

Prof. Dr. Stefan Bräse
Digital chemistry – A trip to the blue

Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe

November 6th, 2025

The digital transformation of chemistry is redefining how molecules are designed, synthesized, and understood. Advances in data-driven tools, automation, and artificial intelligence are enabling a new research paradigm — one where chemical discovery is faster, more reproducible, and more accessible than ever before. This joint lecture will present two complementary perspectives on how digital technologies and autonomous systems are reshaping molecular science and its applications in OLED research.

Stefan Bräse will take us on *“A Trip to the Blue”*, highlighting how digital infrastructures can revolutionize the way chemists store, share, and analyse molecular data. Key initiatives include the **Molecule Archive**, a robust repository for the systematic capture and preservation of chemical knowledge; **Chemotion**, an open-source electronic lab notebook and repository platform; and **chemASAP**, a high-throughput cheminformatics pipeline for rapid molecular annotation and analysis. Together, these tools create an integrated ecosystem that enhances collaboration, supports reproducibility, and accelerates the chemical innovation cycle.

Secondly, the second part is devoted to OLED research from an academic point of view. From multi-resonant emitter and TADF, some examples highlight the chemistry.

Bringing these perspectives together, the lecture will explore how digital chemistry infrastructures and autonomous experimentation converge to form a powerful innovation pipeline — from molecular design to real-world technical solutions.

Kurz:

The digital transformation is fundamentally changing how molecules are designed, synthesized, and understood. Advances in automation, AI, and digital infrastructures are creating a new research paradigm that makes discoveries faster and more reproducible. Stefan Bräse highlights how Chemotion, the Molecule Archive, and chemASAP form an integrated ecosystem that revolutionizes the handling of molecular data. Complementing this, OLED research with examples such as multi-resonance emitters and TADF illustrates how digital tools and autonomous systems together build an innovation pipeline from molecular design to real-world applications.

Die digitale Transformation der Chemie definiert neu, wie Moleküle entworfen, synthetisiert und verstanden werden. Fortschritte bei datengesteuerten Tools, Automatisierung und künstlicher Intelligenz ermöglichen ein neues Forschungsparadigma, in dem chemische Entdeckungen schneller, reproduzierbarer und zugänglicher sind als je zuvor. Dieser gemeinsame Vortrag präsentiert zwei sich ergänzende Perspektiven dazu, wie digitale Technologien und autonome Systeme die Molekularwissenschaft und ihre Anwendungen in der OLED-Forschung neu gestalten.

Stefan Bräse nimmt uns mit auf eine „Reise ins Blaue“ und zeigt, wie digitale Infrastrukturen die Art und Weise revolutionieren können, wie Chemiker molekulare Daten speichern, austauschen und analysieren. Zu den wichtigsten Initiativen gehören das Molecule Archive, ein robustes Repository für die systematische Erfassung und Speicherung chemischen Wissens, Chemotion, ein Open-Source-Laborjournal und Repository-Plattform, sowie chemASAP, eine Hochdurchsatz-Cheminformatik-Pipeline für die schnelle molekulare Annotation und Analyse. Zusammen bilden diese Tools ein integriertes Ökosystem, das die Zusammenarbeit verbessert, die Reproduzierbarkeit unterstützt und den chemischen Innovationszyklus beschleunigt.

Der zweite Teil widmet sich der OLED-Forschung aus akademischer Sicht. Anhand von Beispielen wie Multi-Resonanz-Emittern und TADF wird die Chemie beleuchtet.

Unter Zusammenführung dieser Perspektiven wird in der Vorlesung untersucht, wie digitale Chemie-Infrastrukturen und autonome Experimente zu einer leistungsstarken Innovationspipeline zusammenwachsen – vom Moleküldesign bis hin zu realen technischen Lösungen.

Kurz:

Die digitale Transformation verändert grundlegend, wie Moleküle entworfen, synthetisiert und verstanden werden. Fortschritte in Automatisierung, KI und digitalen Infrastrukturen eröffnen ein neues Forschungsparadigma, das Entdeckungen beschleunigt und reproduzierbarer macht. Stefan Bräse zeigt anhand von Chemotion, Molecule Archive und chemASAP, wie ein integriertes Ökosystem den Umgang mit molekularen Daten revolutioniert. Ergänzend wird die OLED-Forschung mit Beispielen wie Multi-Resonanz-Emittern und TADF vorgestellt, um zu verdeutlichen, wie digitale Werkzeuge und autonome Systeme gemeinsam eine Innovationspipeline vom Moleküldesign bis zur Anwendung schaffen.

Bio

Stefan Bräse works at the Institute of Biological and Chemical Systems at the Karlsruhe Institute of Technology, where he is interested in automation and digital solutions. Software developments and services developed within the group are e.g., the Chemotion Electronic Lab Notebook (ELN) and Chemotion repository. Stefan Bräse has been a Professor in Chemistry at KIT since 2003.