研究情報共有システム

CBIS：合成化学用電子実験ノートの有効性

Chemical and Biological Information System（CBIS）は、化合物カタログ・試薬在庫・細胞株・機器分析データ・文書等の研究に関わるあらゆるデータを統合して管理できるWebシステムです。国内外で多数ご導入いただいており、エンドユーザーとシステム管理者の両者に配慮した設計、多様なご要望にお応えできる柔軟なカスタマイズ性、優れたコストパフォーマンスで高い評価をいただいております。今回は、化合物の合成実験を記録するCBISの合成化学用電子実験ノートについて紹介します。

合成実験における実験記録の重要性

ここ数年で実験ノートに対する関心が一気に高まり、その重要性が再認識されています。検索性・アクセス性・ログとしての機能といった実験ノートの要件や、電子ファイルで得られる生データや参考文献の増加を考慮すると、従来の紙の実験ノートよりも電子実験ノートの方がより利便性が高いと考えられます。電子実験ノートは研究者にとっては実験の再現性や正当性を証明したり、研究指導者や上長に研究成果を報告したりする手段になるだけでなく、実験データが一ヶ所に集約されているため論文を書くときの情報参照の時間を大幅に削減できます。一方、企業や研究機関にとっては次にあげるようなより多くの効果を享受でき、研究の質向上や期間短縮、研究リソースの有効活用につなげることができます。

①研究情報の一元管理によりデータの紛失や散逸のリスクを回避できる。
②実験で問題が発生したときに、原因調査に利用できる。また、成功した実験のみならず失敗の記録をつけておくことで、失敗の原因究明や繰り返し防止に役立つ。
③熟練した研究者が異動や退職したときでも、技術や知識を継承してノウハウとして活用することができる。
④ノートの記述方法の標準化により、必要な情報の記入漏れ防止や閲覧性の向上につながる。
⑤テーマの進捗管理を上長が定期的に行うことで停滞による時間ロスを防止できる。
⑥情報共有により研究者同士の議論の活性化が図れる。
⑦上長や担当者が適切なタイミングでノートをチェックすることで捏造や改ざんなどの不正を防止でき、社会的信用を失うような事態を避けることができる。

とりわけ化合物の合成研究は温度、撹拌、滴下速度、不純物などの実験の微細な条件やコツ、勘が研究の成果に影響します。そのため、実際に合成に携わった研究員の実録を参照できる電子実験ノートの利用価値が特に高いと言えます。合成研究における電子実験ノート導入には、上記に加えて以下のメリットがあります。

⑧反応式を入力するだけで、構造式や分子量など化合物情報の自動登録や化学量論計算がなされるため、入力ミスや計算の手間を省ける。
⑨構造式や反応式による検索で目的の実験ノートを素早く抽出できる。

使いやすい電子実験ノートの条件

電子実験ノートには、大別するとFDA 21 CFR Part 11などの医薬品開発における規制に対応するものとしないものとがあります。大学などの研究機関や企業の基礎研究部門における規制対象外の研究であれば、以下のような使いやすさの条件を満たす電子実験ノートが研究の効率化に役立ちます。

・フォームが直観的で記録しやすいこと
・研究分野に適した入力補助機能が充実していること
・検索や閲覧がしやすいこと
・Webベースで実験室からでも利用できること
・動作が軽いこと

規制対象外での利用を目的としたCBISの合成化学用電子実験ノートは、上記の条件を満たしています。

合成実験用ノートの管理・運用事例

CBISのノートはブックとページで構成されており、ブックにページを綴じていくようなイメージです（図1）。一般的には次のような運用が行われます。まず研究テーマや実験種別のような目的別にブックを登録し、著者、共著者、承認者などの役割をもったユーザーや閲覧可能なグループを割り当てます。次に、著者あるいは共著者が目的に合ったブックにページを挿入して実験の記録をつけます。実験中は書きかけのページを一時保存しながら、進行に合わせて逐次記入をしていきます。実験が完了してページへの記入が終わると、承認者がページの内容を確認して承認もしくは著者に差し戻しをします。

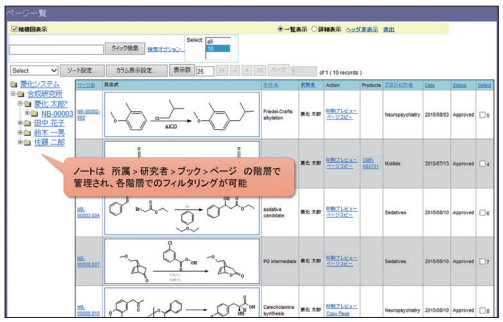

図1　ブックとノートの表示

CBISではいつ誰がどのページに対してどのような操作を行ったのかの履歴を記録しますので、不正などのチェックに役立ちます。

ChemInnovation Software, Inc.

