

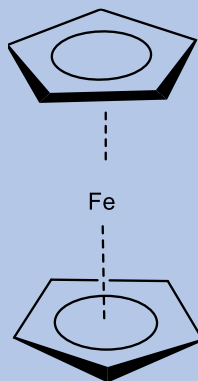


Festkörperchemie

Chemischer Transport

Schmelzsalz

Koordinationschemie



Nanomaterialien

Ag-Nanoprismen

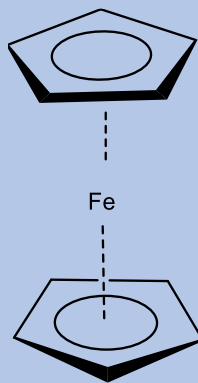
- Pflichtpraktikum Anorganische Chemie F im Studiengang B. Sc. Chemie der RWTH Aachen University
- Ca. 130 Studierende/Jahr

Festkörperchemie

Chemischer Transport

Schmelzsalz

Koordinationschemie



Nanomaterialien

Ag-Nanoprismen

- Pf
- Ch
- Ca

Forschungsdatenmanagement:
5 Lerneinheiten und Anwendung des
Wissens

Elektronisches Laborjournal:
Darstellung von Ferrocen



- Pflichtpraktikum Anorganische Chemie F im Studiengang B. Sc. Chemie der RWTH Aachen University
- Ca. 130 Studierende/Jahr
- Einführung des elektronischen Laborjournals (ELN) Chemotion
- Begleitende Videos zu den Themen Grundlagen des Forschungsdatenmanagements, FAIR-Prinzipien, Datenmanagementplan, Metadaten und InChi und SMILES

- Pflichtpraktikum Chemie der 3. Sc.
- Ca. 130 Stunden
- Einführung in Laborjournaldokumentation
- Begleitende Videos zu den Themen Grundlagen des Forschungsdatenmanagements, FAIR-Prinzipien, Datenmanagementplan, Metadaten und InChi und SMILES



Chemie
 versity



Laborj

ation

In diesem Abschnitt lernen Sie, was Forschungsdaten sind und welche Forschungsdaten es in der Chemie gibt. Es wird Ihnen gezeigt, welche Elemente des Forschungsdatenmanagements umfasst und warum es entscheidend sein kann für die zukünftige Forschung. Als letztes erklären wir Ihnen den Forschungsdatenlebenszyklus.



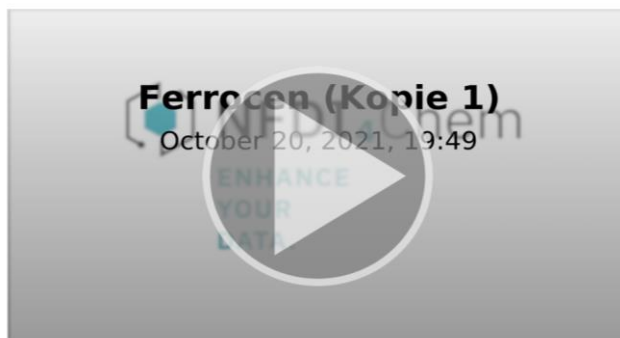
dl



EL



- Pflichtpraktikum Anorganische Chemie F im Studiengang B. Sc. Chemie der RWTH Aachen University
- Ca. 130 Studierende
- Einführung des elektronischen Laborjournals (ELN) Chemotion
- Begleitende Videos zu den Themen Grundlagen des Forschungsdatenmanagements, FAIR-Prinzipien, Datenmanagementplan, Metadaten und InChi und SMILES
- Videos, die die Grundlagen und Bedienung des ELN Chemotions erklären



zenodo Search Upload Communities Log in Sign up

March 15, 2022 Video/Audio Open Access

Chemotion ELN Erklärvideos

483 views 763 downloads

See more details...

