

Case Study

quattro/U in der Pharmazeutischen Entwicklung



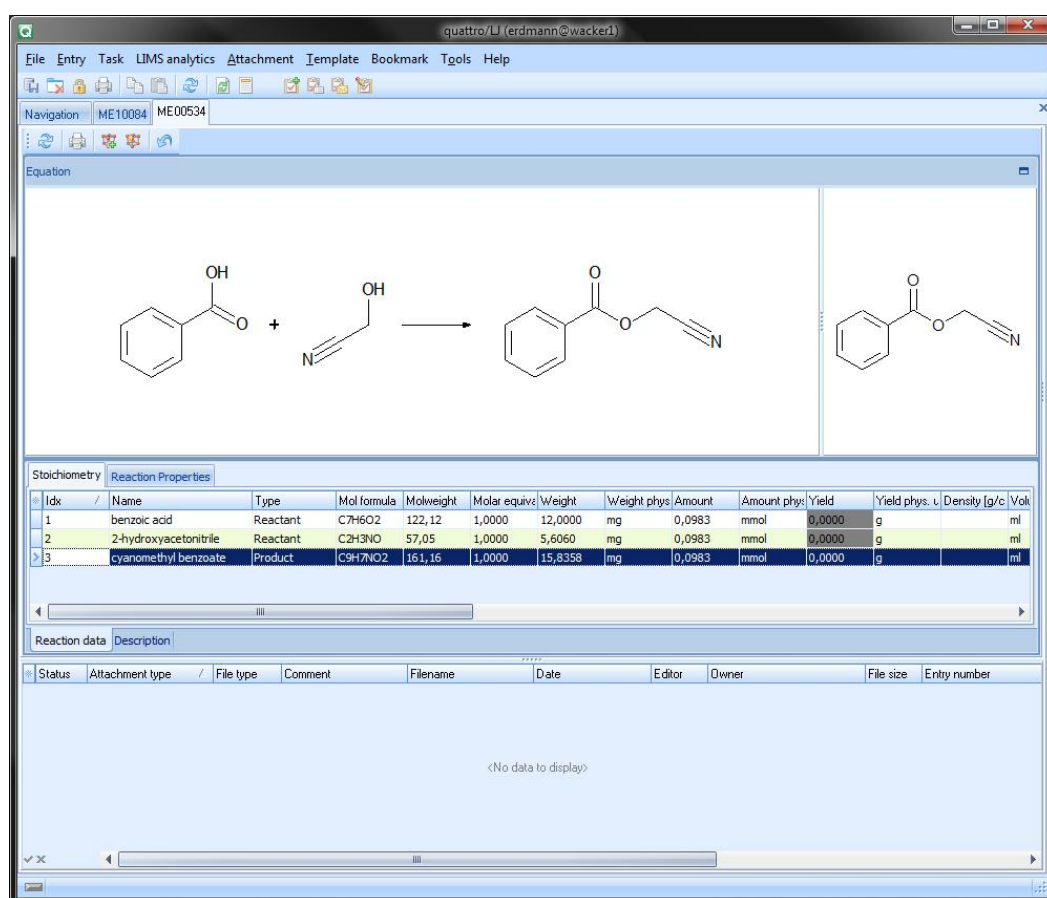
© 2005 - 2009 quattro research GmbH

Hintergrund

Synthesechemiker und Chemielaboranten sind es schon sehr lange gewohnt, ihre Experimente in Laborjournalen zu dokumentieren. Eine Umstellung auf ein elektronisches Laborjournal fällt dabei leicht, sofern das neue System einfach zu bedienen ist und zusätzliche Funktionen bietet, die Routinetätigkeiten vereinfachen.

Registrierung neuer Substanzen im ELN

Im Rahmen der Einführung eines ELN bei einer Pharmafirma wurde daher das Reaktionsmodul direkt in das System zur Registrierung neuer Substanzen integriert. Der Chemiker kann mit wenigen Mausklicks eine Substanz registrieren und analytische Meßaufträge abgeben. Der Status und die Ergebnisse der Analytik werden dann direkt wieder in das ELN übertragen.



The screenshot shows the quattro research software interface. The main window displays a chemical reaction: benzoic acid reacts with 2-hydroxyacetonitrile to form cyanomethyl benzoate. Below the reaction, there is a table with the following data:

Idx	Name	Type	Mol formula	Molweight	Molar equiv	Weight	Weight phys	Amount	Amount phys	Yield	Yield phys. u.	Density [g/c]	Volt
1	benzoic acid	Reactant	C7H6O2	122,12	1,0000	12,0000	mg	0,0983	mmol	0,0000	g		ml
2	2-hydroxyacetonitrile	Reactant	C2H3NO	57,05	1,0000	5,6060	mg	0,0983	mmol	0,0000	g		ml
3	cyanomethyl benzoate	Product	C9H7NO2	161,16	1,0000	15,8358	mg	0,0983	mmol	0,0000	g		ml

