

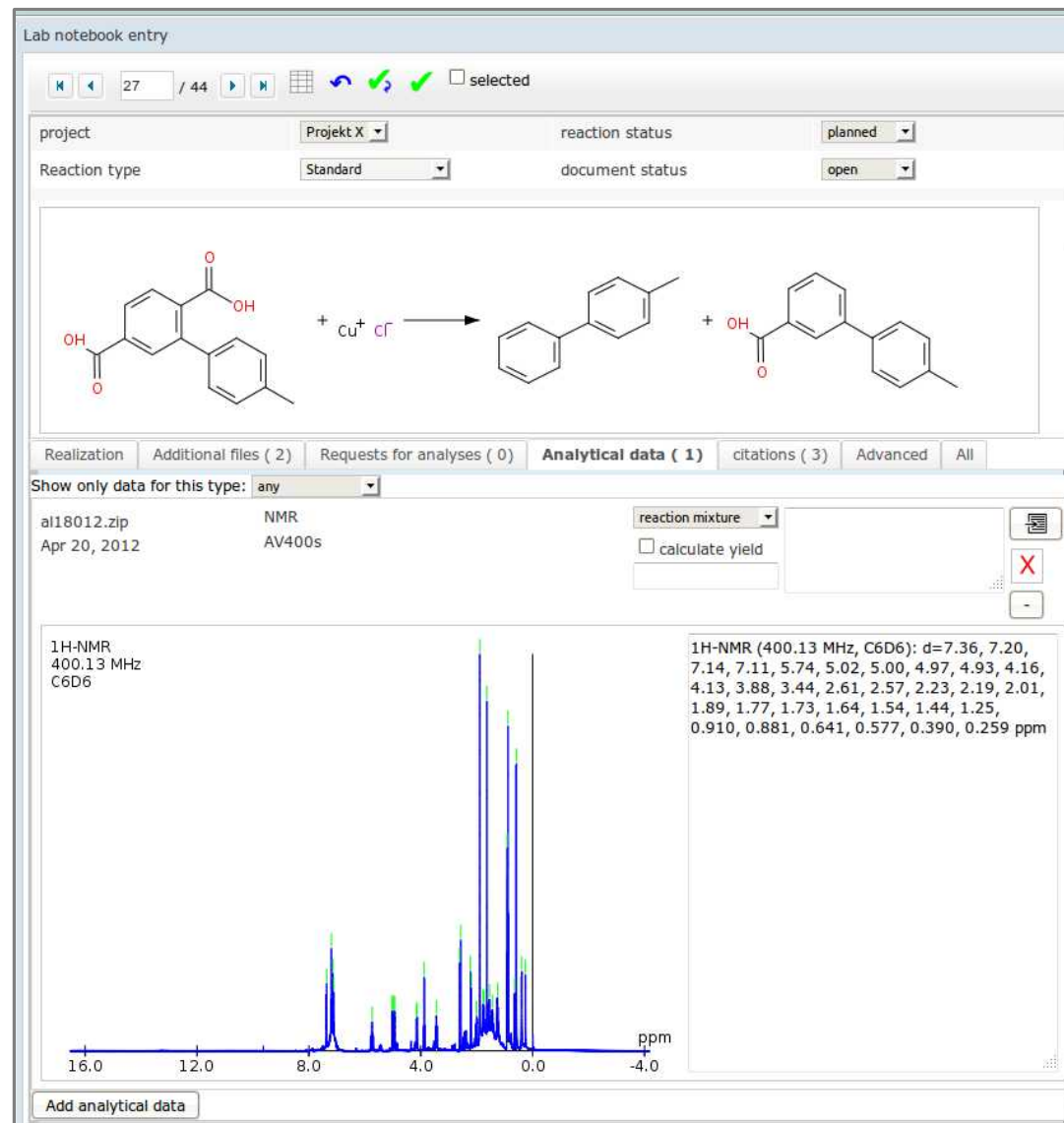
# sciformation ELN

**Beweissicherheit durch Integration mit BeLab**

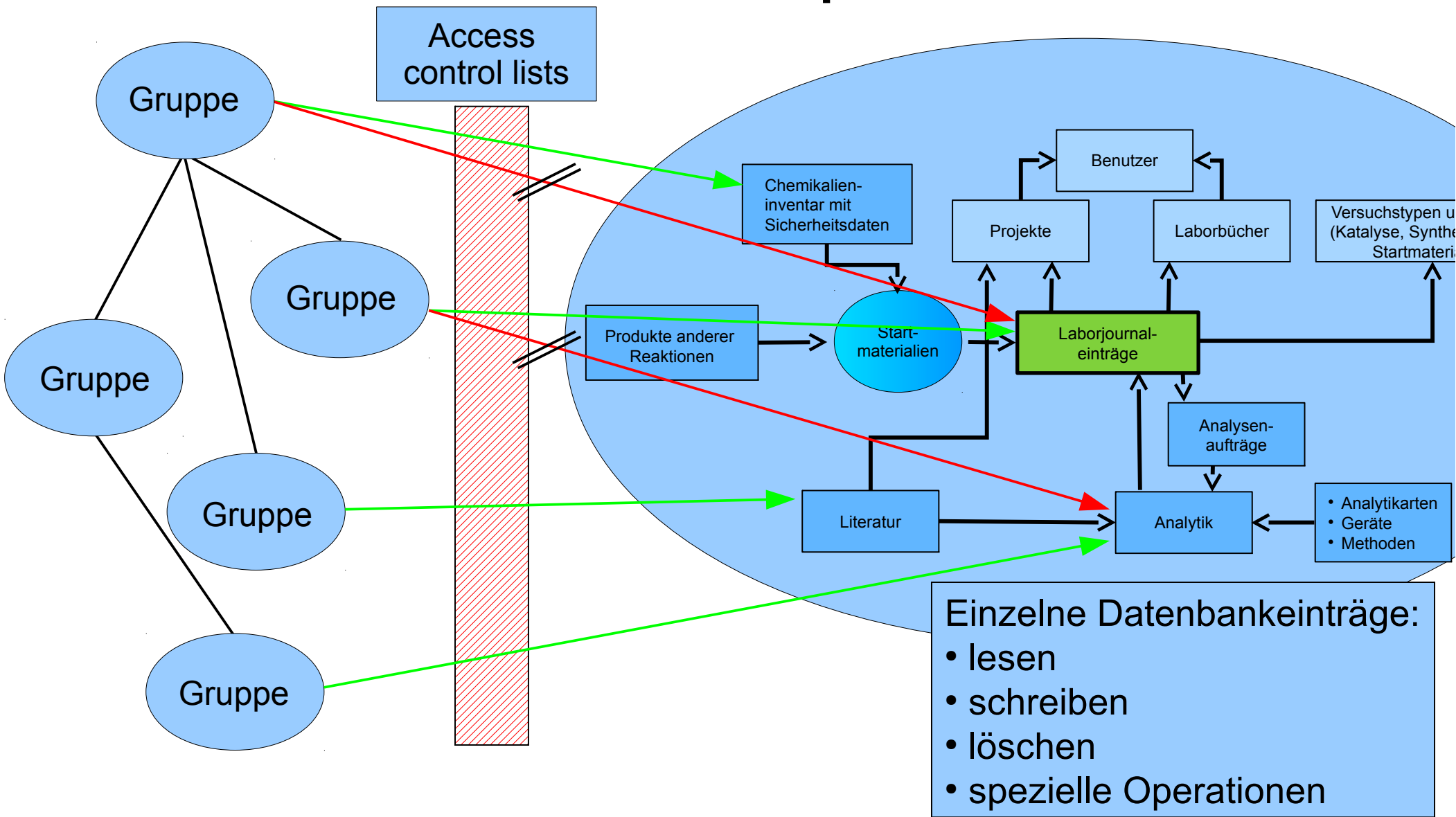
Dr. Felix Rudolphi  
Sciformation Consulting GmbH

# Was leistet Sciformation ELN?

- Erfassung
  - Beschreibung wiss. Experimente
  - relevante Dokumente
  - Analytikdaten
  - Literatur
- Planungshilfe
- Suchmöglichkeiten
  - Texte
  - num. Parameter
  - chemische Strukturen
  - ähnliche Analytikergebnisse/  
Spektren
- Schutz vor Manipulation
- Erkennung einer evtl. Manipulation
- Langzeitarchivierung



