

HIUN  
REN

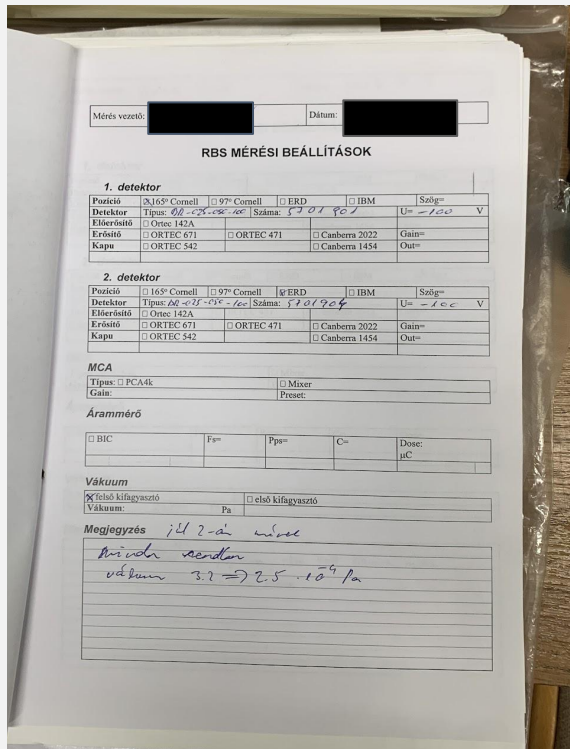
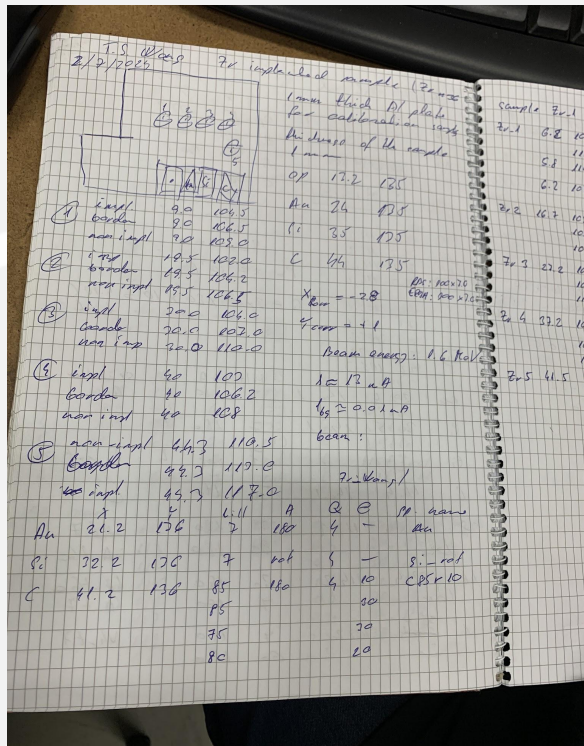


