

Produktinfo

Chemikalien-Datenbank

und

Chemikalienmanagement

mit

CLAKS

Inhalt

- 1. Überblick**
- 2. Funktionen**
 - 2.1. Chemikaliendatenbank / Substanzinformationen**
 - 2.2. Chemikalienmanagement und Kataster**
 - 2.3. Verwaltungsfunktionen**
 - 2.4. Technische Funktionen**
- 3. Technische Anforderungen**

1. Überblick

CLAKS ist die weltweit umfangreichste Chemikaliendatenbank mit validierten chemischen, physikalischen und rechtlichen Informationen zu über 240.000 Substanzen.

CLAKS übersetzt gesetzliche Vorgaben in Algorithmen und verfügt über eine einmalige automatisierte Erkennung und Bewertung von Gefahrstoffen.

CLAKS gibt zu den Substanzen einen einheitlichen Überblick zu allen gängigen Registrierungsnummern, Bezeichnungen, Synonymen, Derivate, Ersatzstoffen, Strukturformeln, Gefahrstoffinformationen und Referenzen auf die einschlägige Gesetzgebung.

CLAKS ist ein hocheffizientes Katastersystem mit einer Vielzahl an arbeitserleichternden Funktionen für den Laboralltag und die Recherche. Es ermöglicht eine effiziente Inventarisierung und Lagerhaltung von Chemikalien.

CLAKS organisiert Ihre Chemikalienbestände kostengünstig und entsprechend den gesetzlichen Vorgaben und vereinfacht so die Labororganisation. Umfangreiche Synergien ergeben sich durch die Optimierung der Lagerhaltung, zielgerichtete Chemikalienbeschaffung mit integriertem Bestellwesen, zeitsparender Barcode-Steuerung und Schnittstellen zu kaufmännischen Programmen.

Die Software bietet ein hohes Maß an Handhabbarkeit und Funktionalität, insbesondere:

- Erfüllung gesetzlicher Vorgaben zur Führung eines Gefahrstoffverzeichnisses
- Berücksichtigung des aktuellen Kenntnisstands der chemischen Forschung
- Echte Gebindeverfolgung von der Bestellung bis zur Entsorgung
- Vollständige Zuordnung gesetzlicher Regelungen zu einzelnen Stoffen
- Größte Datenvielfalt nach Art und Anzahl der Stoffe (auch Biostoffe, Lösungen und technische Produkte sowie Puffer), Online-Links zu Sicherheitsdatenblättern und Katalogeinträgen
- Umfangreiche Suchfunktionen mit Bezug zu allen Datenfeldern inklusive Substruktursuche
- Umfassende Angaben zu Derivaten und Ersatzstoffen
- Unkomplizierte Inventurpflege in Übereinstimmung mit den gesetzlichen Vorgaben und Bereitstellung aller Daten für die Gefährdungsbeurteilung

2. Module

2.1. Chemikaliendatenbank / Substanzinformationen

CLAKS verfügt über eine validierte Stoffdatenbank mit Eigenschaften und Bezügen zu über 240.000 chemischen Stoffen, Strukturzeichnungen von rund 152.000 Stoffen und 770.000 Artikeln und ist damit die mit Abstand größte Chemikalien-Datenbank.

CLAKS basiert nicht auf statischen Substanzlisten, sondern überprüft und erkennt Stoffe aufgrund einer logischen Datenanalyse. Dazu werden Gesetze in Algorithmen übersetzt und anhand der Stoffeigenschaften erkannt, welche gesetzlichen Regelungen für den jeweiligen Stoff gelten, insbesondere durch Verknüpfungen zwischen Derivaten und Grundstoffen, Substrukturanalysen und der Erfassung chemischer und technischer Synonyme.

So kann eine gesetzeskonforme Gefahrstoffbeurteilung generiert werden – selbst dann, wenn der Stoff durch den Gesetzgeber (noch) gar nicht oder unzureichend erfasst worden ist.