# Schutz vor Manipulation

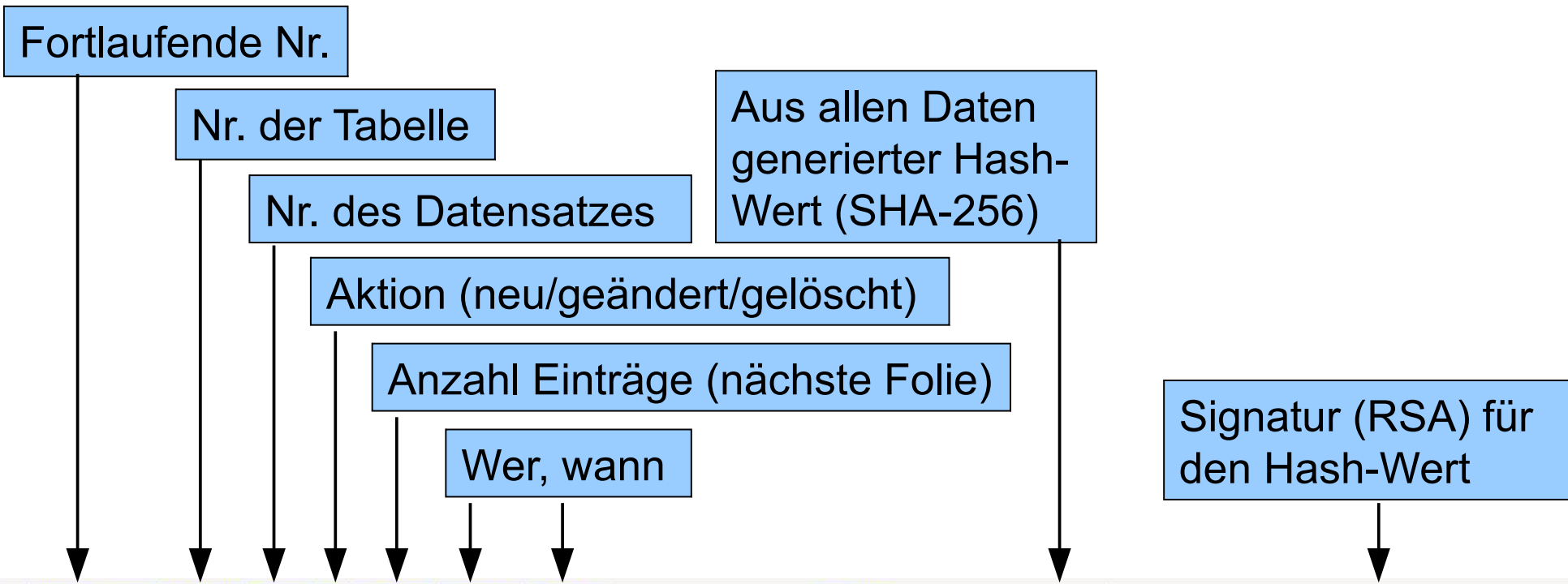


# Erkennung einer Manipulation - intern

- „Audit trail“ auf Datenebene
- Hashwerte
- digitale Signaturen

	auditTrailEntryId	dbObjectId	entityId	op	entryCount	username	whenTs	hash_value	
<input type="checkbox"/>	1	NULL	0	4	5	laurich	2012-05-31 23:19:40	4bfb44258021b64f5d15e924c52a59a65aac5bfd734dc9933efee8820edac7e	22a0e28fc8cd7398787adf5783b3b3606436de643a5d504bf37147dfd473a6e97afafcc
<input type="checkbox"/>	2	2	1	2	1	laurich	2012-05-31 23:19:40	d0a4e111111bd8c8a30860908a6b61488be2950df155fcc37ec782b1fb8da52c	11d7ec5476496902c3133f0626a0ec33406c7af4c58c02218657c9a4cc5e1bbed9972f
<input type="checkbox"/>	3	NULL	0	4	10	laurich	2012-05-31 23:55:59	fda0e83b8827aa1e902f16291b2db4a2ab01d49b7e1034dec6224a2043b535eb	92d147167bfa18f7b5d3d68c1c46d2e4e2f16c90a2a34632569809604e484e0c69c1d4
<input type="checkbox"/>	4	2	1	2	1	laurich	2012-05-31 23:55:59	845a546c710482fb499d50d7f8d00287b73f58474b272c1fd79186f3f3dcb95	92ac64a65049915abed1d9b9e7a6e8708482a8099bd8f5ca6be764184b16e1ece6c58
<input type="checkbox"/>	5	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 10:15:52	833ad88ab01a7aa67f55dca4527c4ea1fdcee3d8c9a872039986e7d6b1868af2	e08d6eab4085e1f4587116c629ef6998afe4316feb8ed24f075103da8e62f3574e6d9a1
<input type="checkbox"/>	6	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 10:16:44	f7d98bde5ca06711cf36330b60571ef8d55b29f58a852c072cbc95ae2d14987a	1e18c6578d0d255e1f1723452d61b6e9a4149454f15baebe5a2774252d53f73204e7d4
<input type="checkbox"/>	7	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 11:00:13	62ff08292e8d8b4a4e8916503f56edf22cbc2084ec64f587aac78d81b26b7b3c	af41df4b068ce3df613196ceb80dfe6fd0d4feb6649b7477bbc957b8239ebfc1075e1d1