SZTAKI

RSpace, avagy a labormunka digitalizálása

HIUN-REN  
Hungarian Research Network

# Hagyományos laborjegyzőkönyv



Project leader:		Date:	
Aim of the experiment: Preparation of BICAAC complex from NM-318 salt and HG-1. Scale up.			
Relevant literature:			
1 NM-295			
Reaction equation:			
<p>Reaction scheme showing the synthesis of a complex from NM-318 and HG-1. The reaction involves the reaction of NM-318 (M = 399,32 g/mol) with HG-1 (M = 600,61 g/mol) in THF, catalyzed by LiHMDS. The product is a complex with a Ru center, a PCy<sub>3</sub> ligand, and a BICAAC ligand. The yield is 0,66 ekv. The product has a molecular weight of M = 631,69 g/mol.</p>			
Measurement:			
Exp. product		631,69 g/mol	0,417 mmol
Exp. Yield (100%):		263,7 mg	Remarks: NMR
Amount	Unit	Chemical name	Amount (mmol) equivalent
1	250,0 mg	NM-318	0,626 1 per def
2	689 μl	LiHMDS (1M THF-ben)	0,689 1,10
3	250,7 mg	HG-1	0,417 0,67
4	8,0 ml	THF	-
V:	9,0 ml		
Reaction starts:		2021. 6. 17. 11:10	
Reaction ends:		2021. 6. 17. 13:00	
Reaction time (h:m)		1:50:00	
Description - Experience: A reakciót gloveboxban mértem össze egy kis mintás üvegben. Az NM-318 prekuzorot felvettem 4 ml THF-ben (kb. negyedrészből oldott), majd hozzáadtam a LiHMDS oldatát, mire majdnem színtelen (gyengén sárga) oldat keletkezett. Ezt követően adtam hozzá a HG-1, 3+1 ml THF-es oldatát, majd 30 ml-es kis üvegbe töltöttem, és kevertettem a tartalmát két órát. Az oldat 2-3 perc alatt beűdült. Ezt követően kevés szilikagel szűrtem, EIOAc-tal mostam és beápoltam. A maradékot felvettem 40 ml hexánban, felkavarás után kevertettem 1 órát, majd lesűrtem és hexánal mostam, tömege 235 mg, NMR szerint 16% protonálódott ligandumot tartalmaz. Tisztítás kromatográfiával szilikán tiszta DKM eluenssel (VRK szerint a prekuzorsó az alapanyag van, míg a komplex teljesen (rt. 0,9) feljut. Beállítás után 207 mg (79%) anyag keletkezett, nagyvákuumban száradt.			
Tests			
1	<sup>1</sup> H <sup>31</sup> P NMR	NM-320A 1D (1H, <sup>13</sup> C).mnova	kloroform
Conclusion: reaction successful, conversion full.			

# Mi az ELN?

- ELN = Electronic Laboratory Notebook
- Célszoftver a labormunka dokumentálására és támogatására
- LIMS = Laboratory Information Management System
- Készletnyilvántartás
- Repozitálás
- Kollaboráció
- Szakterületi eszközök
- ...



# Milyen ELN-t kerestünk?

- Tudja az előzőeket
- Legyen open-source és alkalmas arra, hogy továbbfejlesszük
- ARP interoperabilitás



# Dokumentum szerkesztése

- Egyszerű dokumentum
- Form: előre megadott szerkezet különböző típusú mezőkkel
- Template: form előzetesen megadott adatokkal





SAVE

CANCEL



Home / Untitled document

Editing

Name: Untitled

Tags:

Unique ID: SD372

document

Show last modified date

New List of Materials



File Insert Format Table View Science Tools Online Tools



**B**

*I*

A



Paragraph

Arial

14px



Name: Reakció

Tags:

Editing a form. Click 'Update' to commit this edit and make available.  
Abandoning the editing (by clicking 'Revert') will revert to the previous form version.

Field Names

Fields

Edit Delete

Előkészítés (Text) \*

**B** *I* U ~~S~~    ≡ ≡ ≡ ≡

Reakció kezdete  
(Time) \*

Edit Delete

Reakció vége (Time)  
\*

Edit Delete






Hőmérséklet (°C)  
(Number) \*


Edit Delete




Edit Delete

Eredmény (Text) \*


**B** *I* U ~~S~~    ≡ ≡ ≡ ≡


× SAVE CANCEL     

Home / Untitled document Editing 


Name: Untitled document  Tags:  Unique ID: SD377 

Show last modified date


**Előkészítés \*** New List of Materials 

**Reakció kezdete \*** 


11:30






**Reakció vége \*** 


13:00




**Hőmérséklet (°C) \*** 

24.35


**Eredmény \*** New List of Materials 


× SAVE CANCEL     

Home / Untitled document Editing 


Name: Untitled document  Tags:  Unique ID: SD377 

Show last modified date


**Előkészítés \*** New List of Materials 

**Reakció kezdete \*** 


11:30

**Reakció vége \*** Autosaving... 

13:30

**Hőmérséklet (°C) \*** 

23.92

**Eredmény \*** New List of Materials 

### source samples for chloroplasts

New List of Materials



Add macro algae sample list of materials here. Include only specific subsamples.

Be sure to list any additional safety requirements.



