

Elektronisches Laborjournal

Mit dem elektronischen Laborjournal haben Sie die Möglichkeit, Ihre wissenschaftlichen Projekte digital zu verwalten und auszuwerten. Zu jedem Projekt können Sie Versuchsvorschriften, Reaktionsgleichungen, eingesetzte und erhaltene Stoffe, Analyse- und Literaturdaten konsistent darstellen und archivieren. Dadurch kann die Produktivität signifikant erhöht und einem Wissensverlust in Folge von Mitarbeiterfluktuation wirksam vorgebeugt werden. Außerdem ermöglicht die Suchfunktion (Wörter aber auch Struktursuche) eine schnelle Suche nach Projekten und deren Ergebnissen.

Projekte

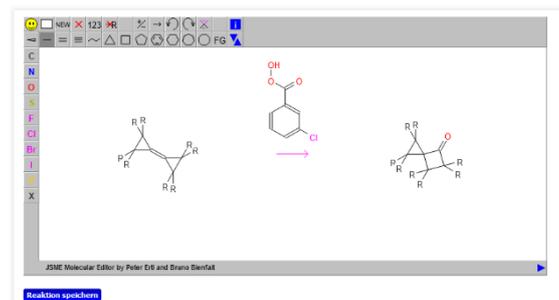
Als erstes muss ein Projekt angelegt und ggf. Berechtigungen gesetzt werden, sollten Sie eine entsprechende Berechtigung dafür haben. Dazu klicken Sie auf das Symbol

Anschließend erhalten Sie folgende Ansicht mit den Reitern:

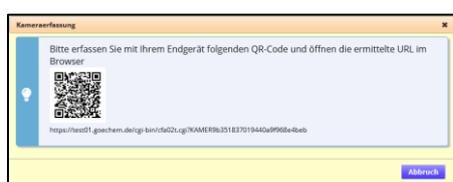
- Berechtigungen
- Projektbeschreibung
- Ansätze
- Analysen/Dokumente
- Literaturangaben

Der Reiter „Projektbeschreibung“ ist standardmäßig aktiv, sodaß Sie gleich das Pflichtfeld der **Projektbezeichnung** ausfüllen können. Optional können Angaben zum **Projektstart**, **–ende** und dem **Projektstatus** angegeben werden. Angaben zum **vorherigem** und **Folgeprojekt** sind aktuell nur informativ und haben keinen Einfluss auf Projektauswertungen. Auf der rechten Seite befindet sich der Texteditor für die **Projektbeschreibung** (Versuchsvorschriften etc.).

Durch Klicken auf das Symbol  werden Sie zum Struktureditor¹ weitergeleitet. In diesem können Sie die Reaktionsgleichung zum Projekt erstellen. Dadurch werden zu diesem Projekt alle eingegebenen Stoffe für zukünftige Suchen gespeichert.



Es ist auch möglich, daß Sie mit z.B. Ihrem Smartphone Fotos aufnehmen und diese gleich in das Projekt hochladen können. Dazu Klicken Sie auf das Symbol . Es erscheint ein Fenster mit einem QR-Code, den Sie mit Ihrem Smartphone erfassen und die decodierte Adresse im Browser öffnen. Alternativ können Sie auch die darunter stehende Adresse in der Adressleiste des Browsers eingeben.



Bevor die Kamera aktiviert wird, müssen Sie ggf. Ihrem Browser die Berechtigung dafür erteilen. Anschließend können Sie die Bilder aufnehmen. War die Datenübertragung des Bildes erfolgreich, wird es in der Box „letztes erfasstes Bild“ angezeigt. Auf der Ausgangsseite werden alle empfangenen Bilder angezeigt.



Möchten Sie die Erfassung beenden, so klicken Sie auf die Schaltfläche „fertig“. Auf der Ausgangsseite können Sie das Fenster schließen und die Bilder weiterbearbeiten (s. Analysen/Dokumente).