<input type="checkbox"/>	8	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 11:00:13	339a361bacfb39d8e27015ecc9e8bd59fc41d1ba8f4290f375a09f10267a0461	d3ace2e5c1bd672ded60ceb676d5289c7757daf1cb7451136cbfd15d6ca17c7c9f1223
<input type="checkbox"/>	10	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 11:26:08	1e7434aabe2ddf085ddd3dccc676a319e4bae53615adbef1e930c333671f8bd1b	b4ae4639b5410c6227d962edbc40abba98a957d9ba2eb9b18b52d11827b118c52c09f
<input type="checkbox"/>	11	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 11:26:13	f22e634467e8ff21c781fad33e65a51aa7659fd37c56dd3893d6d1399b4ac27a	511ff0284127ddf202ba497968fa4e27072b6e7a27ef485ac48995527ed4b43bc688cb5
<input type="checkbox"/>	12	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 14:35:25	0817add959b1889a8bb34fa07424709176df041a8f85c4528940e291e0e6769e	64b8162fd00b3820e6d819bc3bbecc729dfe0267c6c48b91c4b23b7e034e254c8fe3
<input type="checkbox"/>	13	2	17271	1	59	laurich	2012-06-01 14:35:25	9c13096b18715438774d18b3cdf6815fce872f2c79f0fae621a861dfadd93643	9916c24be54f0784491d1139eff1e3c54ea14ea6b4fd5580a34120010d0a1ce07aab84
<input type="checkbox"/>	14	2	17271	2	2	laurich	2012-06-01 14:36:53	12b85c3a145c4855923b6543a8f2529a7a6917c43dd3f4345e80f496662188ad	338c25ef8a43828dcebb5c34a91932cdaa3a1029fdc73a1246135c74471add7a5d19c
<input type="checkbox"/>	15	2	17271	2	2	laurich	2012-06-01 14:39:42	43579cd047fc3382307b70a462fc69f217aea08d194dbdabddf0f11d48a71e1d	72f4f6584e123a7a554bce8a9b0c096c3a8a455ceaa0503996e81013d7fe75c497621e
<input type="checkbox"/>	16	2	17271	2	2	laurich	2012-06-01 14:43:46	63b06c7f5698f231ad2002bb3444093f7ffc9044ed01d84614ccba9542cbdc7	d20e7872fcb77aafcdf6b140c22d033340f8bd8926ddc59a72ebfc319f5f505c2b4869

