

化学研究開発

データシート

BIOVIA 化学研究開発ソリューションは、包括的なツールによって実験サイクルの数と期間の両方を減らすことで、化学研究開発分野における持続可能な技術革新の創出を実現します。

化学研究開発の課題

バルクケミカルの価格が不安定な中で、多くの企業は汎用分野から離れて、より多くの利益を生み出す専門に特化した化学物質の製造へと移行する方針を固めています。こうした戦略転換を実現するには、通常販売している原材料に付加価値をもたらすことのできる、差別化された特化型の化学製品を迅速に開発することが必要です。ただし、それを可能にするためには、研究室の技術革新のペースを加速させなければなりません。BIOVIA 化学研究開発ソリューションは、実験結果の効率的な取得をはじめ、製品の最適化やプロセスのスケールアップに至るまで、研究室が直面するさまざまな課題に対処できます。

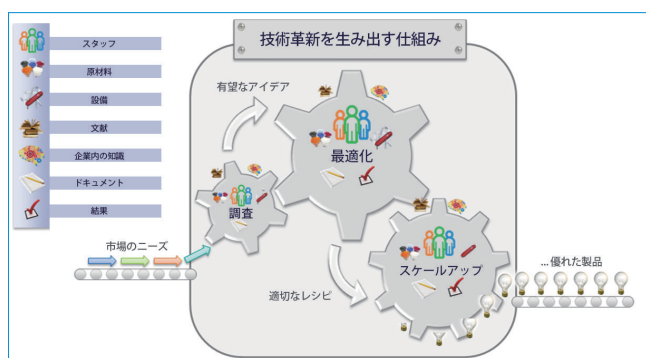


図 1: スタッフ、リソース、研究文献、テストツールを組み合わせ、実験の3つの重要なフェーズである調査、最適化、スケールアップを合理化することで、組織の「技術革新を生み出す仕組み」の基盤が整えられます。各実験フェーズを通じてこうした可変要素をうまく活用し、幾多のバラバラなアイデアから管理可能な数の価値ある研究候補に絞り込むことで、技術革新を促進すると共に、実際にスケールアップ可能な最も有望な候補だけに焦点を当てて開発を進められるようになります。

科学技術を基盤とした製品開発に携わる企業では、研究開発ライフサイクルと製品化ライフサイクル間の生産性格差が広がっていることで、迅速な開発が妨げられ、収益や競争力の面でも多大な悪影響が生じています。

既存のシステムでは、数多くの要因によって生産性が制限されがちです。紙ベースの実験ノートでは、書類棚の奥に埋もれたデータを他の研究者や別の研究拠点のスタッフが利用することはできません。実験プロセスの下流工程で最適化やスケールアップの検討を行う際に、実験情報が利用できない、または利用しづらい仕組みになっている場合もあります。

ITシステムが複雑すぎて、重要な情報がどこに格納されているのかわからないケースも見られます。バラバラなデータベ

ースやスプレッドシートにデータを保存しているために、科学データの管理ができなくなっている場合もあります。その結果、同じ実験を繰り返して不要なコストが発生したり、情報が紛失したりするのです。研究室でのこうした非効率的な作業状況が、ゆくゆくは製品化までの期間を長くし、製品価格の上昇を招きます。

研究開発プロセスを、持続可能な技術革新を生み出す「仕組み」へと変革すれば、より短い導入期間で市場シェアを獲得できる新製品を開発できるようになると共に、将来的にも継続して優れた製品や競争力のある製品を投入して、コンスタントに他社との差別化を図れるようになります。しかし、こうした変革を阻む主な原因となっているのが、既存のソフトウェアやツール、手順であることが少なくないのです。

BIOVIA 化学研究開発ソリューションの主な利点

以下を可能にすることで、技術革新のペースを加速させます。

- 研究室から紙を排除し、過去の実験を検索
- 成果につながらないアイデアの検討に多くの時間を割かず、有望なアイデアにすみやかに注力
- 無駄な時間や実験サイクル期間を最小限に抑える
- 化学物質の在庫情報を安全かつ適切に管理

新たな化学開発を加速させるソリューション

研究室から紙を排除

紙の実験ノートを廃止して電子実験ノートを導入することで、研究者が作成した文書にキー操作1つで瞬時にアクセスできるようになります。研究報告、競合他社に関する分析情報、企業知識を簡単に利用、共有できます。その場限りの予備調査でも手早くメモを取っておいて、それを後から活用することもできます。研究者、研究室、拠点間でデータを共有できるので、知識をすばやく収集できます。

- **貴重な時間の節減:** 紙の実験ノートや時間のかかる手作業での処理を排除
- **迅速なコラボレーション:** 時間や場所を問わず、即座に実験記録にアクセス
- **知的財産(IP)の保護:** デジタル署名、実験テンプレート、ワークフロー アラートの利用により、知的財産を確実に保護
- **情報の再利用:** 過去の実験ノートに即座にアクセスすることで、サイクル期間を短縮しサイクル回数を削減
- **直感的な作業:** わかりやすいインターフェースによってトレーニング回数を削減でき、組織レベルで迅速な導入が可能

