

Manual com funções básicas do Open Inventory

www.inventory.igq.unicamp.br

Versão: 02/2018

O Open Inventory é uma aplicação WEB (funciona em qualquer navegador de internet, independentemente do Sistema Operacional utilizado) que realiza o Gerenciamento de Reagentes e possui em Caderno de Laboratório Eletrônico.

Os objetivos do Open Inventory são:

- Permitir o gerenciamento e troca de reagentes (caso o acesso seja permitido) de reagentes entre os grupos;
- Permitir a troca de conhecimento dentro do grupo e entre os grupos (caso o acesso seja permitido);
- Tornar visível e facilmente acessíveis as informações de segurança;;
- Redução da quantidade de resíduos e custos desnecessários na aquisição de novos reagentes;

Para maiores informações [clique aqui](#) para conhecer a página do desenvolvedor.

INVENTORY

1. Alterar senha

- Clicar em **Settings** (menu lateral esquerdo)
- Clicar em **Change password** (menu lateral esquerdo)
- Digitar **new password** e repeti-lo
- Clicar em **Change password**

2. Criar novo usuário

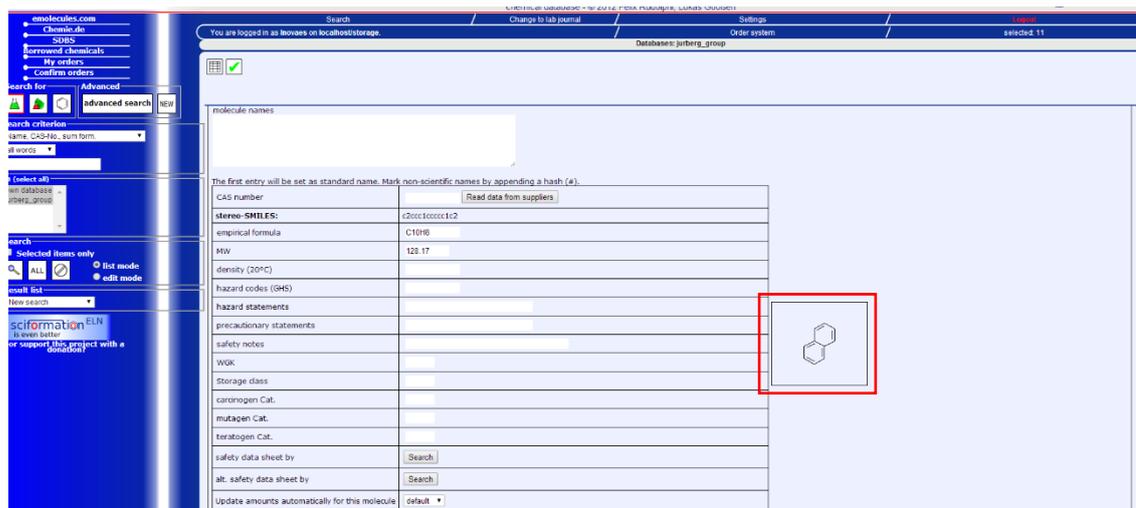
- Clicar em **Settings** (menu lateral esquerdo)
- Clicar em **Users** (menu lateral esquerdo)
- Clicar em **edit mode** (menu central)
- Preencher os seguintes campos:
 - **User name, new password, repeat** (password), **preferred language** (English)
 - **Title/first name/last name** (ex.: Dr. Manoel Gomes)
 - **Predefined permissions** (Administrator ou Write access)
 - Marcar a caixa ao lado de **new lab journal**, preencher **code** (iniciais do nome em maiúsculo), marcar início da numeração do caderno eletrônico em **first entry** e marcar a caixa ao lado de **Start at 1 and fill with empty entries**
- Clicar no ícone para salvar alterações
- Usuário criado!

