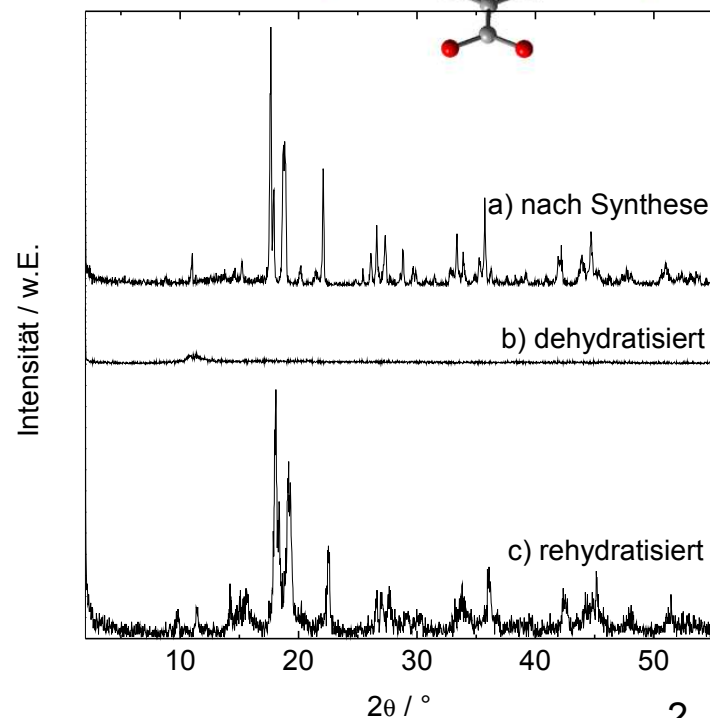
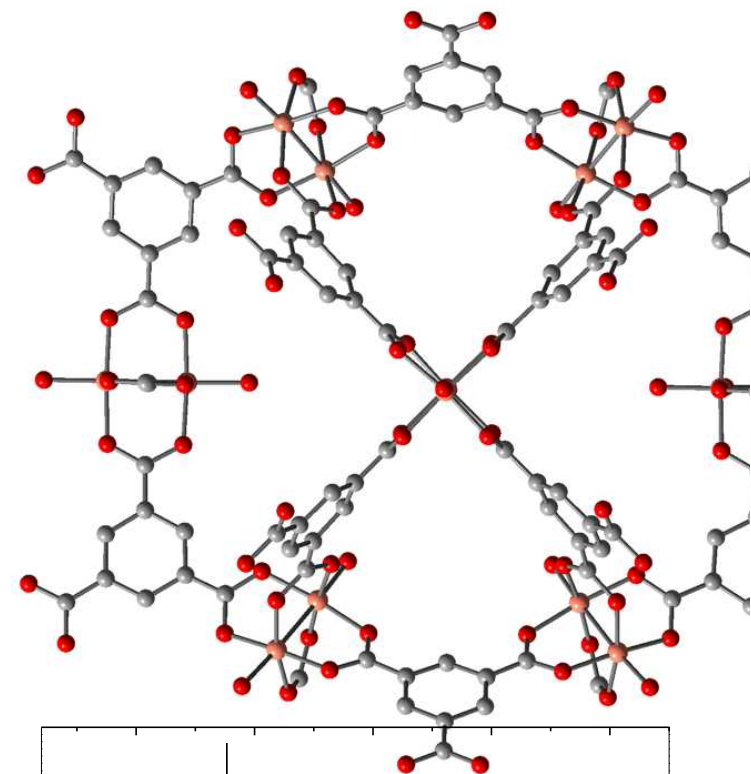
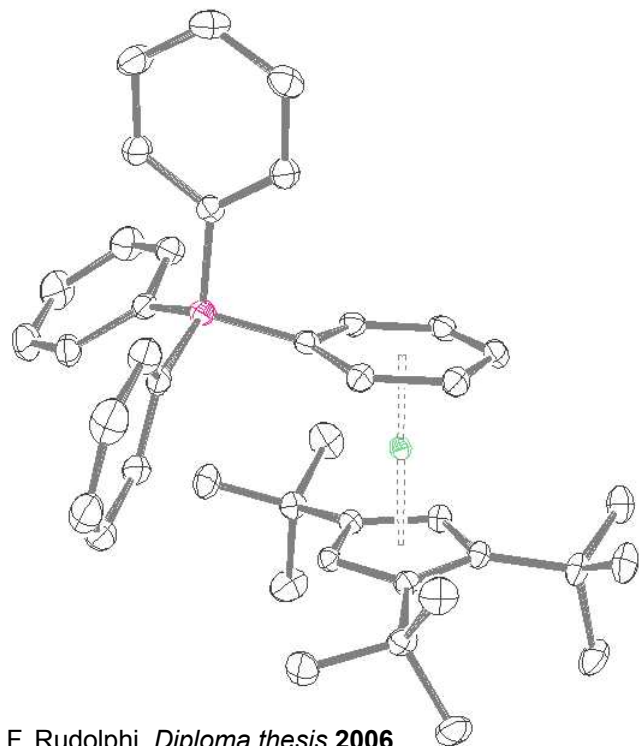


# sciformation ELN

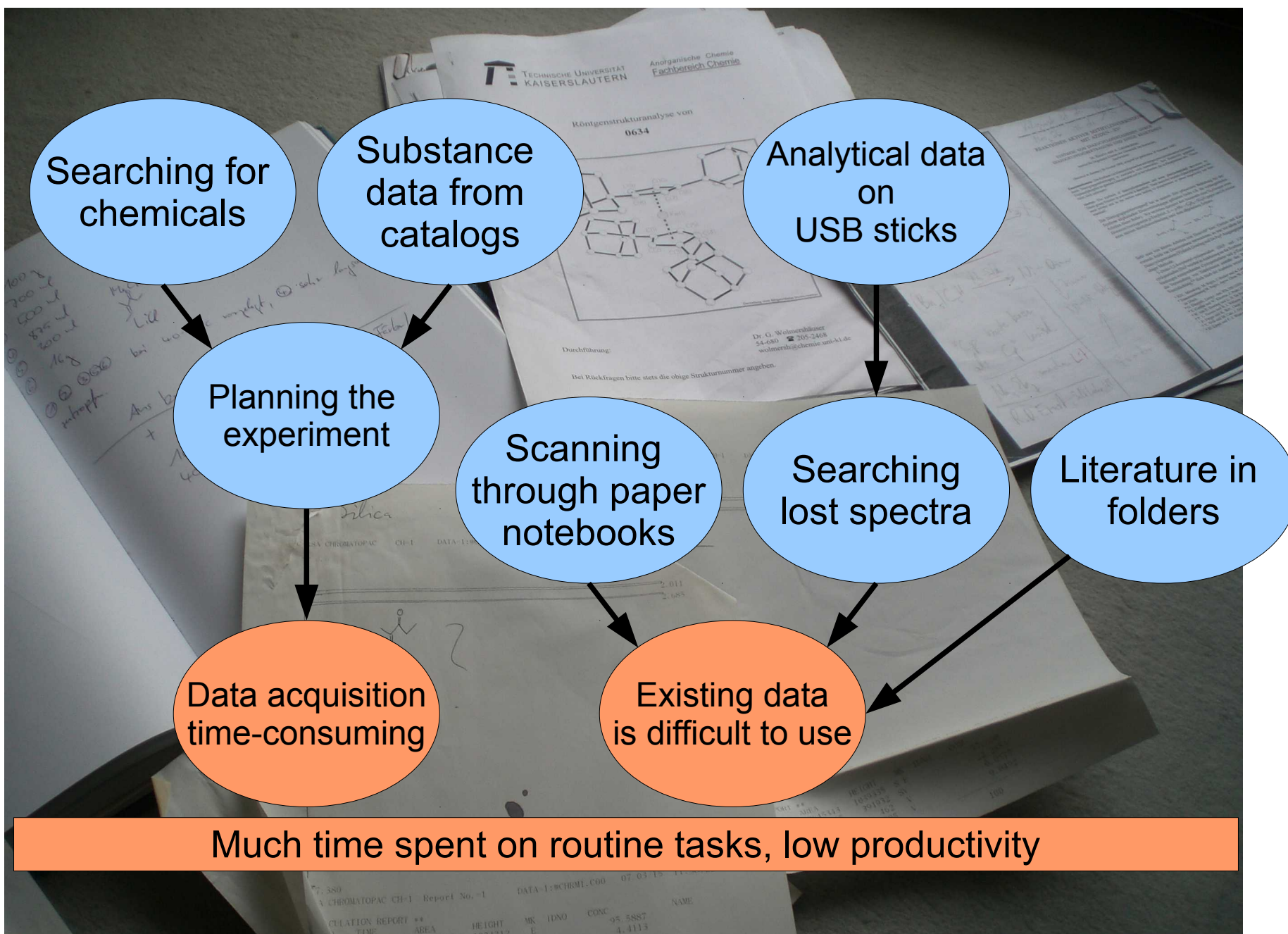
## Electronic Laboratory Notebook

Dr. Felix Rudolphi  
Sciformation Consulting GmbH

# Chem. Research I



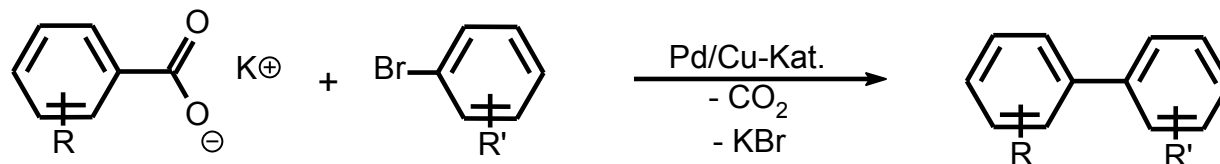
# Traditional workflow



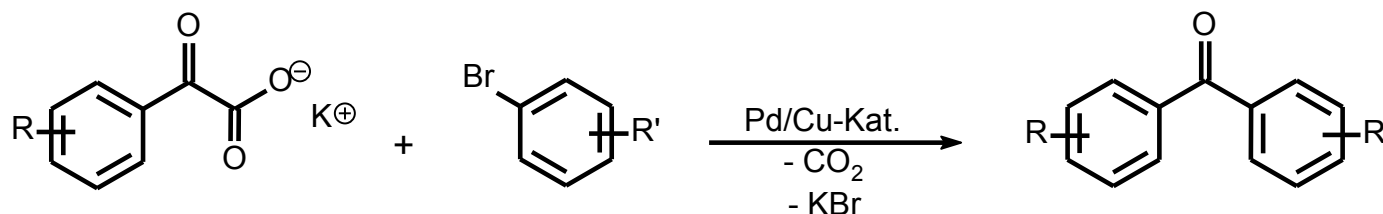
# Chem. Research II



Decarboxylative cross-coupling (min 10 000 experiments)



