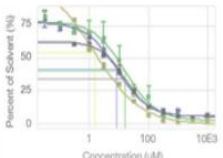
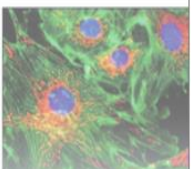




創薬研究情報共有サービス

プロジェクトチーム全体の
研究データを包括して管理

CDD Vaultは創薬インフォマティクスのための最適なプラットフォームです。
直観的なウェブインターフェースで、
プロジェクトチームの化合物や生物学アッセイデータの
管理、解析、共有に貢献します。

Molecule	Molecule Wt.	Dose Response Plot	PIC50	LE	LipE	clogP	Microscopy Image
✓ CDD-1413022 <chem>CC(C)NCCc1ccc(cc1)C(=O)O</chem>	341.444		6.48	0.37	2.84	3.64	



Activity & Registration
研究データの蓄積と整理

蓄積、検索、解析、レポート

CDD Vaultは化合物の登録、アッセイデータの管理、SAR解析のための最新のWebアプリケーションです。創薬研究のデータを整理し、プロジェクトチーム全体のコラボレーションを促します。シンプルで使いやすく、極めて安全です。



Visualization
プロットとマイニング

対話、計算、比較、共有

CDD Vaultは創薬研究データのダイナミックな解析ツールです。興味深いパターンや活性のホットスポットあるいは外れ値を見出せるように、大きなデータセットでもプロットや解析ができます。高画質の画像により、プロジェクトチーム全体の結果の説明や共有が容易になります。



Inventory
化合物を追跡

貸出、追跡、保管場所

CDD Vaultは化合物や試薬のための在庫システムです。化合物の各バッチの初期量、使用量、保管場所を管理します。在庫状況を社内や外部の共同研究者と共有します。



ELN
すべての研究文書

記録、検索、コラボレーション

CDD Vaultは究極の電子実験ノートです。科学情報と生物学のアッセイデータを一元管理し、解析や可視化の完璧な機能を備えた環境です。プロジェクトチームのためにデザインされており、すべての実験を簡単にアーカイブしたり検索でき、安全なコラボレーションを実現します。

種々のアッセイ値と併せてサンプル情報を管理・共有するためのクラウドシステムです。プロジェクトチーム全体の研究データの包括的な情報管理、解析、共有に貢献します。

主な機能

プロジェクト

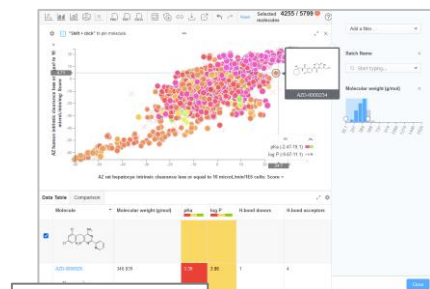
各種データをプロジェクト単位で管理します。複数の共同研究プロジェクトのデータをセキュアに取り扱います。

- サンプルは複数のプロジェクトで共有できます。同一サンプルを重複登録する必要はありません。
- アッセイ結果やメッセージはプロジェクト内で完結します。他のプロジェクトのメンバーは、サンプルを共有していたとしても、アッセイ結果を参照できません。

サンプル

低分子・ペプチド・核酸・複数原料の配合物などのサンプルや、アッセイ用細胞株などの実験資材を管理します。

- Overview: 分子自体の情報
- Batch: 在庫の入手日、残量、保管場所など

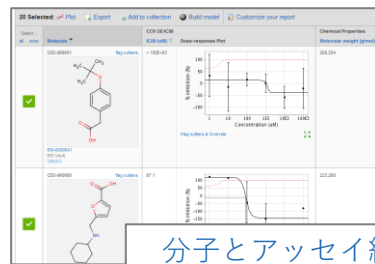


可視化

アッセイデータ

アッセイなどの実験情報を管理します。

- Protocol: Readout の定義や実験種別などの情報
- Run: 個々の実験の情報と結果のデータ



分子とアッセイ結果

可視化

動的なプロットやヒストグラムなどでデータを解析します。解析に用いたプロットは画像やPDFとして出力可能です。

プレート

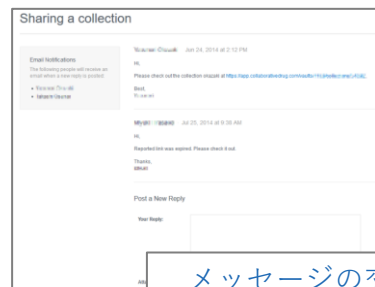
Runのデータからプレートやウェルの情報を抽出し、ヒートマップ表示などを行います。

機械学習モデル

選択したProtocolをベースラインとして、ヒット化合物の機械学習モデルを構築します。

メッセージボード

プロジェクト内でメッセージやファイルを交換します。雑多なメールに埋もれて重要な連絡を見落とすことを防ぎ、組織や所在地の壁を越えた協業をサポートします。



メッセージの交換

▶ 複合的なコラボレーションをセキュアに実現

企業や大学など複数の研究組織が参加する共同研究や、複数の研究拠点を持つ企業での利用に適しています。バイオ、化学、分析などの研究者の地理的距離や専門分野の壁を越えたコラボレーションを実現します。

