



# CDD Vault: Sicherer, kollaboratives und integriertes Datenmanagement für die wissenschaftliche Forschung



Kostenlose Visualisierung



CDD Vault - Kostenlose Evaluierungslizenz

Förderung der Forschung durch leistungsstarke Lösungen für Datenmanagement, ELN, Inventarisierung und Analyse zur Gewährleistung der Dauerhaftigkeit von Daten

## Kurzbeschreibung

CDD Vault ist eine Cloud-basierte Datenmanagement-Plattform, die auf die wissenschaftliche und die Arzneimittelforschung zugeschnitten ist und sichere, kollaborative und reproduzierbare Arbeitsabläufe bietet. Die umfassende Tool-Suite beinhaltet Registrierung von Verbindungen, Verwaltung von Assays, Nachverfolgung von Verzeichnissen, ein elektronisches Laborjournal (ELN), Datenvisualisierung und Protokollverwaltung – all diese Funktionen verbessern die Forschungseffizienz und die sichere Zusammenarbeit, wo dies erforderlich ist. Das Tool eignet sich für verschiedenste Arten der Forschung, einschließlich kleiner Moleküle, Nukleotide, Peptide, Antikörper, Proteine, Mischungen usw.

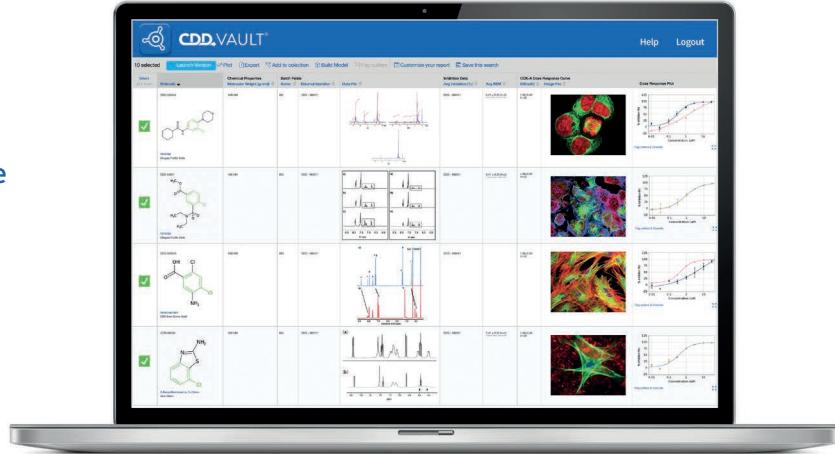
## Einführung

Die wissenschaftliche Forschung benötigt robuste, sichere und kollaborative Datenmanagement-Systeme, insbesondere in der Arzneimittelforschung und den Biowissenschaften. Herkömmliche Methoden wie handschriftliche Notizen können den Fortschritt behindern. So kann es vorkommen, dass Daten verlorengehen, Experimente wiederholt werden und Übergaben zwischen Forschenden ineffizient vonstatten gehen. CDD Vault ist eine skalierbare, moderne Lösung zur Bewältigung dieser Herausforderungen, die es Forschenden ermöglicht, Daten sicher zu dokumentieren, zu analysieren und problemlos einrichtungsübergreifend auszutauschen.

Informieren Sie sich, wie Einrichtungen, die CDD Vault nutzen, Compliance-Standards verbessert, geistiges Eigentum geschützt, interdisziplinäre Zusammenarbeit gefördert und Kosten durch ein zentrales, effizientes Datenmanagement erheblich gesenkt haben.

# I. Lösungen für weit verbreitete Herausforderungen

- Datensuche und -zugriff
- Dauerhaftigkeit von Daten
- Vertrauliche Zusammenarbeit
- Erforschung neuartiger Moleküle und Design-Effizienz
- Fernzugriff auf Daten



## Datensuche und -Zugriff

Alle Forschungsdaten werden an einem einzigen Ort sicher gespeichert und katalogisiert - Single Source of Truth. Dies vereinfacht die Suche, da die Forschenden alle hochgeladenen Daten schnell durchsuchen können.