L. J. Gooßen, G. Deng, L. M. Levy, *Science* **2006**, 313, 662-664;  
 L. J. Gooßen, N. Rodríguez, B. Melzer, C. Linder, G. Deng, L. M. Levy, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 4824-4833;  
 L. J. Gooßen, N. Rodríguez, C. Linder, B. Zimmermann, T. Knauber, *Org. Synth.* **2008**, 85, 196-204;  
 L. J. Gooßen, B. Zimmermann, T. Knauber, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 7103-7106

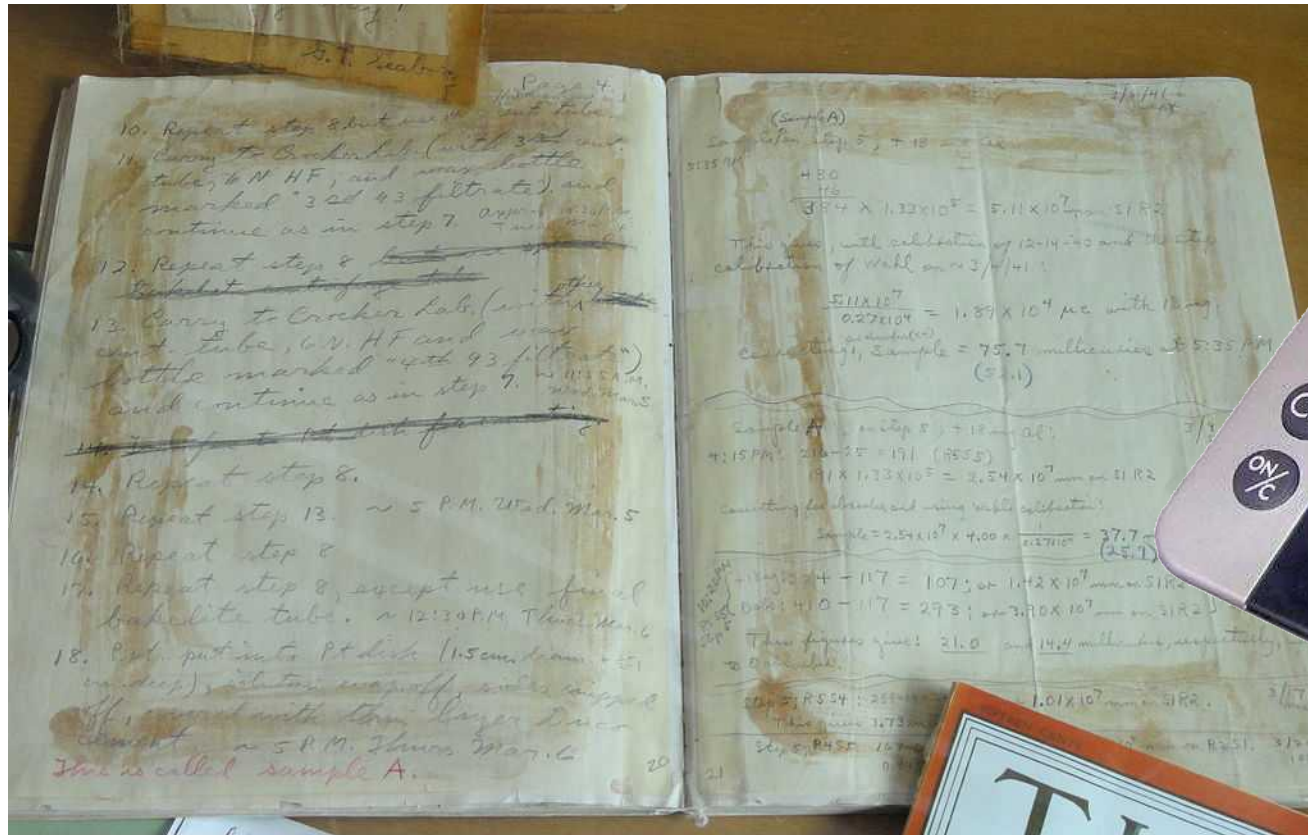


L. J. Gooßen, F. Rudolphi, C. Oppel, N. Rodríguez, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 3043-3045





# How can I plan and analyze 10 000 experiments?



# How can I plan and analyze 10 000 experiments?



sample\_xls.ods - LibreOffice Calc

File Edit View Insert Format Extras Data Window Help

Font: Arial, Size: 10

Cell: B6

|   | A         | B       | C    | D    | E     | F    | G           |
|---|-----------|---------|------|------|-------|------|-------------|
| 1 |           |         |      |      |       |      |             |
| 2 | Component | Formula | MW   | mmol | mg    | g/ml | ml          |
| 3 | A         | C10H16  | 136  | 1    | 136   |      |             |
| 4 | B         | C6H5Br  | 157  | 1,2  | 188,4 | 0,87 | 0,216551724 |
| 5 | C         | EtCl    | 74,5 | 2    | 149   |      |             |
| 6 | D         |         |      |      |       |      |             |
| 7 |           |         |      |      |       |      |             |
| 8 |           |         |      |      |       |      |             |

# How can I plan and analyze 10 000 experiments?



sample\_xls.ods - LibreOffice Calc

Datei Bearbeiten Ansicht Einfügen Format Extras Daten Fenster Hilfe

Arial 10

B6

|   | A         | B       | C    | D    | E     | F    | G           |
|---|-----------|---------|------|------|-------|------|-------------|
| 1 |           |         |      |      |       |      |             |
| 2 | Component | Formula | MW   | mmol | mg    | g/ml | ml          |
| 3 | A         | C10H16  | 136  | 1    | 136   |      |             |
| 4 | B         | C6H5Br  | 157  | 1,2  | 188,4 | 0,87 | 0,216551724 |
| 5 | C         | EtCl    | 74,5 | 2    | 149   |      |             |
| 6 | D         |         |      |      |       |      |             |
| 7 |           |         |      |      |       |      |             |
| 8 |           |         |      |      |       |      |             |

**No!**



# How can I plan and analyze 10 000 experiments?

ISIS/Base - [LIN-LD.db/Ansatz]

File Edit Options Object Database Search List Window Help

Forms Query Browse Update <RXN> Search Domain: All

**Ansatzzettel**

bearbeitet  
 eingetragen

LIN-LD: 173  
 Datum: 13.11.2006  
 Ausführender: Linder

Verf.: LIN-LD 173  
 GC.: LIN-LD 173  
 NMR.: LIN-LD 173  
 MS.: LIN-LD 173

LIN-LD 173  
 Goößen  
 $C_6H_5NO_2$   
 MW= 123  
 TmD  
 Achtung! Noch nicht

|    | Name | Formel       | MW     | mmol | reinh. | mg |
|----|------|--------------|--------|------|--------|----|
| A  |      | $C_7H_5NO_4$ | 167.12 | 0    | 100    | 0  |
| R1 |      |              |        |      | 100    |    |
| R2 |      |              |        |      | 100    |    |

TECHNISCHE UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN

Database: own database

User: Rudolphi, Felix

Project: any

lab journal: RUD

carried out by: any

status: any

date of reaction start: any

Order by: Lab journal entry

Selected items only

Result list: New search

- list mode
- edit mode
- Change to inventory
- My projects
- Projects
- Lab journals
- Literature
- Settings
- Logout

Reaction setup Results GC NMR IR GC-MS Analytics All Custom list mode Search

RUD 1302

project: Übergangsmetallkatalysierte Iminsynthese

date of reaction start: 21.08.2010 00:00:00

Type: Screening

status: started

carried out by: Felix Rudolphi

solv.: NMP Amount (ml): 2 T (°C): 80 dur. (h): 16 Reference

| reactants | eq   | structure | Compound barcode   | formula CAS number  | MW     | n [mmol] | c [%] | m [mg] | p    | V [ml]  | R (g) |
|-----------|------|-----------|--|---|--------|----------|-------|--------|------|---------|-------|
| A         | 1.2  |           | Aus Reaktion RUD965 Kaliumphenylpyruvat  | $C_8H_5KO_3$  | 188.22 | 1.2      | 100   | 226    |      |         |       |
| B         | 1    |           | 4-Bromtoluol (98 %), 100 (99) g, Chemical storage, B1 10030806   | $C_7H_7Br$ 106-38-7   | 171.04 | 1        | 98    | 175    | 1.39 | 0.126   | 28    |
| C         | 0.15 |           | Copper(I) bromide (98 %), 250 (215) g, Chemical storage, K1 10004869   | BrCu 7787-70-4  | 143.45 | 0.15     | 98    | 22     | 4.71 | 0.00466 |       |
| D         | 0.01 |           | Palladium(II)-1,1,1,5,5,5-hexafluoracetylacetonat 5 (3.41) g, Chemical storage, P2, (Song, Bingrui) 10041703 | $C_{10}H_2F_{12}O_4Pd$<br>C: 23.07 %<br>H: 0.39 %<br>N: 0 % | 520.52 | 0.01     | 100   | 5.21   |      |         |       |
| E         | 0.15 |           | 1,10-Phenanthrolin 25 (21.2) g, Chemical storage, P1, (Song, Bingrui) 20040550                               | $C_{12}H_8N_2$ 66-71-7                                      | 180.21 | 0.15     | 100   | 27     |      |         |       |
| F         | 0.01 |           | 1,1'-Bis-(diphenylphosphino)-ferrocen (97 %), 1 (0.554) g, Chemical storage, P3 10004844                     | $C_{34}H_{28}FeP_2$ 12150-46-8                              | 554.39 | 0.01     | 97    | 5.72   |      |         |       |

**Realization:**  
 Solvent, B, E, F and G in stock; solution, 30 min Ar bubbled before use  
 CuBr was dried at 60°C in vac for 2h before use, H was dried at 250°C in vac for 2h before use  
 A was dried at RT in vacuo for 2h before use

Mix solids, add stock solution via syringe and heat for 16 h to 80 °C.

Workup only with water, no HCl. Isolate by Kugelrohr distillation.

**Observation:**  
 Solid does not dissolve as good as at 100 °C, color brown (as usual).

Maybe...