CDD Vault ELNは、テキスト、表、画像、ファイルなどを自由に記述できる化学およびバイオ向けの電子実験ノートです。CDD Vaultの追加モジュールとして提供されます。

主な機能

アッセイアノテーション

用意された項目で用語を選択するだけで、アッセイアノテーションを簡単に追加できます。用語の揺れがなくなるので、データを検索で探しやすくなります。

化学量論表

化学反応式を入力すると、化学量論表が自動的に生成されます。使用量や収量を入力すると、当量や収率も計算されます。

Name	Properties	Amounts	Comments	Comments
1. Methyl 2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzothiazole-5-carboxylate	FW: 243.2 g/mol	Mass: 1.00 g	Expenditure: 1.00 g	
2. Acetic anhydride	FW: 198.2 g/mol	Mass: 100 mg	Expenditure: 1.00 g	
3. Triethylamine	FW: 189.3 g/mol	Mass: 5.00 mg	Expenditure: 5.00 mg	
4. 1,3-bis(4-methyl-5-oxo-1,2,3,4-tetrahydro-2H-pyridin-2-yl)-2,2,3,3-tetrahydro-1,3-dioxane-6,6-dione	FW: 325.3 g/mol		Expenditure: 4.00 mg	

化学量論表

アノテーションの付与

リンクと相互参照

分子、アッセイ、ELNの他のページなど、CDD Vault内の様々な情報へのリンクを作成します。分子や実験結果をELNからCDD Vaultへ登録でき、相互に参照されるようになります。

ファイルなどの貼付け

画像、表、文書ファイル、PDBデータなど、様々なデータをELN内に貼り付けられます。PDFファイルやPDBデータはELN内でプレビューが表示されます。

ウィットネス

実験終了後、ELNの編集を終える際に他のユーザーへの確認を要求します。確認依頼は依頼されたユーザーにメールで通知します。

監査証跡

いつ・誰がELNのデータを変更したかを記録します。記録はCSVファイルとしてダウンロードを行えます。

Audit Trail		Download CSV
2019-11-08 22:04	Modified Entry	
2019-11-08 20:11	Modified Entry	
2019-10-28 01:39	Created Entry	

監査証跡

▶ データへのアクセスが容易

キーワードや構造式による多彩な検索や、定評のあるオントロジーに基づいたアノテーション付けにより、求める実験データへと容易にたどり着けます。

トライアル

CDD Vaultの全ての機能は30日間無償でトライアルが可能です。ご希望の際は弊社ウェブサイトのお問い合わせフォームよりお申込み下さい。
<https://www.molsis.co.jp/contact/>



コラボレーション

組織内、パートナーやCRO、世界的な先駆者たちとのコミュニケーションをサポートします。CDDはR&Dデータ管理のホストにおけるパイオニアです。

イノベーション

CDDは鋭い視点や技術を研究機関へ提供するために、大学や産業の一流の科学者と提携しています。blog (<https://www.collaborativedrug.com/blog/>) で最新のニュースや出版物をご覧ください。



親しみやすさ

創薬チームのためのウェブインターフェースはビギナーにとっては直観的で扱いやすく、経験豊富な研究者にとっては十分に強力です。ITの専門知識がなくてもデータ移行が容易です。



強力

最新のウェブブラウザから、すべての研究データを利用できます。全実験データを検索し、SARテーブルやプロットでその結果を確認できます。フィルター、カラーコード、部分構造のハイライト表示はパターンの視認性に優れています。



導入のしやすさ

アカデミックの研究室や立ち上げたばかりのプロジェクト、バイオ医薬品メーカーにとってコスト効果が高いソリューションです。CDD Vaultは優れたサポート体制をもち、チームの成長に合わせたスケールアップが可能です。



チームのための設計

冗長な作業やずさんなファイルのバージョン管理を回避するために、チーム全体のデータを一か所でまとめて保存できます。どのデータを自分たち専用にして、どのデータを共同研究者に共有するかを完全な制御を提供します。



マルチドメイン

CDD Vaultは化学および生物学の専門分野をまたいだツールを提供します。化学者によって登録された構造式や、生物学者によってキャプチャーされたアッセイ結果を構造活性相関として表すことができます。



極めて安全

CDD Vaultは知的財産を不慮の損失または漏えいから保護します。CDD Vaultは主要な製薬会社から信頼されています。また、SSAE 16 Type II に裏打ちされた高度に安全なクラウドストレージです。



CDD社 日本代理店

株式会社モルシス ライフサイエンス部

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

TEL: 03-3553-8030

FAX: 03-3553-8031

E-mail: informatics@molsis.co.jp

URL: <https://molsis.co.jp/>

- 詳細につきましてはお問い合わせください。
- 記載の商品名、サービス名は各社の商標または登録商標です。
- 本カタログの内容は予告なく変更される場合があります。