



Como flui seu trabalho?

O Reaxys apóia o seu fluxo de trabalho, melhora a sua produtividade e aumenta a produção científica da sua organização.



reaxys®

Apresentando Reaxys

O tempo é curto, a pressão é grande e, quando há muita informação para avaliar, não há como ser eficiente. O Reaxys fornece resultados relevantes e aplicáveis. O que mais você poderia esperar de uma ferramenta de fluxo de trabalho?

Ferramentas integradas de fluxo de trabalho

O Reaxys integra a pesquisa de dados de substâncias e reações com o planejamento de síntese. Com isso, você acelera as etapas dos seus fluxos de trabalho.

Informação relevante

O Reaxys oferece uma profundidade insuperável de informações de qualidade, combinadas com excelentes ferramentas de análise, para que você esteja certo de que encontrará exatamente o que procura.

Processos produtivos

O Reaxys economiza um tempo valioso ao integrar informações relevantes e aplicáveis, para que você possa esperar melhores resultados.

Passamos muito tempo com químicos. Ouvir e observar estes profissionais durante o trabalho nos proporcionou uma maior percepção das frustrações que enfrentam. Muito esforço para localizar e obter os dados de que precisam para iniciar seus experimentos, muito tempo perdido validando resultados, muitas armadilhas.

Nas próximas páginas, explicaremos mais sobre o Reaxys e como ele pode apoiá-lo melhorando a sua produtividade e aumentando a produção científica da sua organização. Você aprenderá um pouco mais sobre como as nossas ferramentas economizam seu tempo. Abordaremos a extraordinária qualidade das informações que fornecemos e também mostraremos como é fácil utilizar o Reaxys.

Como o Reaxys auxilia o fluxo de trabalho em Pesquisa e Desenvolvimento (P&D) relacionados à Química

Quimioinformática,
Bioquímica/Química Medicinal

Química Sintética

Pesquisa de Informações
Pesquisa de Patentes

Engenharia de Processos
Engenharia Química

Analisa as relações entre a estrutura e seus dados

Dados físicos, farmacêuticos e de toxicidade medidos
Tabelas de dados de estrutura

Pesquisa reações químicas

Excelente base de dados de reações

Verifica as inovações

Reações presentes em literatura de periódicos desde 1771
Reações presentes em literatura de patentes desde 1889
Textos dos procedimentos de reações em documentos de patentes

Otimiza a síntese

Texto de procedimentos para reações, condições e rendimentos
Disponibilidade comercial
Dados de toxicidade e

Localiza estruturas-alvo com propriedades específicas

Perfis de substâncias:
Um grande acervo de dados de substâncias medidas

Desenvolve a melhor estratégia de síntese

Ferramenta para planejamento de sínteses
Condições de reações
Ferramentas de arquivamento, classificação e análise

Fornecer perfis de substâncias

Dados de diferentes fontes coletados em um único registro de substâncias

Processos superiores

Quantidades e rendimentos
Condições de reações
Solubilidade, Dados de toxicidade, Dados de entalpia

Otimiza a síntese

Texto de procedimentos de reações, condições e rendimento
Disponibilidade comercial
Dados de toxicidade e

Fornecer relatórios inteligentes de pesquisa

Exibições inteligentes de dados tabulares e exportação/
relatórios flexíveis

Identifica produtos

Dados físicos e espectrais

Dados de substâncias e reações validados experimentalmente

Os químicos necessitam de informações relevantes, de alta qualidade e confiáveis. Com o Reaxys, você obtém dados de substâncias e reações validados experimentalmente, para que economize tempo questionando seus resultados e evite armadilhas.

Cobertura abrangente

O Reaxys tem uma ampla cobertura de informações consagradas sobre química orgânica, organometálica e química inorgânica incluindo:

- Dados de reações em única ou múltiplas etapas
- Informações sobre catalisadores
- Dados sobre propriedade de substâncias experimentais
- Indicadores de disponibilidade comercial

Reações em múltiplas etapas

O Reaxys oferece informações mais completas sobre o percurso de uma reação. Com as reações em múltiplas etapas, você tem maior percepção em relação às etapas intermediárias de um processo sintético. A identificação das reações precursoras para o alvo aperfeiçoará seus fluxos de trabalho.

