

ライフサイエンス ソフトウェア

Scilligence社インフォマティクス製品販売開始



Scilligence社の製品は、電子実験ノートや在庫管理等の利用目的ごとのプラットフォームと、データマイニングやデータ解析のためのツール群、インフォマティクス環境を構築するためのツールキットの3種類に大別されます。弊社ではお客様のご要望を伺い、これら製品群を組み合わせる最適なソリューションを提案します。今回は各製品の概要について紹介します。

■利用目的ごとに最適化されたプラットフォーム

研究開発業務には業務ごとにワークフローがあります。例えば合成実験により化合物サンプルを調製し、そのサンプルの活性を調べるためにアッセイ(試験)を行い、その結果を踏まえて最適な構造を評価し、次に合成すべき化合物構造を決定するといった流れです。Scilligence社の製品は、データの登録がきっかけになって次の作業を遅滞なく進められるような、研究開発業務の進め方に適したWebベースのプラットフォームです。

■Scilligence ELN

化学および生物学の実験の記録をWebブラウザから簡単に登録できる電子実験ノートです。キーワード、構造式、配列情報による検索だけでなく、遺伝子やたんぱく質などの生物製剤やADC(抗体薬物複合体)に対するデータマイニングを行えることが特長です。メディシナルケミストリー、プロセス化学、バイオアッセイ、HTS、*in vivo*薬理学、毒物学など幅広い分野に対応できるため、企業の研究部門や教育機関で広く採用されています。

■RegMol

生物製剤、化合物、および複合体の情報を包括的に管理します。①化合物やポリマー(立体化学、塩、混合物)、生物製剤(ペプチド、環状ペプチド、オリゴヌクレオチド、遺伝子、RNA、タンパク質、抗体)、ADC、製剤、処方、細胞株、組織等のライブラリーの登録 ②アッセイプロトコルおよびアッセイデータの管理 ③データマイニング、データ解析 の3つのモジュールから構成されています。ライフサイエンスのR&Dにおけるデータの一元管理とコラボレーションを支援します。

■Inventory

化学物質、ペプチド、オリゴヌクレオチド、タンパク質、遺伝子、siRNA、ADC、細胞株、組織などの各種サンプルを、保管場所や試験成績書(CoA)の情報と共に管理します。出荷やSDSに基づく安全準拠の管理も行います。ワークフローによりScilligence ELNやRegMolとシームレスに統合できます。構造式や配列情報による検索を利用できることが特長です。

■PMF

組織内外のプロジェクトやワークフローの管理および顧客関係管理(CRM)を支援します。また、厳格なセキュリティ制御機能を備えているため、プロジェクトごとに安全にドキュメントの共有ができます。特長は、構造式および配列情報による検索を利用できることと、Scilligence ELNやRegMol、Inventory、ERPといった他のデータベースシステムとのシームレスな連携ができる点です。例え

ば、Scilligence ELNで低分子化合物の合成記録をつけた後、ボタン一つで合成化合物の分析を所定部署に依頼するといった一連のワークフローを組むことができます。

■データマイニングやデータ解析のためのツール群

■Chrawler

Microsoft OfficeやPDFなどのドキュメントファイル、画像ファイル、ChemDrawやISISなどの化学情報ファイル、Outlook Emailなどのさまざまなデータソースに含まれる構造式や反応式の横断検索を可能にします。これにより、共有フォルダーに保存されているファイルデータを整理・整形することなくそのまま構造式の検索対象にできるため、長年蓄積されてきた情報を有効活用できるようになります。

■TouchMol4Office

Microsoft Word、PowerPoint、Excel、OneNoteで構造式や配列情報の入力や編集ができます。また、Microsoft Officeが社内データベースやPubChem、Medlineなど外部データベースのインターフェースになります。

■SAR

母核による化合物のふるい分け、多変量データの色表示、多変量プロファイルを満たす化合物の検出を容易にする表示、R-グループ解析などのデータ解析およびフィルタリング機能を提供します。

■ソフトウェア開発キット

化学、生物学に関するデータを取り扱える独自システムを容易に構築できるソフトウェア開発キットです。

- JSDraw: 化学および生物学のためのJavaScriptベースの描画ツール
- MolEngine: 構造情報および反応情報に対する迅速な構造検索を実現する.NETツールキット
- MolSql: 各種ファイル形式に対応する構造検索を実現するMicrosoft SQL Server用のケミカルカートリッジ
- CDS: 任意のWebサイトで迅速な構造検索を実現したり独自インターフェースを設計するためのツールキット

■まとめ

Scilligence製品群は研究データの管理、有効活用、視覚化等に関するさまざまな要求にお応えすることができます。製品紹介や試用を以下ホームページより承ります。

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/scilligence/index.html>