Universität Rostock

5. Vernetzungstreffen
Forschungsdatenmanagement in
Mecklenburg-Vorpommern (FDM-MV)

Verwendung von eLabFTW in der Technischen Chemie

Annalena Erdmann, Stefan Jopp, Henrik Schröter, Udo Kragl

Universität Rostock, Institut für Chemie, Albert-Einstein-Straße 3a, 18059 Rostock, Deutschland

Zielsetzung & Methode

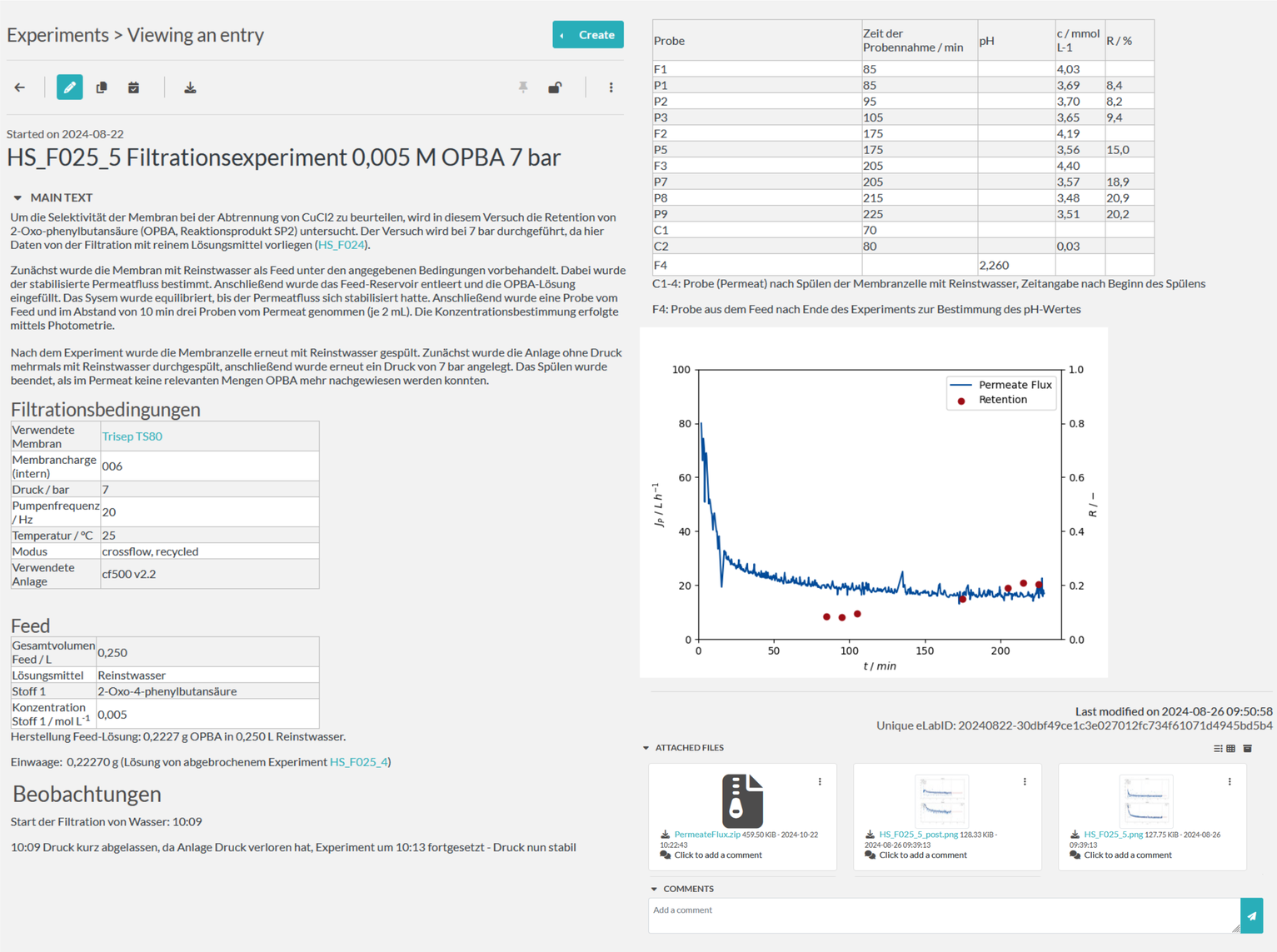
- Einordnung des Experiments
- grobe Durchführung und Vorbereitung

Experimentelle Parameter

- Auflistung wichtigster Parameter in tabellarischer Form
- Verweis auf externe Ressourcen (Proben, Geräte)

Beobachtungen

- Informationen zum Versuchsverlauf



Experiments > Viewing an entry

Create

Started on 2024-08-22

HS_F025_5 Filtrationsexperiment 0,005 M OPBA 7 bar

MAIN TEXT

Um die Selektivität der Membran bei der Abtrennung von CuCl2 zu beurteilen, wird in diesem Versuch die Retention von 2-Oxo-phenylbutansäure (OPBA, Reaktionsprodukt SP2) untersucht. Der Versuch wird bei 7 bar durchgeführt, da hier Daten von der Filtration mit reinem Lösungsmittel vorliegen (HS_F024).

