



L'accès aux données freine vos recherches?

Reaxys s'adapte aux besoins de vos chercheurs et de vos étudiants, augmente leur productivité et valorise le rendement de votre institution.

www.info.reaxys.com



Reaxys soutient la recherche des données expérimentales, des réactions et aux substances de synthèse.

Un accès facile à des résultats directement applicables a permis l'augmentation de l'efficacité des étudiants, ainsi qu'un accroissement de la productivité.

che et l'étude en intégrant
les existantes liées aux
es avec un outil de planifi-

ultats pertinents et di-
our direct impact une
té des chercheurs et des
croissement de leur pro-

Présentation de Reaxys

Les délais sont courts, la pression est élevée et quand il y a trop d'informations disponibles à trier, nul ne peut être efficace.

Reaxys fournit des résultats pertinents, directement utilisables. Que demander de plus à un outil de workflow?

Information importante

Chercheurs et étudiants peuvent être confiants qu'ils trouveront exactement l'information dont ils ont besoin, avec l'accès à des données expérimentalement validées, non calculées, ainsi qu'à un contenu d'une qualité inégalée, couvrant en détail la chimie organique, organométallique et inorganique.

Outils intégrés

Les données réactionnelles de Reaxys, ainsi que les informations liées aux substances, sont toutes intégrées avec un outil de rétrosynthèse, ainsi qu'avec d'excellents outils d'analyse, facilitant ainsi les différentes étapes du travail du chercheur.

Productivité augmentée

Reaxys donne accès à des informations

pertinentes, directement utilisables ; celles-ci sont affichées de telle façon qu'elles peuvent être facilement manipulées et retravaillées par les chimistes, en fonction des contraintes liées à leur travail, augmentant ainsi leur efficacité et leur productivité.

Nous passons beaucoup de temps en compagnie des chimistes. Les écouter et les regarder travailler nous a éclairé sur les frustrations auxquelles ils doivent faire face. Trop d'efforts sont nécessaires pour trouver les données dont ils ont besoin pour démarrer leurs expériences, trop de temps est perdu en validation de résultats et en faux départs de recherche.

Dans les pages suivantes, nous vous raconterons plus de détails sur Reaxys et

vous expliquerons comment cette application peut aider vos chercheurs et vos étudiants, en augmentant leur productivité et en valorisant le rendement de votre institution. Vous apprendrez comment Reaxys peut aider à économiser le temps d'un chercheur. Nous vous expliquerons l'origine de l'extraordinaire qualité des informations disponibles, et nous vous montrerons comme il est facile d'utiliser Reaxys.

Comment Reaxys soutient-il la recherche liée à la chimie

Reaxys soutient l'approche actuelle, multidisciplinaire, de la recherche moderne, avec une grande richesse de données expérimentalement validées extraites des journaux et des brevets. Les chercheurs et les étudiants de différentes disciplines en relation avec la chimie vont bénéficier des données pertinentes, directement applicables, disponibles dans Reaxys.

Chimie de Synthèse

Les données expérimentales disponibles pour les réactions et les substances – couvrant des domaines aussi variés que la chimie organique, inorganique et organométallique – combinées avec l'outil de planification de synthèse, répondent aux besoins du chimiste de synthèse.

Chimie Médicinale, Biochimie et Sciences de la vie

Les chercheurs en chimie médicinale, en biochimie et en sciences de la vie trouveront des informations pertinentes, telles que des données mettant en relation structure chimique et activité spécifique (SAR).

Chimie Analytique et Chimie Physique

Des données spectrales validées, comme par exemple des valeurs de déplacement chimique en RMN, ainsi que des données liées à de nombreuses propriétés physiques sont utiles pour des applications en chimie analytique et en chimie physique.

Chimie de l'environnement

Reaxys soutient la chimie de l'environnement avec des informations telles que l'absorption des produits toxiques dans les systèmes biologiques.

Chimie des Matériaux

Alors que tous les scientifiques tirent avantage des composés de coordination et des catalyseurs – par exemple en recherche sur les polymères – les alliages, les 'verres' et les céramiques contribuent également à la valeur de Reaxys pour le chimiste des matériaux. Les données de Reaxys sur les semi- et superconductivité, sur le magnétisme, sur les propriétés optiques et mécaniques sont essentielles pour le développement de nouveaux matériaux utilisés dans des applications modernes.

Des données réactionnelles et des propriétés liées aux substances validées expérimentalement

Les chercheurs et les étudiants ont besoin d'informations pertinentes, de grande qualité, qu'ils peuvent employer en toute confiance. Reaxys leur donne accès à des données réactionnelles expérimentales validées, il en est de même pour toutes les données liées aux substances; ils peuvent ainsi perdre moins de temps en interrogeant leurs résultats et donc éviter de faux départs.