Ansätze

Da es zu jedem Projekt mehrere Versuchsreihen oder Experimente gibt, bei denen die Versuchsbedingungen variiert oder optimiert werden, um bestmögliche Ergebnisse zu erzielen, können diese in **Ansätzen** gespeichert werden. Jeder Ansatz kann mit **Notizen**, **Reagenzien** und **Proben** versehen werden. Die Proben wiederum können mit **Dokumente** und **Lagerorte** verknüpft werden.

¹ Wenn Sie Ihre Reaktionen/Strukturen schon in einem anderen Struktureditor angelegt haben, können Sie durch Drag&Drop die Moleküldatei (*.mol)/Reaktionsdatei (*.rxn) oder die Strukturdaten importieren.

The screenshot displays the 'Ansätze' (Reactions) section of the laboratory journal. It shows a table with columns for 'Ansatzname', 'Ansatznotizen', 'Eingesetzte Reagenzien', and 'Proben'. The 'Ansatz001' entry includes detailed notes about the reaction of 1,1,2,2,5,5,6,6-octamethyl-7-oxadispiro[2.0.2.1]-heptane and 1,1,2,2,5,5,6,6-octamethylspiros[2.3]-hexan-4-one, along with reagent quantities and analytical data (NMR, IR, MS). The 'Proben' section lists three samples: 'Probe: ProbeP3A1' (status: abgeschlossen), 'Probe: A02U3-AN01-2' (status: in Vorbereitung), and 'Probe: A02U3-AN01-1' (status: abgeschlossen).

Um einen Ansatz hinzuzufügen, klicken Sie auf das Symbol . Sie werden um die Eingabe des **Ansatznamens** und (optional) der **eingesetzten Reagenzien** gebeten. Weitere Reagenzien oder die Korrektur des Ansatznamens können durch Klicken auf „Reagenz hinzufügen“ hinzugefügt/korrigiert werden.

Reagenzien

Reagenzien sind die für den Ansatz benötigten Produkte. Bei der Eingabe der Reagenzien erscheint eine Vorschlagsliste. Durch Klicken des Namens erscheint dann das Feld „eingesetzte Menge“. Möchten Sie, dass die eingesetzte Menge automatisch vom verbleibenden Inhalt abgezogen wird, so muss das entsprechende Kontrollkästchen aktiv sein.

Die ID wird automatisch gesetzt und entspricht einem registrierten Produkt aus dem Chemikalienkataster.

The screenshot shows the reagent input form with the following fields: 'Reagenz' (Ammoniumacetat min. 97), 'ID' (29941), 'MngEinh.' (2.50 KG), 'einges. Menge' (KG), and a checked checkbox for 'eingesetzte Menge aus Behälter abziehen'.

Möchten Sie ein Reagenz hinzufügen, welches nicht im Chemikalienkataster registriert ist, so klicken Sie in der Vorschlagsliste auf den untersten Wert.

Proben

Proben sind isolierte Stoffe aus einem Ansatz und können entweder Rohgemische oder schon isolierte Reinsubstanzen sein. Für jede Probe können Sie einen Lagerort setzen², Dokumente verknüpfen und den

² Es können nur Lagerorte festgelegt werden, wenn zuvor Aufbewahrungsboxen auf der Seite „Lagerorte“ angelegt wurden.

Status festlegen.

Analysen/Dokumente

Messergebnisse werden meist in einem nicht offenen Dateiformat gespeichert, weshalb eine Auswertung in GoeChem (noch) nicht möglich ist. Die Ergebnisse können aber zum Projekt hochgeladen werden, damit die Projektbearbeiter diese dann verwenden können.

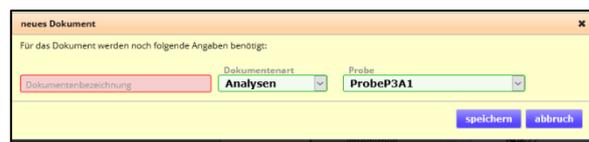
Auch können Sie natürlich Literatur zum Projekt bereitstellen.

Damit die Dokumente leichter gefunden werden, wird dem Dokument noch eine Dokumentenart und (optional) die Probe zugewiesen.