# How can I plan and analyze 10 000 experiments?

Lab notebook entry

27 / 44

project: Projekt X reaction status: planned

Reaction type: Standard document status: open

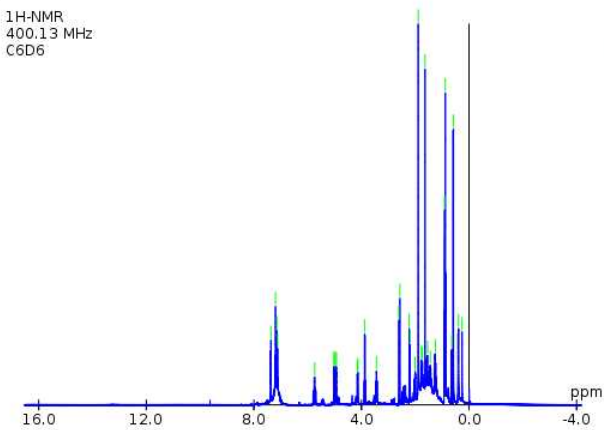
Cc1ccc(cc1)C(=O)O + Cu+ + Cl- >> Cc1ccc(cc1)C(=O)O + Cc1ccc(cc1)C(=O)O

Realization: Additional files (2) Requests for analyses (0) Analytical data (1) citations (3) Advanced All

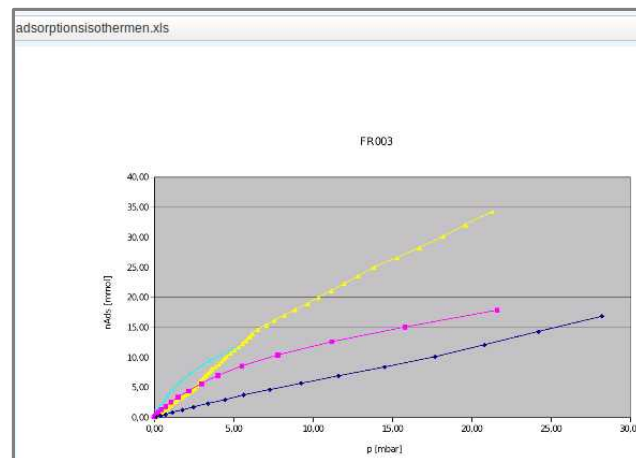
Show only data for this type: any

al18012.zip NMR reaction mixture  
Apr 20, 2012 AV400s calculate yield

1H-NMR (400.13 MHz, C6D6): d=7.36, 7.20, 7.14, 7.11, 5.74, 5.02, 5.00, 4.97, 4.93, 4.16, 4.13, 3.88, 3.44, 2.61, 2.57, 2.23, 2.19, 2.01, 1.89, 1.77, 1.73, 1.64, 1.54, 1.44, 1.25, 0.910, 0.881, 0.641, 0.577, 0.390, 0.259 ppm



Add analytical data



authors: Elinor C. Spencer, Judith A.

Chemical Communications

year: 2005

issue: 3

DOI: 10.1039/B511941C

title: Determination of the hydro...

COMMUNICATION www.rsc.org/chemcomm | ChemComm


**Determination of the hydrogen absorption sites in Zn<sub>4</sub>O(1,4-benzenedicarboxylate) by single crystal neutron diffraction**

Elinor C. Spencer,<sup>a</sup> Judith A. K. Howard,<sup>a\*</sup> Garry J. McIntyre,<sup>b</sup> Jesse L. C. Rowell<sup>a</sup> and Omar M. Yaghi<sup>b</sup>

Received (in Cambridge, UK) 25th August 2005, Accepted 24th November 2005  
First published as an Advance Article on the web 6th December 2005  
DOI: 10.1039/b511941c

A variable temperature (5–300 K) single crystal Laue neutron diffraction study has been conducted, and the gas absorption sites within hydrogen-loaded Zn<sub>4</sub>O(1,4-benzenedicarboxylate) have been located. The accuracy of the results obtained by this method is limited by the low X-ray scattering ability of hydrogen. Herein we report on the first example of the use of single crystal neutron diffraction for the elucidation of the hydrogen gas absorption sites within a

# How can I plan and analyze 10 000 experiments?

| # | Glob | Bromobenzene<br>200.0 mmol | Magnesium<br>200.0 mmol | Iodine<br>20.0 mg | Neues Edukt | Struktur ändern   | Komponente suc | Neues Reagenz | Titel                               | Durc T (°C) | Menge (ml) | Dauer (h) | LöMI | Phenylmagnesium | Neues Produkt |
|---|------|----------------------------|-------------------------|-------------------|-------------|---|----------------|---------------|-------------------------------------|-------------|------------|-----------|------|-----------------|---------------|
| 1 | 1.0  | 1.0                        | 1.0                     | 1.0               |             |   | Name, CAS-Nr   | Referenz      | <input checked="" type="checkbox"/> | 30 => 70    | 200        | 2         | THF  | 1.0             |               |
| 2 | 1.0  | 1.0                        | 1.0                     | 1.0               |             |   | Name, CAS-Nr   | Et2O stat     | <input checked="" type="checkbox"/> | 30 => 70    | 200        | 2         | Et2O | 1.0             |               |
| 3 | 1.0  | 1.0                        | 1.0                     | 1.0               |             |   | Name, CAS-Nr   | wärmer        | <input checked="" type="checkbox"/> | 50 => 70    | 200        | 2         | THF  | 1.0             |               |
| 4 | 1.0  | 1.0                        | 1.0                     | 1.0               |             |  | Name, CAS-Nr   | mit TMDE      | <input checked="" type="checkbox"/> | 30 => 70    | 200        | 2         | THF  | 1.0             |               |

Eintrag hinzufügen    5 Einträge hinzufügen    10 Einträge hinzufügen









- TMEDA
- TMEDA
- TMEDA
- TMEDA
- TMEDA
- Cu-TMEDA-Katalysator (TMEDA)PdMe2
- Cu-TMEDA catalyst

Laborjournaleintrag

27 / 58    Ausgewählt    Schnellsuche    Reaktion kopieren    Auto-Trans    DOI    PDF    PDF    PDF    PDF

Ansatzgröße

Retrosynthesebaum für LAU-LC-0024 - LAU-LC-0027-A

| Retrosynthesebaum  | Struktur  | Titel | isol. % | Kategorie            |
|--|---|-------|---------|----------------------|
| LAU-LC-0024 - LAU-LC-0027-A                                |  |       | 78.0%   | ELN<br>Reaktionskomp |
| 2-Bromoterephthalic acid - 586-35-6 - LAU-LC-0024-A        |  |       |         | ELN<br>Reaktionskomp |
| 2-Bromoterephthalic acid - C8H5BrO4 - 586-35-6             |  |       |         | Molekül              |
| Keine Suchergebnisse                                       |   |       |         |                      |
| 4-Tolylboronic acid - 5720-05-8 - LAU-LC-0024-B            |  |       |         | ELN<br>Reaktionskomp |
| Palladium(II) acetylacetonate - 14024-61-4 - LAU-LC-0024-C |  |       |         | ELN<br>Reaktionskomp |
| Triphenylphosphine - 603-35-0 - LAU-LC-0024-D              |  |       |         | ELN<br>Reaktionskomp |

andere Reaktionen, die zu dieser Struktur führen

Retrosyn

# About Sciformation ELN

- Electronic Laboratory Notebook (ELN)
  - for chemistry
  - for other research disciplines
- Laboratory Information Management System (LIMS)
- Chemical inventory
- Literature database