Vaste contenu

Reaxys présente un large éventail d'informations faisant autorité en chimie organique, organométallique et inorganique, incluant:

- Des données réactionnelles pour les réactions simples, ou constituées de plusieurs étapes
- Des informations sur les catalyseurs
- Des données expérimentales liées aux propriétés des substances
- Des descriptifs de la procédure expérimentale

Réactions en plusieurs étapes

Reaxys fournit des informations très complètes sur un chemin réactionnel. Le chimiste peut accéder à de plus amples détails sur toutes les étapes intermédiaires d'un processus de synthèse.

Identifier toutes les réactions qui mènent du précurseur au produit final améliore le travail du chimiste.

Riche héritage

Reaxys contient toutes les données des trois prestigieuses bases de données **CrossFire Beilstein**, **CrossFire Gmelin** et **Patent Chemistry Database**. Avec un héritage aussi riche, éprouvé par le temps, vos chercheurs et vos étudiants peuvent être assurés que l'information trouvée répond à de sévères critères de qualité.

Sélection de qualité

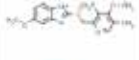
Des chimistes experts en leur domaine extraient avec circonspection les données de grande qualité, expérimentalement validées, liées aux réactions et aux substances, de journaux et de brevets sélectionnés.

Qualité et détail de l'information proposée

Substances (Grid) Substances (Table) Citations 2 substances out of 529 citations go to Page 1 of 1 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	N° of ref.	N° of prep.	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-pyridyl)methylsulphonyl)-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-pyridin-2-yl)methylsulfinyl)benzimidazole 2-((3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl)-5-methoxybenzimidazole rac-omeprazole	Identification (1) Physical Data (4) Spectra (2) Bioactivity/Eochem (500) Use/Application (104)	128	15 prep out of 87 reactions.	

[Hide Details](#)

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

Molecular Formula: C₁₇H₂₀N₄O₅
Linear Structure Formula: C₁₇H₂₀N₄O₅
Molecular Weight: 345.422

InChI Key: SUBD6HMDDZVOS-LILDFURCA

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)

Adsorption (MCS) (1)

Association (MCS) (6)

Spectra

NMR Spectroscopy (8)

Description	Nucleus	Solvents	Temperature	Frequency	Original Text
Chemical shifts	1H	tetradecanoromethanol			
	1H	chloroform-d3		300MHz	1H NMR (300 MHz, CDCl3): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, mbroad), 7.04 (1H, s), 6.96 (1H, dd), 4.78ac04.60 (2*1H, system AB), 3.87 (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		

Accès à des données détaillées, testées expérimentalement, non calculées, extraites de références bibliographiques.

Outils pour évaluer vos données et concevoir vos stratégie de synthèse

Vos chercheurs et étudiants doivent pouvoir économiser leur temps, maximiser son emploi, tout en évoluant avec confiance d'une idée de base vers la concrétisation de leur projet de recherche. Ils doivent également pouvoir travailler à leur convenance: n'importe quand, n'importe où.

Des données présentées sous forme de résultat unique

Les réactions ayant les mêmes réactifs et produits, mais se différenciant par les catalyseurs, solvants et conditions expérimentales, sont résumées en une simple et unique réaction, présentée dans un tableau contenant les différentes variations observées dans la littérature.

A partir de cette même réaction, le chimiste peut accéder à diverses propriétés chimiques et physiques, et évaluer l'approche synthétique la plus probante, de sorte qu'il ne perdra aucun temps à manuellement trier les réactions identiques existant dans la littérature. Les modes opératoires extraits des brevets réduisent le besoin d'aller au texte complet du brevet pour en vérifier la pertinence.

Outil de rétrosynthèse

Un planificateur de synthèse unique vous aide dans l'évaluation des différentes voies de synthèse, et vous permet d'identifier et de combiner différentes étapes réactionnelles afin de générer la plus performante stratégie de synthèse.

N'importe quand, n'importe où

Avec l'accès à prix fixe, les chimistes de votre institution peuvent accéder immédiatement et simultanément à l'information dont ils ont besoin. Reaxys est une application basée sur le Web, qui peut donc être accédée n'importe quand et de n'importe quel endroit. Et, comme il n'y a aucune installation à effectuer, et aucune limite d'accès, il y a moins de travail administratif pour vous.

Des fonctionnalités de recherche avancées

Il est facile d'effectuer des recherches avec Reaxys. Les utilisateurs définissent les substances ou les réactions recherchées à l'aide d'un des éditeurs de dessin fournis. Ils peuvent bien sûr également combiner leurs structures avec certaines propriétés, ou faire des recherches en se basant uniquement sur des propriétés, en suivant une des méthodes suivantes:

- **Form-based Search:** cette forme fournit les propriétés les plus couramment employées, et est très pratique pour tout type d'utilisateurs.
- **Advanced Search:** cette forme permet à l'utilisateur expérimenté de définir les propriétés nécessaires en les sélectionnant parmi les centaines de types de données disponibles.