## Dauerhaftigkeit von Daten

Da alle Daten an einem einzigen, sicheren Ort gespeichert und aufbewahrt werden, gehen keine Daten in verlegten Notizbüchern, auf USB-Sticks oder Laptops verloren, die das Labor verlassen. So wird sichergestellt, dass Experimente nicht wiederholt werden müssen, und dass Projekte reibungslos übergeben werden können, wenn neue Forschende der Gruppe beitreten.

## Vertrauliche Zusammenarbeit

Durch die Erleichterung der nahtlosen Zusammenarbeit über Abteilungen und Einrichtungen hinweg können Forschende Datensätze und Erkenntnisse sicher und in Echtzeit austauschen, sodass die Effizienz gemeinsamer Forschungsprojekte verbessert wird. Durch Zugriffsberechtigungen und Prüfprotokolle stellen Sie sicher, dass alle Änderungen nachverfolgt werden können und alle Daten sicher sind.

## Erforschung neuartiger Moleküle und Design-Effizienz

Verbessertes Moleküldesign und Optimierung der Arbeitsabläufe in der Arzneimittelforschung, da Forschende Datenbanken wie ChEMBL, SureChEMBL, Enamine und CDD Public schnell nach ähnlichen Strukturen durchsuchen können, ohne die sichere Umgebung von CDD zu verlassen.

Die KI-Lösungen priorisieren synthetisierbare Moleküle und unterstützen die Ausrichtung auf praktische und umsetzbare Ergebnisse. Ein innovativer bioisosterischer Vorschlagsalgorithmus verbessert die Molekülwirksamkeit, sodass die Entwicklung neuer Therapien beschleunigt wird.

## Fernzugriff auf Daten

Mit der Cloud-basierten Plattform von CDD Vault können Studierende von überall aus sicher auf experimentelle Daten zugreifen, sie durchsehen und analysieren und so unabhängig von ihrem Standort produktiv bleiben. Durch die Organisation von Daten in einem zentralisierten System mit intuitiven Analyse- und Visualisierungstools vereinfacht CDD Vault den Prozess der Auswertung von Ergebnissen und der Erhebung von Erkenntnissen. Dieser optimierte Arbeitsablauf ermöglicht es Studierenden, sich auf das Verfassen von Forschungsarbeiten zu konzentrieren, auch wenn sie nicht im Labor oder auf dem Campus sind. Mit seinem zuverlässigen Fernzugriff unterstützt CDD Vault die Studierenden dabei, ohne Unterbrechung an ihren Forschungsarbeiten und ihren wissenschaftlichen Beiträgen weiterzuarbeiten.



*„Die elektronische Datenspeicherung ist für die Arzneimittelforschung derartig wichtig, dass man die Zugangsbarrieren senken muss ... eine einrichtungsweite Lizenzierung hilft, Barrieren abzubauen.“*

**Paul Cartier, Ph.D.**  
Director, University of Illinois Centre, Hans W. Valteich-Lehrstuhl  
für medizinische Chemie, Professor für pharmazeutische  
Wissenschaften und Chemie, Universität Illinois

## II. Methoden und Funktionen

### 1. Enthaltene Kernfunktionen

- **Registrierung:** Verwalten der Registrierung von Verbindungen/Proben
- **Wirkung:** Erfassen und Verwalten von Assay- und Screening-Daten
- **Parser:** Direkte Datenübernahme von Instrumenten, und somit Minimierung der Datenmanipulation
- **Assay-Management:** Zusätzliche Funktionen für die Organisation von Assay-Daten
- **Protokollformulare:** Ontologie-gestützte Verwaltung von Assay-Protokollen
- **Visualisierung:** visuelle Analyse von Assay-Daten

### 2. Zusätzliche Funktionen (optionale Add-ons)

- **Elektronisches Laborjournal (ELN):** Digitalisierung und Optimierung von Labornotizen und Versuchsdaten
- **Hochentwickeltes Verzeichnis:** Nachverfolgung von Proben mit detaillierten Standortfunktionen (Regale, Gefrierschränke usw.)
- **KI:** Hochentwickeltes Tool zur Identifizierung ähnlicher Strukturen und Erzeugung von Bioisosteren, das CHeMBL, SureCHeMBL, Enamine und CDD Vault Public Datensätze integriert
- **Kurven und Analysen:** Abbildung verschiedener Diagramme, einschließlich zeitabhängiger Variablen
- **Automatisierung/API:** Zugang zu programmatischer Integration mit CDD Vault unter Verwendung von KNIME, R, Python und Pipeline Pilot
- Vorgefertigte Anschlüsse für DataWarrior und Star Drop von Optibrium sind verfügbar

### Registrierung und Wirkung - Organisieren, Suchen und Zusammenarbeiten

Effizientes Registrieren, Organisieren und Durchsuchen von Forschungsdaten auf einer sicheren, zentralisierten Plattform. CDD Vault unterstützt Arbeitsabläufe für die Registrierung von Verbindungen, die Verwaltung von Bioassays und die Probennachverfolgung.