3. Alterar o perfil do usuário (somente é possível se um administrador realizar)

- Clicar em **Settings** (menu lateral esquerdo)
- Clicar em **Users** (menu lateral esquerdo)
- Clicar em  (Edit)
- Clicar em **Predefined permissions** e escolher a opção desejada. (As duas opções mais utilizadas são Administrador e Write Access)
- Clicar no ícone  para salvar alterações

4. Inserir reagente no almoxarifado

- Clicar no ícone  (menu superior) para ir ao almoxarifado
- Clicar no ícone **NEW**
- Iniciar com o preenchimento do **CAS number** (ex.: 61-54-1) em seguida clicar em **Read data from suppliers**, esperar alguns segundos até as informações serem encontradas
- Preencher os seguintes campos no topo do formulário:
 - **Purity/concentration, in (solvent), amount, still available, in compartment**
- Clicar no ícone  para salvar alterações (menu superior)
- Reagente inserido!
- Para inserir reagentes inéditos, substituir o passo de preencher o **CAS number** por inserir a estrutura do composto (no local marcado em vermelho a seguir)



The screenshot shows the 'molbase.com' interface. The main content area displays a form for reading data from suppliers for a molecule. The form includes the following fields:

CAS number	<input type="text" value="61-54-1"/>
stereo-SMILES	<input type="text" value="C1=CC=CC=C1C"/>
empirical formula	<input type="text" value="C10H8"/>
MW	<input type="text" value="120.17"/>
density (20°C)	<input type="text"/>
hazard codes (GHS)	<input type="text"/>
hazard statements	<input type="text"/>
precautionary statements	<input type="text"/>
safety notes	<input type="text"/>
WGK	<input type="text"/>
Storage class	<input type="text"/>
carcinogen Cat.	<input type="text"/>
mutagen Cat.	<input type="text"/>
teratogen Cat.	<input type="text"/>
safety data sheet by	<input type="text" value="Search"/>
alt. safety data sheet by	<input type="text" value="Search"/>

A red box highlights the 'Read data from suppliers' button, which is located to the right of the CAS number field. The button contains a chemical structure icon of a benzene ring.

5. Adicionar reagente pelo fornecedor

- No campo **search criterion**
- Clicar no link  e digitar o nome ou nº CAS. Na sequência clicar em 
- Após a finalização da pesquisa, clicar no link **Create new molecule based on data details**
- Adicionar os outros itens (quantidade, localização, etc.)
- Clicar no ícone  para salvar alterações

emolecules.com | Search | Change to lab journal | Settings | Logout

You are logged in as edsonnavansini on localhost:8124 | Order system | Selected: nothing

Databases: storage,pastre_group,Lcd_group,salles_group,pocl_group,zancket_group,jurberg_group,comanich_group,jurberg,new,oliveira_group,root,lasso,lqa,lcd_group,thomson,labensino

Chemie.de | SDBS | CMR report | Borrowed chemicals | My orders | Confirm orders

Search for: Advanced

search criterion: Name, CAS-No., sum form. | all words | 118-96-7

at: all suppliers

Search:

sciformation ELN is even better | or support this project with a donation.

molecules at suppliers

The following pieces of information originate from the respective suppliers. No responsibility is taken for the correctness of this information. Additional costs (e.g. shipping) may not be included.

No hits found at VWR

No hits found at TCI EUROPE

No hits found at ACROS ORGANICS

Results from SIGMA-ALDRICH

name		possible purchase
2,4,6-Trinitrotoluene solution (1000 µg/mL in acetonitrile, ampule of 1.2 mL, certified reference material (Cerilliant))	Create new molecule based on data details	<input type="checkbox"/>
2,4,6-Trinitrotoluene solution (10 mg/mL in acetonitrile, ampule of 5 mL, certified reference material (Cerilliant))	Create new molecule based on data details	<input type="checkbox"/>

No hits found at TREM CHEMICALS, INC.

6. Procurar por reagente no almoxarifado

- Na opção padrão (**Name, CAS-No., sum. form.**), inserir parte ou nome completo do reagente em inglês, ou número do CAS
- Clicar em (menu lateral esquerdo)
- Alterando o **search criterion** para **structure** aparece um editor de estrutura, em que pode ser inserido parte ou estrutura completa do reagente

7. Editar reagentes

- Procurar a molécula
- Clicar em **edit mode**
- Clicar no ícone para realizar as modificações necessárias
- Clicar no ícone para salvar alterações
- Caso queira excluir o reagente, clicar no ícone

8. Exportar a lista de reagentes para formato .xls, SDfile ou Csv

- Na área do almoxarifado clicar no ícone (menu lateral esquerdo)
- Clicar no ícone (menu superior direito)
- Selecionar **All**
- Selecionar o formato desejado (padrão excel)
- Clicar no novo ícone que aparecer na janela
- Cópia do almoxarifado feita!
- DICA: Utilizar Ctrl+L para fazer as buscas no Excel