Funktionalität	<ul style="list-style-type: none"> • Insgesamt über 2.000.000 Datensätze • 240.111 chemische Stoffe • Strukturzeichnungen von rund 154.000 Stoffen • 6.275 Biologische Arbeitsstoffe • 75.063 GHS-Datensätze • 23.063 ADR-Daten (UN-Nummern) • 84.000 Stoffe mit Link auf Sicherheitsdatenblätter (SDBs) Online • 770.000 Produkte aus über 100 Katalogen • 300 Property-Felder • Sonstige Referenzen (Literatur, Gesetzen, Untersuchungen, etc.) • Angabe von Abhängigkeiten und Verwandtschaftsbeziehungen zwischen Stoffen, z.B. Verweis auf Ersatzstoffe und einfache Derivatisierungen (Hydrate, Hydrochloride)
Stoffklassen	<ul style="list-style-type: none"> • Organika • Anorganika • Biozide & Pestizide • Arzneistoffe • Betäubungsmittel • Psychoaktive Stoffe • Lebensmittelzusatzstoffe

	<ul style="list-style-type: none"> • Futtermittel • Enzyme • biologische Arbeitsstoffe • Mikroorganismen • Verbrauchsmaterialien & Trennmaterialien • Dual-Use-Stoffe • Biowaffen & Chemiewaffen • FCKW & Klimagase • Standard-Referenz-Materialien uva
Technische Produkte und Gemische	<p>Ausführliche Darstellung von technischen Produkten und Gemischen je nach Zusammensetzung und Aggregatzustand, insbesondere:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Petrolether 30-50 und Petrolether 50-70 mit und ohne Benzol • Salzsäure 10 % und 37 %-ig in Wasser oder in Methanol • Eisen als Block oder Pulver • Kieselgel, normal, oder als Blau- oder Orangegegel • Standardlösungen (AAS) und Pufferlösungen • Ionenaustauscher • Elektrochemische Chemikalien • Puffer-Lösungen • technische Lösungsmittelgemische • Petrochemische Produkte und Lösungsmittel • Pflanzenextrakte • traditionelle Arzneistoffe
Verwandte Stoffe und Derivate	<p>Untereinander sind verwandte Stoffe und Derivate verlinkt, etwa:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Freie Amine zu Hydrochloriden • Hydrate zu Grundstoffen • Gefahrstoffe zu Ersatzstoffen
Klassifizierung	<p>nach nationalen und internationalen Registrierungssystemen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Zoll-Nummern • CAS-Nummern • ZVG-Nummer • Dual-Use Kategorie • UN-Nr. (ADR) • Colour-Index • EC-Nummern (REACH) • SVHC-Liste (REACH Annex XIV)

	<ul style="list-style-type: none"> • CWÜ- und BWÜ-Listen • Doping (WADA-Liste) • BtmG • ATC-Codes • EC-Nummern (REACH) • EINECS / ELINCS / NLP • Stoffgruppe Sprengstoff-Gesetz • Ausführliche Regelungen für die Schule (SR-2004) • Einstufung als Biologischer Arbeitsstoff • Gruppe in der Seveso III-Verordnung
<p>Referenzen</p>	<p>600 Gesetze, technische Regeln (TRGS, TRBA) und internationalen Vereinbarungen, insbesondere:</p> <ul style="list-style-type: none"> • REACH • GHS/CLP • TRGS905, TRGS907 • Dual-Use Kategorie • CWÜ- und BWÜ-Listen • Stoffgruppe Sprengstoff-Gesetz • Global Warming • AMVV • BtmG • Doping (WADA-Liste) • Einstufung als biologischer Arbeitsstoff • Gruppe in der Seveso III-Verordnung • Ausführliche Regelungen für die Schule (RiSU, SR-2004)
<p>Substanzinformationen</p>	<ul style="list-style-type: none"> • rund 154.000 Strukturzeichnungen mit exakter Stereochemie • Substanznamen • Abkürzungen • Synonyme • Internationale Bezeichnungen • Summenformeln • Registrierungsnummern EC-Nummer (REACH), EINECS, ELINCS, NLP, CAS-Nummer, Colour-Index, UN-Nummer (ADR), Zoll-Nummer, ATC-Codes, EG-Index (CLP-VO) • CAS-Nummer • ZVG-Nummer • Molformel (MF) • GHS-Daten • R&S-Sätze • Lagerklassen