- fully web-based
- not bound to any platform or OS version




Info for scientists

Info for managers

Info for IT department

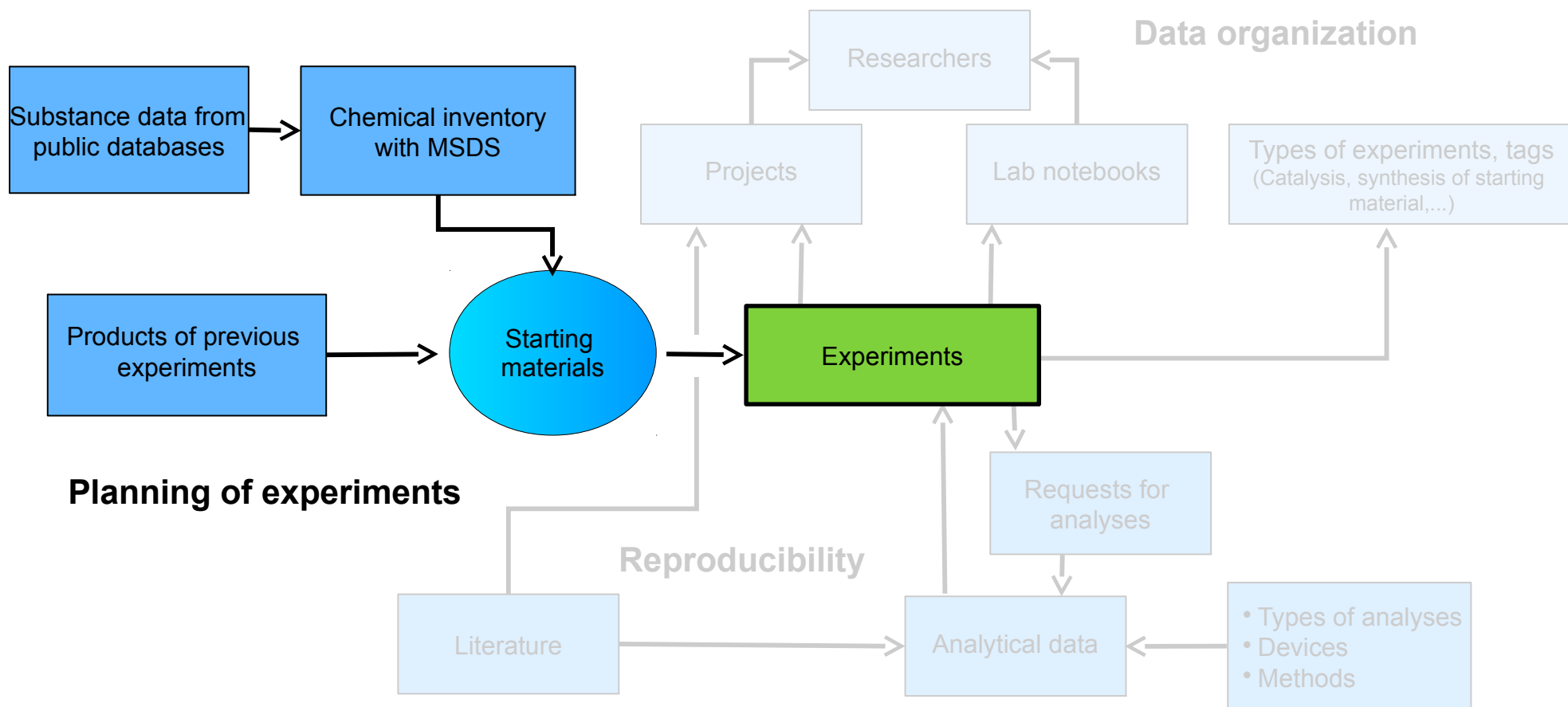


# Benefits

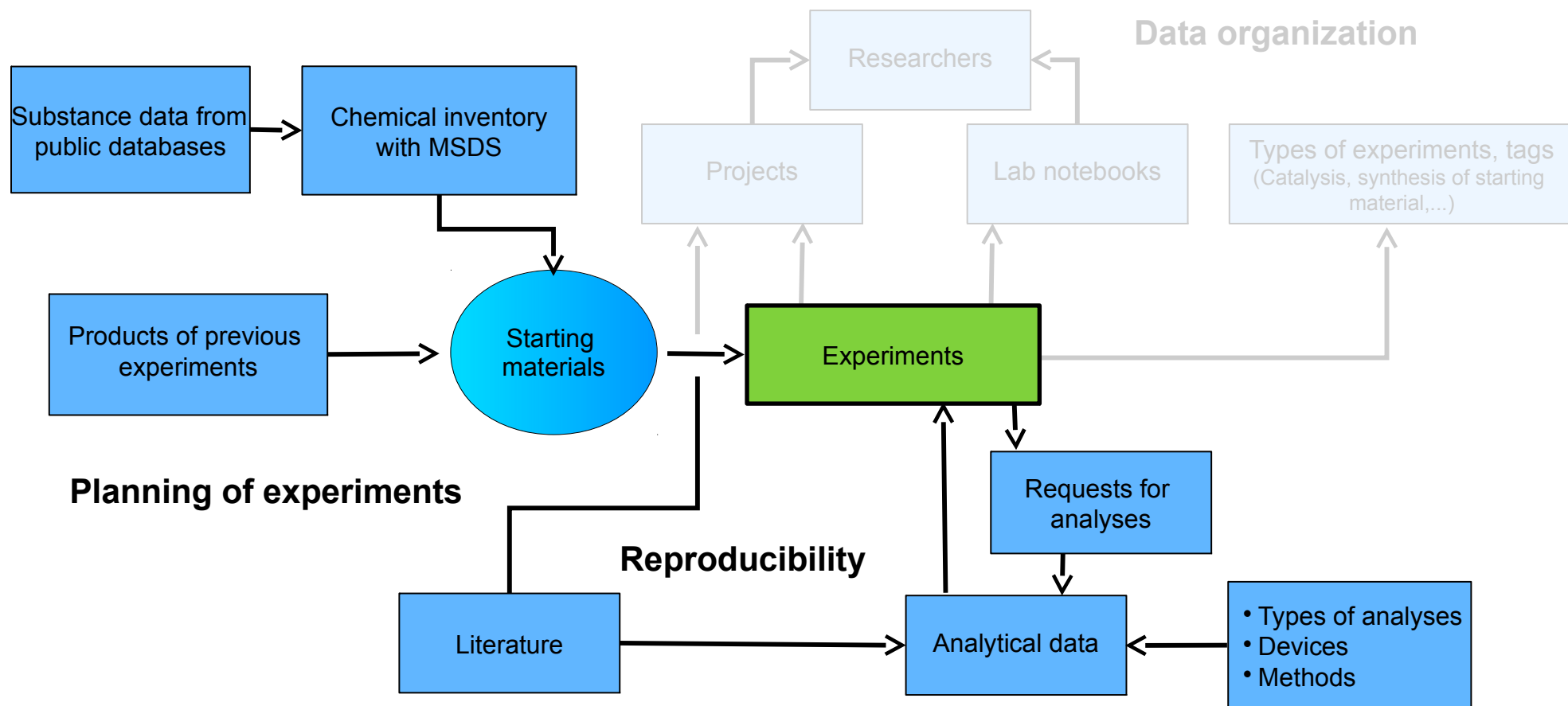
1. Helps to generate and analyze big data
2. Routine tasks get automated
3. Better team coordination
4. Higher work safety, avoids errors and mistakes  
5. Avoids redundant work
6. Higher quality of documentation (complete, readable)
7. Research data becomes valuable resource for future employees 
8. Full control over your data
9. Easy deployment



# Sciformation ELN integrates all aspects of research

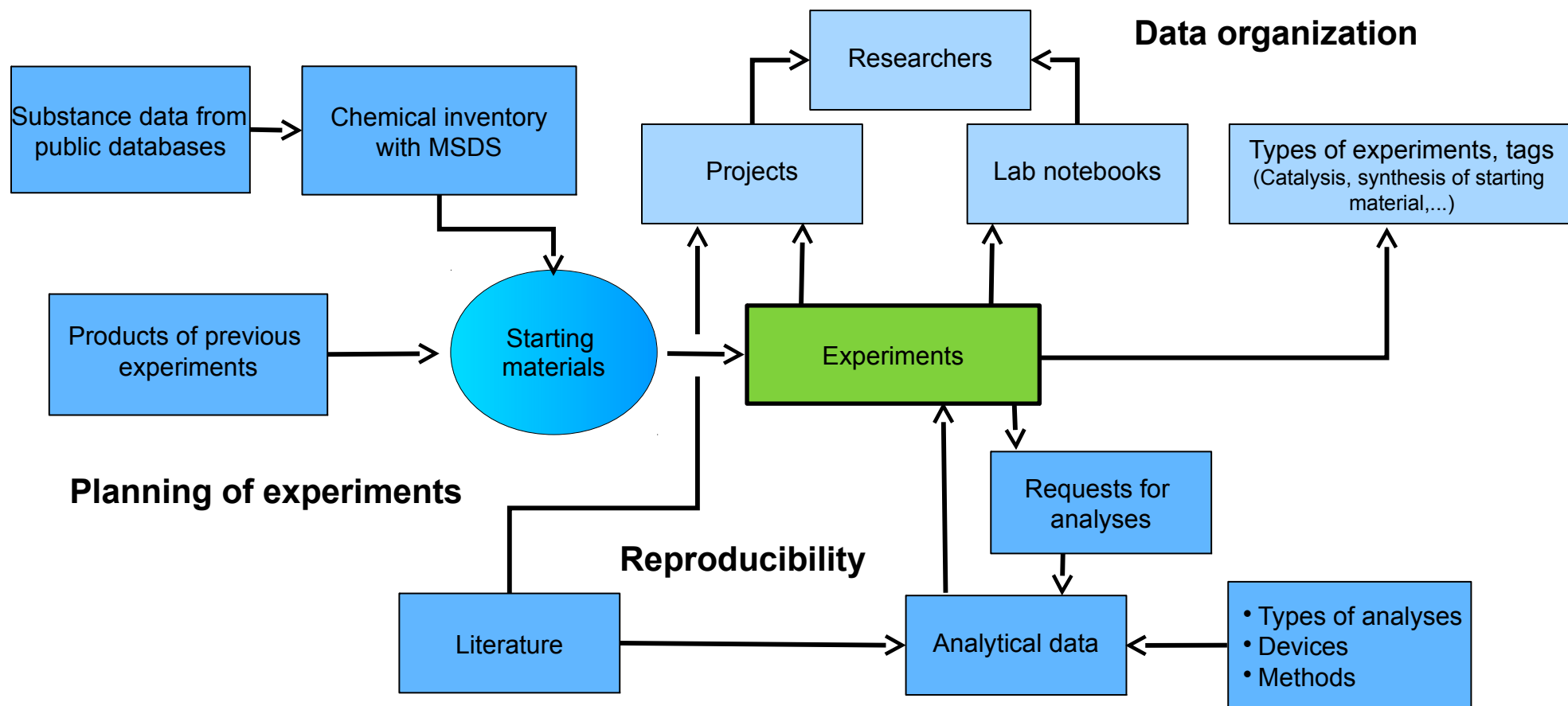


# Sciformation ELN integrates all aspects of research





# Sciformation ELN integrates all aspects of research



# Planning experiments

# Planning a chemical reaction

Laborjournaleintrag

49 / 105

Ausgewählt

Reaktionsgleichung bearbeiten

27.04.2012 10:54:37

Br

+

Mg

→

Br

Mg

Drawing the equation

© 2012-2013 Sciformation - test use only

Struktur kopieren Kопierte Struktur einfügen VectorMol Copyright © 2012-2013 Sciformation Consulting GmbH

OK Abbrechen

Name, CAS-No., Reaktion, Sun. C6H5Br



226-315-411






# Planning a chemical reaction

Laborjournaleintrag

49 / 73  Ausgewählt


 

| Label | Name, CAS-No., F  | MW   | Amount | Unit | Stock   | Location | GHS0                       | Notes   |
|-------|---|------|--------|------|---------|----------|----------------------------|---|
| A 1   | <br>Bromobenzene - C6...<br>Name, CAS-No., F: C6H5Br<br>108-86-1 | 157  | 200.0  | %    | 31400.0 | 1.4 21.1 | 226-315-411<br>273         | X<br>  |
| B 1.0 | Mg<br>Magnesium - Mg - ...<br>Name, CAS-No., F: Mg<br>7439-95-4<br>250.0 g - Schrank 3  | 24.3 | 200.0  | %    | 4910.0  | 1.1 2.81 | 261-228<br>222-223-231+232 | X<br>  |
| C     | I2<br>Iodine<br>Iod<br>Jod<br>MgI2<br>CaI2<br>SnI2<br>Hg2-I2<br>Li2O<br>Ti2O3<br>BaI2   |      |        | %    |         |          |                            | <p>P 222: Berührung mit Luft vermeiden.</p> <p>P 223: Berührung mit Wasser wegen heftiger Reaktion und möglichem Aufflammen unbedingt vermeiden.</p> <p>P 231+232: Unter inertem Gas handhaben. Vor Nässe schützen.</p> <p>P 370+378: Bei Brand: ...zum Löschen verwenden.</p> <p>P 422: Inhalt in/unter...lagern</p> |

Edukt hinzufügen  
Reagenz hinzufü

Durchführung

**B** / *I* / U / ~~S~~ / x



B wurde in 100 ml THF vorgelegt, etwas A zutropft. Anföhen! Dann A mit restl. THF innerhalb von 30 min zutropfen. Std weiterrühren.