実験サイクルの期間を短縮

研究室のリソースはきわめて貴重なため、非効率的な研究サイクルで無駄使いするわけにはいきません。製品最適化テストを効果的に行うためには、一元化された詳細なデータベースを使用して過去のテスト内容を確認することが重要です。そうすれば、以前と同じ項目を一からやり直さずに済みます。

す。研究プロジェクトでは、サンプル作成やサンプル特性評価、あるいは数百ものサンプルの中から使用するものを選択するなど、さまざまな作業が求められることから、テストサイクルの数や期間を管理できる効率的なシステムがあれば、技術革新プロジェクトの長期化という課題は解消されるはず。実験サイクル期間を短縮するには、研究者が過去の実験結果を簡単に検索し、信頼できる情報として再利用できるようなシステムでなければなりません。

- **実験の計画立案:** 知識と統計に基づいて実験を実施することにより、コストを最小限に抑えて、研究の効率を最大限に向上
- **実験の実施:** ワークフローの追跡のほか、機器やスプレッドシート、データベースからのデータ収集により、手作業でのデータ統合を不要に
- **データ分析:** 実験結果を照会、可視化できる強力な機能を活用
- **レポート作成:** 統合チャート、散布図、対話型のレポート作成オプションを備えた構成可能なレポート テンプレートを利用
- **データ マイニングと知識の創出:** 研究開発全般にわたってデータを比較するための相関予測モデルを作成し、次に実施すべき実験についての統計的指針を得る

アイデアのバーチャル スクリーニングによって、成果につながらない調査テストを削減

研究者は、物質の挙動を構造レベルで正確に把握する必要があります。「バーチャル スクリーニング」を実施することで、パフォーマンスや挙動に関する数多くの多様なシナリオをすばやくモデル化して評価できるようになります。たとえば、さまざまな化学成分をモデルに代入したり、異なる配合や配列(層)の材料で試したりするなどして、どのような結果が得られるかを確認できます。

このようにしてリードの評価が迅速に行えるので、数多くの可能性の低い候補物質を早い段階で排除できます。モデリング・シミュレーション ツールを使用すれば、材料の原子構造や分子構造の関係性を予測して、新たな材料や化学物質を開発することが可能です。こうしたツールを活用することで、研究者はあらゆる分野にわたってより性能の高い材料や化学物質を設計できます。

- **コストと時間の削減:** 候補材料について「バーチャル スクリーニング」を実施することで、物理的なテストや実験を削減または回避
- **技術革新プロセスのスピードアップ:** 物理的なテストや実験に比べて、より高性能で持続可能なコスト効率に優れた新材料を、より早期に開発
- **基本的理解の促進:** 材料の原子・分子構造がその特性や挙動にどのように関係しているかを把握
- **強力なマテリアル インフォマティクス機能の利用:** 計算材料科学を導入することで物理的な研究実験を補完

コストの削減、無駄の排除、研究室の安全性とコンプライアンスの確保

化学物質は実験に欠かせない材料であり、きわめて高価なものです。化学物質在庫管理システムでは、研究室の在庫を効率的かつ効果的に管理できます。必要な化学物質の在庫チェックや調達が可能なので、研究室では必要な材料を必要な量だけ確保でき、大量の在庫の期限、品質、安全性に問題がないことを徹底できます。また、環境安全衛生レポートや安全性データ シートをすぐに確認できるので、規制上のリスクやコンプライアンスにまつわるコストを効率的に管理することが可能です。

- 化学物質の受領から廃棄までを効率的に管理
- 化学物質の安全性や在庫に関する正確なデータをリアルタイムに把握
- 化学物質の在庫情報を安全性データ シートに盛り込む
- 化学物質の使用期限と保存可能期間を監視
- 無駄やコストの削減を促進
- 正確で完全な規制関連レポートを作成
- 化学物質の供給業者を特定

BIOVIA 化学研究開発ソリューション

BIOVIA 化学研究開発ソリューションは、共通のプラットフォームを基盤とする一連の機能によって実験工程を合理化することで、プロセスの効率化や時間とコストの節減を可能にします。

機能	メリット
デジタルソリューションによるデータの集中管理	ワークフローの合理化、技術革新の課題の解消
安全な環境でのデータ共有	ロールベースの権限によるアクセス許可、知的財産の安全な保護
過去の実験データへのアクセス	実験の重複の排除、実現可能な理論の迅速な検索
物理的な実験の数の削減	バーチャル スクリーニングによる実験プロセスの迅速化
最新のコラボレーション ツール	グループ作業の促進
実験サイクルの短縮と削減	有望なアイデアに絞ることによる、多くの時間やコストをかけない調査
スケールアップの合理化	スケールアップに伴う時間とコストの削減

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語)をご参照ください。