	<ul style="list-style-type: none"> • Kategorie der Krebserzeugung (KrebsErz) • VbF Klasse • Mutagenitäts-Kategorie • Reproduktiontoxizitäts-Kategorie • WGK Klasse • Einstufung nach BtMG • Molmasse • Dichte • Siedepunkt • Schmelzpunkt • Verlinkung verwandte Stoffe und Derivate, z.B.: <ul style="list-style-type: none"> ○ freie Amine zu Hydrochloriden ○ Hydrate zu Grundstoffen ○ Gefahrstoffe zu Ersatzstoffen
<p>Gefahrstoffinformationen</p>	<ul style="list-style-type: none"> • GHS-Daten (H-, P-Sätze, Piktogramme, Gefahrenklassen) • R&S-Daten • Lagerklassen • Arbeitsplatzgrenzwerte (AGW) • Biologische Arbeitsplatztoleranzwerte (BAT) • Wassergefährdungsklassen • Global Warming Potential (des ICC)
<p>Substanzsuche</p>	<ul style="list-style-type: none"> • nach Parametern <ul style="list-style-type: none"> ○ Summenformel, Summenteilformel ○ Substanznamen, Teilnamen ○ Synonyme ○ Substruktursuche ○ Dichte ○ Schmelzpunkt ○ Siedepunkt ○ Bestellnummern ○ Artikelnummer ○ Gefahrstoffmerkmale (GHS) ○ Lagerklassen ○ CAS-Nummer ○ ZVG-Nummer ○ R&S-Sätze ○ Registrierungsnummern wie EC-Nummer (REACH), EINECS, ELINCS, NLP, CAS-Nummer, Colour-Index, UN-Nummer (ADR), Zoll-Nummer, ATC-Codes, EG-Index (CLP-VO) • Mittels Strukturzeichnung <ul style="list-style-type: none"> ○ Suche durch Strukturzeichnung bzw. Teilstrukturen

2.2. Chemikalienmanagement und Kataster

CLAKS bietet eine kompakte Bedienoberfläche für die effektive, sichere und rechtskonforme Verwaltung von Chemikaliengebunden in Ihrem Labor. Das CLAKS-Gebinde-Kataster umfasst dabei folgende Informationen und Möglichkeiten:

Gebindeangaben	<ul style="list-style-type: none"> • Benutzer/in • Standort • Info • Gebindeart • Typ • Hersteller/Lieferant • Zusatz • Lösungsmittel • Konzentration • Prüfer • Gebindegröße (Originalmenge) • Menge (Ist) • Preis • Datumsangaben
Gebindeverfolgung	<p>Nachvollziehbarkeit des vollständigen Lebenszyklus eines Gebindes von der Bestellung über Liefereingang im Lager, Lagerabfüllung, Übertrag auf andere Benutzer, Entnahmen, Restmengenbörse bis zur Entsorgung</p>
Gebindesuche	<ul style="list-style-type: none"> • Name • Person • Standort (Alle, bestimmte Institute, Stoffbörse) • Artikelnummer • Lagerklasse • ID-Nummer • Füllmenge • Konzentration • Lösungsmittel • Kommentare • Datum • Barcode • Behältertyp • Gasflasche (Haus / Leih) • alle Gebinde einer Substanz (→Substanzsuche) • Kombinationssuche aller Parameter • Chemikalienbörse

Artikel	<ul style="list-style-type: none"> • Artikelnummer und Name des Herstellers/Lieferanten • 775.000 Produkte aus über 100 Katalogen
Etiketten	<ul style="list-style-type: none"> • Für alle Gebindegrößen • Gefahrguteinstufung • aktuelle gesetzlichen Vorgaben (GHS-Kennzeichnung) • variable Etikettengrößen • alle gängigen Vorlagen können hinterlegt werden • Sammeldruck von Etiketten • freie Auswahl auf Etikettenbogen • personalisierte Barcode-Etiketten
Listen	<p>Erstellung von Katasterlisten nach Bedarf:</p> <ul style="list-style-type: none"> • gedruckt oder exportiert • für einzelne Abteilungen, Anwender, Räumlichkeiten oder Stoffklassen • z.B. Summation gemäß Seveso III –Richtlinie
Barcode-Funktionen	<p>Viele Prozesse werden durch Barcode-Funktionen beschleunigt, z.B.:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Schnelle Inventur („Inventur-Modus“) • Gebindeübertragung zwischen Nutzern ohne manuelle Eingabe • Lagerabgaben
Userverwaltung	<p>Zahlreiche Berechtigungsstufen sind möglich:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Lese- und Schreibrechte lassen sich für einzelne Benutzer oder ganze Benutzergruppen vergeben • Gruppenverwaltung mit individuellen Zugangsrechten • Lese- und Schreibrechte für Gebinde auch nach Gruppenzugehörigkeit • Rechte für Bestellungen • Rechte für Eintragungen von Stoffen • Anpassbare Nutzerprofile als Labor- oder Lagermitarbeiter bzw. Gefahrstoffbeauftragter
Prüfzyklen	<p>Überwachung von Prüfzyklen (Ablaufzeit, Druckgasflaschen-TÜV)</p>