Interested in

<https://zenodo.org/record/6356844>

Chemotion¹ ist ein Open-Source-System für die Speicherung und Verwaltung von Experimenten und Moleküldaten in der Chemie und deren angrenzenden Wissenschaften. Dabei besteht das System hauptsächlich aus zwei Komponenten: dem elektronischen Laborjournal (electronic laboratory notebook, ELN) Chemotion ELN² zur Eintragung und Auswertung von Experimenten und deren Analytik-Daten und dem Chemotool³ zur Veröffentlichung dieser. Durch die...

Publication date: March 15, 2022

DOI: 10.5281/zenodo.6356844

Keyword(s):

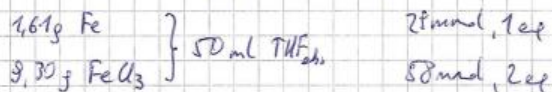
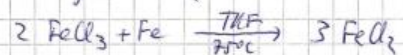
Electronic Laboratory Notebook, ELN, Chemotion, Chemotion ELN, Chemotion Repository, Teaching, Erklärvideos, Erklärvideos Videos, NFDI, RWTH Aachen

Danksagung

Die Autoren danken Nicole Jung für weiterführende Erklärungen zu den Funktionen von Chemotion und die Hilfe bei der Erstellung und Überarbeitung der Videos. Weiterhin danken die Autoren Anna Manukhina für die Hilfe bei der konzeptionellen Entwicklung der Videos.

Darstellung von Ferrocen

1. Darstellung von FeCl₂

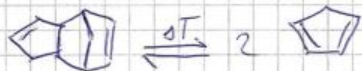


4,5h Rückfluß bei 90°C → Suspension (dunkel)

LM in W-Kühler → braunes Pulver

Ausbeute 90%

2. Cracen von Cp



Cp (75 ml) in Destillationsapparat mit Vigreux

dest bei 180°C

Produktkühler mit Eisbad kühlen

70 ml Cp erhalten → bei -30°C gelagert

3. Na/Cp-Darstellung

a) Natriumscand

Natrium klein schneiden, Oberfläche blank machen

m(Na) = 1,80g + Toluol_{abs} (70 ml)

Na in Dreihalskolben, in Mitte KPG-Rührer, feste

Metallkühler, andere Seite N₂-Auftrieb

auf 140°C aufheizen, starke Durchmischung mit KPG-Lös

(250 rpm)

Na-Sand abschrecken mit kaltem Ölbad

→ feine Kügelchen, etwa gleiche Größe, wenige doppelt so groß

Toluol abdekantieren, Rest mit frischem

THF_{abs} (50 ml) zugeben

Metallkühler + KPG-Rührer weg

Rührfisch vorsichtig zugeben

Tropftrichter einbauen

Apparat auf 0°C mit EtOH/N₂, dann CO₂/EtOH

kühlen

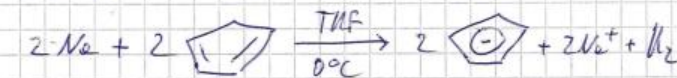
Cp einfüllen (10 ml, 0,12 mol, 1,5 eq)

paarz! vorsichtig zugeben → Gesamtwirkung

über Nacht rühren

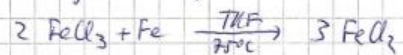
morgens: etwas Na sichtbar → erneute Cp-Zugabe (5 ml)
 → nach 1h alles weg

rose-lsg



Darstellung von Ferrocen

1. Darstellung von FeCl₂



1,61g Fe } 29mmol, 1eq
 9,30g FeCl₃ } 50ml THF_{ab} 58mmol, 2eq

4,5h Rückfluß bei 80°C → Suspension (dunkel)
 LM im Vakuum → braunes Pulver
 Ausbeute 80%

