency	Original Text
Chemical shifts	<sup>1</sup> H	tetrahydrofuran-d <sub>2</sub>			
	<sup>1</sup> H	chloroform-d <sub>3</sub>		300MHz	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mroad), 7.08 (mroad), 6.96 (1H, dd), 4.78and4.80 (2*1H, system AB), 3.87 (3H, 1H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)
	<sup>1</sup> H	chloroform-d <sub>3</sub>		300MHz	<sup>1</sup> H NMR (300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mroad), 7.08 (mroad), 6.96 (1H, dd), 4.78 and 4.80 (2x1H, system AB), 3.87 (3H, 1H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)
Chemical shifts	<sup>13</sup> C	acetone-d <sub>6</sub>	26.9°C		
Chemical	<sup>1</sup> H	acetone-d <sub>6</sub>	6.9 - 26.9°C		

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

# 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.

## Ahorro de tiempo

The screenshot displays the Reaxys software interface. At the top, the Reaxys logo is on the left, and the user 'Scotta Reeves (reeves)' is logged in on the right. Below the navigation bar, the 'Synthesis 1' workspace shows a reaction scheme with three steps. Step 1 is highlighted with a red box and a '1' label. Step 2 is also highlighted with a red box and a '2' label. Below the reaction scheme, there are buttons for 'Hide selected details', 'Hide all details', and 'Show all details'. A table below the reaction scheme provides details for Step 1:

Step	Yield	Conditions	References
1	92%	With $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_2)_2$ in toluene 6 h; Heating; Rate constant;	<b>Tsuiji, Yasushi; Kotachi, Shinji; Huh, Keun-Tae; Watanabe, Yoshikisa</b> <i>Journal of Organic Chemistry</i> , <b>1999</b> , vol. 55, # 2, p. 580 - 594 <a href="#">Title/Abstract</a> <a href="#">Full Text</a> <a href="#">Scopus</a> <b>Tsuiji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshikisa</b> <i>Journal of the Chemical Society, Chemical Communications</i> , <b>1986</b> , # 21, p. 1575 - 1576 <a href="#">Title/Abstract</a> <a href="#">Full Text</a> <a href="#">Scopus</a>

At the bottom, a search result is shown for a reaction with Re-ID: 371401. The reaction scheme shows a starting material reacting to form a product. The conditions are 'With aqueous HCl'. The reference is 'Romeo et al. Helvetica Chimica Acta, 1955, vol. 38, p. 463,465'. There is an 'Add' button next to the reaction scheme.

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



# 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.

## Facilidad de uso

The screenshot displays the Reaxys web application interface. At the top, the Reaxys logo is visible. Below it, a navigation bar contains tabs for 'Query', 'Results', 'Synthesis Plans', 'History', 'My Settings', and 'Help'. The main content area has three tabs: 'Reactions', 'Substances and Properties', and 'Text, Authors and more'. Under the 'Substances and Properties' tab, there are three buttons: 'Generate structure from name' (highlighted with a red box and the number '1'), 'Draw structure from query', and 'Draw structure from image'. Below these buttons is a large frame with a hatched background and the text 'Double click this frame and draw structure query' (highlighted with a red box and the number '2'). Inside this frame is a chemical structure of Geldanamycin. A modal dialog box is open over the frame, titled 'Please enter a chemical identifier and then click "Submit"'. It contains a text input field with 'Geldanamycin' entered, and two buttons: 'Submit' and 'Cancel'. Below the dialog, a 'Search' button is visible. On the left side of the interface, there is a section titled 'Hide further search conditions' with several expandable categories: 'Substance Data', 'Identification Data', 'Physical Data', 'Spectroscopic Data', 'Bioactivity Data', 'Ecotoxicological Data', and 'Bibliographic Data'. At the bottom of this section are three buttons: 'Clear Query', 'Load Query', and 'Save Query'.

1. Generar estructuras químicas a partir de un nombre

o

2. Diseñar una consulta de estructura

Para obtener más información o solicitar una prueba gratis, visite:  
[www.info.reaxys.com](http://www.info.reaxys.com)

**Empresas:**

Elsevier Corporate - Latinoamérica

Tel: + 55 21 3970 9300

E-mail: [corporate.sales.la@elsevier.com](mailto:corporate.sales.la@elsevier.com)

[www.elsevierforindustry.com](http://www.elsevierforindustry.com)

**Instituciones Académicas y de  
Gobierno:**

Elsevier Ciencia y Tecnología - Latinoamérica

Tel: + 55 21 3970 9300

E-mail: [latinoamerica@elsevier.com.br](mailto:latinoamerica@elsevier.com.br)

[www.americalatina.elsevier.com](http://www.americalatina.elsevier.com)



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