### Experiment ID number






### Add MSDS as PDF here


New List of Materials



   
Cyclereader Kit.pdf

[View](#)  
[Download](#)  
[Info](#) 

   
dextransulfate.pdf

[View](#)  
[Download](#)  
[Info](#) 

### approved by safety group?




yes

# Kulcsszavak (tag)

- Egyszerű kifejezések társíthatóak a dokumentumhoz
- Keresés, csoportosítás
- Kétféle kulcsszó:
  - szabad szöveges
  - ontológia



Name: liver 45 

Tags:  
tissue=thymus 

Unique ID: SD251 

Show last modified date

**Tissue** 

thymus

**Sample.ID** 

23

**Format** 


FFPE


**Collection Date** 

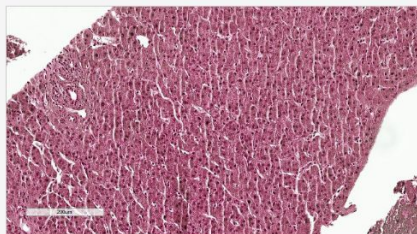
13/01/2024

**Location** 

Folio Archive Facility (FAC)

**Description and Image** 

New List of Materials 



normal liver 10X RJD.jpg 

Tags:



Separate tags by comma...

- tissue=lymph
- tissue=necrotic
- tissue=pancreas
- tissue=spleen
- tissue=thyroid
- tissue=vascular
- training
- tricycle



SAVE AS TEMPLATE



Home / [drug design](#) / Sequence analysis

View

Name: Sequence

Tags:

Unique ID: SD259

analysis

importance=critical

NASH with fibrosis

Show last modified date

## tag info

NASH with fibrosis - ontology: MEDDRA, version: <https://bioportal.bioontology.org/ontologies/MEDDRA> on: 2023/09/15,  
uri:<http://purl.bioontology.org/ontology/MEDDRA/10086370>

Here is the original for reference:



Sequence\_analysis\_1721653253520.doc

View

Download

Info

CREATE






Tag(s) X

tissue=liver, X



Showing results of your search. [Clear search](#)

<input type="checkbox"/>	Type	Name	Created	Modified	ID	Owner
<input type="checkbox"/>		<a href="#">i</a> Dundee liver	2023-04-26 14:27	2026-02-09 10:16	SD245	System Admin
<input type="checkbox"/>		<a href="#">i</a> DEMO	2026-02-08 22:57	2026-02-08 22:58	SD356	System Admin
<input type="checkbox"/>		<a href="#">i</a> Liver UCI 2	2022-11-23 16:50	2023-01-03 17:55	SD235	System Admin

Items per page:

50 ▾

# Számoló eszközök

- Egyszerű számításokat lehet velük elvégezni, az eredmény beillesztésre kerül a dokumentumba
- Oldatok hígítása
- PCR primerek
- Molaritás
- Mértékegység-átváltások



# Dilution Calculator



Solution dilution calculator - dilute the solution of known molarity.  
The calculator uses the formula  $RSV = (DC * DV) / SC$  .

Desired concentration:  M (molar)

Desired volume:  L (liters)

Stock concentration:  M (molar)



Calculate required stock volume

Required stock volume:  L (liters)

Close

Insert

## Categories

 radioactivity	 converter
 molarity	 calculator
dna	

## Tools

Mass to Moles  
Converts Mass to Moles

Mass from Concentration  
Calculates mass of substance required for a volume of a given molar concentration

Cell doubling time  
Calculates cell doubling time from counts at 2 time points

Molarity from Mass  
Calculates molarity of a solution, given mass, volume and RFM

OD260 DNA concentration  
Calculate DNA concentration from absorbance

Transformation efficiency  
Calculate transformation efficiency

Close

Insert

# Kémia

- Be lehet linkelni vegyületeket a PubChem adatbázisból
- A Ketcher eszközzel molekulákat, reakciókat lehet rajzolni
- Sztöchiometriai számítások



## PubChem

**IMPORT FROM PUBCHEM**

Search PubChem for chemical compounds by name, CAS number, or SMILES string.  
See <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> and our [PubChem integration docs](#) for more.