# Erkennung einer Manipulation - intern



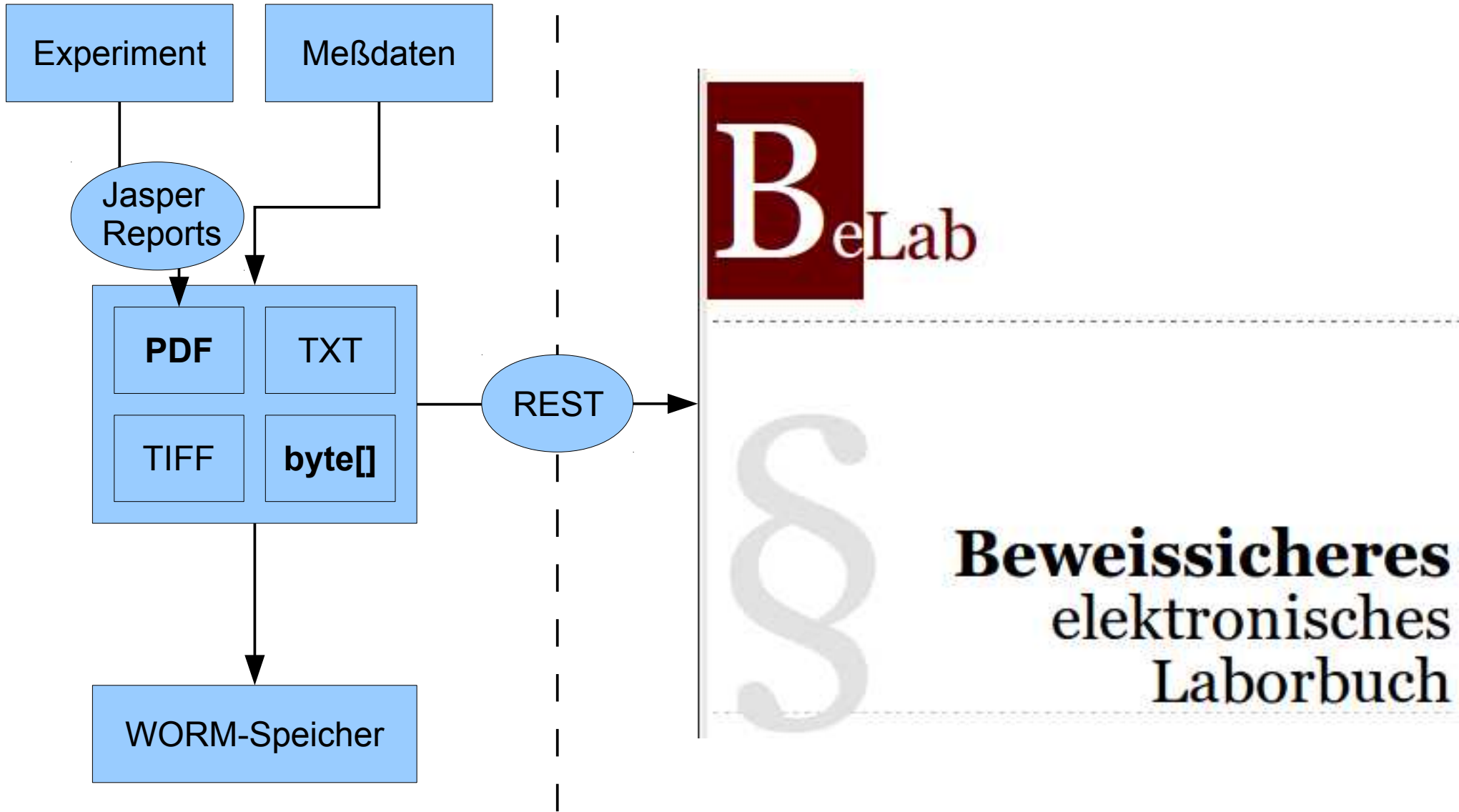
	auditTrailEntryId	dbObjectid	entityid	op	entryCount	username	whenTs	hash_value	
<input type="checkbox"/>	1	NULL	0	4	5	laurich	2012-05-31 23:19:40	4bfb44258021b64f5d15e924c52a59a65aac5bfd734dc9933efee8820edac7e	22a0e28fc8cd7398787adf5783b3b3606436de643a5d504bf37147dfd473a6e97afafcc
<input type="checkbox"/>	2	2	1	2	1	laurich	2012-05-31 23:19:40	d0a4e111111bd8c8a30860908a6b61488be2950df155fcc37ec782b1fb8da52c	11d7ec5476496902c3133f0626a0ec33406c7af4c58c02218657c9a4cc5e1bbcd9972
<input type="checkbox"/>	3	NULL	0	4	10	laurich	2012-05-31 23:55:59	fda0e83b8827aa1e902f16291b2db4a2ab01d49b7e1034dec6224a2043b535eb	92d147167bfa18f7b5d3d68c1c46d2e4e2f16c90a2a34632569809604e484e0c69c1d4
<input type="checkbox"/>	4	2	1	2	1	laurich	2012-05-31 23:55:59	845a546c710482fb499d50d7f8d00287b73f58474b272fc1fd79186f3f3dcb95	92ac64a65049915abed1d9b9e7a6e8708482a8099bd8f5ca6be764184b16e1ece6c58
<input type="checkbox"/>	5	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 10:15:52	833ad88ab01a7aa67f55dca4527c4ea1fdcee3d8c9a8720399867d6b1868af2	e08d6eab4085e1f4587116c629ef6998afe4316feb8ed24f075103da8e62f3574e6d9a1
<input type="checkbox"/>	6	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 10:16:44	f7d98bde5ca06711cf36330b60571ef8d55b29f58a852c072cbc95ae2d14987a	1e18c6578d0d255e1f1723452d61b6e9a4149454f15baebe5a2774252d53f73204e7d4
<input type="checkbox"/>	7	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 11:00:13	62ff08292e8d8b4a4e8916503f56edf22cbc2084ec64f587aac78d81b26b7b3c	af41df4b068ce3df613196ceb80daf6fd0d4feb6649bf747bbc957b8239ebfc1075e1d1
<input type="checkbox"/>	8	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 11:00:13	339a361bacfb39d8e27015ecc9e8bd59f	23
<input type="checkbox"/>	10	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01 11:26:08	1e7434aabe2ddf085ddd3dcc676a319e4	9
<input type="checkbox"/>	11	4	1069	2	0	laurich	2012-06-01 11:26:13	f22e634467e8ff21c781fad33e65a51aa7	6
<input type="checkbox"/>	12	NULL	0	4	10	laurich	2012-06-01	0817ad1959b1889e8bb34fa07424709176df041e8f85c4528940c291e0e6789e	64b8162fd00b3820e6d819bc3bbeeceh729dfc0267c6c48b91c4b23b7e034e254c8