Auskunftspflichten	Erfüllung gesetzlicher Auskunftspflichten u.a. Bundesimmissionsschutzgesetz, Betäubungsmittelgesetz, diverse Vorschriften für Lagerung und Transport
Gefahrstoffbeurteilung	<ul style="list-style-type: none"> • CLAKS basiert nicht auf statischen Substanzlisten, sondern überprüft und erkennt Stoffe auf Basis einer logischen Datenanalyse. • Erkennung von nahezu jeder relevanten chemischen Verbindung, mit gesetzlichen Regelungen, auch durch Verknüpfungen zwischen Derivaten und Grundstoffen, Substrukturanalysen und vielfältigen chemischen und technischen Synonymen. • Dazu werden von CLAKS Gesetze in Algorithmen übersetzt und anhand der Stoffeigenschaften kann eine gesetzeskonforme Gefahrstoffbeurteilung generiert werden - selbst dann, wenn der Stoff durch den Gesetzgeber (noch) gar nicht oder unzureichend erfasst worden ist.
Sicherheitsdatenblätter	Online-Links zu aktuellen Sicherheitsdatenblättern der Hersteller, passend zu den jeweils erfassten Gebinden
Zusammenlagerungsüberwachung	<ul style="list-style-type: none"> • Erfassung der Lagerklassen • Automatische Erkennung von Zusammenlagerungsverboten
Schnittstellen	Verknüpfung zu Schnittstellen ohne dass die Software erweitert werden müsste: <ul style="list-style-type: none"> • Laborsoftware, Labfolder, SAP etc. • Hardware wie etwa Laborwaagen, Barcodescanner, Drucker, Feuermelder
Daten	Datenimport von bestehenden Listen vieler Formate (Excel, SDF-File, ASD-File, TAB-File, SSF u.v.m.) möglich

2.3. Verwaltungsfunktionen

Interne Bestellfunktion	<ul style="list-style-type: none"> • Anzeige von Artikelnummer und Name des Herstellers/Lieferanten • Auswahl von 775.000 Produkten aus über 100 Katalogen
Statusmeldungen	<ul style="list-style-type: none"> • Bestellt • Nicht Lieferbar • Labor • Wareneingang • Lager • Entsorgt
Bezüge	<ul style="list-style-type: none"> • Zuordnung zu Kostenstellen • Kosten <ul style="list-style-type: none"> ○ inklusive oder exklusive Mehrwert ○ Stück oder gesamtes Gebinde ○ Währung • Bestellscheinnummer
Chemikalienbörse	Übersicht aller Stoffe und Mengen von allen Benutzern möglich
Verknüpfung	Verknüpfung mit Warenwirtschaftssystemen, insbes. SAP möglich

3.4. Technische Funktionen

Datenstruktur	<ul style="list-style-type: none"> • Objekt-orientierte Datenbank • Erweiterte Datentypen im Vergleich zu einfachen SQL-Datenbanken • Drei Haupttabellen: Compounds, Properties und References • Über 2.000.000 Records
Datenfelder	<ul style="list-style-type: none"> • 'Compounds' (Verbindungen, Enzyme, Microorganismen): <ul style="list-style-type: none"> ○ Struktur/Graphik ○ Namen (unbeschränkte Anzahl) ○ Registrierungsnummern ○ Summenformeln • 'References' (Literaturzitate, Referenzen, Gesetze) <ul style="list-style-type: none"> ○ Autoren, Editoren ○ Titel, Abstracts, Keywords ○ Zeitschrift, Band, Seiten ○ Patentnummern (PI, AI, PRAI) ○ Internetlinks uva • 'Properties' <ul style="list-style-type: none"> ○ freie Zusammenstellung von Feldern mit unterschiedlichen Datentypen ○ Properties verweisen auf eine 'Compound' und eine 'Reference' • Atome in Strukturen <ul style="list-style-type: none"> ○ Element, Koordinaten, Radikal, Spinzustand, Isotop, NMR-Verschiebung, uva
Datentypen	<ul style="list-style-type: none"> • Text <ul style="list-style-type: none"> ○ Keine Längenbegrenzung, und Unterstützung beliebige Formatierungen (fett, kursiv, unterstrichen, Symbole, hoch/tief) • Value <ul style="list-style-type: none"> ○ Fließkommazahl können auch immer als Intervalle abgelegt werden und logische Zusätze (extrapoliert, unsicher etc.); z.B. für Schmelz- und Siedeintervalle • Peaklist <ul style="list-style-type: none"> ○ Liste von X/Y-Paaren in unbeschränkter Anzahl, zusätzliche Darstellung als Balkendiagramm (z.B. MS-, UV- und IR-Spektren) • Hyperlink

