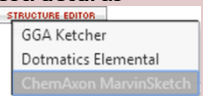

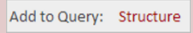


## 1. Seleccione un tema de consulta en Reaxys:



SUSTANCIAS		REACCIONES		BIBLIOGRAFÍA	
FUNCIÓN	COMENTARIO	FUNCIÓN	COMENTARIO	FUNCIÓN	COMENTARIO
<b>Pregúntele a Reaxys</b>	Introduzca un nombre o número CAS. Ejemplos: <i>quinolona</i> , <i>91-22-5</i>	<b>Pregúntele a Reaxys</b>	Introduzca un término. Ejemplo: <i>síntesis del p-fenilnitrobenzono</i> , <i>acoplamiento de Suzuki</i> , <i>oxidación de fenoles de adler</i> .	<b>Pregúntele a Reaxys</b>	Introduzca términos en el cuadro de búsqueda. Ejemplo: <i>cicloación de CO2 a epóxidos</i> , <i>deforestación tropical</i> , <i>solventes ecológicos</i>
<b>Crear plantilla de estructuras a partir del nombre</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Sustancias</b> y luego seleccione el vínculo de color rojo que figura debajo del cuadro Estructura. Introduzca <i>Nombre</i> , <i>N.º CAS</i> , etc.	<b>Crear plantilla de estructuras a partir del nombre</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Reacciones</b> y luego seleccione el vínculo de color rojo que figura debajo del cuadro Estructura. Introduzca <i>Nombre</i> , <i>N.º CAS</i> u otro identificador de un producto, reactivo o catalizador.	<b>Árbol de Reaxys</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Árbol de Reaxys</b> . Abra las carpetas para buscar un tema en la bibliografía química o introduzca un término en el cuadro de búsqueda. Luego haga clic en <b>Buscar</b> y desactive las casillas correspondientes a los temas que no son de su interés. Haga clic en <b>Buscar bibliografía</b> .
<b>Formularios de búsqueda</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Sustancias</b> y luego utilice el formulario <b>Identificación</b> que se encuentra debajo del cuadro Estructura. Introduzca nombre, números de identificación, etc. Haga clic en <b>Búsqueda</b> para seleccionar un término. Si desea agregar más campos, haga clic en el vínculo <b>Agregar/Quitar campos</b> que figura debajo del formulario.	<b>Formularios de búsqueda</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Reacciones</b> y luego utilice el formulario <b>Datos de la reacción</b> que se encuentra debajo del cuadro Estructura. Introduzca <i>Nombre del producto</i> , <i>rendimiento</i> , <i>Tipo de reacción</i> , etc. Haga clic en <b>Búsqueda</b> para seleccionar un término. Si desea agregar más campos, haga clic en el vínculo <b>Agregar/Quitar campos</b> que figura debajo del formulario.	<b>Formularios de búsqueda</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Bibliografía</b> y luego utilice el formulario <b>Datos bibliográficos</b> para introducir una consulta por <i>Autor</i> , <i>Tipo de documento</i> , <i>Título de publicación</i> , etc. Haga clic en <b>Búsqueda</b> para seleccionar un término. Si desea agregar más campos, haga clic en el vínculo <b>Agregar/Quitar campos</b> que figura debajo del formulario.
<b>Editores de estructuras</b>  	Haga clic en el tema de consulta <b>Sustancias</b> . Haga clic en el botón <b>Editores de estructuras</b> que se encuentra en el cuadro Estructura y seleccione una de las tres opciones. Haga clic en el vínculo <b>Ayuda</b> si desea obtener información sobre cómo usar ChemDraw, AccelrysDraw, ISISDraw o ICEdit.	<b>Editores de estructuras</b>	Haga clic en el tema de consulta <b>Reacciones</b> ; luego, presione el botón <b>Editores de estructuras</b> en el cuadro Estructura y seleccione una de las tres opciones. Haga clic en el vínculo <b>Ayuda</b> si desea obtener información sobre cómo usar ChemDraw, AccelrysDraw, ISISDraw o ICEdit.	<b>Agregar una estructura a la consulta bibliográfica</b> 	Si desea agregar un cuadro de búsqueda de estructuras, haga clic en el vínculo Estructura que figura debajo del formulario de consultas.