Vortrocknung  
Aufarbeitung sauer  
Aufarbeitung basisch

..or using the quick search

Text modules



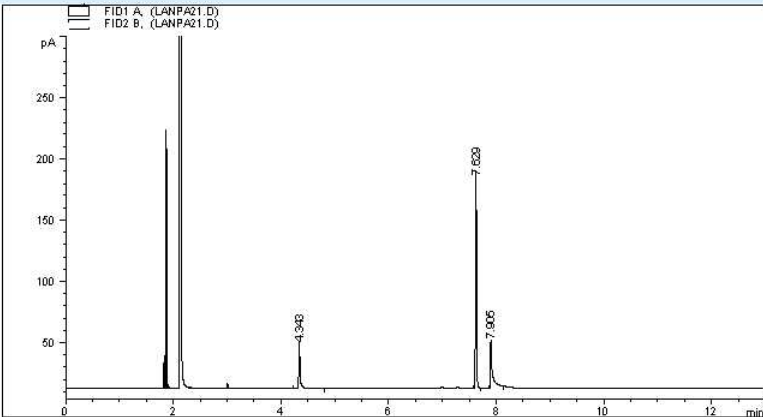
# Calculating the yield

| # | eq  | structur  | molecule names / package | sum formula / CAS No. | MW     | n th [ mmol ] | % | m [ mg ] | Ysp | Yisol                | comment | hazard code | R S H P |
|---|-----|---|--------------------------|-----------------------|--------|---------------|---|----------|-----|----------------------|---------|-------------|---------|
| 1 | 1.0 |  | 4-Phenyltoluene          | C13H12<br>644-08-6    | 168.24 | 10.0          |   | 694+76   |     | 45.8<br>(4.577 mmol) |         |             | 24/25   |

Isolated



RUD-UA28.zip GC Agilent 6890 Reaktionsmischung  Ausbeuteberechnung Frak. Kommentar



Area Percent Report

| Peak # | RetTime [min] | Type | Width [min] | Area [pA*s] | Height [pA] | Area %   |
|--------|---------------|------|-------------|-------------|-------------|----------|
| 1      | 4.343         | VV   | 0.0283      | 67.59409    | 35.31559    | 16.57707 |
| 2      | 7.629         | VV   | 0.0209      | 219.20975   | 171.18623   | 53.75994 |

Data File D:\DATA\LANPA21.D  
Instrument 1 04.04.2007 14:08:53

Injection Date : 04.04.2007 13:55:51 Seq. Line : 2  
Sample Name : Location : Vial 39  
Acq. Operator : Inj : 1  
Inj Volume : 1

Sequence File : C:\HPCHEM\1\SEQUENCE\21-03-07.S  
Method : D:\METHODS\LUKASN.M  
Last changed : 27.10.2006 11:04:31

Sorted By : Signal  
Multiplier : 1.0000  
Dilution : 1.0000

Signal 1: FID1 A.

| Peak # | RetTime [min] | Type | Width [min] | Area [pA*s] | Height [pA] | Area %   |
|--------|---------------|------|-------------|-------------|-------------|----------|
| 1      | 4.343         | VV   | 0.0283      | 67.59409    | 35.31559    | 16.57707 |
| 2      | 7.629         | VV   | 0.0209      | 219.20975   | 171.18623   | 53.75994 |

| Reaktionskomponente | RetTime | Area %   | Ysp (%) | F | Kommentar |
|---------------------|---------|----------|---------|---|-----------|
| Standard: C14H30    | 7,629   | 53,75994 |         | 1 |           |
| C6H12               | 4,343   | 16,57707 | 14,65   | 1 |           |
| C6H14               | 7,905   | 29,66299 | 25,6    | 1 |           |
| Salt - 7647-14-5    |         |          |         |   |           |

Analytically determined (GC, etc.)



# Research and experiments are heterogeneous

**Reactions**

- Homogeneous Catalysis**
  - Asymmetric counterion-directed catalysis
  - Organocatalysis using proline
  - Active center of cytochrome P450cam
- Heterogeneous Catalysis**
  - Sinter stable catalysts: Gold in zirconia spheres
  - Isotope scrambling of silicate oligomers
- Organometallic Chemistry**
  - Noble metal  $\pi$ -acid catalysis
  - Metathesis in total synthesis
- Synthetic Organic Chemistry**
  - Combinatorial asymmetric catalysis
  - superior catalyst

Templates adapted to your requirements

System Chemikaliendatenbank Laborjournal Personaldatenverwaltung Lagerverwaltung Literat

Laborjournaleintrag

|              |          |                      |              |
|--------------|----------|----------------------|--------------|
| Laborjournal | LAU-LC   | Beginn               |              |
| Projekt      | Kein     | Ausführender         | oe2admin oe2 |
| Reaktionstyp | Standard | Titel                |              |
|              |          | Status der Reaktion  | geplant      |
|              |          | Status des Dokuments | offen        |

Bitte wählen Sie aus der Liste der R... ssende Vorlage und speichern Sie den Eintrag dann.

Standard  
Text  
Standard (List)  
ohne Äquivalente  
Standard (Fürstner)



# Biological or medical research

System Chemikaliendatenbank Laborjournal Literaturverwaltung Persönliche Einstellungen Abmelden Hilfe

Laborjournaleintrag

73 / 73  Ausgewählt Datensatz gespeichert

## LAU-LC-073


|                      |                     |
|----------------------|---------------------|
| Beginn               | 01.10.2012 21:27:54 |
| Ausführender         | Daniel Laurich      |
| Titel                |                     |
| Projekt              | Kein                |
| Status der Reaktion  | geplant             |
| Reaktionstyp         | Abstrich            |
| Status des Dokuments | offen               |

Tags + -

Durchführung Zusätzliche Dateien (0) Analysenaufträge (0) durchgeführte Analytik (0) Literatur (1) Erweitert Alles

|                 |                        |
|-----------------|------------------------|
| Enzyme source   | Enterobacter cloacae   |
| Enzyme family   | Reduktase              |
| Enzyme name     | Reduktase<br>Hydrolase |
| Evolution step  | 1                      |
| Incubation time |                        |

Hochladen Herunterladen



nexted XML forms  
saving name-value pairs  
=> high flexibility

And so on and so on...

# Attaching files to ELN entries

**LAU-LC-0019**

project: none  
Reaction type: Standard

Zn^{2+}.Cl^{-} + C1=CC=C(C(=O)O)C=C1

Realization: Additional files (0) Requests for analyses (0) Ana

File: **Add file**

**Datei hochladen**

| Orte               | Name                         | Größe    | Letzte Änderung |
|--------------------|------------------------------|----------|-----------------|
| Suchen             | MOF                          |          | 26.06.2009      |
| Zuletzt verwendet  | prandtl_dateien              |          | 09.05.2009      |
| fr                 | conecat-ringvorlesung        |          | 09.05.2009      |
| Desktop            | Chr Augustin                 |          | 09.05.2009      |
| Dateisystem        | nusselt_dateien              |          | 09.05.2009      |
| 161 GB-Dateisystem | theorie_allgemein03_dateien  |          | 09.05.2009      |
| System Reserved    | prandtl_nusselt_dateien      |          | 09.05.2009      |
| 12 OE2 en          | symbol_dateien               |          | 09.05.2009      |
| Poster             | reynolds_dateien             |          | 09.05.2009      |
| open inventory     | Biomasse_komplett.pdf        | 15,0 MB  | 01.02.2006      |
| Vorträge           | report_616-2_d.pdf           | 323,7 KB | 13.11.2005      |
| Papers             | report_616-1_d.pdf           | 397,9 KB | 13.11.2005      |
| oe2                | MIRO Karlsruhe wikimedia.jpg | 155,0 KB | 09.11.2005      |
| Dokumente          | ren-ganz_netz.pdf            | 209,5 KB | 06.11.2005      |
| Gewerbe            | complete.doc                 | 7,2 MB   | 09.11.2004      |
| Downloads          | vorlage_TCII.ppt             | 980,5 KB | 26.07.2004      |
| Öffentlich         | cosh.xls                     | 141,0 KB | 12.04.2004      |
| dr-arbeit          | makro1.pdf                   | 503,5 KB | 12.04.2004      |
| Studium            | meoh_zerfall.pdf             | 249,2 KB | 12.04.2004      |
| Musik              | skript.pdf                   | 1,5 MB   | 09.04.2004      |

Hinzufügen Entfernfen

Alle Dateien

Abbrechen Öffnen

Durchführung **Zusätzliche Dateien (1)** Analysenaufträge (1) durchgeführte Analytik (0) Literatur (0) Erweitert Alles

Datei: adsorptionsisothermen.xls

Herunterladen

FR003

Ads [mmol]

document to collect the adsorption data

also via „drag & drop“



# Adding literature

System Chemikaliendatenbank Laborjournal Literaturverwaltung Persönliche Einstellungen Abmelden Hilfe

Laborjourmaleintrag

73 / 73 Ausgewählt

Eintrag hinzufügen

Neu Suchen

Literaturzitat

Autoren Manfred T. Reetz

[Angewandte Chemie](#)

Jahr 2010 Band 123

Ausgabe 1 Seite (von-bis) 144-182

DOI 10.1002/ange.201000100

Titel Gerichtete Evolution stereoselektiver Enzyme: Eine ergiebige Katalysator-Quelle für asy

**Protein-Engineering**

**Gerichtete Evolution stereoselektiver Enzyme: Eine ergiebige Katalysator-Quelle für asymmetrische Reaktionen**

Manfred T. Reetz\*

**Schwerer:**  
Asymmetrische Katalyse  
Enantioselektivität - Enzyme  
Gerichtete Evolution

Schlüsselwörter

```
graph TD; Literatur[Literatur] --> Projects[Projects]; Literatur --> AnalyticalData[Analytical data]; Experiments[Experiments] --> Projects;
```

acquires the bibliographic data and the full texts if possible

# Analytical data

# Analytical data

- Transfer data from the devices to the ELN
- Create preview images (extensible by Python modules)



Eintrag hinzufügen

Neu Suchen

Analytikdaten

✓ | doi

Analytikart: NMR gemessen durch

Gerät: AV400s (NMR) Transferieren

Methode: Kein Kommentar

Probenbezeichnung:

