



アカデミア創薬の効率化のための 電子実験ノートシステム (E-Notebook)

大阪大学大学院薬学研究科
附属創薬センター 構造展開ユニット
駒川 晋輔 特任助教
春田 純一 特任教授

知財や論文作成時、様々なノートから
データを収集する必要があるときに、
電子実験ノートシステムは強力なツールとなります。

現在研究されている内容について教えてください

「構造展開ユニット (Lead Exploration Units : LEU)」では、製薬企業出身・出向者の知識・経験を活用したアドバイスや、テーマの具現化に向けた相談、ヒット化合

物の合成展開など、創薬の包括的な支援を行っています。また、化合物の初期薬物動態評価として、物性・代謝安定性・膜透過性・タンパク結合率などの in vitro ADME 評価、および iPS 細胞由来心筋細胞を用いた心毒性評価の実施が可能です。現在、AMED「生命科学・創薬研究支援基盤事業」の採択を受け、「創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (BINDS)」と連携して、基礎研究の推進とその研究成果を創薬研究などの実用化研究に繋げることを目的とした公的研究支援を行っています。



◀実験室

E-Notebook

電子実験ノートシステム (E-Notebook) をどのような場面で使用されていますか？

実験情報や合成化合物の管理、研究者間の情報共有に電子実験ノートシステムは役立てています。実験ノート作成は化学構造式や試薬データベースから入力できるため簡単に行うことができ、反応式は実験化学者が使い慣れている ChemDraw 形式なので効率よく描画できます。反応式に記載すれば分子量は自動計算され、試薬量も当量計算されるので、手計算の必要がなくミスが減らせています。用いる試薬や合成化合物は CRAIS Checker による法規制チェックを実施しており、実験前に法規制情報の確認ができています。ノートはテキスト情報だけでなく、画像や Office ソフト、PDF など組み込めるので、

NMR や LCMS などの情報もひも付けも可能です。実験ノートは変更履歴や電子承認により知財への対応にも役立っています。

合成化合物は E-Notebook 上で登録すると自動的に発番されるため、化合物番号、ロット番号、塩情報などを一元管理できます。登録化合物リストは SDF で外部出力することもでき、外部のデータベース管理ソフトと連携した管理も行えます。当ユニットでは合成化合物の in vitro ADME 評価を同時に行っており、化合物情報と統合して管理しています。

電子実験ノートシステム (E-Notebook) を 使い始めたきっかけ

現代の研究現場では業務の効率化や情報の管理が必須であり、ほとんどの製薬企業で電子実験ノートを利用しています。当ユニットでは製薬企業出身・出向者が在籍しており、製薬企業の現場と遜色ない環境で実験できるようにするため導入しました。

電子実験ノートシステム (E-Notebook) の 魅力とは？

実験ノートを電子化するメリットは、自分や他者の過去の実験を簡単に確認することができる点です。E-Notebook には検索機能も付いているので、実験者やノート番号だけでなく、キーワードや構造式からも検索でき、さらにノートをコピーして再利用することもできるので、目的の実験の再現や類似実験を楽に行えます。またフォーマットが決まっているので、難読で困ることもありません。特に知財や論文作成時、様々なノートからデータを収集する必要があるときに、電子実験ノートシステムは強力なツールとなります。

The screenshot displays the E-Notebook software interface. At the top, there's a menu bar with options like Home, View, Combi Chem, and Data. Below the menu, a chemical reaction scheme is shown, involving the reaction of a carboxylic acid with an amine in the presence of HCl. Below the reaction scheme, there's a table titled 'Reagents & Products' with columns for Reagent ID, Type, Component, Reactant, MF, MW, Eq, Moles, Sample Mass, Vol, Molarity, and d. The table lists various reagents like methyl L-phenylalaninate hydrochloride, EDC, HOBT, triethylamine, and DMF. Below the table, there's a section for 'Reaction Conditions' and 'Library Settings'. At the bottom, there's a 'Preparation' section with fields for 'Reaction' and 'Fill'.

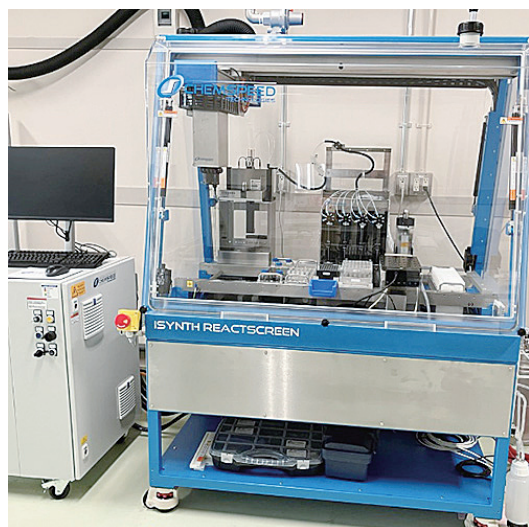
▲ E-Notebook 使用例

The screenshot displays the E-Notebook software interface in search mode. At the top, there's a menu bar with options like Home, View, and Data. Below the menu, there's a search bar and a 'Query' button. Below the search bar, there's a section for 'Create a New Set of Search Results' with a dropdown menu for 'Reaction Query'. Below this, there's a 'Text' field and a 'Look In...' dropdown menu. Below the 'Text' field, there's a 'Metadata' section with fields for 'Experiment Title', 'User Full Name', and 'Project Name'. Below the 'Metadata' section, there's a 'Reaction' section with a dropdown menu for 'Substructure' and a checkbox for 'Map Reaction Centers'. Below the 'Reaction' section, there's a chemical structure of benzoic acid. Below the structure, there's a table with columns for 'Reactants', 'Eq', 'Moles', 'Mass', 'Vol', 'Name', and 'Solvents'. Below the table, there's a 'Products' section with columns for 'Product', 'Theo. Moles', 'Purity', and 'Yield'. Below the 'Products' section, there's a 'Reaction Conditions' section with fields for 'Temperature' and 'Pressure'. At the bottom, there's a 'Preparation' section with fields for 'Reaction' and 'Fill'.

▲ E-Notebook 検索例

今後の展望 / 製品機能への要望

大阪大学薬学研究科では自動合成装置を導入しており、E-Notebook の Parallel Synthesis の機能を活用したパラレル合成の自動化を目指しています。Parallel Synthesis は置換基変換など類似化合物を数多く作る際に便利な機能ですが、Chem ACX (試薬データベース) との連携ができなかったり、複数回 CRAIS Checker (法規制チェック) を行わなければならないなど、不便なところが解決されると良いかと思います。



◀自動合成装置

●本事例作成に関し、駒川先生のご協力に感謝いたします。(インタビュー：2024年9月) ※所属・役職は取材当時のものです。

株式会社ヒューリンクス

〒103-0015
東京都中央区日本橋箱崎町 5-14
<https://www.hulinks.co.jp/>

※本カタログ内の各商品名は各社の商標・登録商標です。 2024年9月発行

E-Notebook

