Scilligence 社製研究情報管理統合プラットフォーム

Scilligence ELN の紹介

Scilligence ELN は化学および生物学の実験の記録をウェブブラウザーから簡単に登録できる電子実験ノートです。構造式、反応式、塩基配列やアミノ酸配列、各種ドキュメントが登録可能で、専用のテンプレートが用意されています。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ご利用いただけます。本稿では Scilligence ELN の機能について紹介します。

Scilligence 統合プラットフォームの特長

Scilligence 社の研究情報管理統合プラットフォームは、以下の製品で構成されています。

- 電子実験ノート : ELN
- 分子情報およびアッセイデータ登録システム : RegMol
- 在庫管理システム : Inventory
- 実験データ管理システム : SDMS
- プロジェクト・ワークフロー管理システム : PMF
- データ解析・可視化ツール : Focus

これらの製品は相互に連携して、研究に関わるさまざまなデータを統合的に管理します。

本製品はウェブアプリケーションですので、ユーザーは居室や実験室などにあるパソコンやタブレット端末から利用できます。さらに、アマゾンウェブサービス（AWS）を利用するクラウドサービスとして提供されるため、管理者はサーバーなどのハードウェアを用意する必要はありません。

用途に応じたテンプレート

Scilligence ELN では実験種別ごとにカテゴリー分けされたテンプレートが用意されています（図 1）。テンプレートの種類は随時更新されるほか、ニーズに合わせたカスタマイズも可能です。ユーザーは最適なテンプレートを選んでエントリーを作成しデータを登録できます。

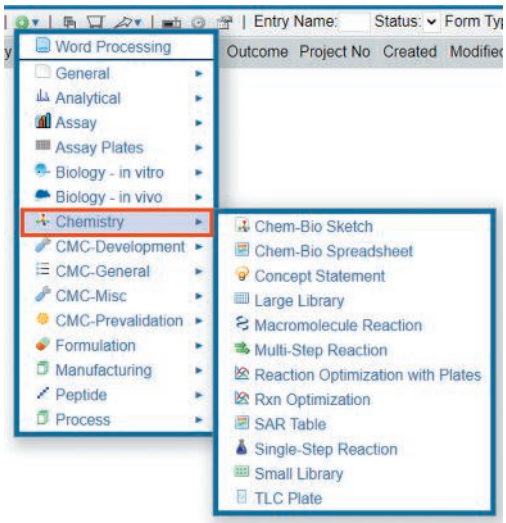

図 1. テンプレート例
Chemistry のカテゴリー（赤枠）には 12 種類のテンプレートが用意されています（2022 年 6 月時点）。

描画ツール

合成実験などにおいて、化合物や反応式などを描画する際の描画ツールとして JSDraw が搭載されています（図 2）。JSDraw は化学および生物学のための JavaScript ベースの描画ツールです。低分子化合物の構造式だけでなく、ペプチドや核酸もモノマーを組み合わせて簡単に描画でき、さらにはこれらの複合体もシームレスに描画できます。MOL ファイルなどの分子構造データファイル、SMILES、HELM（Hierarchical Editing Language for Macromolecules: 生体高分子のテキスト表記法）の入出力が可能です。描画した構造式・反応式は PNG 画像としても出力できます。

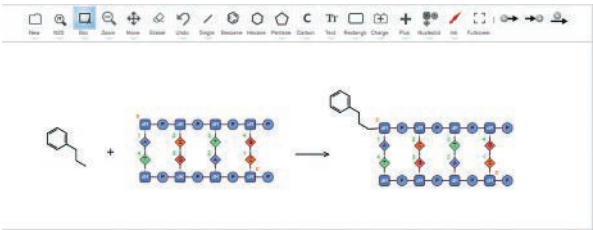

図 2. 核酸 – 低分子複合体を含む反応式の JSDraw による描画

検索機能

プロジェクト・キーワード・構造式・配列・化合物の物性など、さまざまな条件から検索可能です。構造式での検索は、部分構造検索、完全一致検索、類似構造検索（95%, 90%, 80%, 60%）を選択できます。

履歴管理

登録したデータはバージョン管理されます。いつ、誰が、どのような操作を行ったのかを確認できます。また過去の特定の時点のデータに差し戻すことも可能です。

ディスカッション機能

すべてのテンプレートには、チームディスカッション欄が用意されています。同じプロジェクトのメンバーは、ディスカッション欄にコメントを記入できます。データに関して気付いた点の連絡や議論の場として活用できます。

データへの直接アクセス用アドレス

登録されたデータには、それぞれ URL（アドレス）が用意されます。その URL を他のユーザーに伝えることで直接そのデータにアクセスできます。