9. Criar novo laboratório

- Na tela inicial, inserir o nome do novo laboratório no campo **database**.
- Inserir o username **root**
- Digitar a senha do root
- Clicar em **Inventory**
- Pronto, o banco de dados está criado
- Na sequência proceder a criação de usuários

Logon

Please logon to the

Database:

user name:

password:

Language: ▼

Copyright 2006-2015 Felix Rudolphi and Lukas Goossen open inventory is distributed under the terms of the GNU Affero General Public License, see COPYING for details. You can also find the license under <http://www.gnu.org/licenses/agpl.txt> open inventory is a registered trademark of Felix Rudolphi and Lukas Goossen. Usage of the name "open inventory" or the logo requires prior written permission of the trademark holders. This file is part of open inventory, open inventory is free software: you can redistribute it and/or modify it under the terms of the GNU Affero General Public License as published by the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or (at your option) any later version. open inventory is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU Affero General Public License for more details. You should have received a copy of the GNU Affero General Public License along with open inventory. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.

10. Remover todos os reagentes de um laboratório

- Para executar esse procedimento, é necessário visualizar os arquivos no servidor onde está instalado o software.
- Utilizando o phpMyAdmin, truncar (remover) a tabela "chemical_storage" da respectiva base de dados.
- Depois de removido o banco de dados, criar novamente o laboratório.

11. Realizar a importação

- Os dados precisam estar numa planilha de Excel.
- As informações mínimas necessárias são: n^o de CAS, localização (armário, prateleira, etc), nome e quantidade. Nesse último item deverá ser utilizada uma das seguintes sintaxes: 1 frasco de 500g (a sintaxe a ser utilizada é 500g ou 500 g); 1 frasco de 300 mL (a sintaxe a ser utilizada é 300mL ou 500 mL); 3 frascos de 1000g (a sintaxe a ser utilizada é 3x1000g ou 3x1000 g).
- Exemplo

Compounds	Amount	CAS number	Placed in
p-Tolylboronic acid	1g	5720-05-8	C6-C9-1_G2
Sodium citrate.2H2O	500g	6132-04-3	C6-C10-1_P2
3-Buten-2-one	100mL	78-94-4	Geladeira (G1PR1-1)
4-Nitrophenol	100 mL	100-02-7	C6-C10-2_P2
tert-Butanol	3x100mL	75-65-0	Inorg 4/5
Phthalic anhydride	2 x 500g	85-44-9	Inorg 1

- Depois de pronto a lista, deverá ser salvo como: TEXTO (SEPARADO POR TABULAÇÕES).
- No Open Inventory, o usuário deverá estar logado como administrador para realizar a importação,
- Clicar em **settings**
- Clicar em **import tab-separated text file**.
- Escolher o arquivo salvo previamente
- Clicar no icone para prosseguir
- Observação: Pula-se uma linha que em geral é o título das colunas, conforme exemplo da figura acima
- Se o sistema estiver funcionando aparecerá uma tela conforme figura abaixo.

- Selecionar as colunas correspondentes conforme a figura abaixo dados da planilha que queira importar.
- Clicar novamente no ícone:  para prosseguir a importação
- Aguardar o processo de importação. Em geral o processo de importação é lento (demora algumas horas, dependendo do tamanho do banco de dados). Isso ocorre, pois, o sistema irá buscar informações fora do aplicativo. Se já existir informações do banco de dados, essa importação é mais rápida.



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
KAISERSLAUTERN



chemical database - © 2015 Felix Rudolph, Lukas Gooßen



FACHBEREICH
CHEMIE

Search
Change to lab journal
Settings
Logout

You are logged in as distma1 on localhostdistma
Order system
Selected: nothing

Import tab-separated text file

Additional name (2)	none	Storage class	none	refractive index (20°C)	none	barcode	none	Property	column fixed value
Additional name (3)	none	carcinogen Cat.	none	melting point	none	description (e.g. solid support)	none	Date opened	none
CAS number	column D	mutagen Cat.	none	boiling point	none	supplier	none	multiple equal containers	none
empirical formula	none	teratogen Cat.	none	amount	none	Catalog no.	none	migrated package identification code	none
migrated molecule identification code	none	BMG (narcotics law) appendix	none	still available	none	Lot no.	none	comment on chemical	none
hazard codes (GHS)	none	SprengG appendix III No.	none	tara with lid	none	price	none		
hazard statements	none	hazard codes	none	purity/concentration	none	currency	none		
precautionary statements	none	risk statements	none	(diff. density)	none	order date	none		

