

Reaxys®

DRUG DISCOVERY & DEVELOPMENT

## 教育・研究機関におけるReaxys活用事例

岐阜薬科大学 創薬化学大講座 薬品化学研究室



### 概要

岐阜薬科大学佐治木教授と研究グループの方から、研究や教育におけるReaxysの活用事例を伺いました。



エルゼビアの保守サポートの一環として実施されるReaxys講習会は、製品機能・活用方法の新たな発見や、化学へのさらなる興味の一助となっており、これをきっかけとして大学院に進学する学生が増えることを期待しています。

岐阜薬科大学 創薬化学大講座 薬品化学研究室 佐治木弘尚 教授



佐治木弘尚教授

岐阜薬科大学は1932年に設立された岐阜薬学専門学校を前身とする単科大学であり、基本理念である「人と環境にやさしい薬学(グリーンファーマシー)」に基づき教育研究や社会貢献に取り組んでいます。

創立以来、全国各地の中核的な病院や医療行政に携わる医療現場で活躍する薬剤師を輩出し、同時に製薬企業及び関連化学企業などの研究者や技術者など社会の様々な分野で活躍する多様な人材を育成してきた伝統と実績を持ちます。

創薬化学大講座薬品化学研究室は同大学教育理念に基づき、環境負荷の低い有機合成反応、触媒、および重水素標識法の研究・開発を行っています。これらのテーマにおいては、様々な製薬・化学系企業等と共同研究を行っています。

担当されている講義を教えてください。

澤間准教授とともに以下を担当しています。

学部： 医薬品化学、危険物化学、総合薬学演習、薬学基礎実習、有機化学実習

大学院： 医薬品プロセス化学・機能性有機化学（博士前期課程）、創薬化学特論（博士後期課程）、新薬論（岐阜大学連合大学院連合創薬医療情報研究科博士後期課程）、医薬品開発学（岐阜大学大学院工学研究科博士前期課程）

企業との共同研究について教えてください。

製薬、化粧品、化学、農薬、石油化学、金属化学など共同研究先は多岐に渡ります。

上記に挙げた企業が創製した化合物における合成ルートの探索・最適化あるいは触媒開発を主に行っています。

特殊な機器を必要とする一部の業務を除き、特許調査も含めた実務をほぼ当研究室で行っています。

研究を行う上で文献調査が必要になると思いますが、そのような業務を行うに当たっての課題や問題点を教えてください。

調査の過程で膨大な数の文献や関連データが発生することです。

それらすべてを精査することは物理的に不可能ですので、調査対象となる特定の反応や物性値を直接検索できるインターフェースが実装されたReaxysは、時間短縮や質の高いデータを我々にもたらしてくれます。

研究業務におけるReaxysの位置付けを教えてください。

様々な化学系データベースを使える環境にありますが、Reaxysは反応検索や実測物性値の入手先としての第一選択と考えています。

- ・各原子の細かい設定を行った検索、例えばアイソトープの検索ができる唯一の化合物データベースであること
- ・反応検索に最適化された検索インターフェースが実装されていること
- ・膨大な数の実測物性値が収録されている事
- ・実測物性値の種類や値が表形式で記載されていること
- ・各核種におけるスペクトルデータの原著掲載ページが明示されていること

Reaxysのようなデータベース活用方法に関する講義を行っていますか。

講義としては行っておりませんが、保守サポートの一貫として、開発元による定期的な講習会を実施しています。

Reaxysの基礎的・応用的な活用方法の講習会を通じて、これまで使っていなかった製品の便利な機能を知るとどまらず、データベースの有用な活用方法を学生が知ること、化学により興味を持ち、一人でも多くの学生が大学院に進学してくれることを期待しています。

特にどのような時にReaxysを活用いただいていますか。

論文執筆時のバックグラウンドデータ入手時によく使っています。

特定化合物におけるNMRデータ、物性値、合成ルートの記載が必要になる際、Reaxysを活用することでこれらデータを迅速に入手することができます。

また、合成研究を行っている際、予期しない反応、あるいは生成物が出てきた場合にReaxysは重宝します。たとえば、 $A+B=C$ という反応を予測していた際、 $C$ 以外の生成物が観察されるような場合Reaxysで情報検索し、周辺情報を調査します。

