

Reaxys

CHEMICAL R&D

# Case Study:最適な合成方法の検索に 反応化合物データベース



## Summary

化学データベースの活用強化のためReaxysを導入した株式会社ヨーユーラボ様にインタビューを行い、導入の経緯や活用事例を伺いました。



# お客様から依頼を受けて合成方法を検討する時にReaxysの合成構築は便利です。



市川哲也 代表取締役社長

## 会社概要

社名:株式会社ヨーユーラボ  
代表者:代表取締役社長 市川哲也  
本社所在地:群馬県太田市新田反町町108-1  
TEL:0276-20-8033  
FAX:0276-56-7990  
資本金:6千万円  
設立:平成5年11月  
従業員数:20名(平成28年6月現在)

御社の沿革や概要について教えてください。

市川様『弊社は、有機化合物受託製造メーカーとして平成5年11月より事業を開始しました。初めは4名でしたが、現在は従業員20名で事業を継続しています。』

どのような分野のお客様が多いのでしょうか？

市川様『特定の分野にこだわることなく、電子材料、医・農薬、特殊試薬、などお客様のご要望に合わせてお受けしています。業績に波はありましたが、多くの分野に関わっていたためか各業界のマイナスの影響を結果的に小さくすることができたと思っています。』

市川様『国内外を問わず多くの受託メーカーと競合していますが、弊社の強みは①文献調査から始められ、②お客様とお打合せしながら行い、③各種精製操作を駆使し、④高純度・高スペックの化合物を、⑤1gから50kg前後までの範囲でご提供できるところにあると思います。』

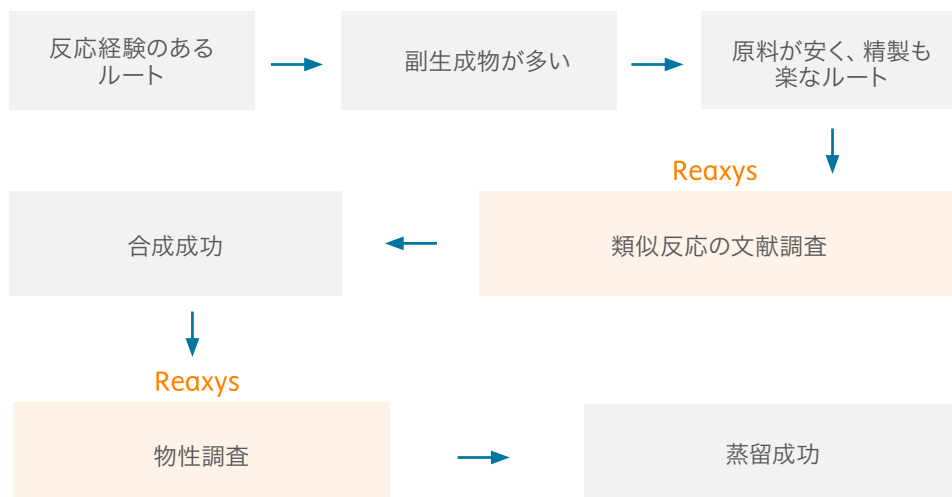
Reaxys導入の経緯について教えてください。

並木様『Reaxys導入前までは従量課金制の検索サービスを利用していました。このサービスではReaxysのコンテンツも利用できるのですが、これを通じてReaxysの良さを知っており興味がありました。ちょうどその頃に、弊社では化学データベースの活用の強化を検討しており、そのタイミングでReaxysの導入を決定しました。実際導入するとかなり有益な情報をReaxysから得ることができています。また、従量課金制ではないので費用を気にすることなく利用できるもの良いです。』

Reaxysでもっとも使っている情報はどのようなものになりますか？

並木様『主に合成反応、物性情報の検索に利用しています。物性情報の検索ではReaxysを使っていないと見落とすものが多いので重宝しています。情報の信頼性も高いです。また、お客様から依頼を受けて合成方法を検討する時にReaxysの合成構築は便利です。ヒットする化合物が無くても構造類似性や部分構造検索機能で候補を出してくれるのが有難いです。』

## HPPの合成 (※1)





並木様

### Reaxys特に便利だと感じる機能はありますか。

並木様『教科書のかわりとして使っています。また、Reaxysは逆合成経路を調べた時に複数の反応をまとめて提案してくれるので便利だと思います。出てきた反応情報を各種設定で絞り込みが出来るのもいいです。』

並木様『実務で活用した一例としてHPP(仮名)の合成があります。まず過去の経験を基に或る触媒反応を試したところ、予想に反して副生成物が多く精製も困難でした。そのため未経験の合成法でしたが、Reaxysの類似反応の検索を元に別法を試したところ、満足できる結果が得られました。Reaxysの物性検索結果の通りの蒸留条件で容易に精製でき、お客様にご満足頂ける品質の製品を納入することができました(※1)。

また、別にPS(仮名)という合成がありました。こちらの合成は実験書の条件で実施し、更に収率アップを図るため反応の試行錯誤を行いました。その過程の試作スケールの反応で危険な副産物が発生しました。小さいスケールの反応でしたので大事にはいたりませんでした。Reaxysでこれを検索した結果、実施した反応条件で危険な副産物が発生する情報が収録されておりました。Reaxysを使って調査をしておくべきでした(※2)』