Economiser du temps

reaxys

Query Results Synthesis Plans History My Settings Help

Synthesis 1 Synthesis 2 Synthesis 3 Synthesis 4 Synthesis 5

Undo Open Save Copy plan to new page Output

1

3 90 %
Modify

2 51 %
Modify

1 71 %
Modify

Synthesize
e

$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$
Ga
Cl Cl

Synthesize
e

Synthesize
e

2

Hide selected details Hide all details Show all details

1. Chercher des réactions et planifier une synthèse
ou
2. Vérifier la disponibilité commerciale et les fournisseurs des substances intervenant dans vos réactions

Une interface intuitive conçue par des chimistes pour des chimistes

En employant Reaxys, vos chercheurs et vos étudiants peuvent avoir confiance qu'ils trouveront rapidement et facilement ce dont ils ont besoin. Car Reaxys a été créé en étroite collaboration avec des chimistes de différentes disciplines et de différents horizons, et en maintenant la chimie comme principe organisationnel.

Partenaires de Développement

Nous travaillons également de façon très étroite avec divers partenaires issus d'universités réputées, d'industries chimiques et pharmaceutiques, et d'instituts gouvernementaux afin d'être sûr que Reaxys soutient chaque étape du travail des chimistes.

Filtrage des résultats

Il est facile de trouver, de filtrer et d'analyser les données obtenues. Les résultats classés sont affichés de façon commode et disposés sous forme de tableaux : le chimiste peut donc voir en un coup d'œil les informations les plus importantes. Des outils permettant de grouper, de trier et d'analyser les résultats facilitent également la classification des informations, afin de rapidement identifier les données les plus pertinentes.

Interopérabilité

Reaxys vous permet d'exporter vos structures et vos réactions, ainsi que les données qui y sont liées, comme par exemple, sous forme de tables de réactions avec propriétés. De nombreux formats sont supportés, sans aucun coût supplémentaire, tels que: Microsoft Word, Excel, PDF, SD-/RD-/ Mol File, XML, et RIS (Endnote, ReferenceManager).

Reaxys est facile à intégrer à d'autres systèmes, et vous pouvez charger des structures et des réactions, ainsi que des données et du texte. Reaxys est également interopérable avec les autres produits d'Elsevier. Accéder à Scopus, la plus grande base de données de citations et d'extraits, est aussi rapide qu'un click de souris. Et il est tout aussi facile d'accéder aux données primaires de recherche, trouvées dans la base de

données de texte intégral d'Elsevier: ScienceDirect.

Formation et support

Reaxys est très facile à utiliser, et le temps que vous aurez à consacrer à des formations est minime. Nous serons toujours avec vous, à chaque étape du chemin, en vous offrant un support complet, incluant des formations en ligne, des guides d'utilisateurs, un accès à une liste de questions les plus souvent posées et leurs réponses, et encore plus.

Utilité

The screenshot displays the Reaxys web interface. At the top left is the Reaxys logo. A navigation bar contains tabs for Query, Results, Synthesis Plans, History, My Settings, and Help. Below this, a secondary navigation bar has tabs for Reactions, Substances and Properties, and Text, Authors and more. The 'Substances and Properties' tab is active, and a sub-tab 'Generate structure from name' is highlighted with a red box and the number '1'. Below this sub-tab is a large frame with a red border and diagonal hatching, containing a chemical structure of Geldanamycin. A red box with the number '2' is placed over the frame with the text 'Double click this frame and draw structure query'. 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 frame, there are search options: 'Hide further search conditions', 'Substance Data', 'Search text in all facts', and a 'Search for' dropdown menu set to 'is'. At the bottom, there are three buttons: 'Clear Query', 'Load Query', and 'Save Query'. A 'Search' button is also visible to the right of the search options.

1. Générer une structure chimique à partir d'un nom
ou
2. Dessiner une structure chimique

Pour de plus amples informations,
ou pour demander de tester Reaxys, visitez:
www.info.reaxys.com

Amériques:

E-Customer Service
360 Park Avenue South
New York
NY 10010-1710
Numéro gratuit: +1 888 615 4500
Tel: +1 212 462 1978
Fax: +1 212 462 1974
Email: usinfo@reaxys.com

Europe et toutes les autres régions:

E-Customer Service
Theodor-Heuss-Allee 108
60486 Frankfurt/Main, Allemagne
Tel: +49-69-5050 4268
Fax: +49-69-5050 4213
Email: nlinfo@reaxys.com

Japon et Pacifique:

E-Customer Service
1-9-15 Higashi-Azabu
Minato-ku Tokyo
106-0044 Japon
Tel: +81 3 5561 5034
Fax: +81 3 5561 5047
Email: jpinfo@reaxys.com



Reaxys® est une marque déposée et protégée
par Elsevier Properties SA et qui ne peut être
utilisée que sous licence.