

研究開発の効率化 意思決定に貢献

Reaxysは、研究開発における重要な意思決定を行うために必要な高品質な化学データをご提供します。

- ・ 学術文献・特許より、マニュアルで抽出された実測物性値、反応、実験方法などを簡単に素早く検索、一覧表示
- ・ ファインケミカル、材料、医薬品、農薬、石油化学製品などの研究開発、商品化においてgo/stop判断や実験計画をサポート
- ・ データの複雑さとデータのサイロ化を軽減し、R&Dマネジメントの効率向上に寄与



Reaxys®は、 化学研究に必要な「データ」そのものをご提供します。

Reaxysは、学術文献・特許より高度にキュレーションした実験データと関連文献のデータベースです。

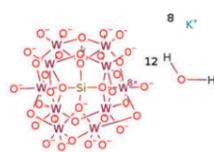
有機化学、無機化学、錯体化学についての

正確な物質特性、反応データを実験法、特許情報、引用文献、商業的利用可能性の詳細とともに提供し、
化学研究開発プロジェクトの重要な意思決定に貢献します。

文献から5億件以上の構造式に紐づいた実験データを、各データポイントの出典情報とともに
簡単に利用できるように、Reaxysは化学系ソリューションの中でもユニークな存在です。

無機化学

- 材料としての金属比率や混合比は？
- 金属を含む触媒は選択可能？



新規性調査

- 新規性／特許化できるか？
- 自由に扱えるか？



Druggable化合物の選定

- 薬剤として適した化合物か？
- ターゲットは？



+Target & Bioactivity

プロセス化学

- スケールアップしたときの条件
- 安全、安価なプロセスルートの選定

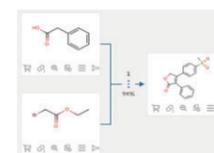


物理化学的特性

- その物理化学的性質は何か？
- 材料が持つ力学的特性をえられるか？
- 熱力学的電気的な物理特性は？

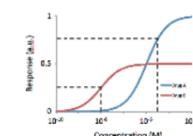
合成計画

- どう合成するか？
- 出発物質は手に入るか？
- 未知の反応を予測できるか？
- 環境に配慮した溶媒、触媒を選択可能か？



メディシナルケミストリー特性

- 活性があり、薬剤として有効か？
- 選択性があるか？
- オフターゲット活性があるか？



+Target & Bioactivity

プロダクト分析

- プロダクトの精製はどうするか？
- プロダクトをどう分析するか (NMR, HPLC, UV, IR) ?



薬学、薬物動態、安全性

- ADMEや毒性のプロファイルは？
- CYP, HERGの阻害はあるか？
- AMES testで陰性か？ +Target & Bioactivity



分子デザインから安全性まで

- 分子デザイン、合成、スケールアップまで、数百年間に蓄積された知識を活用可能
- 構造式に紐づいた特性値、生物活性データにより、素早く効率的なSAR解析が可能※
- 毒性、ADMEデータの利用で、安全性を考慮しての分子デザインが可能※

※Target & Bioactivityとの併用例

物質化学、材料化学

- 収録の実測物性値は5億5000万件以上、様々な出力形式に対応可能
- マテリアルインフォマティクスにも有用
- ある特性をもつ物質を特定のパラメータの数値で検索可能
- Reaxys独自の索引語により概念検索での重要文献の発見が容易に

合成計画の効率化

- 同一反応の条件を列挙して表示し、試薬や溶媒の比較・検討を簡便化
- 最適な合成経路を自動および手動で設計
- 未知の化合物/反応については、最新AIを用いた合成予測利用が可能

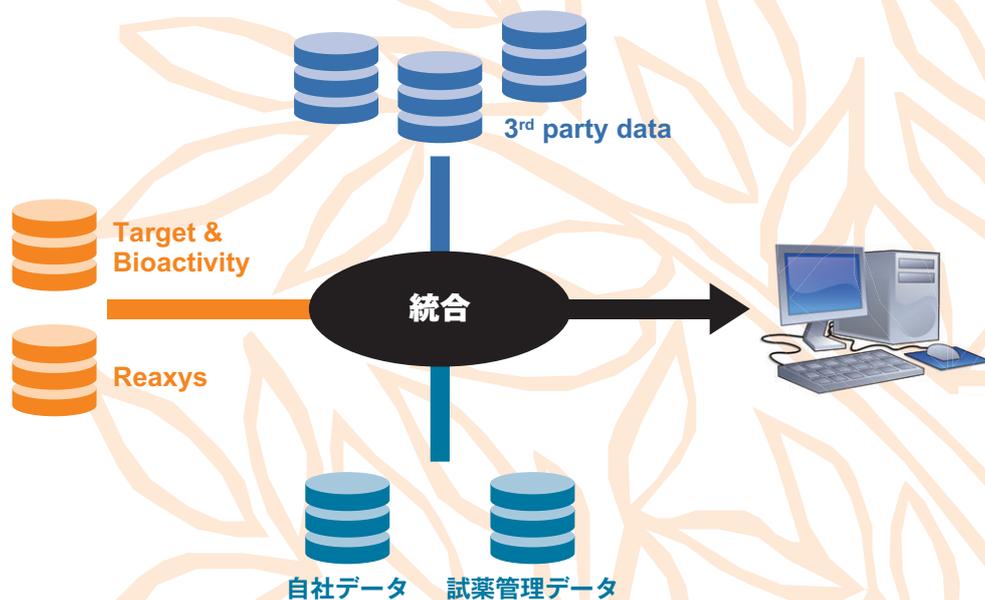
合成予測ツール

- ・ 深層学習、ニューラルネットワーク、モンテカルロ決定木を用いたAIの学習により、1,500万件有機シングルステップの反応データを用いて、AIが40万件の反応ルールを自動生成
 - ・ AIが決定したルールに基づき、既存および新規化合物の合成ルートをデザインし予測
 - ・ イノベーションの加速、意思決定支援、時間短縮に寄与。企業独自の中間体や化学反応データをフレキシブルに統合可
- *予測結果の質は複数の試験で検証済



データ統合

- ・ サイロ化している社内データと公開されているデータを統合し、合成計画、特許出願、論文投稿などの生産効率を向上
- ・ 眠っている社内データも活用し、検索から試薬管理までのシームレスな研究管理による研究開発の加速化とコスト削減を実現



トライアル随時受付中

お問い合わせ

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 : 03-5561-5034 E-mail : jp.corporate@elsevier.com

Reaxysとは
<https://elsevier.widen.net/s/4p0tor6nzi>



日本語ホームページ (製品情報)
<https://www.elsevier.com/ja-jp/solutions/reaxys>