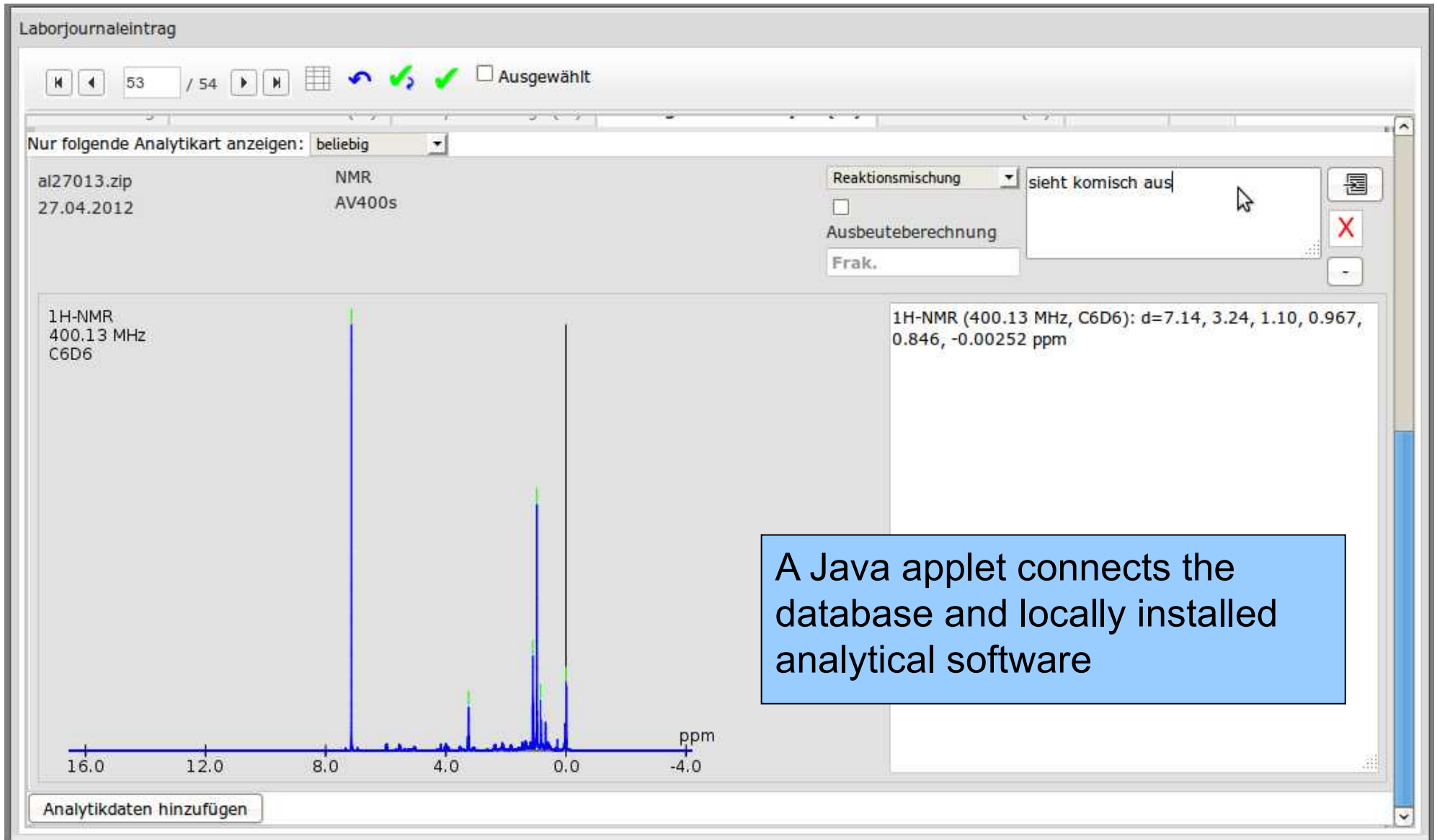
Lösungsmittel:  Frak.

Datei oder Ordner transferieren Bericht

|         |                      |                     |
|---------|----------------------|---------------------|
| al27005 | Ordner transferieren | 27.04.2012 10:33:47 |
| al27014 | Ordner transferieren | 27.04.2012 10:25:09 |
| al27013 | Ordner transferieren | 27.04.2012 10:17:17 |
| al27012 | Ordner transferieren | 27.04.2012 10:09:24 |
| al27011 | Ordner transferieren | 27.04.2012 10:01:18 |
| al27010 | Ordner transferieren | 27.04.2012 09:54:00 |

# Analytical data

- Transfer data from the devices to the ELN
- **Create preview images** (extensible by Python modules)



# Measure and let measure

Eintrag hinzufügen

Neu

Analysenauftrag



Nächster Schritt

freigegeben

Analysenzettel

|                          |                   |   |   |
|--------------------------|-------------------|---|---|
| Laborjournaleintrag      | LAU-LC-0053       | Auftragsnummer  | 0   |
| Auftraggeber             | oe2admin oe2admin | Abteilung   | root  |
| 1. Telefonnummer         |                   | 2. Telefonnummer  |   |
| Emailadresse             |                   |   |   |
| Probenchiffre            | LAU-LC-0053-01    | Anzahl Proben   | 1 <input type="button" value="Liste anpassen"/> |
| Analytikart              | NMR               | <input checked="" type="checkbox"/> Reaktion für Analytikabteilung sichtbar |   |
| Analysenauftrag erstellt | 27.04.2012        |   |   |



Analysenauftrag



Zusätzliche Dateien

Kommentar

Datei hinzufügen

Specific XML forms

Kernart

|   |  |   |
|---|--|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> <sup>1</sup> H-NMR  | ca. <input type="text" value="200"/> bis <input type="text" value="-5"/> ppm   | (rel. TMS)                                |
| <input type="checkbox"/> <sup>11</sup> B-NMR            | ca. <input type="text" value="150"/> bis <input type="text" value="-100"/> ppm | (rel. BF <sub>3</sub> ·OEt <sub>2</sub> ) |
| <input checked="" type="checkbox"/> <sup>13</sup> C-NMR | ca. <input type="text" value="250"/> bis <input type="text" value="-30"/> ppm  | (rel. TMS)                                |
| <input type="checkbox"/> <sup>15</sup> N-NMR            | ca. <input type="text" value="100"/> bis <input type="text" value="-400"/> ppm | (rel. CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub> )   |
| <input type="checkbox"/> <sup>19</sup> F-NMR            | ca. <input type="text" value="200"/> bis <input type="text" value="-300"/> ppm | (rel. CFCl <sub>3</sub> )                 |
| <input type="checkbox"/> <sup>29</sup> Si-NMR           | ca. <input type="text" value="200"/> bis <input type="text" value="-200"/> ppm | (rel. TMS)                                |
| <input type="checkbox"/> <sup>31</sup> P-NMR            | ca. <input type="text" value="250"/> bis <input type="text" value="-90"/> ppm  | (rel. H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> )    |
| <input type="checkbox"/> andere Messung                 | spektrale Breite <input type="text"/>  |   |



# Sample inbox

Chemikaliendatenbank Laborjournal Persönliche Einstellungen Abmelden Hilfe

Analysenauftragsverwaltung

Zuletzt aktualisiert 14:32:23

erstellt (0) freigegeben (1) Fehlerkorrektur (5) Wiedervorlage (1) **In Bearbeitung (6)** abgeschlossen (8)

Filter als Standard verwenden  
Speichern Löschen

Filtereinstellungen  
 nur eigene Aufträge anzeigen

**Analytikart**  
 GC  
 XRAY\_SINGLE  
 XRAY\_POWDER  
 NMR  
 MS  
 SEM  
 NMR\_SPECIAL  
 TEM  
 LC  
 XRAY\_XPS

| Auftragsnummer | Laborjourneleintrag                | Analytikart |                     | Auftraggeber   | Bemerkungen des Auftraggeb | Bemerkungen der Analytikabt |
|----------------|------------------------------------|-------------|---------------------|----------------|----------------------------|-----------------------------|
| 1              | LAU-LC-041                         | LC          | 15.05.2012 14:12:05 | Daniel Laurich |                            |                             |
| ▶ 0            | LAU-LC-003, LAU-LC-002             | GC          | 09.05.2012 20:56:47 | Daniel Laurich |                            |                             |
| ▼ 42           | LAU-LC-004, LAU-LC-011, LAU-LC-006 | GC          | 04.06.2012 14:07:47 | Daniel Laurich | schnell testen             |                             |
| 42             | LAU-LC-004                         | GC          | 05.06.2012 17:11:26 | Daniel Laurich |                            |                             |
| 42             | LAU-LC-011                         | GC          | 05.06.2012 13:41:22 | Daniel Laurich |                            |                             |
| 42             | LAU-LC-006                         | GC          | 05.06.2012 13:41:22 | Daniel Laurich |                            |                             |
| ▶ 43           | LAU-LC-002, LAU-LC-008, LAU-LC-003 | GC          | 05.06.2012 14:09:52 | Daniel Laurich |                            |                             |

1 / 2

[1-7/9]

**Single tasks and groups**

Analysenauftrag

Ausgewählt Auto-Trans PDF

Anzahl Proben 0

Analytikart LC Reaktion LAU-LC-041 Reaktion bei Auftragsabgabe

Analysenauftrag erstellt 16.04.2012

Probe lagern  Raumtemperatur  +5°C  -20°C  Trockeneis  
 unter Argon  auf Abruf

Strukturvorschläge

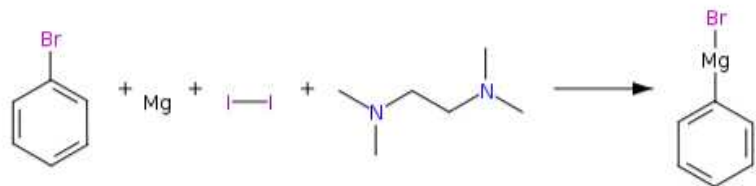
Zusätzliche Dateien

Analysenziel

Analytisch  Präparativ  HPLC/MS  CE

**Request form**

# Collaboration with analytical departments



Status monitoring and communication

| Durchführung  | Zusätzliche Dateien (0) | <b>Analysenaufträge (2)</b> | durchgeführte Analytik (1) | Literatur (0)            | Erweitert                | Alles                               |                        |
|---------------|-------------------------|-----------------------------|----------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------------------|------------------------|
| Probenchiffre | Analytikart             | Auftragsnummer              | Erstellt                   | Bemerkungen des Auftrags | Bemerkungen der Analytik | Reaktion anzeigen                   |                        |
|               | NMR                     | 16                          | 27.04.2012                 | eilt wie immer sehr      |                          | <input checked="" type="checkbox"/> | <b>in Bearbeitung</b>  |
|               | NMR                     | 17                          | 30.04.2012                 | urgent as usual          |                          | <input checked="" type="checkbox"/> | <b>Fehlerkorrektur</b> |

The analytical department adds the results directly to the lab notebook entry.