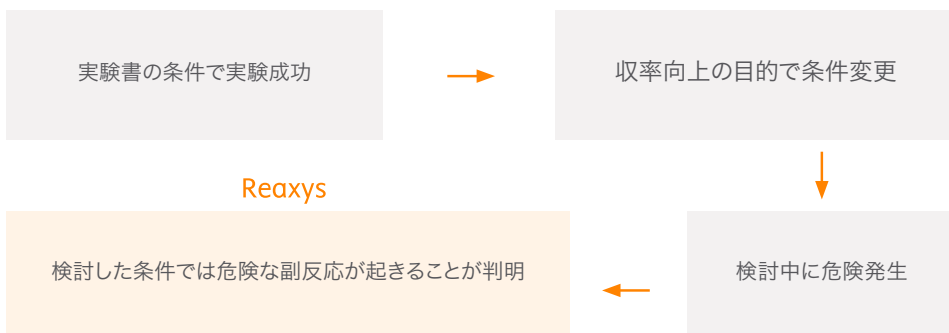
### Reaxysの導入により各種情報の入手のしやすさや時間の短縮はございましたか？

場合によっては数日かかっていた検索が数分でできるので有難いです。過去においてはどうしても見つからない情報は公的機関の図書館へ足を運んで調査していたこともありました。



市川様

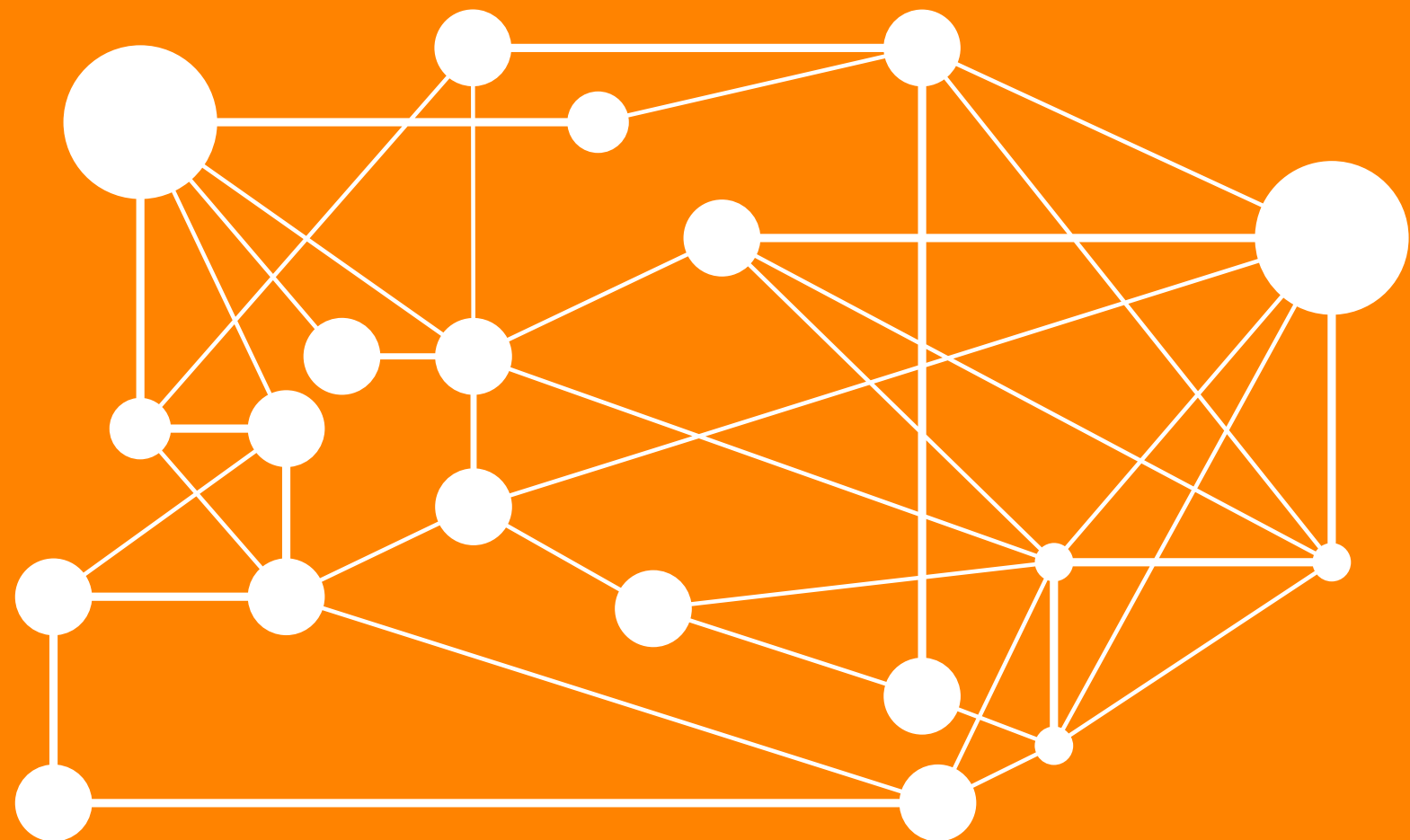
## PSの合成 (※2)



### 今後の御社の展望についてお聞かせください。

来年新工場を建設しますが、新工場では主に継続案件を、そして現工場では主に新規案件をそれぞれ手掛ける予定です。新規案件では化学情報の検索は欠かせないので、Reaxysの利用頻度は上がると考えています。





# Reaxys

Reaxys provides a quick search form that accepts keywords, chemical identifiers and chemical structures—the commonest query elements needed by chemists. The possible interpretations of the query are presented so that users can immediately get an overview of the results—and see results that might otherwise have been overlooked.

## LEARN MORE

Contact us to discover how Elsevier's information tools and trusted content can help your company save time and gain cutting-edge insights to drive innovation.

Visit <http://jp.elsevier.com/reaxys>  
or contact your nearest Elsevier office.

## トライアル随時受付中

お問い合わせ先

エルゼビア・ジャパン株式会社

〒106-0044 東京都港区東麻布1-9-15 東麻布一丁目ビル4階

Tel: 03-5561-5035

Email: [jpinfo@elsevier.com](mailto:jpinfo@elsevier.com)