Physical data will also be read from online catalogs
 Number of lines: 287

column A	column B	column C	column D	column E	column F	column G
p-Tolylboronic acid	1g	135.96	5720-05-8	C7H9BO2	C6-C9-1_G2	Armário 2 - B2 - B2
Sodium citrate.2H2O	500g	294.10	6132-04-3	C6H9Na3O9	C6-C10-1_P2	Armário 1 - Bandeja 4
3-Buten-2-one	100mL	70.09	78-94-4	C4H6O	Geladeira (G1PR1-1)	
4-Nitrophenol	100g	139.11	100-02-7	C6H4NO2N	C6-C10-2_P2	Armário 1 - Bandeja 5
Stannous (II) chloride. 2H2O	3x100g	226.03	10025-69-1	SnCl2.2H2O	Inorg_4/5	
Iron (III) chloride.6H2O	500g	270.30	10025-77-1	FeCl3	Inorg_1	
Cobalt(II) sulfate heptahydrate	50g	281.11	10026-24-1	CoSO4.7H2O	Inorg_3	
Calcium chloride dihydrate	500g	147.01	10035-04-8	CaCl2.2H2O	Inorg_5	
Styrene	100 mL	104.15	100-42-5	C8H8	Geladeira (G1-PR1-1)	
Boric acid	2x25g	62.23	10043-35-3	H3BO3	Inorg_3	

LAB. JOURNAL

1. Antes da utilização do Caderno de laboratório é necessário configurar sua utilização. Deverá ser feita no módulo Inventory e no perfil administrador

- Clicar em **Settings**,
- Clicar em **Global Setting**

1.1

- Clicar na aba **Molecule Editing**
- Selecionar *Ketcher (JavaScript)* para programa de desenho de estrutura e programa de desenho de estrutura para reações.
- Clicar no ícone  para salvar alterações

1.2

- Clicar na aba **Lab Journal**
- Clicar em **Update amounts automatically when performing reactions** e nas Condições reacionais que deseja aparecer.
- Clicar no ícone  para salvar alterações

1.3

- Clicar na aba **Analytics**
- Clicar nas opções de análise que se deseja aparecer no caderno de laboratório.
- Clicar no ícone  para salvar alterações

1.4

- Recomenda-se, ao cadastrar o usuário, atribuir um código para o lab. Journal e marcar **Start at 1 and fill with empty entries**
- Caso não esteja marcado proceder da seguinte forma:
- Clicar em **Settings**
- Clicar em **Users**
- Ao lado da imagem , clicar no sinal de +
- Escolher um código e marcar **Start at 1 and fill with empty entries**
- Clicar em salvar alterações, no ícone 

2. Principais ícones do lab journal

- Ao mudar para o Lab. Journal aparecerá a primeira reação com o código pré-determinado

- Clicar no ícone  para editar experimental
- Clicar no ícone  para adicionar novo experimental
- Clicar no ícone  para copiar um experimental
- Clicar no ícone  para gerar um arquivo .pdf
- Clicar no ícone  para apagar uma reação ou reagente
- Clicar no ícone  para realizar a impressão ou gerar um arquivo .pdf de parte ou de todas as reações registradas

- Na aba **List Mode** é possível obter uma lista de todas as reações registradas
- No campo Title e Date of Reaction poderá ser alterado
- Desenhar a reação a ser realizada
- Preencher com o tipo de solvente, quantidade, temperatura da reação, quantidade referencial
- Ao adicionar os equivalentes reacionais o aplicativo calcula as quantidade necessárias. Esses reagentes podem ser obtidos do módulo de Inventário clicando no ícone  e posteriormente no ícone 
- Nos campos **Procedure** e **Observation** registrar os procedimentos e observações da reação
- Na aba **Results** adicionar as informações do produto obtido (estrutura, massa, rendimento, CAS, etc).
- Nas abas **CG, NMR, Analytics**, adicionar os resultados obtidos.

Autores:

Luiz Fernando Toneto Novaes

Edson Gilberto Avansini

Agradecimento:

André Luiz Paiz