PROPIEDADES	
FUNCIÓN	COMENTARIO
Pregúntele a Reaxys	Introduzca un término. Ejemplos: <i>punto de ebullición del benceno</i> , <i>densidad de la quinolina</i>
Búsqueda de Fórmula molecular y Aleación Molecular Formula Alloy	Haga clic en el tema de consulta <b>Sustancias</b> . Haga clic en uno de los vínculos que figuran debajo del cuadro Estructura. <b>FM</b> : Haga clic en un elemento, use las flechas para agregar un rango para el recuento de elementos. Use las abreviaturas que se muestran para agregar grupos de la tabla periódica y otras opciones que aparecen a la derecha del generador de consultas de FM. <b>Aleación</b> : Seleccione el tipo de porcentaje en el menú emergente. Agregue elementos (distingue minúsculas de mayúsculas) en las columnas de la izquierda. Agregue porcentajes (o rangos) en las columnas de la derecha. Si es necesario, marque el cuadro <b>Componentes adicionales</b> .
Formularios de búsqueda	Haga clic en los temas de consulta <b>Físico</b> o <b>Espectros</b> . Utilice los campos de los formularios o, si desea agregar más campos, haga clic en el vínculo <b>Agregar/Quitar campos</b> que figura debajo del formulario. Haga clic en <b>Búsqueda</b> para seleccionar un término.
Agregar una estructura a la consulta de propiedades Add to Query: Structure	Si desea agregar un cuadro de búsqueda de estructuras, haga clic en el vínculo <b>Estructura</b> que figura debajo del cuadro de consultas.

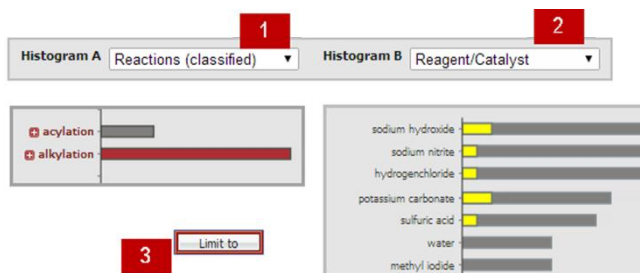
PRODUCTO NATURAL	
FUNCIÓN	COMENTARIO
Pregúntele a Reaxys	Introduzca un término. Ejemplos: <i>aislamiento a partir de aceitunas</i> (obtiene citas), <i>rmn de luteolina</i> (obtiene una lista de sustancias), <i>patentes de luteolina</i> (obtiene una lista de patentes que contienen la estructura de la luteolina)
Formulario de búsqueda (Producto natural)	Haga clic en el tema de consulta Producto natural. Haga clic en <b>Búsqueda</b> para seleccionar un término.
Formulario de búsqueda (Bibliografía)	Haga clic en el tema de consulta <b>Bibliografía</b> . Utilice el campo <b>Índice básico de citas</b> para realizar una búsqueda de textos de títulos, resúmenes y palabras clave.
Editores de estructuras	Dibuje la sustancia que fue aislada de un producto natural. Haga clic en el tema de consulta <b>Sustancias</b> . Haga clic en el botón Editores de estructuras que se encuentra en el cuadro Estructura y seleccione una de las tres opciones. Haga clic en el vínculo <b>Ayuda</b> si desea obtener información sobre cómo usar ChemDraw, AccelrysDraw, ISISDraw o ICEdit.

## 2. Analizar y filtrar



Analice los resultados según alguna de las siguientes categorías, mediante histogramas para observar de qué manera una categoría puede relacionarse con otra.

Document Type	Catalysts (classified)	Compounds (classified)
Authors	Reactions (classified)	Boiling Point
Patent Assignee	Reagent/Catalyst	Density
Journal Title	Solvent	Melting Point
Publication Year	Solvents (classified)	Molecular Formula
	Yield	Molecular Weight
		Pharmacological Effects
		Physical Data
		Solubility
		Spectroscopic Data



**Paso 1.** Seleccione una categoría para el Histograma A del menú emergente (la barra aparecerá en rojo y mostrará la cantidad de resultados relevantes en la lista de resultados).

**Paso 2.** Seleccione una categoría para el Histograma B del menú emergente (las barras aparecerán en amarillo y mostrarán la cantidad de resultados por categoría en la lista de resultados que son un subconjunto de la lista del Histograma A).

**Paso 3.** Después de analizar distintas combinaciones, haga clic en **Limitar a** (o **Excluir**).

A la izquierda de la página de resultados, se muestran las categorías de **Filtrar por**.

Algunos filtros incluyen un vínculo **Más** que le permite filtrar la búsqueda usando más información detallada.

Algunos filtros incluyen una ficha **por Valor** que le permite introducir un término.

### 3. Planes de síntesis

Genere una ruta retrosintética de forma manual o deje que Reaxys lo haga automáticamente. Para comenzar, haga clic en el vínculo **Sintetizar** que figura debajo de una estructura. Luego elija una de las tres opciones.

