Scilligence 社製研究情報管理統合プラットフォーム

学術研究での電子実験ノートの活用事例

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。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、学術研究での電子実験ノートの活用事例[1] について紹介します。

電子実験ノート導入以前

電子実験ノート（ELN）の導入以前では、研究室においての実験記録方法は、紙のノートを利用しての記録であることが大半です。研究室に所属したことのある研究者は、指導教授から「おそらく何年か前にその反応を誰かが実施したはずだから、実験ノートで確認しよう」といった依頼を受けた経験が一度はあることでしょう。研究室に保管されたたくさんの実験ノートから、目的の反応や実験を探すことは困難で時間がかかります。また、探しているページを見つけることができたとしても、NMR スペクトルやその他の関連データを見つけるために同様の労力をかけることになります。

データをデジタルで保存、共有、探索、処理できることは、今日において私たちの仕事の基盤であると言えます。データベース検索、ワードプロセッシング、ファイル共有、電子メールの時代において、実験記録という最も貴重なデータをデジタル化する方法が電子実験ノートです。

ELN 導入による効率化

紙の実験ノートでは、コピー＆ペーストの機能がないため、一部の研究員が繰り返し行う実験の重要な反応の詳細を記入する代わりに、「ページ XX を参照」とだけ書くなど、記録を省略することがあります。ELN の導入で利用できるようになる、コピー&ペーストのような機能が有用なのは明らかです。

実際に Scilligence ELN を導入したボストン大学の Shih-Yuan Liu 教授の研究グループでは、その他にも研究効率化の恩恵を受けることができました。「Single Step Reaction」テンプレートでは、ページテンプレートによってデータ入力時間の大幅な削減に成功しています。反応スキームエディターはデータベースを検索して試薬を取り込み、同時に分子量や分子式などの重要な情報を取得します。化学量論表は自動的に量と比率を計算します。「レシピ」機能を使うと、標準化された実験手順の文面を作成してグループ全体で共有し、実験時にはその文面に試薬情報を反映して微修正するだけで済むようになるため、実験を効率よく記録できます（図 1）。また、個々の実験記録の時間を節約するだけでなく、ELN は情報共有をはるかに効率化できます。彼らの研究グループは、参考文献、SOP（標準作業手順）、プレゼンテーションなどのグループ内プロジェクト資料の中心的な保管場所として Scilligence ELN のプロジェクト文書機能を使用しました。ELN 導入以前は、グループミーティングのために紙に記録されたすべての反応スキームを ChemDraw で再作成し、それを PowerPoint のスライドに貼り付ける必要がありました。Scilligence ELN を使用することで、研究者がプレゼンテーションスクリーンにページを投影しながらグループミーティングやプレゼンテーションを行うことができました。

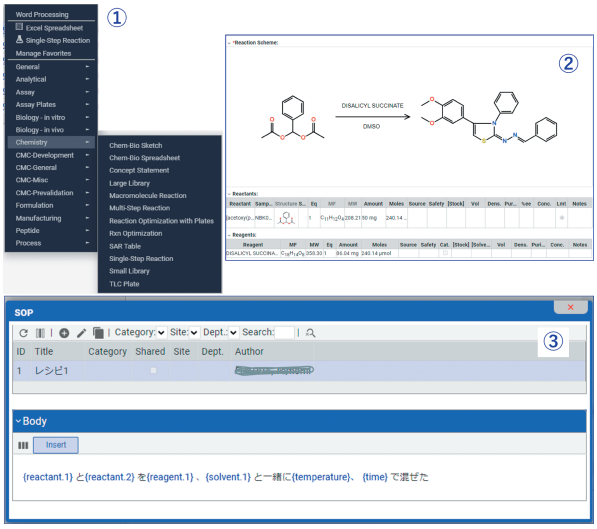

図 1. ①多種多様なテンプレート
②記録ページ内の反応スキームエディターと化学量論表
③レシピ機能

Scilligence 統合プラットフォームの概要

Scilligence 社はデータを起点に研究開発を推進するための統合情報プラットフォームの開発と提供を行っています。製品はウェブベースのシステムで、以下の機能で構成されます。

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

各製品は相互に連携し、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、ADC などの複合体、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。

1) https://scilligence.com/eln-for-academic-research-a-success-story/