研究情報管理統合プラットフォーム　Scilligence

創薬モダリティの多様性への対応

Scilligence 社では、電子実験ノートを中心にプロジェクト管理や在庫管理など研究情報を一元管理できるウェブベースの研究情報管理統合プラットフォームを提供しています。電子実験ノート ELN、分子情報・アッセイデータ登録システム RegMol、在庫管理システム Inventory の各製品では低分子化合物から核酸・ペプチド・タンパク質・抗体などの生体高分子、細胞株や生体組織まで、多様なモダリティのデータを一元的に取り扱えます。本稿では、ELN、RegMol、Inventory に共通する創薬研究のモダリティの多様性への対応機能を紹介します。

製品概要

Scilligence 社の研究情報管理ソフトウェアは、低分子からペプチドや核酸などの中分子、抗体や抗体薬物複合体（ADC）などの高分子までの情報を単一のプラットフォームで扱えることが大きな特長です（図 1）。RegMol では幅広い研究資材の情報を登録し管理します。Inventory では RegMol に登録されている研究資材以外にも購入試薬、合成実験の生成物、細胞や組織を採取した試料などの在庫・保管場所を管理します。ELN では RegMol や Inventory と連携して多種多様な実験を記録できます。

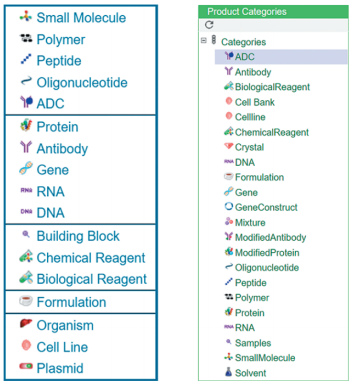

図 1. RegMol、Inventory で管理できる研究資材

生体高分子に対応した描画ツール

JavaScript ベースの構造描画ツール JSDraw では、低分子に加えて、ペプチドや核酸などの配列、複数の配列の複合体、抗体と低分子の複合体（ADC など）をグラフィカルに記述できます（図 2）。JSDraw では多様な種類の複雑な高分子を表すことができる表記法 HELM（Hierarchical Editing Language for Macromolecules）をサポートしており、HELM による構造の入力、および描画した構造の HELM 表記の出力が可能です。JSDraw で描画した構造は ELN や RegMol に登録したり、検索条件として利用したりできます。

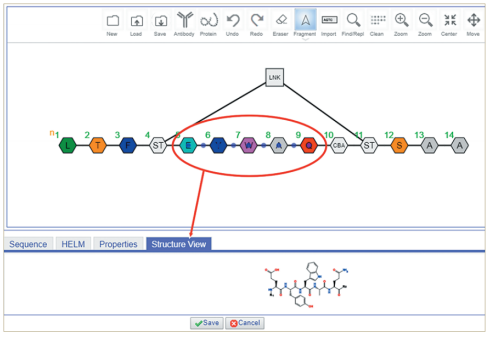

図 2. JSDraw。選択したモノマー（赤丸で囲んだ部分）の構造式を下部の Structure View で確認可能。

生体高分子の管理

抗体などのタンパク質のアミノ酸配列やプラスミドなどの塩基配列を単なる文字列としてではなくシーケンスデータとして管理します。タンパク質のサブユニットや抗体の重鎖と軽鎖のような複数の配列をそれぞれ記述できます（図 3）。SDS や論文などのファイルが添付でき、研究資材と関連する情報の一元管理が可能です。

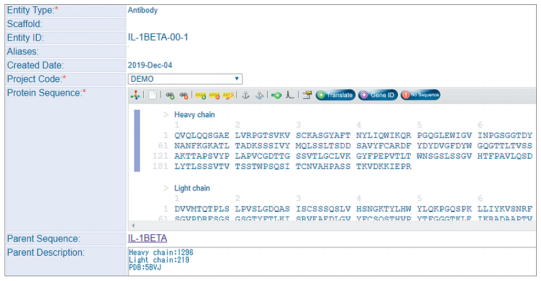

図 3. 抗体の登録

また、プラスミドの登録ではインサート配列の記述やベクターマップの添付、プロモーターや薬剤耐性遺伝子の情報などの記入ができます。

ADC の管理

ADC Builder を用いて既に登録されている抗体や低分子化合物を組み合わせて ADC を作成できます（図 4）。登録された ADC は元になった抗体や低分子とひもづけられ、相互に関連情報として簡単に参照できるようになります。

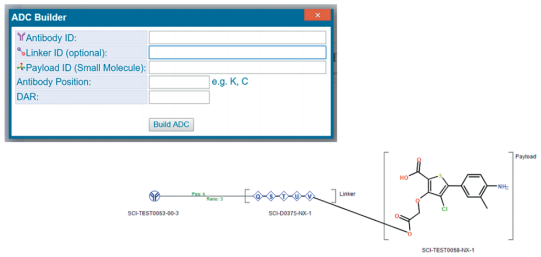

図 4. ADC Builder と ADC

ご試用

Scilligence 社製品を 1ヶ月間無償でご評価いただけます。Scilligence 社製品にご興味がある方はぜひお試し下さい。トライアルをご希望の方は弊社ウェブサイトよりお問い合わせ下さい。

https://www.molsis.co.jp/contact/