Name/CAS ▾ formic acid

SEARCH

**Search Results** **Formic Acid**

PUBCHEM ID 284

CAS NUMBER 64-18-6

FORMULA CH2O2

[View on PubChem](#)

CANCEL

IMPORT SELECTED



MOLECULE

C H<sub>2</sub> O<sub>2</sub>

46.03

46.01

0

2

3

CID

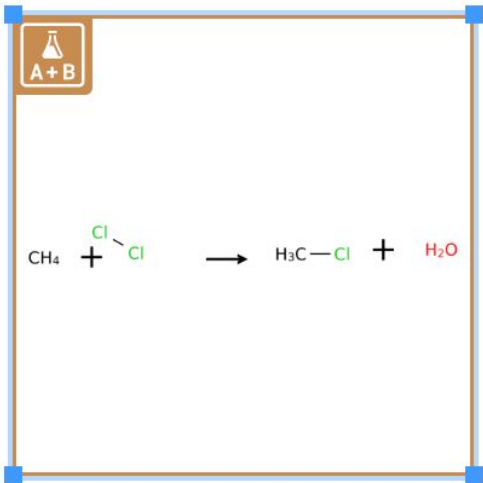
284

64-18-6

URL

<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Rich text editor toolbar containing icons for undo, redo, bold, italic, text color, background color, bulleted list, numbered list, paragraph style, font face, font size, text alignment, link, unlink, comment, insert link, insert image, insert table, insert video, insert audio, insert code, and a help icon.



A dialog box titled "Formula" is open on the right side of the editor. It contains the text  $\text{C H}_4 + \text{Cl}_2 > \text{C H}_3 \text{Cl} +$ . The dialog has a close button (X) in the top right corner and a horizontal scrollbar at the bottom.

# PyRAT

- Állatállományt nyilvántartó rendszer
- Külső szolgáltatás, regisztráció után össze lehet kötni az RSpace-szel
- Ezután a PyRAT rekordjait az RSpace-ben is meg lehet tekinteni és beilleszteni a jegyzőkönyvbe



Rich text editor toolbar with icons for undo, redo, bold, italic, text color, background color, bulleted list, numbered list, paragraph, Arial font, 14px size, and various icons including a mouse cursor icon highlighted with a red box.

Link to PyRAT

### Insert from PyRAT

X

Filter ^ Column Visibility ^

Animal Type: **Animal** | Animal State: **Live** | Sex: | Birth date from: | Birth date to: | Sacrificed from: | Sacrificed to: | Age days from: | Age days to: | ID: | Lab ID: | Building: | License: | Responsible: | Project:

CLEAR X FILTER

ID	Sex	Age (Days)	Strain	Mutations	DOB	Sacrificed On	Classification	License	Lab ID	Building	Project	Responsible
----	-----	------------	--------	-----------	-----	---------------	----------------	---------	--------	----------	---------	-------------

Rich text editor toolbar with icons for undo, redo, bold, italic, text color, background color, bulleted list, numbered list, paragraph, Arial font, 14px size, and various icons including a mouse cursor icon highlighted with a red box.

ID	Sex	Age (Days)	Classification	Building	Project	Responsible
		416				

# Galéria

- A jegyzőkönyvekhez csatolt képek, dokumentumok
- Itt tároljuk az exportokat
- Külső fájlrendszer (SFTP, Samba, iRods)



# Készletnyilvántartás

- A laborban található eszközök és anyagok adatbázisa
- 3 szint:
  - container
  - sample
  - subsample



# Tároló

- Tároló alkalmazosság a laborban
- Típusok:
  - lista
  - grid
  - vizuális
- Tartalmazhat további tárolókat, vagy mintákat
- <https://demos.researchspace.com/inventory/search?resultType=CONTAINER>



# Minták

- A sample egy kategória, a subsample a konkrét, valóságos elem a raktárban
- Több összetartozó subsample alkot egy sample-t
- A mintához metaadatok társíthatóak, pl. lejárat dátum, tárolási hőmérséklet, mennyiség
- Ha a mintából felhasználtam valamennyit egy kísérletben, azt a jegyzőkönyvben tudom rögzíteni és a felhasznált mennyiség levonásra kerül!



# Fieldmark

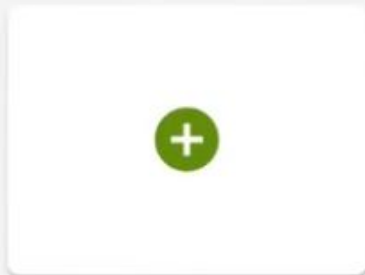
- Helyszínen gyűjtött minták offline rögzítése mobil eszközzel
- Később feltöltés az RSpace-be
- Kísérleti fázisban van



## Sample Photograph

Take a photo

 To download existing photos, please go to the [Notebook Settings Tab](#) and enable attachment download.



