

Reaxys®



塩野義製薬株式会社様
インタビュー記事
「Reaxysは私にとって宝の山です！」

会社概要：

塩野義製薬株式会社は1878年に創業した医療用医薬品を主とする製薬企業です。「常に人々の健康を守るために必要な最もよい薬を提供する」という企業理念のもと、「創薬型製薬企業として社会とともに成長し続ける」ことを経営目標に掲げ、自社研究開発に加え国内外のアカデミアや企業との連携など、社外リソースの活用を積極的に推進しています。革新的な新薬の継続的な提供を通じ、世界中の皆さまの健康とQOLの改善に貢献しています。

本インタビューは2017年10月に3名の研究員の方々にReaxys/Reaxys Medicinal Chemistryの活用事例を伺ったものです。インタビューは主に木村様に回答頂きました。



左から、木村 千明様、増田 真奈美様、野津 梓様
(創薬化学研究所 創薬先端化学部門 シード創製グループ所属)

現在の業務内容について教えてください

入社以来創薬化学研究所で研究員として勤務しています。もともとは有機合成なども手掛けていましたが、現在では「シード創製」グループにて、Cheminformatics技術を社内でのどのように活用するかを模索する毎日です。塩野義製薬では色々なデータベースツールを契約していますが、それぞれのツールの特性を把握して活用例を示したり、使い分けの提案、標準化などを通して、研究員がより情報を有効活用できるような啓蒙活動を行っています。

Reaxysを使い始めたきっかけは？

社会人になって、同じ職場の先輩たちが使っているのを見てからです。たくさんのデータベースツールから自分に合ったものを探すのは大変なので、やはりまわりの同僚から評価の高いものを試してみるようになります。Reaxysは反応検索に強みがあり、社内でも固定ファンがいるツールですので、自然と使うようになりました。

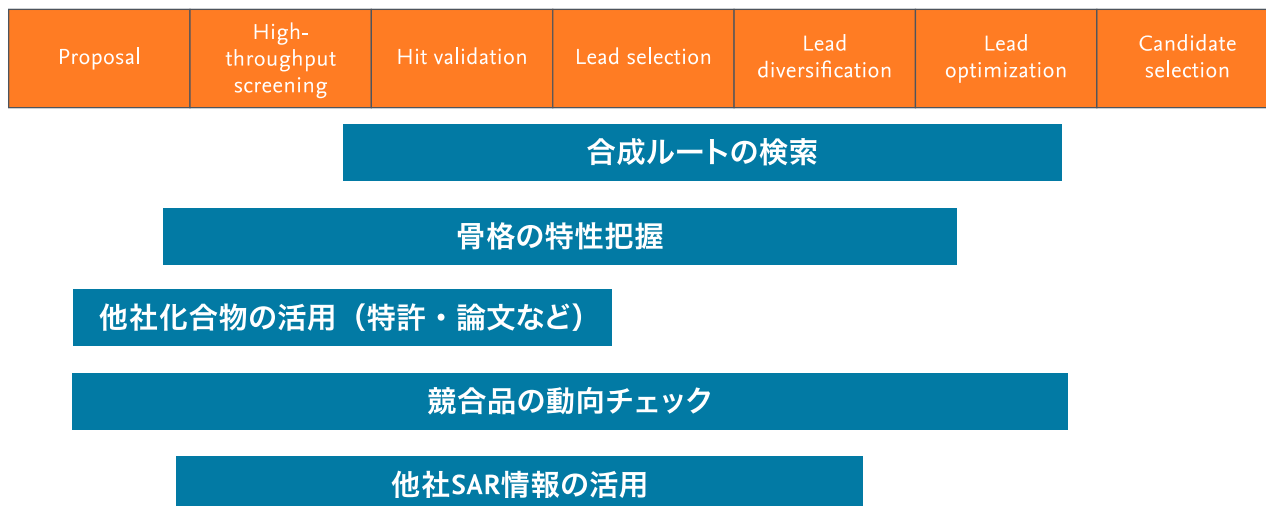
Reaxysのどのようなところに利便性を感じていますか？

最初は化合物や反応を普通に検索していました。そのころからReaxysのデータではある化合物に紐づいてあらゆるデータが収録されているところが便利だと思っていましたし、レコードのフィールドの多さに好奇心をそそられていました。また、検索条件をかなり柔軟に作成できる、複数条件を組み合わせられるなど、検索時の自由度の高さも魅力的ですね。