Kapazität für bis zu 2 Millionen Proben, Verbindungen und Mischungen.



## Elektronisches Laborjournal (ELN) - Effizientes Aufzeichnen und Analysieren

Elektronisches Laborjournal (ELN) - Effiziente Aufzeichnung und Analyse – CDD Vault unterstützt die Reproduzierbarkeit von Forschungen, indem es den Benutzern ermöglicht, Versuchsprotokolle, Beobachtungen und Ergebnisse in einem sicheren, durchsuchbaren Format zu dokumentieren, so dass alle relevanten Daten zentralisiert und leicht zugänglich sind. Das ELN bietet eine ganzheitliche Sicht auf forschungsbezogene Inhalte und ermöglicht es Nutzern, ein breites Spektrum an Materialien zu erfassen, wie z. B. PDFs von Postern oder PowerPoint-Präsentationen, die sie erstellt oder präsentiert haben. Darüber hinaus wird durch die Verwendung von anpassbaren ELN-Vorlagen mit Pflichtfeldern sichergestellt, dass alle erforderlichen Informationen fortlaufend erfasst werden, wodurch die Datenintegrität und -vollständigkeit während des gesamten Forschungsprozesses verbessert werden.

**Screening of molecules**

Project *	Template	Lab temperature	Assigned to
Biology Lab	Reference	37	Mel
Target Date	Instrument Booking	Requested by	
2024-07-03	X COSHII_categorisation-of-bi... X	Yes	X Antima
Experiment progress *	Reaction type	SOP	
In progress	X 345	X	X COSHII_categorisation-of-

Normal | Duplicate of: Experiment: EAD-000102 - New Canvas DEMO: Screening

**Purpose**  
The purpose of this entry is to screen compounds in the growth inhibition assay in *Plasmodium falciparum* 3D7.

**Description**  
This is a primary assay to identify potential treatments for malaria, by investigating the biological process of NADH metabolic pathway in *Plasmodium falciparum* 3D7, specifically targeting **L-lactate dehydrogenase and oxidoreductase**. This is a cell viability assay, for dehydrogenase activity determination. The cell line erythrocyte was used. It was conducted in 96 well plates, with the detection method mode of action of inhibition by small molecules. In a 96-well microtiter plate, 10 µL of each inhibitor from the master plate and 90 µL of (v/v) parasitemia and 1% (v/v) hematocrit were dispensed in each well. The test concentrations ranged from **0.0064 µM** to **1 µM**, with each well. Plates were then incubated at 37°C under a 5% CO<sub>2</sub> atmosphere for 72 h. **Experiment: EAD-000066 - Duplicate of Entry: EA**

**Materials**

Compounds	RBC	Number of Plates	RBC	Total Time
ABL-0000170-001	Entry: EAD-000003	10	AGN-0000034-001	5 hrs

ID: EAD-000152

Reaction scheme:

(1) O=C(=O)c1ccccc1N(O)C2CC2 + (2) CS(=O)(=O)c3ccccc3 → (4) O=C(=O)c1ccccc1N(O)C2CC2S(=O)(=O)c3ccccc3

Reactions:

- 1:** Name: optional  
Compound: ABL-0000170 001  
IUPAC: 1-(2-methoxyphenyl)-3-(3,2-dimethylacryloxy)propane  
Safety:
- 2:** Name: optional  
Compound: CAW-0004677  
IUPAC: 1,1-dimethoxy(methane)  
Safety:
- 3:** Solvent: Dimethyl sulfoxide  
CAS-RN: 67-69-5  
Safety:
- 4:** Name: optional  
Compound: Register  
IUPAC: N-methoxy-N-methyl-2-(2-methoxypropyl)acarboxamide  
Safety:

Properties, Amounts, Calculation, Comment:

1: MW: 181.19 g/mol  
FW: 181.19 g/mol  
Density: optional  
Exact mass: 181.073893 Da  
Safety:  limiting reagent  
Equivalent: 1.00e+3  
Mole: 55.2 nmol  
%V/V ratio: 100 %V/V  
Purity: 100 %

2: MW: 75.15 g/mol  
FW: 75.15 g/mol  
Density: optional  
Exact mass: 75.013930 Da  
Safety:  limiting reagent  
Equivalent: 0  
Mole: optional  
Effective mole: optional

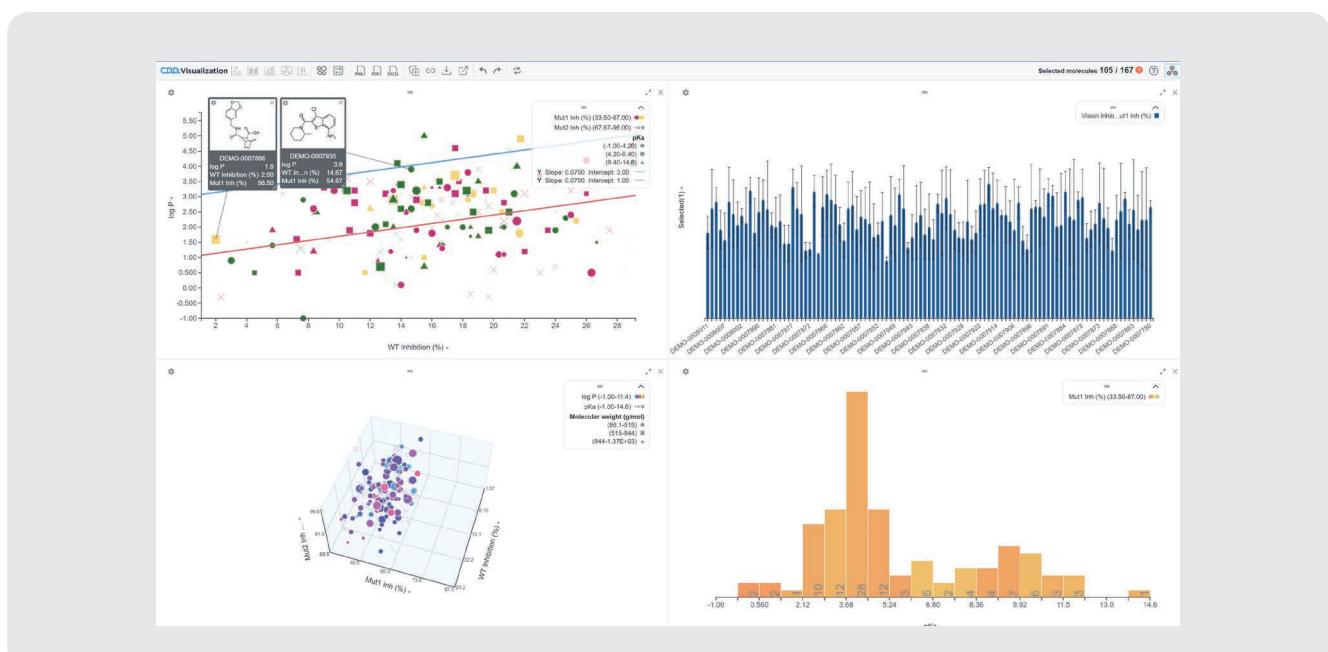
3: MW: 78.15 g/mol  
FW: 78.15 g/mol  
Density: 1.002 g/cm³  
Boiling point: 199 °C  
Exact mass: 78.013930 Da  
Safety:  make solution  
%V/V ratio: 100 %V/V  
Volume: optional  
%V/V ratio: 100 %V/V  
Purity: 100 %

4: MW: 135000000 g  
FW: 135000000 g  
Density: optional  
Exact mass: 135000000 Da  
Safety:  reaction  
Reaction molarity: 4.46e-8  
Mole: 17.3 kmol  
Effective mole: 55.2 µmol

Comments: https://app.collaborativelab.co/m/vaults/6552/entries/1789122

## Datenvisualisierung - Vereinfachung komplexer Datenanalysen

Die Visualisierungstools von CDD Vault wandeln komplexe Daten in umsetzbare Erkenntnisse um. Erstellung von Diagrammen und Grafiken, um Trends zu erkennen, Hypothesentests zu unterstützen und verborgene Erkenntnisse in Datensätze aufzudecken.