Patrimônio valioso

O Reaxys combina o conteúdo de bases de dados renomadas como **CrossFire Beilstein**, **CrossFire Gmelin** e **Patent Chemistry Database**. Com este patrimônio valioso e testado ao longo do tempo, você pode ter certeza de que as informações encontradas correspondem aos seus padrões de qualidade.

Seleção de especialistas


Os químicos especialistas extraem cuidadosamente dados de substâncias e reações validados experimentalmente e provenientes da literatura de patentes e periódicos de alta qualidade.

Informação de qualidade

Substances (0/0) 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)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)methyl)sulfinyl)-1H-benzimidazole 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl)sulfinyl)-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)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)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)methyl)sulfinyl)-1H-benzimidazole, 5-methoxy-2-((4-methoxy-3,5-dimethyl-2-pyridinyl)methyl)sulfinyl)-1H-benzimidazole, 2-((3,5-dimethyl-4-methoxypyridin-2-yl)methylsulfinyl)-5-methoxybenzimidazole, rac-omeprazole
Type of Substance: heterocyclic

Molecular Formula: C₁₇H₂₂N₂O₅
Linear Structure Formula: C₁₇H₂₂N₂O₅
Molecular Weight: 345.422

InChI Key: SUDDH00ZVOS-LJLDFURCA

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	¹ H	tetrahydrofuran-d ₂			
	¹ H	chloroform-d ₃		300MHz	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, m broad), 7.08 (m broad), 6.96 (1H, dd), 4.78 and 4.80 (2*1H, system AB), 3.87 (3H, 1H, s), 2.25 (3H, s), 2.23 (3H, s)
	¹ H	chloroform-d ₃		300MHz	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃): δ 8.24 (1H, s), 7.58 (1H, m broad), 7.08 (m broad), 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	¹³ C	acetone-d ₆	26.9°C		
Chemical	¹ H	acetone-d ₆	6.9 - 26.9°C		

Acesso a dados detalhados, validados experimentalmente, não calculados, provenientes de publicações.

Ferramentas para avaliar conjuntos de resultados e projetar estratégias de síntese

Chegou o momento esperado. Economia e maximização do tempo para que você possa prosseguir com segurança e facilidade de uma idéia básica até um composto alvo. E você pode avançar de acordo com sua conveniência: a qualquer hora, em qualquer lugar.

Registros de resultado único

Um registro de resultado único — de todos os dados disponíveis para o composto ou a reação pesquisada — derruba as barreiras entre fontes diferentes de informação. Reações com o mesmo reagente e produto, mas com diferentes reagentes, solventes e condições, são combinadas em um único registro de reação. Neste mesmo registro, você pode acessar outras propriedades, analisar rotas de síntese ideais e perder menos tempo eliminando manualmente duplicações dos resultados.

O texto de procedimentos de publicações de patentes reduz a necessidade de ler todo o texto da patente para verificar sua relevância.

Ferramenta de Planejamento de sínteses

Uma ferramenta de planejamento de sínteses exclusiva auxilia a análise de rotas sintéticas alternativas e possibilita a identificação e a combinação de etapas de reações selecionadas para gerar uma estratégia de síntese mais eficiente.

A qualquer hora, em qualquer lugar

Com acesso por valor fixo, você e os demais químicos da sua organização podem obter as informações desejadas de maneira simultânea e imediata. O Reaxys é baseado na web, portanto vocês poderão trabalhar a qualquer hora, em qualquer lugar. E, por não ser necessária a instalação de nenhum software, você tem menos trabalho.

Economia de tempo

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' section shows a reaction scheme with three steps. Step 1 is highlighted with a red box and the number '1'. Step 2 is also highlighted with a red box and the number '2'. 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 $\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_3$ in toluene 6 h; Heating; Rate constant;	Tsuiji, Yasushi; Kotachi, Shinji; Huh, Keun-Tae; Watanabe, Yoshikisa <i>Journal of Organic Chemistry</i> , 1990 , vol. 55, # 2, p. 580 - 584 Title/Abstract Full Text Scopus Tsuiji, Yasushi; Huh, Keun-Tae; Yokoyama, Yasuharu; Watanabe, Yoshikisa <i>Journal of the Chemical Society, Chemical Communications</i> , 1986 , # 21, p. 1575 - 1576 Title/Abstract Full Text Scopus