合成実験用ページの機能

反応式の登録、再利用

CBISには構造式や反応式を記述するための専用のソフトウェア Chemistry 4-D Drawが付属します。このソフトウェアで描画した反応式をページに貼り付けると、化合物や試薬がそれぞれ反応物と生成物とに分類されてフォームに挿入されます(図2)。各化合物には構造式、化学式、式量、分子量、モル当量が自動入力されます。基準となる反応物の使用量を手入力すると化学量論計算がなされ、その他の反応物の必要量や生成物の理論量が導出されます。反応実験終了後に収量と純度を手入力すると収率が導出されます。このように最低限のデータを手入力するだけで必要な値が挿入・導出されるため、計算の手間や転記ミスを防ぐことができます。

実験では構造決定のチャートやTLC画像、融点などの物性測定データなどのファイルデータが生成します。これらの生データや参考文献などのファイルをいくつでもページに添付して反応式と併せて保存することができます。実験に関連するファイルを一か所に集約できるため、データの紛失防止、ファイルの検索時間の短縮、知見を再利用しやすいといった効果が得られます。

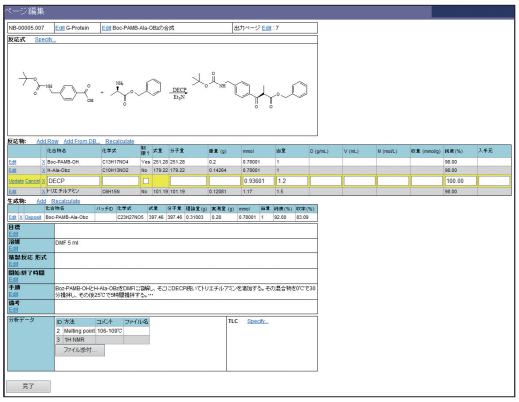

図2　合成化学用電子実験ノートの編集画面

再実験や追実験などで同じ反応実験を行う際には、登録済みのページを複製して再利用できます。必要箇所を書き換えるだけなので、ノートを記録する労力の軽減と入力ミスの抑制が図れます。

コンビナトリアルケミストリー対応

素反応式と化合物群を組み合わせたコンビナトリアルケミストリー合成反応にも対応しています。反応物として2種類までのR-groupリストを指定すると、生成物が導出されます(図3)。

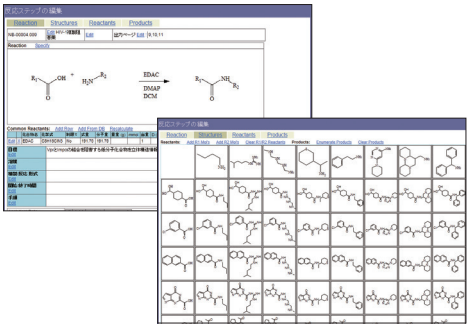

図3　コンビナトリアルケミストリー合成反応の登録画面
左：素反応、右：Enumeration

在庫管理機能との連携

CBISの在庫管理機能と相互に連携することでより入力や検索の時間を抑えられます。具体的には、化学反応の生成物を化合物サンプルとして登録する際に、分子量や純度などの物性値が転記され、収量が内容量として挿入されます。また、当該ページへのリンクも保持されるので、化合物サンプルの合成記録を素早く確認できます。一方、ページ登録の際には、反応物を在庫リストから選択することができるため、試薬の追跡が容易です。

ページの検索

登録した反応式や反応式に含まれる構造式でページを検索することができます。また、ページに添付したファイル内のテキストデータに対するキーワード検索も行えます。構造式・反応式・ファイルデータ・日付・数値などのデータを組み合わせて自在に検索条件を設定できるため、目的のページを簡単に見つけ出すことができます。

まとめ

実験ノートを確実に記録して適切に管理することは研究活動において先延ばしにできない重要課題です。CBISは充実した基本機能に加えてユーザーニーズに合わせたカスタマイズにより、快適な電子実験ノートを提供します。CBISに蓄積されたノートは研究組織にとってかけがえのない資産となり新来の研究者のバイブルになります。新しい実験を始める前に必ずノートを検索して過去に似たような実験の記録がないかを確認することを習慣にすることで、確実に研究の品質と効率を高められます。

CBISの無償トライアルのお申し込みを受け付けています。お気軽にお問い合わせください。