## III. Beispiele für-Arbeitsabläufe

### 1. Verbindungsregistrierung und Analyse der Struktur-Wirkungs-Beziehung (SAR)

#### Neue Verbindungen registrieren:

- Chemiker oder Forschende melden sich bei CDD Vault an und verwenden das Registrierungsmodul zur Eingabe neuer Verbindungsstrukturen, einschließlich SMILES- oder InChI-Vermerke.
- Jede Verbindung erhält eine eindeutige Kennung und automatisch berechnete chemische Eigenschaften, u. a. Molekulargewicht, Log P und pKa.
- Zusätzliche Details wie Synthesedatum, Chargeninformationen, Reinheit usw. sowie Wirkungsdaten können vom/von (den) Benutzenden hinzugefügt werden.

#### Organisieren von Verbindungsdaten:

- Registrierte Verbindungen können nach Eigenschaften wie Verbindungstyp, Ziel und Wirkungsbereich kategorisiert werden, was das Auffinden bestimmter Gruppen von Verbindungen erleichtert.
- Die Verbindungen können auch nach Projekt organisiert werden, um die Zusammenarbeit zwischen Teams oder Einrichtungen zu vereinfachen.

#### Suchen und Analysieren von Verbindungsdaten:

- Forschende können die Multi-Parameter-Suchfunktion nutzen, um Verbindungs-Sätze nach bestimmten Eigenschaften zu durchsuchen, u. a. (Unter-)Strukturen, Wirkungsdaten (z. B. IC50-Werte) und chemische Eigenschaften, um Struktur-Wirkungs-Beziehungen (SAR) mit Hilfe des CDD Vault-Visualisierungstools zu analysieren.
- Mit dem Visualisierungstool können die Ergebnisse und Parameter von Verbindungen mit verschiedenen Diagrammtypen dargestellt werden, wie z. B. Streudiagramme, Histogramme und R-Gruppen-Aufschlüsselung. Des Weiteren gibt es ein Cluster-Analyse-Tool, das dabei hilft, Trends und Beziehungen zwischen Struktur und biologischer Wirkung zu erkennen, was die Leitstrukturoptimierung unterstützt.

**Legen Sie los - fordern Sie noch heute eine kostenlose Evaluierungslizenz an oder kontaktieren Sie unser Team für eine personalisierte Demo**

### 2. Verwaltung und Analyse von Bioassay-Daten

#### Eingabe von Bioassay-Daten:

- Nach der Durchführung eines Assays geben die Wissenschaftler die unbearbeiteten und berechneten Ergebnisse in das Bioassay-Management-Modul ein und verknüpfen die Assaydaten mit bestimmten Einheiten.
- Das Assay-Protokoll, die Bedingungen und die Daten, wie z. B. die IC50/EC50-Werte, sind standardisiert und werden innerhalb der Plattform gespeichert, um die Konstanz bei allen Assays zu gewährleisten.

#### Organisation und Kommentierung der Ergebnisse:

- Jeder Assay kann mit Informationen wie Ziel, Zelllinie oder Organismus markiert werden, um eine organisierte Ergebnisverfolgung im Zeitverlauf zu ermöglichen.

- Erläuterungen und Anmerkungen zur Assay-Durchführung oder zu bestimmten Datenpunkten können hinzugefügt werden, um die Kommunikation zwischen den Teammitgliedern zu unterstützen.

#### Analyse und Visualisierung von Assay-Daten:

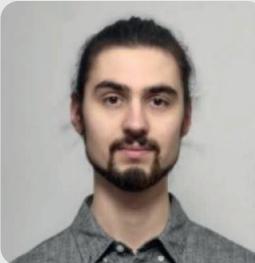
- Die Visualisierungstools der Plattform ermöglichen Trendanalysen und Vergleiche zwischen verschiedenen Assays und helfen den Forschenden, Einheiten auf der Grundlage ihrer Wirksamkeit zu priorisieren.
- Anpassbare Berichte und automatisierte Daten-Workflows können für regelmäßige Analysen konfiguriert werden, um laufende Screening-Kampagnen zu optimieren.