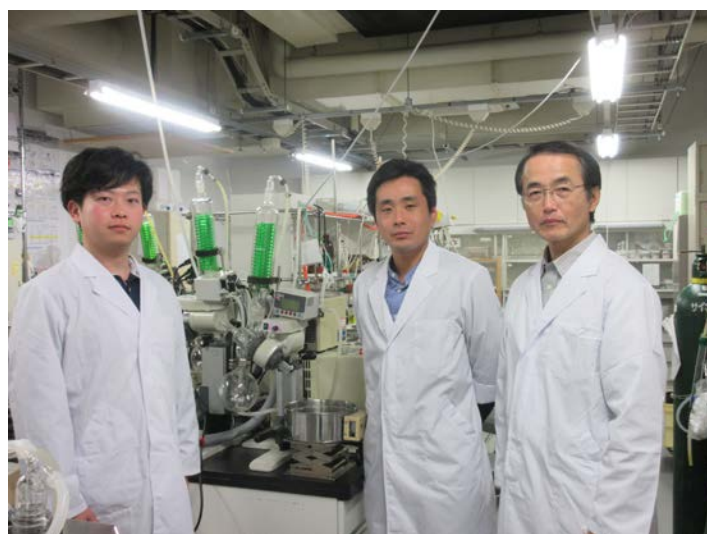
Reaxysに満足されていますでしょうか。

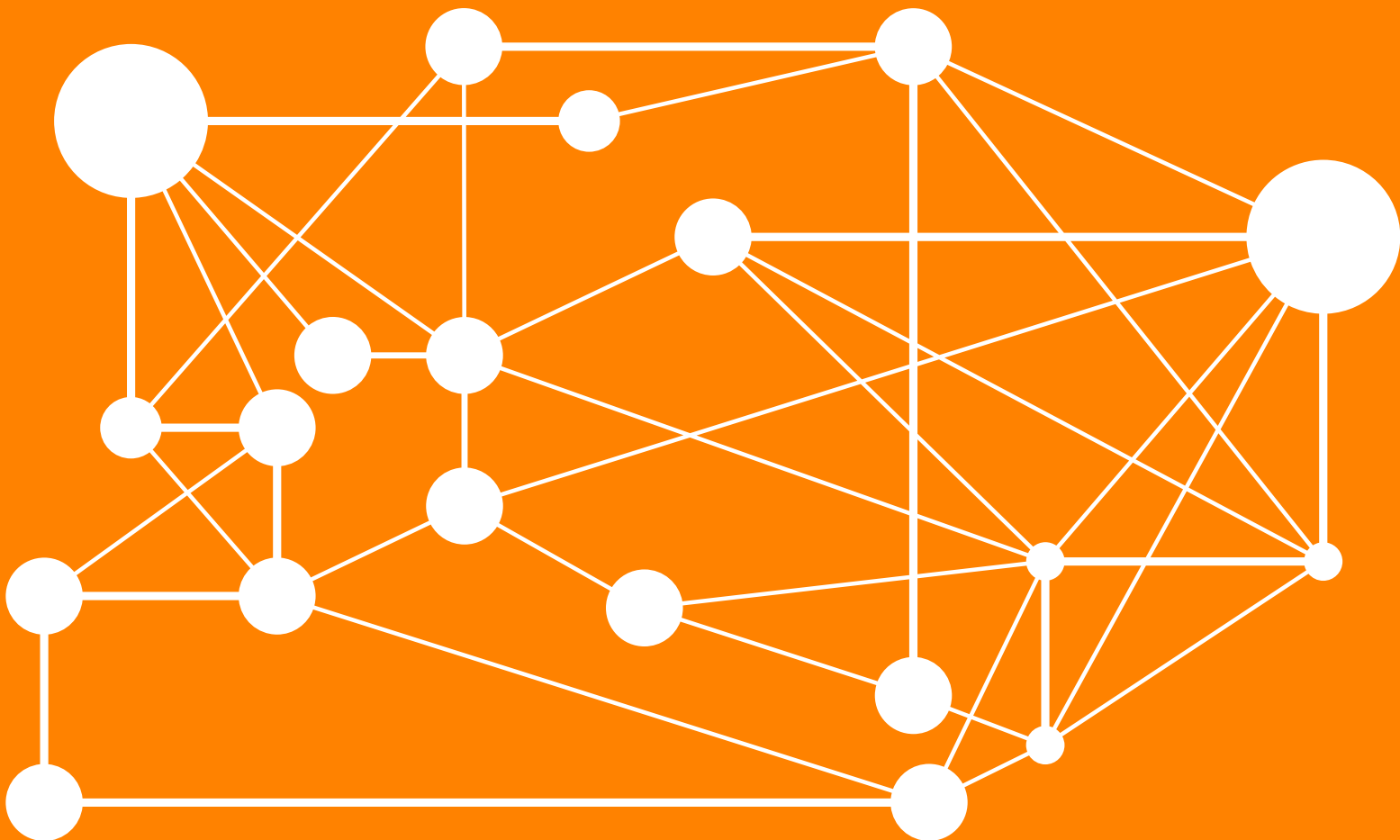
はい、もしReaxysがなければ、膨大な論文を一報ずつ精査する必要があります。Reaxysを活用することで有用なデータが迅速に入手でき、それによって学生の化学に対する興味がより一層強くなると期待しております。

今後どのような研究ツールが登場したら面白いアイデアを教えてくださいませんか。

ケミカルシフト値を入力するだけで構造式がアウトプットされるようなツールがあると有用だと思います！

左から、市川智大様（博士後期課程）  
澤間善成様（准教授）  
佐治木弘尚様（教授）





## Reaxys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、化学者のワークフローに合わせた効率的な検索性を提供します。  
産学の著名な化学者からなるReaxys諮問委員会が厳選した雑誌や各種特許から各種情報を専門家が情報を抽出しています。  
必要な情報を確実かつ迅速に得ることで、化学研究者の生産性が向上します。

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1丁目ビル4階

Tel: 03-5561-5035