Length (mm)

50

Longest dimension of sample in mm.

Width (mm)

22

Shortest dimension of sample in mm

Thickness (mm)

56

Thickness of sample in mm



## IMPORT FROM FIELDMARK

Choose a Fieldmark notebook to import into Inventory. A Sample will be created for each record inside the notebook. A new list container will be placed on your bench, containing a singular subsample for each sample. See [docs.fieldmark.au](https://docs.fieldmark.au) and our [Fieldmark integration docs](#) for more.

☰ COLUMNS

Select	Name	Status	Is Public
<input checked="" type="radio"/>	RSpace IGSN Demo	OPEN	false

IGSN ID Field

Select a field to use as the IGSN ID for imported samples, or select 'Do not use IGSN IDs' to import without one

CLOSE

IMPORT

+ CREATE Search

- My Bench 18
- Containers
- Samples
- Subsamples
- Templates
- IGSN IDs
- Export Data

Type ▾ Owner ▾ Bench ▾ Status ▾ Barcode ▾ Tags ▾ Saved Searches ▾ Baskets ▾

Status: Current

Found SA5079065. ⋮ AZ ▾

<input type="checkbox"/>	Name	Global ID
<input type="checkbox"/>	Sample-45-00010 - 2025-06-24 08:20:42	SA5079065

1-1 of 1 < >

# Sample-45-00010 - 2025-06-24 08:20:42

SAMPLE SA5079065

Info Edit Create Duplicate Move Transfer Add to Basket Export Print Barcode

### New-Text-Field

In glasgow mryhill

### Item-Description

This is the stone with the fossil inside

### Sample-Photograph

No description

Attachment

A file of any type can be attached (e.g. image, document, or chemistry file)

Sample-Photograph/Sample-45-00010-Sample-Photograph.jpg

### Length-mm

15

### Width-mm

10

### Thickness-mm

3

No more fields

## 1 Subsample

Tap one of the subsamples in the search section to preview it below.

Search

# IGSN ID

- International Generic Sample Number
- Egyedi PID minták azonosítására
- [DataCite-tag](#) intézmények használhatják
- Regisztrálás után az RSpace Inventory elemeihez csatolható IGSN ID
- A minta ezután publikálható





### + Mint a new Identifier

Hide all Identifiers associated with this item. 1

To update any details, press Edit first.

Identifier	Type	Status	Hide
10.82762/0w9s-5w25	IGSN	Draft	^

PREVIEW

PUBLISH

DELETE

### Required Identifier Properties

**Creator Name**

V P

**Creator Type**

Personal

**Name**

Bacteria

**Publisher**

ResearchSpace at <https://pangolin8086.researchspace.com>

**Publication Year**

2023

**Resource Type**

Material Sample

**Public Page URL**

Available after publishing

### Recommended Identifier Properties



 At least one of four elements must be completed (Point, Place, Box, Polygon). Point, Box and Polygon cannot be completed partially.

#### Point

**Latitude**

e.g. 51.478

Between  $-90.0^\circ$  and  $90.0^\circ$ .

**Longitude**

e.g. 0.0

Between  $-180.0^\circ$  and  $180.0^\circ$ .

#### Place

**Description**

e.g. Royal Observatory, Greenwich

#### Box

**North Latitude**

Between  $-90.0^\circ$  and  $90.0^\circ$ .

**West Longitude**

Between  $-180.0^\circ$  and  $180.0^\circ$ .

**South Latitude**

Between  $-90.0^\circ$  and  $90.0^\circ$ .

**East Longitude**

Between  $-180.0^\circ$  and  $180.0^\circ$ .

#### Polygon

 Create or Edit a Geolocation Polygon

 No Polygon set yet.