## IV. Nachgewiesener Einfluss auf die wissenschaftliche Forschung



*„Nach einer kurzen Einführung war ich sofort überzeugt, dass CDD für mein Projekt, bei dem ich den Überblick über eine große Molekül-Bibliothek behalten muss, ideal ist. Besonders beeindruckt war ich von der Möglichkeit, nach Strukturfragmenten zu filtern. Ein vergleichbares Tool selbst zu erstellen, hätte einen riesigen Zeitaufwand bedeutet. Außerdem kann man sich immer auf den hervorragenden Kundensupport verlassen.“*

**Leah Glanzmann**  
Doktorandin, Universität Heidelberg



*„Ich glaube, viele von uns werden Vault nicht mehr missen wollen und den Einsatz in unseren Einrichtungen als Alternative zu unübersichtlichen Ordnerstrukturen in Netzwerken anregen.“*

**Leonard Trau**  
M. Sc. Doktorand in Biotechnologie, Universität Münster, iGEM



*„CDD war für mich Liebe auf den ersten Blick. Es ist so intuitiv zu verwenden, dass ich es an einem Tag beherrschte, bevor ich überhaupt eine Schulung erhalten hatte. Das System eignet sich hervorragend für die Verwaltung sowohl strukturierter als auch unstrukturierter Daten.“*

**Iwan Grion**  
Laborleiter, Universitätsklinikum Tübingen



*„Kontinuität ist im wissenschaftlichen Bereich ein großes Thema, da durch den Wechsel von Labormitarbeitenden so viel Wissen verloren geht. Mit CDD Vault ELN haben wir einfachen Zugang zu Experimenten von vor 5 Jahren, ohne uns durch endlose Notizbuchseiten wühlen zu müssen. CDD ist eine Ausgangsbasis, die neue Wissenschaftler:innen auf den aktuellen Stand bringt und ihnen die Freiheit gibt, sich auf kreatives Denken zu konzentrieren.“*

**Digamber Rane**  
Leitender Forschender, Ohio State University



## V. Fallstudie

### Das UI Centre der University of Illinois Chicago verbessert die Zusammenarbeit und Datenintegrität durch die einrichtungsweite Lizenzierung von CDD Vault

Das University of Illinois Centre (University of Illinois Chicago) hat seit der Einführung von CDD Vault mit einrichtungsweiter Lizenzierung mehrere Vorteile festgestellt, u. a.

- Bereitstellung einer einzigen Referenzquelle für Labore
- Verbesserte Zusammenarbeit zwischen Chemikern und Biologen
- Erfüllung der NIH-Anforderungen an das Datenmanagement und den Datenschutz
- Gewährleistung der Datenintegrität und Unterstützung tiefgreifender Forschung
- Erhebliche Einsparungen gegenüber Einzellizenzen
- Schutz des geistigen Eigentums
- Elektronische Notebooks verbessern die Forschungsarbeit und helfen Studierenden, sich auf das Berufsleben vorzubereiten



„Die CDD-Datenbank ist eine äußerst elegante Plattform. Ich empfehle sie jedem, der Daten für die Arzneimittelforschung generiert.“

Brian Roth  
Bryan Roth University of North Carolina School of Medicine | Pharmakologie

## VI. Datenschutz und Compliance

### Strenger Datenschutz, Einhaltung gesetzlicher Vorgaben, Schutz geistigen Eigentums

- **Benutzerberechtigungen und Datenkontrolle:** Granulare Zugriffskontrollen für Benutzer, Berechtigungen und Datentransparenz.
- **Kommunikationsverschlüsselung:** SSL-Verschlüsselung sichert die gesamte Browserkommunikation mit den Websites von CDD.
- **Prüfen der Anwendungssicherheit:** Automatisierte Sicherheitsprüfungen gewährleisten einen isolierten Zugriff zwischen Vaults, um unbefugten Datenzugriff zu verhindern.

- **Firewall-Schutz:** Dual-Layer-Firewall(„Defence in Depth“)-Setup mit Hardware- und Softwareschutz für sensible Server.

