

## Detailseite

### Chemotion Repository (Chemotion)

Das Chemotion Repository ist eine Initiative der Gruppe Prof. Stefan Bräse in Karlsruhe (Karlsruher Institut für Technologie, KIT) und wurde am Institut für Organische Chemie in Zusammenarbeit mit dem Institut für Toxikologie und Genetik entwickelt. Das Chemotion Repository ist eine Sammlung synthetischer Verbindungen, ihrer Analytik und zugehörigen relevanten Details, die von Wissenschaftlern beigetragen wurden. Alle verfügbaren Informationen werden anderen interessierten Forschern frei zur Verfügung gestellt und durch ein einfaches Upload-Protokoll geteilt. Die Datensätze des Repositoriums bestehen zur Zeit aus Analysedaten und beschreibenden Texten und Quellen. Das Repository ist offen für die Teilnahme anderer Forscher und Universitäten. Alle Verbindungen und Datensätze können veröffentlicht werden und werden dann automatisch durch die Vergabe einer DOI® zitierfähig. Zudem findet eine automatische Abfrage der Struktur über PubChem statt. Beispiele für die zur Verfügung stehenden Datensätze sind z.B.: Beschreibungen und Primärdaten von <sup>1</sup>H NMR Daten, <sup>13</sup>C NMR Daten, Massen-, IR-, Raman-, UV-Spektren und HPLC sowie GCMS Ergebnisse, Kristallstrukturen, TLC Informationen und Bilder, Identifikatoren.

**Adresse:** Hermann-von-Helmholtz Platz 1  
76344 Eggenstein-Leopoldshafen  
Baden-Württemberg  
Deutschland  
[Zur Webseite](#)

### Träger

**Karlsruhe Institut für Technologie (KIT)**  
Hermann-von-Helmholtz-Platz 1  
76344 Eggenstein-Leopoldshafen  
Baden-Württemberg  
Deutschland  
<http://www.kit.edu>

### Wissenschaftsgebiet

**Hauptgebiete:**

- Chemie

**Nebengebiete:**

- Biologie
- Materialwissenschaft und Werkstofftechnik

### Kategorie

Forschungsdaten-Repositoryen

### Wissenschaftliche Dienstleistungen

Das Repository bietet die Möglichkeit, wissenschaftliche Daten elektronisch zu speichern und auf Wunsch mit anderen zu teilen. Es ist möglich, die eigene Arbeit zu strukturieren und andere zu einer Diskussion der Ergebnisse einzuladen. Das Repository ermöglicht durch einen sehr einfachen Austausch von Informationen die Zusammenarbeit in interdisziplinären Projekten. Das Projekt ist eine Sammlung analytischer Daten, die einen direkten Vergleich der Ergebnisse ohne die Zuhilfenahme kommerzieller Datenbanken ermöglicht. Die Verwendung von als Open Source verfügbaren IT Lösungen trägt zur unabhängigen, plattformübergreifenden Sicherung, Speicherung und Verwendung von Forschungsdaten bei. Durch Chemotion kann der Forscher ohne weitere Programme die Grunddaten seiner Verbindungen erfragen und nötige Abfragen (PubChem Listung) automatisiert erledigen. Durch Chemotion erhält der Forscher automatisch (unabhängig vom Standort seiner Organisation und er Art seiner Forschungsdaten) eine zitierfähige DOI zu den von ihm gespeicherten Forschungsdaten.

### Wissenschaftliche Geräte

## Schlagworte

- Forschungsdatenmanagement
- Chromatographie-Daten
- Analytik
- Auswertung
- Primärdaten
- IT Infrastruktur zur Speicherung von Forschungsdaten
- IT Infrastruktur als Open Source
- Integrierte Datenbanken
- DOI Verwaltung/DOI Namensvergabe

## Netzwerke

### **InchiTrust**

<http://www.inchi-trust.org/>

### **PubChem**

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

### **DataCite**

<https://www.datacite.org/>

## Nutzer/Jahr

**Interne Nutzer:**

**Externe Nutzer gesamt:** siehe oben

**Externe Nutzer in Deutschland:**

**Externe Nutzer im europ. Ausland:**

**Externe Nutzer außerhalb Europas:**