Below the table, there is a search filter section on the left with options for Yield, Record Type, Reagents/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps, and Document Type. The main search results area shows a reaction scheme with a red box around an 'Add' button. The reaction scheme shows a starting material (a benzene ring with a chlorine atom and a carbonyl group) reacting to form a product (a benzene ring with a chlorine atom and a hydroxyl group). The reaction ID is 'Rn-ID: 371421'. Below the reaction scheme, the conditions are 'With aqueous HCl'. The references section shows a citation: 'Romeo et al. Helvetica Chimica Acta, 1955, vol. 38, p. 463,465 Full Text'.

1. Pesquisa reações e planeja uma síntese

2. Verifica a disponibilidade comercial e os dados do fornecedor para conhecer os outros componentes que intervêm na reação

Uma interface intuitiva projetada por químicos para químicos

Com o Reaxys, você pode estar seguro que encontrará o que precisa de maneira rápida e fácil. Isto porque o Reaxys foi projetado em cooperação conjunta com químicos de diferentes especialidades e regiões geográficas, e ainda utiliza a química como um princípio de organização.

Parceiros de desenvolvimento

Para garantir que o Reaxys apoie cada etapa do seu fluxo de trabalho, trabalhamos em conjunto com parceiros de desenvolvimento provenientes de indústrias farmacêuticas e outras relacionadas à química, além de universidades e instituições governamentais.

Filtragem de resultados

É fácil localizar, filtrar e analisar os dados. Os resultados classificados são exibidos de modo fácil e em tabelas, possibilitando a exibição das informações mais importantes rapidamente. Ferramentas para agrupar, filtrar e analisar os resultados facilitam a classificação de conjuntos de resultados e exibem os mais relevantes. Além disso, os dados são organizados em perfis de substâncias e reações, sendo os dados de publicações diferentes combinados em um registro de resultado.

Interoperabilidade

Com o Reaxys você pode exportar estruturas e reações junto com seus dados, por exemplo, como tabelas de dados de reação. É de fácil integração com outros sistemas, portanto você pode carregar as estruturas/reações e dados/texto.

O Reaxys pode ser integrado a outros produtos da Elsevier. O link para o Scopus, a maior base de dados de resumos e citações, é realizado de modo rápido com um clique no mouse. E tão fácil quanto isso é acessar a pesquisa básica encontrada na base de textos completos da Elsevier: ScienceDirect.

Treinamento e suporte

O Reaxys é fácil de usar, portanto o tempo que você gastará em treinamento é mínimo. Estaremos com você, a cada etapa, oferecendo suporte com seminários interativos via web, guias do usuário, FAQs (Perguntas Frequentes), entre outros.

Facilidade de uso

reaxys

Query Results Synthesis Plans History My Settings Help

Reactions Substances and Properties Text, Authors and more

Generate structure from name 1

Double click this frame and draw structure query 2

Please enter a chemical identifier and then click "Submit"

Geldanamycin

Example 1: aspirin
Example 2: BSYNRYMUTXBXSQ-WXRBYKJCCW
Example 3: 50-78-2

Submit
Cancel

Search

Hide further search conditions

Substance Data

Search text in all facts

Search for is

Identification Data
Physical Data
Spectroscopic Data
Bioactivity Data
Ecotoxicological Data
Bibliographic Data

Clear Query Load Query Save Query

1. Gera estruturas químicas a partir de um nome
ou
2. Desenha uma consulta de estrutura

Para obter mais informações ou solicitar
um período de teste gratuito, visite:
www.info.reaxys.com

Empresas:

Elsevier Corporate - América Latina

Tel: 21 3970 9300

E-mail: corporate.sales.la@elsevier.com

www.elsevierforindustry.com

Instituições Acadêmicas e de Governo:

Elsevier Ciência e Tecnologia - América do Sul

Tel: 21 3970 9300

E-mail: latinoamerica@elsevier.com.br

www.americalatina.elsevier.com



Reaxys® é propriedade da Elsevier Properties SA e é protegido por ela. Ele deve ser usado sob licença.