	<ul style="list-style-type: none"> ○ Verweis auf Websites oder externe Dateien • Structure <ul style="list-style-type: none"> ○ 3D-Koordinaten, bspw. für Konformation, zugeordnetes NMR-Spektrum etc. • Graphiken • Mehrdimensionale, numerische Tabellen
Suchmöglichkeiten	<ul style="list-style-type: none"> • alle Datenfelder sind durchsuchbar (exakte Werte, Intervallangaben, Teilstrings, etc.) • Substrukturen incl. NMR-Daten
Auswertemöglichkeiten / Paare für QSAR & QSPR	<ul style="list-style-type: none"> • Vergleich von Elementen in Strukturen • Vergleich über Namensbestandteile • Vergleiche basierend auf Substrukturunterschieden • Auffinden von Derivaten • Hierarchische Darstellungen der Taxonomie
Datenvalidierung	<ul style="list-style-type: none"> • Chemische Strukturen <ul style="list-style-type: none"> ○ Normierung der Darstellung ○ Chemische Korrektheit, Valenzcheck, Symmetriebewertung • CAS-RN <ul style="list-style-type: none"> ○ Prüfziffercheck ○ Ersatz gelöschter CAS-DR durch korrekte CAS-RN ○ Ersatz mehrdeutiger CAS-RN durch bestmögliche CAS-RN (Mesomere, Tautomere) • Chemische Namen <ul style="list-style-type: none"> ○ Normierung der Darstellung ○ Vergleich der Stereochemie des Textes mit der Zeichnung • Reports für alle Datenfelder
Datenimport	<ul style="list-style-type: none"> • alle Daten <ul style="list-style-type: none"> ○ Microsoft-Excel ○ SDF-Dateien (MDL, internationaler Standard) ○ ASD-Dateien (ASCII) ○ TAB-Dateien (tabulator-getrennte Daten, bspw. Excel-Tabellen) ○ SSF (GSBL) • Chemische Strukturen

	<ul style="list-style-type: none"> ○ MOL-File (MDL, internationaler Standard) ○ MOL2, PLT, CSF (CACHe), CDX, SKC ○ Clipboard (MOL, ChemDraw) ● weitere Formate auf Anfrage
Datenexport	<ul style="list-style-type: none"> ● Grundsätzlich stehen für den Export von Daten dieselben Formate zur Verfügung, die auch beim Datenimport bedient werden können ● Excel-Exportfunktionalitäten für Gefahrstoffinformationen ● zusätzlich: <ul style="list-style-type: none"> ○ RTF (formatierte Word-Files) ○ HTML, XML (Internet-Formate) ○ GIF, PNG, WMF (Pixel- und Vektorgraphikformate)
Datenschutz	<ul style="list-style-type: none"> ● Datenbanken können unabhängig voneinander geschützt werden ● Die Authentifizierung erfolgt durch die Kombination von Benutzernamen und Passwort oder über einen gerätespezifischen Key ● CLAKS bietet ein differenziertes Rechtemanagement (Lese-, Schreib- und Masterrechte)

3. Technische Anforderungen

Die Installation von CLAKS erfolgt als Download.

Die Systemanforderungen sind relativ gering, eine Installation ist auf einem üblichen PC möglich. Der CLAKS-Client erfordert Windows, möglich ist aber auch ein PHP-Client oder Web-Client, der in jedem üblichen Browser auf jeder üblichen Plattform läuft (Windows, Linux, MAC). CLAKS umfasst alle benötigten Funktionen, weitere externe Programme (Oracle, MySQL, o.ä.) werden nicht benötigt, eine Benutzerauthentifizierung kann auch über LDAP erfolgen.

Programm-Versionen sind möglich als:

- Standalone an einem Rechner
- Als Netzwerklösung im Intranet (bevorzugt).