# Searching within the database

# Searching for chemical substructures and any other kind of information


Suchdialog: Laborjournaleintrag

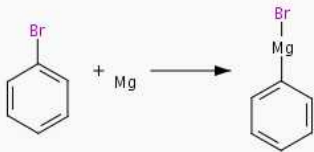
Suchparameter Ergebnis

neue Suche Suchen Alle anzeigen  Listenansicht  Detailansicht Neue Suche   ausgewählte Datensätze

Laborjournale und Projekte

|                      |                      |                     |  |
|----------------------|----------------------|---------------------|--|
| Autor                | beliebig             | Ausführender        | <input type="text"/>   |
| Laborjournal         | beliebig             | Nr. im Laborjournal | <input type="text"/>   |
| Projekt              | beliebig             | Titel               | <input type="text"/>   |
| Reaktionstyp         | beliebig             | Tags                | <input type="checkbox"/> Katalyse<br><input type="checkbox"/> Synthese |
| Beginn               | <input type="text"/> |                     |  |
| Status der Reaktion  | beliebig             |                     |  |
| Status des Dokuments | beliebig             |                     |  |

Did anyone try this already? Is there an NMR of this substance? 



Erweitert

Durchführung und Beobachtung

|              |                           |             |                      |
|--------------|---------------------------|-------------|----------------------|
| Durchführung | <input type="text"/>      | Beobachtung | <input type="text"/> |
| Ansatzgröße  | <input type="text"/> mmol |             |                      |
| isol. %      | >80                       | Ysp (%)     | <input type="text"/> |
| T (°C)       | 20-40                     | Dauer (h)   | <input type="text"/> |

Did anyone try this already? Is there an NMR of this substance?

- Extension to MySQL/PostgreSQL for chem. structure formulas
- Query builder, dyn. JOIN generation

# Searching the literature database

Suchdialog: Literaturzitat

Suchparameter Ergebnis

neue Suche Suchen Alle anzeigen  Listenansicht  Detailansicht Neue Suche ▼

Autoren reetz Name des Journals beliebig

Jahr

Ausgabe

DOI

Volltext enzyme

1 Ergebnis 1 / 1 10 Zeilen

| Literaturstelle  | DOI   |
|--|---|
| Manfred T. Reetz, <i>Angewandte Chemie</i> <b>2010</b> , 123 (1), 144-182.<br><b>Angew:</b> M. T. Reetz, <i>Angewandte Chemie</i> <b>2010</b> , 123, 144-182.<br><b>JACS:</b> M. T. Reetz <i>Angewandte Chemie</i> , <b>2010</b> , 123, 144-182.<br><b>RSC:</b> Reetz, M. T., <i>Angewandte Chemie</i> , <b>2010</b> , 123, 144-182. | <a href="https://doi.org/10.1002/ange.201000000">10.1002/ange.201000000</a> |

1 Reakt

Interesting paper! What experiment does it belong to?





# Searching for similar spectra

Suchdialog: Analytikdaten

Suchparameter

neue Suche Suchen Alle anzeigen  Listenansicht  Detailansicht  ausgewählte Datensätze

Analytikart beliebig gemessen durch

Analytikgerät beliebig Kommentar

Methode Probenbezeichnung

Lösungsmittel Frak.

Suche nach Signalen in Analytikdaten

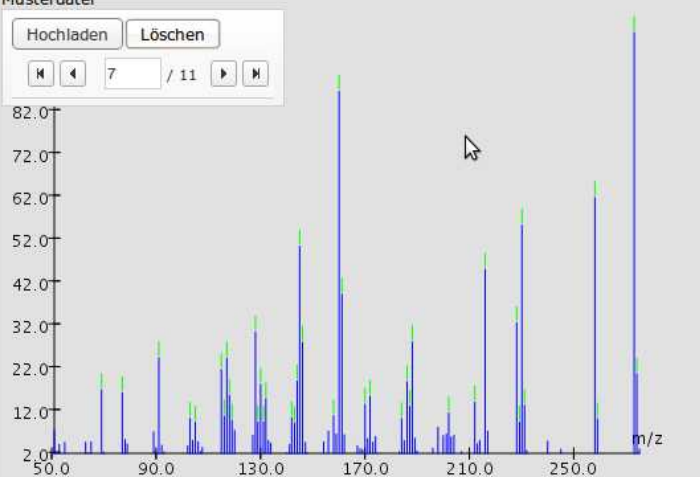
Suchen in Einzelspektren  Musterdatei hochladen  Signale als Text eingeben  Muster aus der Datenbank wählen

min. prozentuale Übereinstimmung RetTime 20,87 min

Musterdatei

Hochladen Löschen

7 / 11



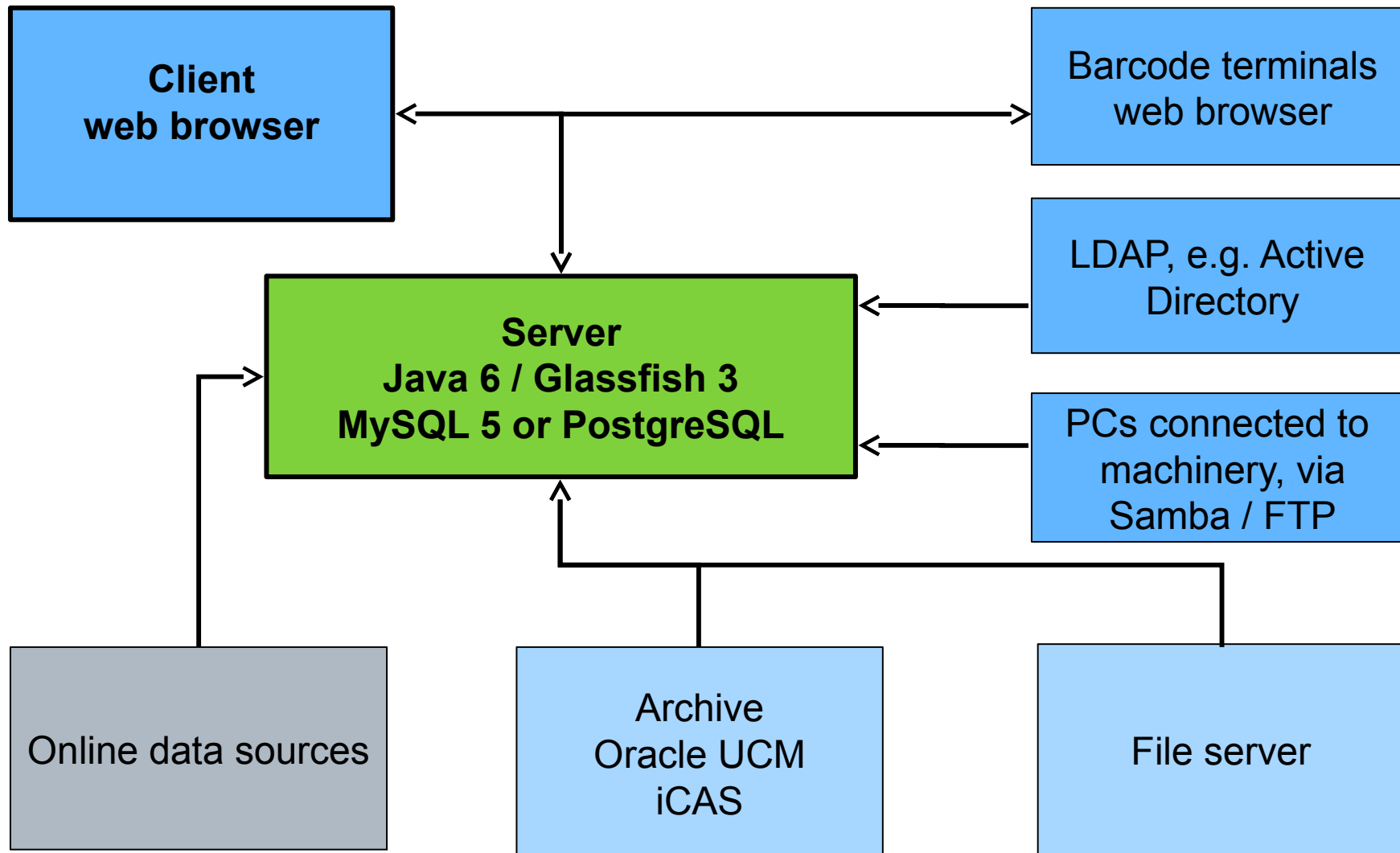
Toleranzen bei der Suche MS

Did we have this side product in the past?