2. Cracken von Dcp



Dcp (75ml) in Destillationsapparat mit Vigreux
 dest bei 180°C

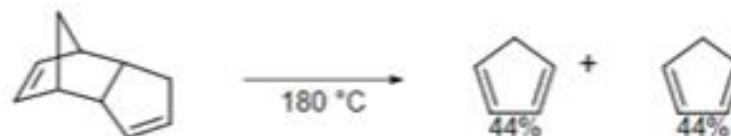
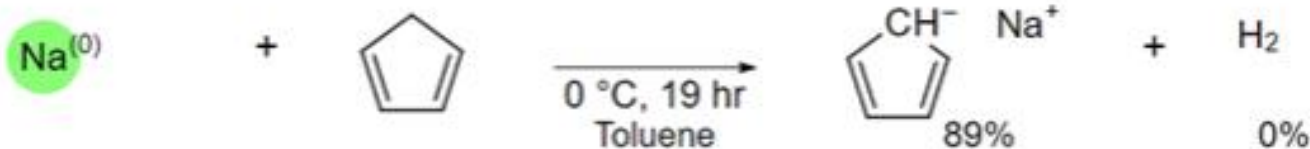
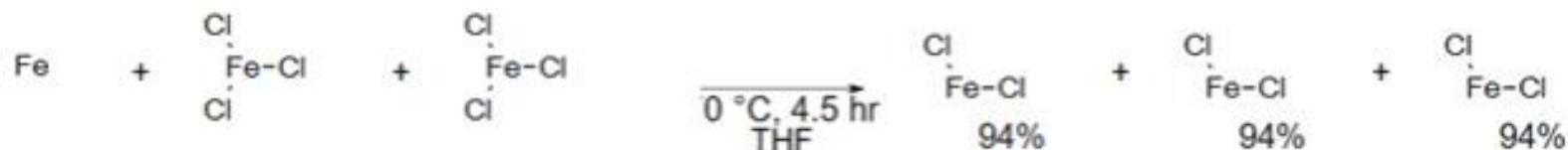
Produktkolben mit Eisbad kühlen

70ml Cr erhalten → bei -30°C gelagert

3. Na/Cp-Darstellung

a) Natriumscand

Natrium klein schneiden, Oberfläche blank machen
 m(Na) = 1,80g + Toluol_{ab} (70ml)



1.0

Scheme Properties References Analyses Green Chemistry

Starting materials		Ref	T/R Amount		Conc		Equiv		
A	tricyclo[5.2.1.0.2,6]deca-3,8-diene	1112	147.0	g	150	ml	n.d.	mmol/l	1.000

Reactants Reagents

Products		T/R Amount		Conc		Yield				
P1	cyclopenta-1,3-diene	32.00	g	40.0	ml	484.1	mmol	n.d.	mmol/l	44%
P2	cyclopenta-1,3-diene	32.00	g	40.0	ml	484.1	mmol	n.d.	mmol/l	44%

Solvents

Default solvents	T/R	Label	Vol	Vol ratio
------------------	-----	-------	-----	-----------

Conditions

The screenshot displays the NFDI4Chem software interface. On the left, there is a chemical structure of a bicyclic diene. The central part of the interface shows a chromatogram with a prominent peak at approximately 10.00 minutes. Below the chromatogram, there is a table with columns for 'T/R Amount', 'Conc', and 'Yield'. The table lists two entries for 'cyclopenta-1,3-diene' (P1 and P2) with a 44% yield. At the bottom, there are sections for 'Solvents' and 'Conditions'.

	T/R	Label	Vol	Vol ratio
Solvents				
Default solvents				
Conditions				

	T/R	Amount	Conc	Yield
P1	r	32.00 g / 40.0 ml	484.1 mmol	n.d. mmol/l / 44%
P2	r	32.00 g / 40.0 ml	484.1 mmol	n.d. mmol/l / 44%

Prof. Dr. S. Herres-Pawlis

Dr. Nicole Jung (KIT)

Dr. Peter Krauß (Steinbuch Center for Computing)

Dr. Pierre Tremouilhac (KIT)