vorangehende Hashwerte/Signaturen gehen in nachfolgende ein

# Erkennung einer Manipulation - intern

			auditTrailEntryId	field	newValue	oldValue
<input type="checkbox"/>			1	logEntities	class entity.CdbMolecule,class entity.CdbContainer...	class entity.CdbMolecule,class entity.CdbContainer...
<input type="checkbox"/>			1	logFolder	/development/audit_trail	/development/audit_trail
<input type="checkbox"/>			1	logOldValues	true	true
<input type="checkbox"/>			1	logTruncateValues	100	100
<input type="checkbox"/>			1	logType	1	2
<input type="checkbox"/>			2	density20	1.39	1.35
<input type="checkbox"/>			3	hashAlgorithm	SHA-256	
<input type="checkbox"/>			3	logEntities	class entity.CdbMolecule,class entity.CdbContainer...	
<input type="checkbox"/>			3	logFolder	/development/audit_trail	
<input type="checkbox"/>			3	logOldValues	true	
<input type="checkbox"/>			3	logOperations	insert,update,delete,update_config	
<input type="checkbox"/>			3	logTruncateValues	100	
<input type="checkbox"/>			3	logType	1	
<input type="checkbox"/>			3	maxFileSize	0	
<input type="checkbox"/>			3	signAlgorithm	RSA	
<input type="checkbox"/>			3	signPrivateKeyFile	/home/fr/NetBeansProjects/SignTool/src/key/private...	
<input type="checkbox"/>			4	density20	1.01	1.39
<input type="checkbox"/>			5	hashAlgorithm	SHA-256	
<input type="checkbox"/>			5	logEntities	class entity.CdbMolecule,class entity.CdbContainer...	
<input type="checkbox"/>			5	logFolder	/development/audit_trail	
<input type="checkbox"/>			5	logOldValues	true	
<input type="checkbox"/>			5	logOperations	insert,update,delete,update_config	
<input type="checkbox"/>			5	logTruncateValues	100	
<input type="checkbox"/>			5	logType	1	

# Erkennung einer Manipulation - extern

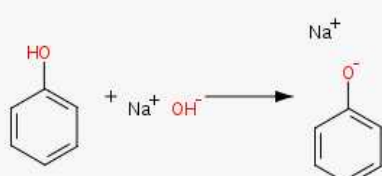


# PDF-Erzeugung

Laborjournaleintrag

1 / 2

Ausgewählt Schnellsuche Experiment kopieren Auto-Trans DOI PDF



Oc1ccccc1.[Na+].[OH-]>>[Na+].[O-]c1ccccc1

Experiment

Jasper Reports

Durchführung

Zusätzliche Dateien (0) Analysenaufträge (0)