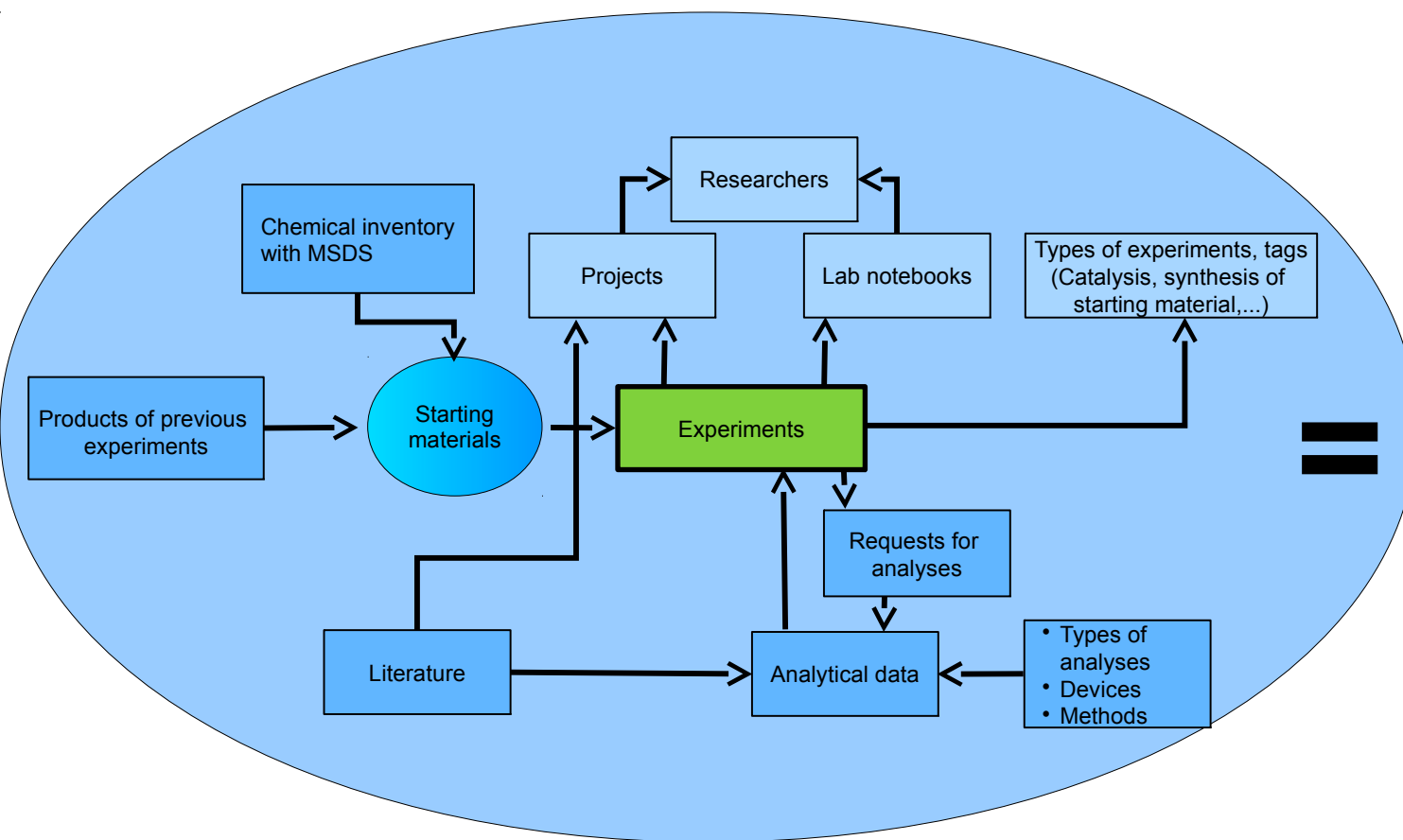


# Technology

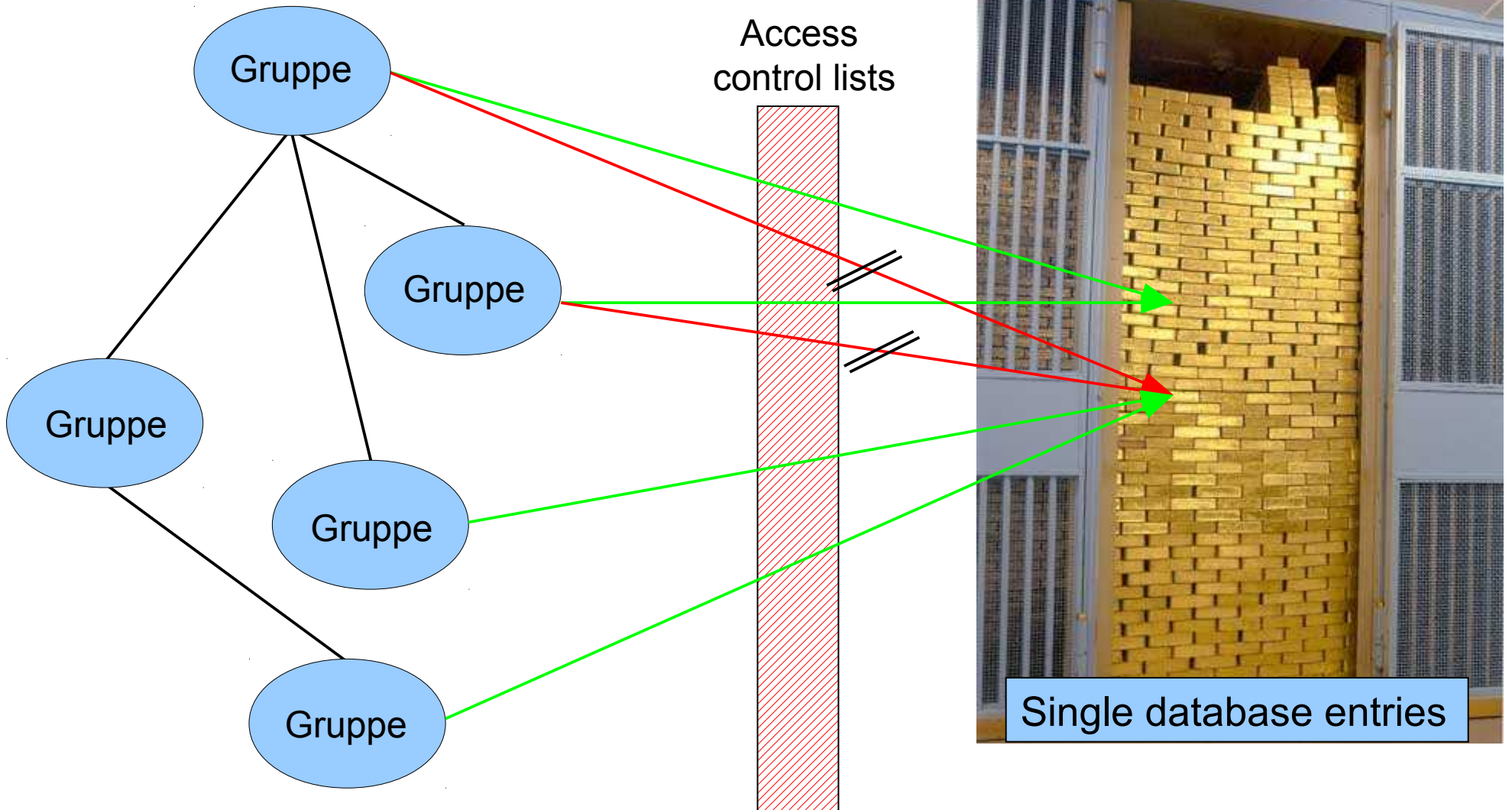
# Architecture



# Managing permissions



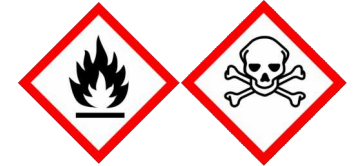
# Managing permissions



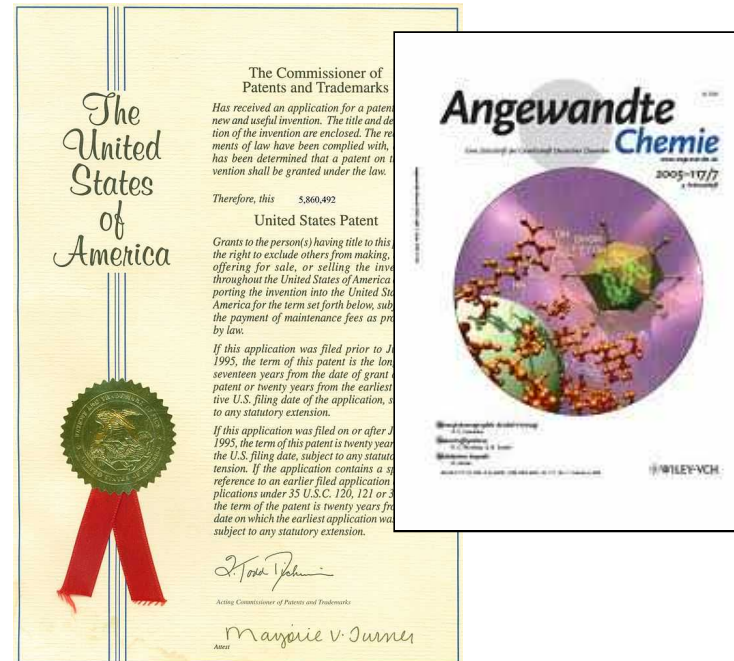


# Summary

- complete documentation integrating all data
- rich and smart functionality
- more work safety, less routine work
- shared and controlled data access
- search functionality with chemical intelligence
- flexible and extensible



Reach your goal with less effort in shorter time



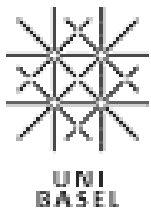
# Reference users

open inventory

sciformation<sup>ELN</sup>

- TU Kaiserslautern
- Univ. Düsseldorf, Hamburg, Hohenheim, Leipzig, Mainz, Saarbrücken, Tübingen
- SMEs
- Government agencies

- MPI für Kohlenforschung



CYNORA  
optoelectronic materials

DyStar®



Universität zu Köln

sciformation

- PhD project
  - PHP/MySQL
  - open source
  - ELN for chemistry
  - Chemical inventory
  - Literature database
  - 3 permission levels
  - substructure search
- Project together with the MPI für Kohlenforschung
  - Java Server Pages/PostgreSQL or MySQL
  - commercial license
  - multidisciplinary ELN
  - Chemical inventory
  - Literature database
  - detailed permission management
  - about 20x faster, extended search modes
  - audit trail
  - LDAP integration
  - LIMS (requests for analyses)

# Automatic transfer of analytical data

Laborjournaleintrag

55 / 58  Ausgewählt  Reaktion kopieren

**LAU-LC-0055**

LAU-LC-0049

Projekt

Reaktionstyp

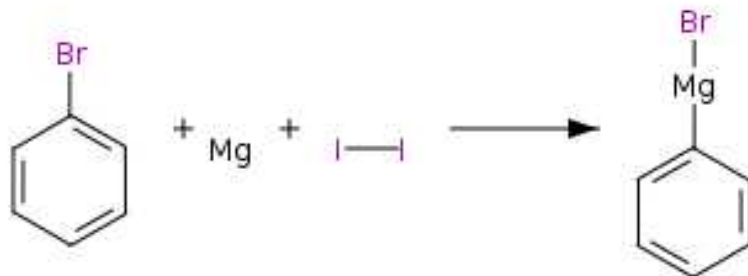
Beginn 02.05.20

Ausführender

Titel

Status der Reaktion

Status des Dokuments



- Auto-Trans
- DOI
- PDF
- PDF
- PDF
- GC
- GC/MS
- XRAY\_SINGLE
- XRAY\_POWDER
- NMR
- MS
- SEM
- NMR\_SPECIAL
- TEM
- LC
- XRAY\_XPS
- Bruker DPX300S (NMR)
- AV400s (NMR)
- Agilent 5890 (GC)
- Stoe (XRAY\_POWDER)