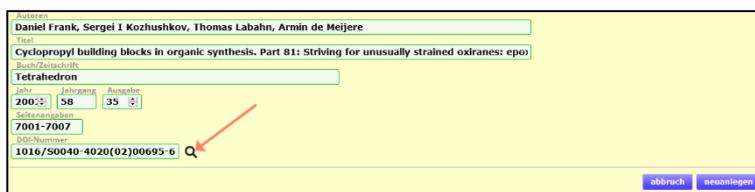
Literaturangaben

Durch Literaturangaben im Laborjournal haben Sie eine Möglichkeit die entsprechende Vorschrift oder Vorlage zum Projekt zu erhalten.

Durch Klicken auf das Symbol  erhalten Sie das Formular, um zum Projekt die Literaturangaben hinzuzufügen. Ist die DOI-Nummer bekannt, kann diese zuerst eingegeben werden. Durch Klicken auf  werden die übrigen Felder automatisch³ ausgefüllt. Durch Klicken auf **neuanlegen** wird die Literaturangabe gespeichert.



In der Tabelle ist die DOI-Nummer mit der Webseite „www.doi.org“ verlinkt. Von dort erfolgt automatisch die Weiterleitung zum Artikel.



Literaturangabe	DOI	Option
[1] Ramesh C. Samanta, Julia Struwe, Lutz Ackermann, <i>Angewandte Chemie International Edition</i> 2005, 44, 33, 14154-14159 https://doi.org/10.1002/anie.200504958	10.1002/anie.200504958	 
[2] Daniel Frank, Sergei I Kozhushkov, Thomas Labahn, Armin de Meijere, <i>Tetrahedron</i> 2002, 58, 59, 7901-7907 https://doi.org/10.1016/S0040-4020(02)00695-6	10.1016/S0040-4020(02)00695-6	 

Zu jeder Literaturangabe gibt es noch die Optionen „bearbeiten“ und „löschen“.

³ Die Daten werden über eine REST-Schnittstelle von „api.crossref.org“ bezogen

Berechtigungen

Möchten Sie, daß mehrere Anwender an einem Projekt arbeiten oder jemand anderes dieses Projekt bearbeiten darf, so können Sie in diesem Tab die entsprechenden Berechtigungen den Anwender geben. Dabei können Sie nur Anwender auswählen, zu denen Sie berechtigt sind oder zu Abteilungen, mit denen Sie auf der Seite „Profil (Abteilung)“ eine Kooperation eingegangen sind (**interne Berechtigungen**).

Möchten Sie jemand eine Berechtigung geben, der nicht in „interne Berechtigungen“ zur Verfügung steht, können Sie in **externe Berechtigungen** diesen aufnehmen. Dazu klicken Sie auf „externe Bearbeitungsrechte hinzufügen“ und füllen das Formular aus.

Sollte Ihr GoeChem-System von außen nicht erreichbar sein, Sie aber jemanden Bearbeitungsrechte geben wollen, können die Daten zum GoeChem-Hauptserver übermittelt werden. In diesem Fall werden noch folgende zusätzliche Abfragen erfolgen:

Projektbeschreibung & -skizzen/strukturen

Projektdokumente: *Alle Dokumente zum Projekt*

Probendokumente: *Alle Dokumente, die mit der Analyse verknüpft sind*

externen Bearbeitungsberechtigten hinzufügen

E-Mail-Adresse: cmusterm@zufalldomain.de Probe: ProbeP0A1

Abteilung für Herrn Dr. Mustermann:

Sehr geehrter Herr Dr. Mustermann,
von dieser Probe bitten wir Sie, ein 1H und 13C messen zu lassen.

interne Bearbeitung
 externe Bearbeitung
 Projektbeschreibung & -skizzen/strukturen
 Projektdokumente
 Probendokumente

abbrechen ext. Berechtigung speichern

Es werden keine personenbezogene Daten aus dem Projekt zum GoeChem-Hauptserver übermittelt. Namen aus der Projektbeschreibung, in den Dokumenten oder in der Probenbezeichnung können nicht herausgefiltert werden.