1.0 mmol Temperatur

Lösungsmittel

**Edukte**

#	eq	Struktur	Molekülnamen / Gebinde	Summenformel / CAS-Nr.	MW	n	m
A	1.0		Phenol alcohol KS	C6H6O 108-95-2	94.1	1	m
			sodium hydroxide	HNaO	40.0		

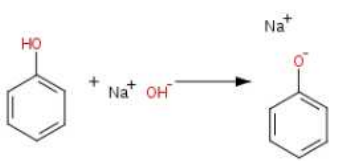
TEST-AA-001-1.pdf

Datei Bearbeiten Ansicht Gehe zu Hilfe

Vorherige Nächste Zurück 1 (1 von 3) Auf Seitenbreite einpassen

TEST-AA-001

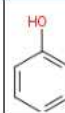
Erstellt: 02.04.2013  
Erstellt durch: oe2admin  
Ausführender: oe2admin oe2admin



Ansatzgröße: 1.0 mmol

PDF

## Edukte

eq	Reaktionsgleichung	Name	Summenformel/CAS-Nr.	MW	n	c	m	p	V
1.06		Phenol alcohol	C6H6O	94.11	1.06 mmol		100.0 mg	1.06	0.0943 ml
1.0	+	sodium hydroxide	HNaO	40.0	1.0 mmol		40.0 mg	2.13	0.0188 ml



# Datentransfer ins BeLab

Laborjournaleintrag

1 / 2

Ausgewählt Schnellsuche Experiment kopieren Auto-Trans DOI

Datensatz gespeichert

Sichert den aktuellen Stand des Eintrags im Archiv

Oc1ccccc1.[Na+].[OH-]>>[Na+].[O-]c1ccccc1

im Hintergrund:

- PDF erzeugen
- METS erzeugen
- Transfer zu BeLab über REST
- Empfang und Speichern der BeLab-ID

ZK

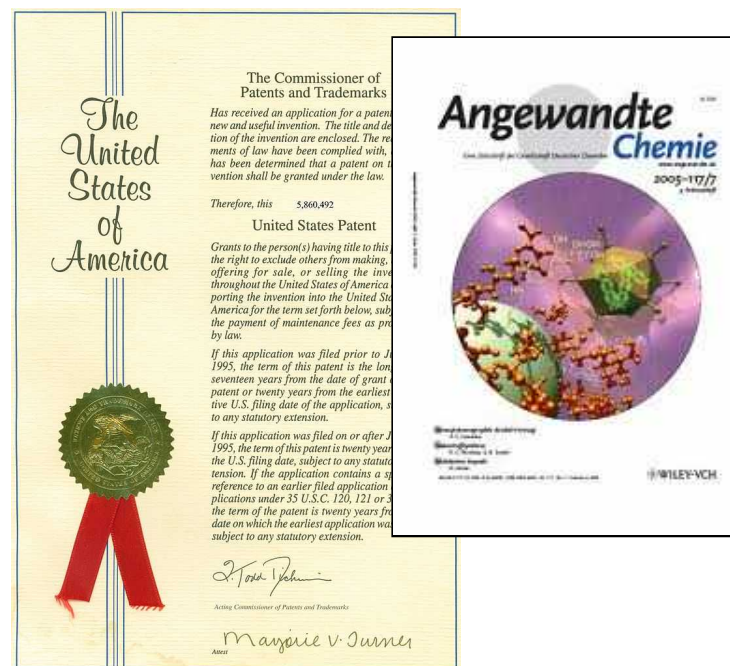
Der aktuelle Stand wurde gesichert.

OK

Datensatz gespeichert

# Zusammenfassung

- Vollständige Dokumentation durch Integration aller Daten
- Zeitersparnis, Arbeitserleichterung und Team-Funktionalität
- Recherchemöglichkeiten mit chemischer Intelligenz
- **Sicherheit der Daten**
  - Zugriffskontrolle
  - Protokollierung
  - BeLab/externe Archivierung
- Flexibilität und Erweiterbarkeit



# Ausblick

- Regelmäßige Speicherung von Ausschnitten des „Audit trails“ im BeLab (Sciformation ELN muß priv. Schlüssel enthalten)
- Wer wird BeLab betreiben?
- Agenda?