Weitere Einzelheiten finden Sie in unserem Whitepaper zur Sicherheit, das auf Anfrage erhältlich ist.

Mit den Prüfprotokollen und der Versionskontrolle von CDD Vault können Forschende experimentelle Arbeitsabläufe validieren und die Reproduzierbarkeit der Forschung sicherstellen.

### CDD Vault: Europa-spezifischer Einsatz

Um den Anforderungen unserer europäischen Kunden gerecht zu werden, wird CDD Vault eine EU-spezifische Version anbieten. Für weitere Informationen wenden Sie sich bitte an [info@collaborativedrug.com](mailto:info@collaborativedrug.com).

- **Garantierte Datenhoheit:** Ihre Daten verbleiben innerhalb der EU, wodurch die Einhaltung der DS-GVO und regionaler Datenschutzbestimmungen gewährleistet wird.
- **Höhere Leistungsfähigkeit:** Verkürzte Latenzzeit für europäische Nutzer.

- **Compliance, der Sie vertrauen können:** In unserer SOC 2 Typ II Zertifizierung enthalten.
- **Reibungsloses Erlebnis:** Gleiche Funktionalität, Sicherheit und Unterstützung wie bei unserer globalen Bereitstellung.

# VII. Abschließende Zusammenfassung: Die wichtigsten Vorteile von CDD Vault für die wissenschaftliche Forschung

- Sichere, Cloud-basierte Datenspeicherung, optimiert für die Forschung
- Hochentwickelte Visualisierungstools für datengestützte Erkenntnisse
- Vollständig integriertes ELN für eine umfassende Datendokumentation
- Optimierte Zusammenarbeit über Teams und Einrichtungen hinweg

CDD Vault bietet wissenschaftlich Forschenden eine sichere, skalierbare und benutzerfreundliche Plattform, die das Datenmanagement, die Zusammenarbeit und die Forschung verbessert.

Von optimierten Arbeitsabläufen bis hin zu hochentwickelten Visualisierungstools wird sichergestellt, dass sich die Forschungsteams auf Innovationen statt auf die Datenlogistik konzentrieren können.

Durch die Einführung von CDD Vault können Einrichtungen Compliance-Standards erfüllen, geistiges Eigentum schützen und die disziplinübergreifende Zusammenarbeit fördern – und das alles bei gleichzeitiger Kostensenkung durch effizientes, zentralisiertes Datenmanagement.

Schließen Sie sich der wachsenden Zahl wissenschaftlicher Einrichtungen an, die CDD Vault nutzen, um ihre Forschung voranzutreiben und die Vorteile einer integrierten Plattform auszuschöpfen, die für moderne Herausforderungen in der Arzneimittelforschung und den Biowissenschaften entwickelt wurde.

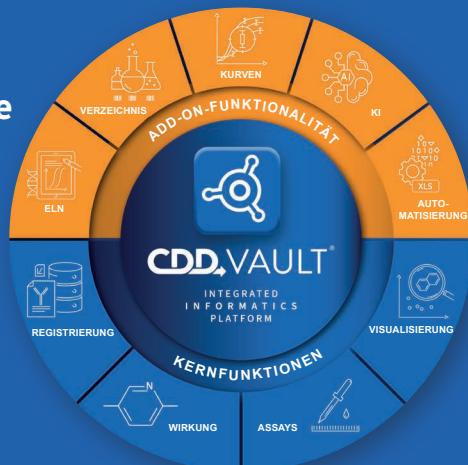
**Fordern Sie noch heute eine kostenlose Evaluierungslizenz an oder kontaktieren Sie unser Team für eine personalisierte Demo**

## KONTAKTDATEN:

 [cddvault.com](http://cddvault.com)

 [sales@collaboratedrug.com](mailto:sales@collaboratedrug.com)

 +44 (0) 1223 803830  
+1 (650) 242 5259



Kostenlose Visualisierung



CDD Vault - Kostenlose Evaluierungslizenz

## Referenzen

- |   |                         |
|---|-------------------------|
| - API über DataWarrior – die Grundlagen | - Vault-Benutzerrollen  |
| - CDD-Visualisierung starten            | - CDD Vault Fallstudien |
| - API-Dokumentation                     | - Kundenfallstudie UIC  |