

# 情報計算化学生物学会2021年大会ランチョンセミナー 「Elsevier R&D Solutionsのご紹介～化学反応情報の活用～」

日時: 2021年10月28日(木) 12:00-13:00

講演者: 出羽俊和  
エルゼビア・ジャパン株式会社  
ライフサイエンスソリューションコンサルタント



エルゼビアは、電子ジャーナルをはじめとした各種のオンラインデータベースの提供にとどまらず、Information analytics companyとして、データ駆動型R&Dを支援しています。

本ランチョンセミナーでは、データ駆動型R&Dを推進するためのエルゼビアのソリューションの中から、Reaxys Contents IntegrationとEntellect Reaction Workbenchについてデモを交えてご紹介します。

## 1. Reaxys Contents Integration

- 電子実験ノート等に登録した自社の反応情報等をReaxys上で統合参照

## 2. Entellect Reaction Workbench

- Reaxys収録の高品位な反応情報を基に、各種の予測モデル構築を行うためのプラットフォーム

## Reaxysの主な特徴

### 1. 化学研究で実際に必要な「データ」そのものを提供

- 化学関連論文や特許から必要な「情報そのもの」を的確に抽出して提供
- 1700年代からの価値のある反応、実測物性値情報を収録
- 情報源: ジャーナル約16,000誌、特許(WO/US/EP、アジア特許)
- 傾向分析に対応した充実したフィルタ

### 2. シンプルかつ直観的なインターフェース

- 構造検索とキーワード検索に対応したQuick Searchと複雑な掛け合わせ検索に対応したQuery Builderを搭載
- 文中の言葉の前後関係を考慮した自然言語処理に対応したテキストサーチ
- 検索結果候補を複数提示するSuggestionオプション
- 合成法、化合物ごとに複数の情報源から情報を集約したデータ構成

The screenshot displays the Reaxys web application interface. At the top, there are navigation tabs for 'Quick search', 'Query builder', 'Results', 'Synthesis planner', and 'History'. The main content area shows a search result for a chemical reaction, with a '反応式' (Reaction) button. Below the reaction, there is a '論文由来データ' (Literature-derived data) button. The interface includes a 'Filters and Analysis' sidebar on the left with various filters like 'By Structure', 'Yield', and 'Reagent/Catalyst'. A 'Quick Search' box is also visible at the bottom of the interface.

## Reaxys Contents Integration: Reaxysを合成研究者の情報ポータルに

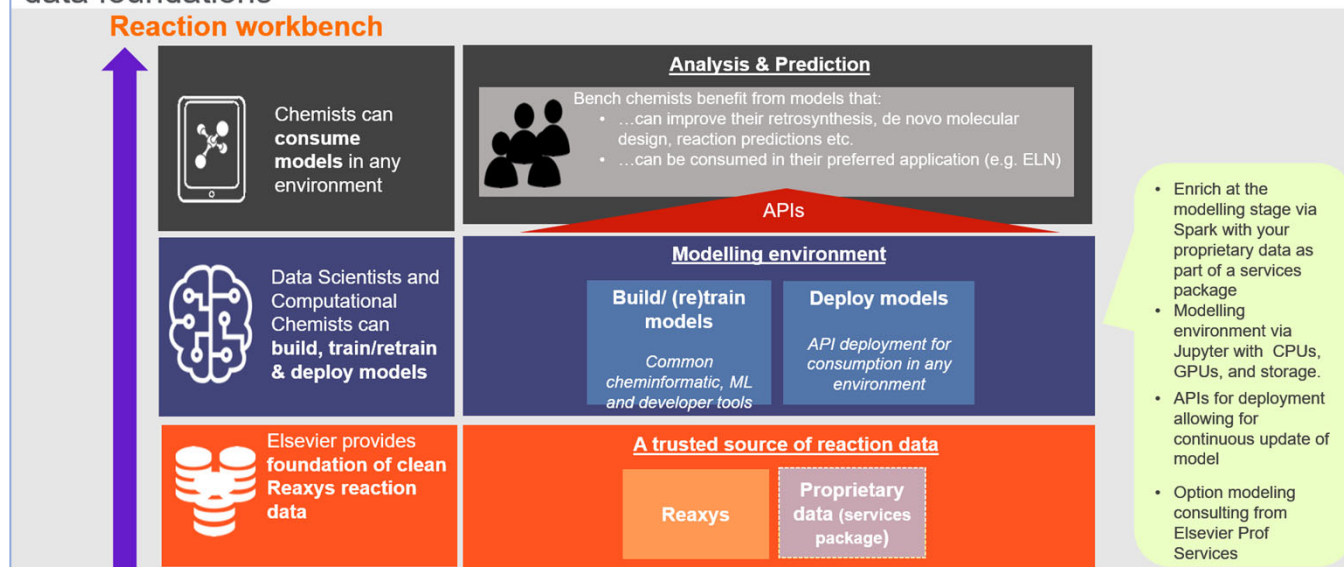


専用のReaxys環境を構築

自社内の化学系情報(反応・試薬など)を  
Reaxys上で統合参照することで

- 検索の効率化と効果的な情報収集
- シンプルで合理的なワークフローの確立
- 容易なコスト管理
- 単純作業の軽減と時間の有効活用

## Entellect's Reaction Workbench: Better predictive reaction chemistry from Reaxys' solid data foundations



お問い合わせ先：

〒106-0044 東京都港区東麻布 1-9-15 東麻布一丁目ビル4階

E-mail: [jp.corporate@elsevier.com](mailto:jp.corporate@elsevier.com)

<https://www.elsevier.com/ja-jp>