Wurde die Probe vom berechtigten bearbeitet und als abgeschlossen markiert, erhält derjenige, der die Berechtigung erstellt hat eine Benachrichtigung und Sie können die Daten herunterladen und in das Projekt integrieren. Nach dem Herunterladen werden die Daten vom GoeChem-Hauptserver gelöscht. Dadurch hat der ursprüngliche Bearbeitungsrechtige keinen Zugriff mehr.

Probenverzeichnis

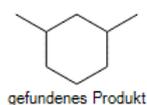
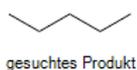
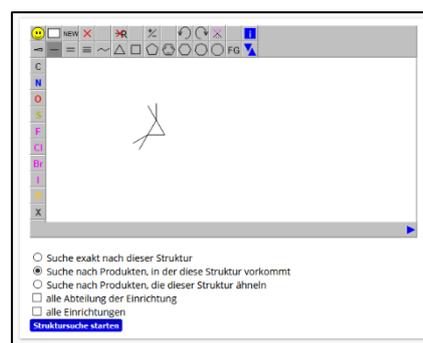
Im Probenverzeichnis finden sie alle Proben wieder, die im Laborjournal als Probe, Reagenzien oder im Reaktionsschema aufgenommen wurden. Dadurch ist es möglich, anhand der Struktursuche schnell ein Ergebnis zu allen Projekten zu erhalten, welches die Suche beinhaltet. Natürlich ist auch eine Stichwortsuche möglich, bei der die Projektbeschreibung und Ansatznotizen durchsucht werden.

Probenname/ Ersteller	Projekt/ Ansatz	Bearbeitungsstatus	Struktur	Lagerort	Dokumente
Reagenzien zur Synthese	Projekt A003000	in Bearbeitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung	
Intermediate aus Reaktionsgleichung	Projekt A003000	in Bearbeitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung	
Ausgangsmaterial aus Reaktionsgleichung	Projekt A003000	in Bearbeitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung	
Reaktionsmaterial aus Reaktionsgleichung	Projekt A003000	in Bearbeitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung	
<input type="checkbox"/> Probe 7341	Projekt A003000 Ansatz 001	abgeschlossen		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung Ewa Industriest. Pac. 12	Dokument (Analyse) NMR-Spektrum
<input type="checkbox"/> A020-AN01-2	Projekt A003000 Ansatz 001	in Vorbereitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung Ewa Industriest. Pac. 5	
<input type="checkbox"/> A020-AN01-1	Projekt A003000 Ansatz 001	abgeschlossen		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung Ewa Industriest. Pac. 10	
Nachschubend zur Analyse EMD9000 AN1	Projekt A003000 Ansatz 001	in Bearbeitung		Ewa, Mustoffirma GmbH ABL, Forschung und Entwicklung	

Struktursuche

Für die Struktursuche klicken Sie auf das Symbol  und geben Ihre Struktur ein, nach der gesucht werden soll.

Als Berechnungsgrundlage für das Suchergebnis wird der Tanimotokoeffizient⁴ herangezogen. Bei einer **exakten** Struktursuche muss dieser Koeffizient 1,0000 sein. Bei einer Struktursuche, in der diese Struktur vorkommt muss (wie der Name schon hergibt) die gesuchte Struktur in der Zielstruktur vorkommen. Ein Koeffizient muss wenigstens errechnet worden sein. In einer **Ähnlichkeitssuche** würde folgende Suche auch zu einem positiven Ergebnis führen.



⁴ Der Tanimotokoeffizient ist ein Distanzindex zur Bestimmung der Ähnlichkeit zweier Objekte. In diesem Fall wird für jede Struktur und dem Suchmuster ein Fingerprint erstellt und der Koeffizient ermittelt. Die Berechnungen werden auf dem GoeChem-Hauptserver mit der Software „OpenBabel“ durchgeführt.

Ausblick

Folgende Funktionen werden in Kürze noch zur Verfügung stehen

- Probenverknüpfung in den Serviceaufträgen
- Probensuche auf der Seite „Produktsuche“

Dokumentenversion

- 17.10.2020: unkorrigierte erste Version
- 03.11.2020: Bilderimport über Smartphone integriert