Zunächst wurde die Membran mit Reinstwasser als Feed unter den angegebenen Bedingungen vorbehandelt. Dabei wurde der stabilisierte Permeatfluss bestimmt. Anschließend wurde das Feed-Reservoir entleert und die OPBA-Lösung eingefüllt. Das Sysem wurde equilibriert, bis der Permeatfluss sich stabilisiert hatte. Anschließend wurde eine Probe vom Feed und im Abstand von 10 min drei Proben vom Permeat genommen (je 2 mL). Die Konzentrationsbestimmung erfolgte mittels Photometrie.

Nach dem Experiment wurde die Membranzelle erneut mit Reinstwasser gespült. Zunächst wurde die Anlage ohne Druck mehrmals mit Reinstwasser durchgespült, anschließend wurde erneut ein Druck von 7 bar angelegt. Das Spülen wurde beendet, als im Permeat keine relevanten Mengen OPBA mehr nachgewiesen werden konnten.

Filtrationsbedingungen

Verwendete Membran	Trisep TS80
Membrancharge (intern)	006
Druck / bar	7
Pumpenfrequenz / Hz	20
Temperatur / °C	25
Modus	crossflow, recycled
Verwendete Anlage	cf500 v2.2

Feed

Gesamtvolumen Feed / L	0,250
Lösungsmittel	Reinstwasser
Stoff 1	2-Oxo-4-phenylbutansäure
Konzentration Stoff 1 / mol L^{-1}	0,005

Herstellung Feed-Lösung: 0,2227 g OPBA in 0,250 L Reinstwasser.

Einwaage: 0,22270 g (Lösung von abgebrochenem Experiment HS_F025_4)

Beobachtungen

Start der Filtration von Wasser: 10:09

10:09 Druck kurz abgelassen, da Anlage Druck verloren hat, Experiment um 10:13 fortgesetzt - Druck nun stabil

Probe	Zeit der Probennahme / min	pH	c / mmol L-1	R / %
F1	85		4,03	
P1	85		3,69	8,4
P2	95		3,70	8,2
P3	105		3,65	9,4
F2	175		4,19	
P5	175		3,56	15,0
F3	205		4,40	
P7	205		3,57	18,9
P8	215		3,48	20,9
P9	225		3,51	20,2
C1	70			
C2	80		0,03	
F4		2,260		

C1-4: Probe (Permeat) nach Spülen der Membranzelle mit Reinstwasser, Zeitangabe nach Beginn des Spülens

F4: Probe aus dem Feed nach Ende des Experiments zur Bestimmung des pH-Wertes

Last modified on 2024-08-26 09:50:58
Unique eLabID: 20240822-30dbf49ce1c3e027012fc734f61071d4945bd5b4

ATTACHED FILES

PermeateFlux.zip 459.50 KiB - 2024-10-22 10:22:43 Click to add a comment

HS_F025_5_post.png 128.33 KiB - 2024-08-26 09:39:13 Click to add a comment

HS_F025_5.png 127.75 KiB - 2024-08-26 09:39:13 Click to add a comment

COMMENTS

Add a comment

Ergebnisse

- Zusammenfassung der Ergebnisse in tabellarischer, graphischer und/oder Textform

Anhänge

- Rohdaten oder größere Datensätze

Kommentare

- Zusammenarbeit innerhalb der Gruppe

Ziele

- schnelles und zuverlässiges Dokumentieren von Experimenten verschiedener Typen
- strukturierte Ablage aller relevanter Daten an einem Ort
- Teilen von Experimentaldaten mit dem nötigen Kontext
- erleichterte Veröffentlichung der Daten nach den FAIR-Prinzipien

Beispiele

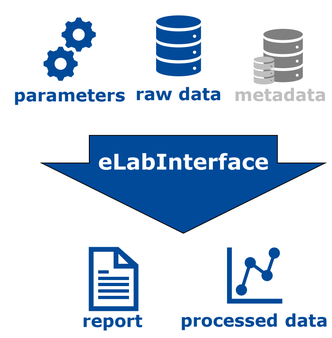
- analytische Chemie
  - Verweise auf Standardmethoden
- technische Verfahren
  - Dokumentation von Versuchsaufbauten
- organische Synthese
  - Abarbeiten von Synthesevorschriften
- in der Lehre
  - Praktikum
  - Abschlussarbeiten
  - stud. Hilfskräfte

Fazit

- Vorteile von eLabFTW:
  - flexible und individuelle Gestaltung möglich
  - Quelloffenheit
  - Programmierschnittstelle verfügbar
  - interner Austausch von Daten
- Nachteile von eLabFTW:
  - Umstrukturierung der Arbeitsweise und Datenaufnahme nötig
  - Anhänge nicht im Programm editierbar
  - eingeschränkte Darstellung von Molekülstrukturen

Schnittstellen

- ermöglichen Zugriff auf ELN-Einträge (Textkörper, Metadaten, Anhänge) und anschließende Weiterverarbeitung der Daten
- der Textkörper ist für Forschende am einfachsten für die Datenaufnahme nutzbar und kann durch Vorlagen und festes Vokabular auch teils maschinenlesbar gemacht werden (insbes. Tabellen)
- Datenverarbeitung im Kontext aller dem Experiment zugehörigen Daten (Parameter, Messdaten, Ergebnisse)
- *proof-of-concept* verfügbar (Python)



Kontakt:
annalena.erdmann@uni-rostock.de
stefan.jopp@uni-rostock.de
henrik.schroeter@uni-rostock.de
udo.kragl@uni-rostock.de

eLabInterface

Poster PDF