# Kollaboráció

- Az RSpace felhasználói különféle csoportokba szervezhetőek
- A csoport tagjai megoszthatják a csoporttal a dokumentumaikat
- A csoportnak van egy vezetője, aki lát minden dokumentumot, amit a többiek létrehoznak
- Az egyes tagok tevékenységét is nyomon tudja követni, ebből riportot is tud generálni
- A készletnyilvántartás is csoportszinten történik



# Export

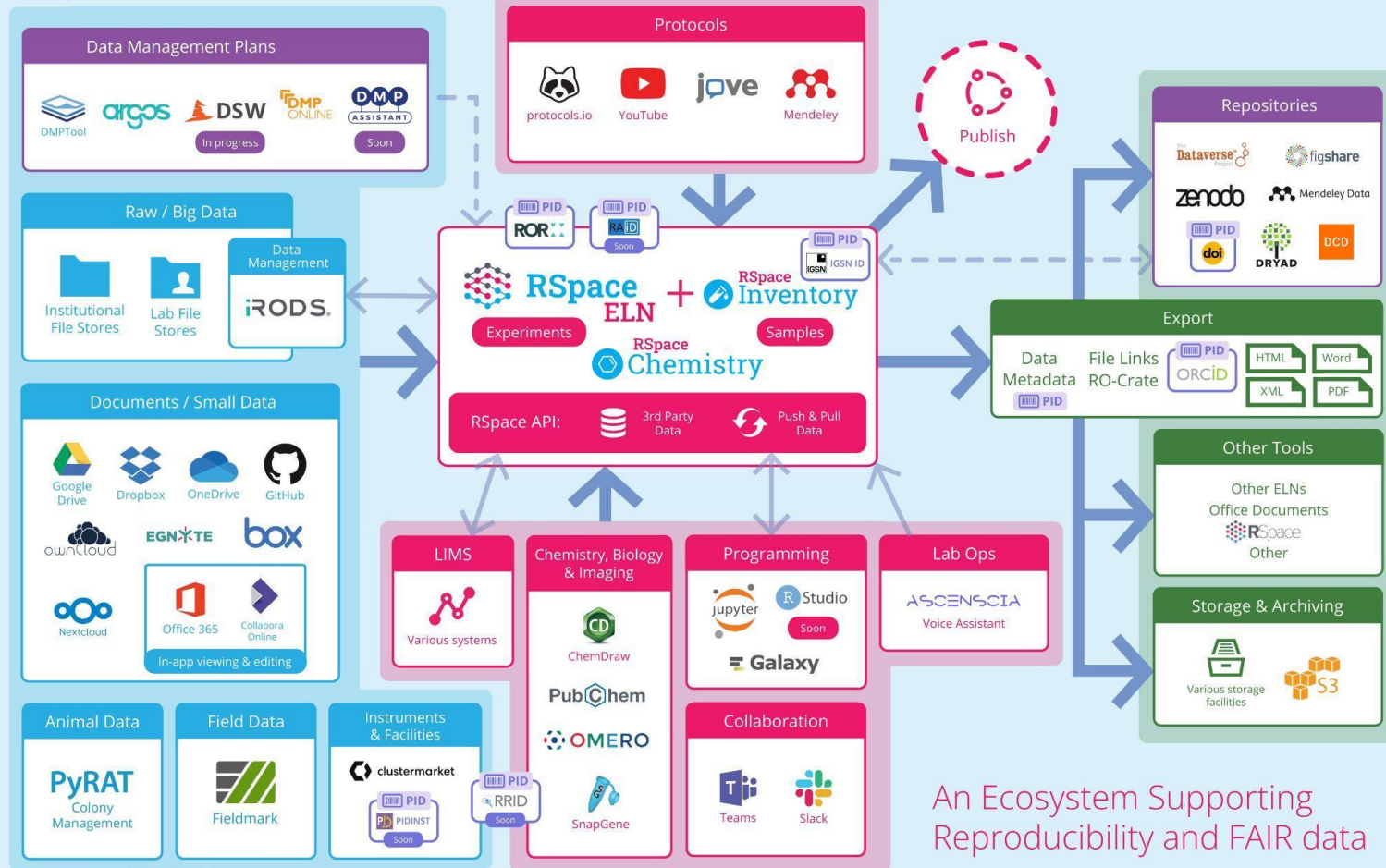
- olvasható: HTML, PDF
- gépi: XML, RO-Crate
- repozitórium: **Dataverse**, Dryad, Zenodo, stb



Preparation

Active Research

Archiving, Storage & Reuse



An Ecosystem Supporting Reproducibility and FAIR data

# Az RSpace jövője

- RAID: PID kutatási projektekhez
- PIDINST: PID mérőműszerekhez
- Az RSpace nemzetköziesítése
- Mérőműszerek integrációja
- Magyar kutatók





## Kérdések, megjegyzések