ある日Reaxysのデータをチェックしているときに、偶然右クリックしてみたら、化合物の構造だけでなく、薬理活性など色々なデータをSDファイルでエクスポートできることに気が付き、そこからReaxysにはもっといろいろな可能性が隠されているのでは？と自分なりにReaxysのデータ活用について試行錯誤を始めるようになりました。

今はどのようにReaxysを活用していますか？

現在ではReaxysだけではなく、姉妹製品のReaxys Medicinal Chemistry (RMC) も併せて契約しています。以下の図に示すように、Reaxys/RMCの情報は創薬の様々な場面に応じた活用が可能です。



ただ、エンドユーザーではReaxys/RMCの豊富なコンテンツを十分に使いこなすのは難しいのが現状です。そこで、私たちのチームではReaxys/RMCからエクスポートしたデータを他の解析ツールと組み合わせて加工することにより、Excelなどの一般的で扱いやすいファイル形式で提供しています。

プロジェクト単位などでエンドユーザーが同じ情報を共有し、議論できるような仕掛けづくりをしているのです。このような形をとっておけば、プロジェクトメンバーの入れ替えなどにも柔軟に対応可能です。

Reaxys/RMCで改善を望む点はなんでしょうか？

まずは収録のタイミングが一定ではない点です。特許、学术论文などソースによってある程度はばらつきがあるのは仕方ないとは思いますが、2週間程度のタイムラグでデータベース化されているのが理想的です。

また、Reaxysのデータはかなりフィールド項目が多いのが魅力の一つですが、すべての化合物で同じフィールドのデータを収録していない、という点も今後拡充していただければうれしいです。

同じエルゼビア製品であるScopusでジャーナル名で検索した結果とReaxysの検索に整合性を持たせるなど、数多くのデータベースを提供しているエルゼビアにだったらできることもあるのではないかと期待しています。

世の中には色々なデータベースがあって一長一短なのは理解しているのですが、ユーザーの習熟度、研究テーマも様々な中で、それぞれの利用者の目的を充足するサービスになってもらえればと思っています。

将来的には、Reaxys/RMC上で検索⇒確認⇒解析⇒他者との議論までが完結できるツールになってくれると、私の理想に近づくとおもいます。

今後の塩野義製薬様におけるReaxys/RMCの活用イメージを教えてください

Reaxys/RMCのデータは私にとって宝の山です。APIを導入したことによって、今後はますます可能性が広がっていくと思います。チームメンバーとともに、より研究所内で活用しやすいデータ提供の形を構築していきたいと考えています。

インタビューへのご協力ありがとうございました。

Reaxys と Reaxys Medicinal Chemistryについて

Reaxys（リアクシス）は化学反応情報と実測物性値を収録した世界最大級の反応・化合物データベースです。有機化学から無機化学、有機金属、錯体化学まで幅広くカバーしています。また、厳選した収録源から専門家によりきめ細かく収録され、高い信頼性を誇ります。更に、操作性の高いインターフェース、比較検討が容易な結果表示機能を搭載し、化学研究者の生産性向上に寄与します。Reaxys Medicinal Chemistry（リアクシス・メディシナルケミストリー）は、医薬品候補化合物に関連した生物活性データ、薬理作用、ADME特性等、最新の質の高い実測データを抽出しまとめたデータベースです。候補化合物の選択プロセスの効率化と生産性を向上させ、創薬探索のための化合物デザインやターゲットへの最適化に携わるメディシナルケミストの研究の効率化に寄与します。

お問い合わせ先（トライアル随時受付中）

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: 03-5561-5034 Mail: jp.corporate@elsevier.com