**AutoPlan Settings** **Opción 3**

No of plans to create: 10

Max. alternative branches: 5

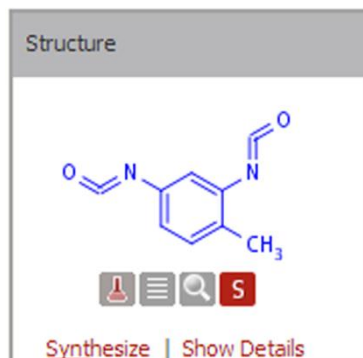
Max. steps: 5

All starting materials commercially available

Default yield for reactions without a given yield: 50 %

Autoplan

“por AutoPlan (con opciones)”. Seleccione parámetros sobre la marcha cuando genere automáticamente rutas sintéticas



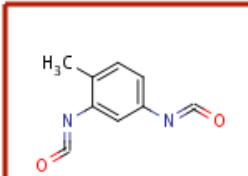
Manually  
by Autoplan  
by Autoplan (with options)

Synthesis 1

New Undo Open Save Rename Duplicate Output Print

**Opción 1**

“De forma manual”. Seleccione las reacciones que desea agregar al plan de la lista generada debajo del Planificador de síntesis

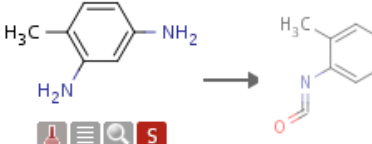


Synthesize (40)

Add selected

Create new plan

+



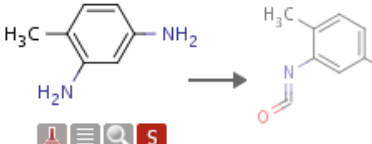
Add this reaction to p

Show Details

Add selected

Create new plan

+



Add this reaction to p

Synthesis 1 x Synthesis 2 x Synthesis 3 x Synthesis 4 x Synthesis 5 x Synthesis 6 x Synthesis 7 x Synthesis 8 x

New Undo Open Save Rename Duplicate Output Print LeR Right Top Resize Thumbnail Report

**Opción 2**

Synthesize (55)

Synthesize (19)

96.70 %

93.00 %

2 Details

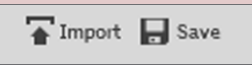



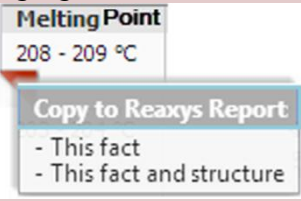


1 Details

Add Remove

Add Remove

“mediante AutoPlan”. Deje que Reaxys cree automática hasta diez planes de síntesis diferentes en función de las opciones preseleccionadas en la página Configuración

## 4. Cómo guardar, imprimir, exportar y generar informes

FUNCIÓN	COMENTARIO
<p><b>Guardar una consulta</b></p> 	<p>Haga clic en <b>Guardar</b> en el extremo superior derecho de la página Consulta.</p>
<p><b>Guardar una lista de resultados</b></p> 	<p>Haga clic en el botón <b>Historial</b>. Haga clic en el vínculo <b>Almacenar</b> a la derecha de la página.</p>
<p><b>Imprimir la página actual</b></p> 	<p>Haga clic en el botón <b>Imprimir</b> que se encuentra en la barra de botones del lado izquierdo.</p>
<p><b>Exportar resultados</b></p> 	<p>Haga clic en el botón <b>Salida</b>. Seleccione las opciones correspondientes a formato, rango y contenido.</p>
<p><b>Agregar datos a un Informe.</b></p> 	<p>Mueva el mouse por encima de los resultados. Haga clic en el triángulo rojo que aparece cerca de los puntos y estructuras de datos individuales. Seleccione entre las opciones que aparecen. Seleccione datos, sustancias, reacciones, planes de síntesis.</p>
<p><b>Ver un informe</b></p> 	<p>Haga clic en el botón <b>Informe</b>. Ordene los elementos mediante los vínculos <b>Mostrar</b>, <b>Desplazar hacia arriba</b>, <b>Desplazar hacia abajo</b> y <b>Quitar</b>. Agregue texto a un elemento mediante el vínculo <b>Anotar</b>.</p>
<p><b>Enviar un informe por correo electrónico</b></p> 	<p>Haga clic en el botón <b>Enviar</b> de la página <b>Informe</b> y complete el formulario. El informe se enviará como un documento html adjunto comprimido.</p>