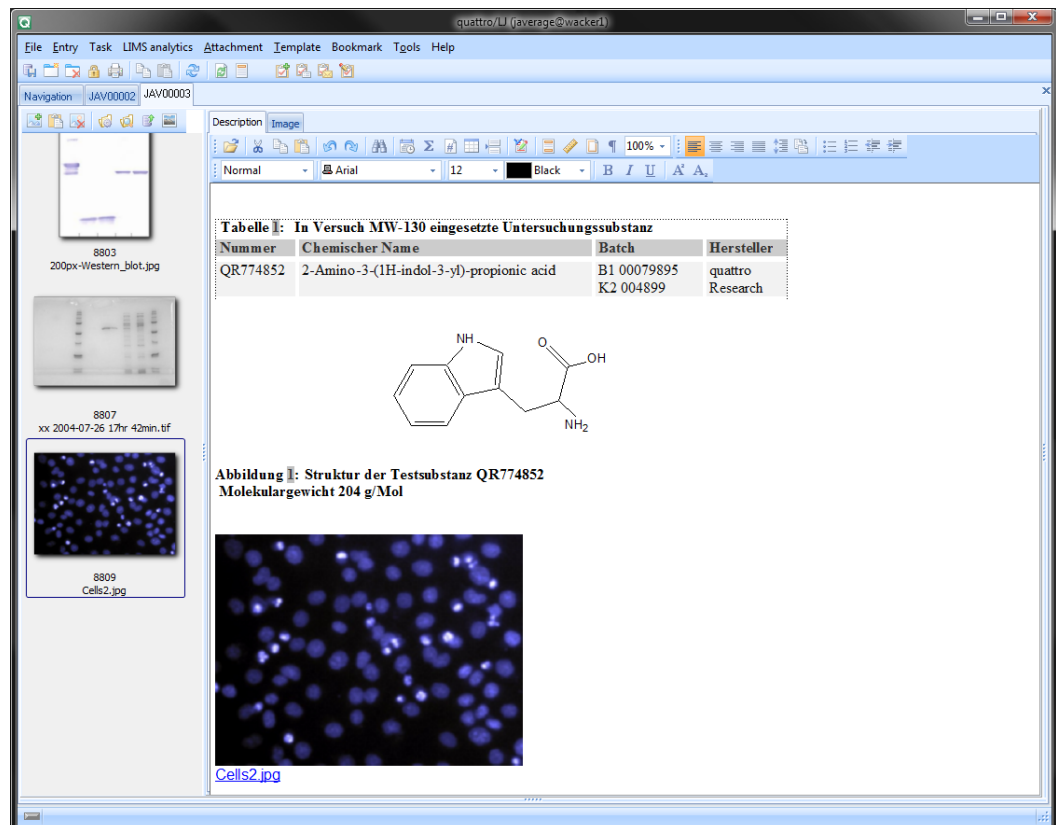
Below the table, there is a section for 'Reaction data' with a 'Description' field. At the bottom, there is a table with columns: Status, Attachment type, File type, Comment, Filename, Date, Editor, Owner, File size, Entry number. The table is currently empty, displaying '<No data to display>'.

Ein Laborjournal für alle Abteilungen

Natürlich soll ein ELN möglichst breit in einer Firma eingesetzt werden. Fälschlicherweise wird dabei oft davon ausgegangen, dass z.B. die Biologie zu wenig strukturiert ist, um sie sinnvoll in einem ELN abbilden zu können. Richtig ist vielmehr, dass „die Biologie“ als solche nicht existiert. Natürlich kann jeder Wissenschaftler mit Hilfe von Texteinträgen und Attachments seine Experimente

ausreichend dokumentieren. Um die Akzeptanz eines ELN zu erhöhen ist jedoch eine bessere Workflow-Unterstützung notwendig.

Betrachtet man Teilgebiete der Biologie, z.B. Screening, Assay-Entwicklung etc. dann lassen sich Bereiche identifizieren, die gut durch zusätzliche Softwaremodule unterstützt werden können. Hierzu wurde z.B. das BioImage-Modul verwendet. Dieses Modul erlaubt es, Bilder und Blots einfach zu bearbeiten und zu dokumentieren. Die Integration von quattro/Workflow bindet zusätzlich Screening-Ergebnisse in quattro/LJ mit ein.



quattro/LJ (average@wacker1)

File Entry Task LIMS analytics Attachment Template Bookmark Tgoals Help

Navigation: JAV00002 JAV00003

Description Image

Normal Arial 12 Black B I U A₁ A₂

100%

Tabelle 1: In Versuch MW-130 eingesetzte Untersuchungssubstanz

Nummer	Chemischer Name	Batch	Hersteller
QR774852	2-Amino-3-(1H-indol-3-yl)-propionic acid	B1 00079895 K2 004899	quattro Research

NC(C(=O)O)Cc1c[nH]c2ccccc12

Abbildung 1: Struktur der Testsubstanz QR774852
Molekulargewicht 204 g/Mol

8803
200px-Western_blot.jpg

8807
xx 2004-07-26 17tr 42min.tif

8809
Cells2.jpg

Cells2.jpg