



FDM in der Chemie und die Rolle der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur

Dr. Janna Neumann
Bibliothekskongress, Leipzig
18. März 2019

- **FDM in der Chemie**
 - Umgang mit Forschungsdaten
 - Herausforderungen
 - Digitaler Wandel (im Labor)
- **Nationale Forschungsdateninfrastruktur**
 - Konsortien
 - Bund-Länder-Vereinbarung
- **Fachkonsortium Chemie in der NFDI**
 - Struktur und Entwicklungen

Umgang mit Forschungsdaten

- Chemie als Fachgebiet sehr heterogen
 - Heterogene Landschaft von Forschungsdaten
- Viele Fächer im Grenzgebiet zu anderen Fachdisziplinen
- Konkrete Daten und Metadatenerfassung in manchen Teilbereichen noch unklar
- Klarere Datenstrukturen in der Molekülchemie (NMR, MS, UV etc.) aber oftmals noch analoge Auswertung
- Weiter Verbreitung von analogen Laborbüchern, ELNs noch die Ausnahme

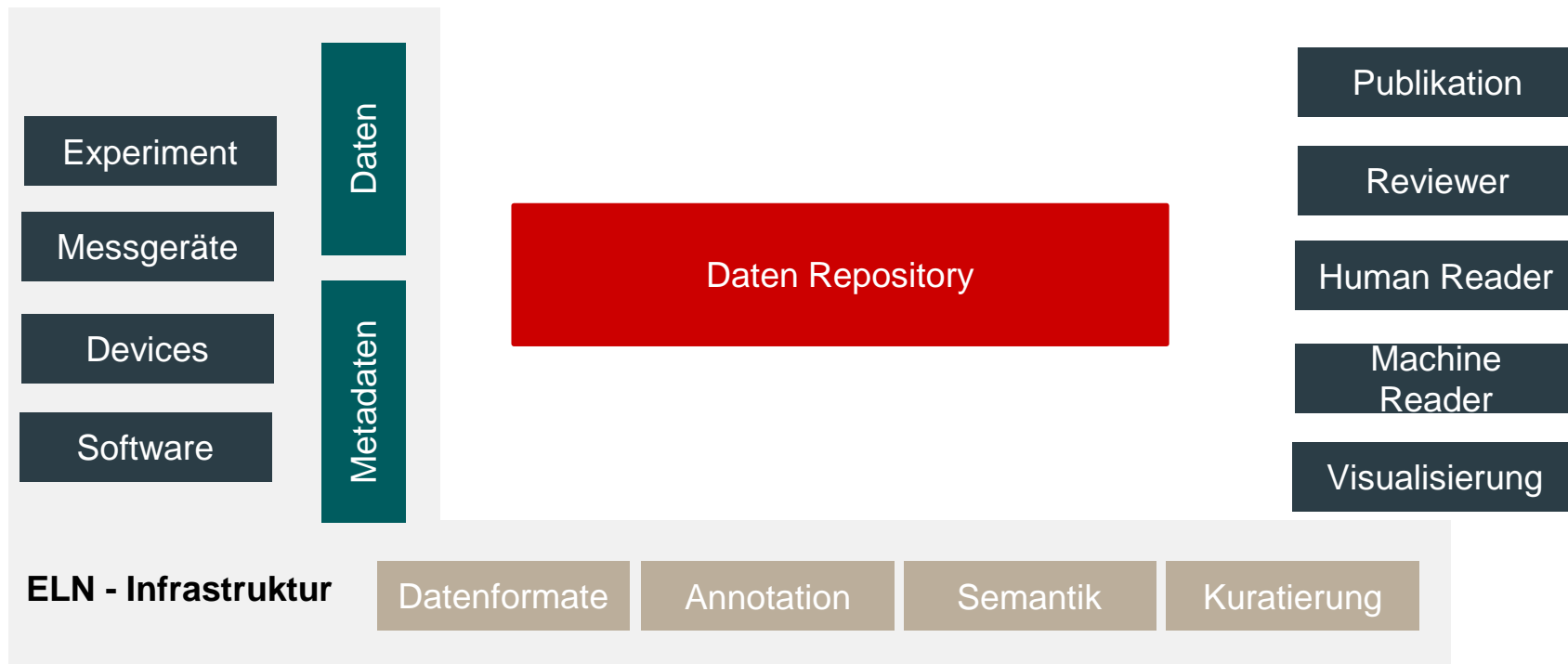
Herausforderungen

- Adressierung der heterogenen Landschaft
 - Wer braucht was?
- Adressierung der verschiedenen Level an FDM-Erfahrungen und Affinität
- Umgang mit interdisziplinärer Forschung und Teilbereichen mit Überlappungen zu anderen Disziplinen
 - Welche Dienste können für wen und wo entwickelt werden?
- Entwicklung von (Eigen-)Motivation und Incentives in der Fachcommunity

FDM in der Chemie



Digitaler Wandel (im Labor)



- verantworten (langfristig) Forschungsdatendienste für ganze fachlich-thematische Domänen,
- haben **normbildende Funktion** für eine Community/ Fachgemeinschaft,
- führen relevante Akteure (Nutzer und Anbieter) zusammen zu strukturbildender und dauerhafter Kooperation
- bieten **nachhaltige Dienste, ermitteln und kanalisieren Bedarfe, erarbeiten konsentierete Standards,**
- **Zusammenwirkung mit anderen Konsortien** zur Abdeckung **generischer Bedarfe**
- wachsen weiter durch Integration möglichst vieler Projekte in ihrer Domäne

NFDI – BL-Vereinbarung



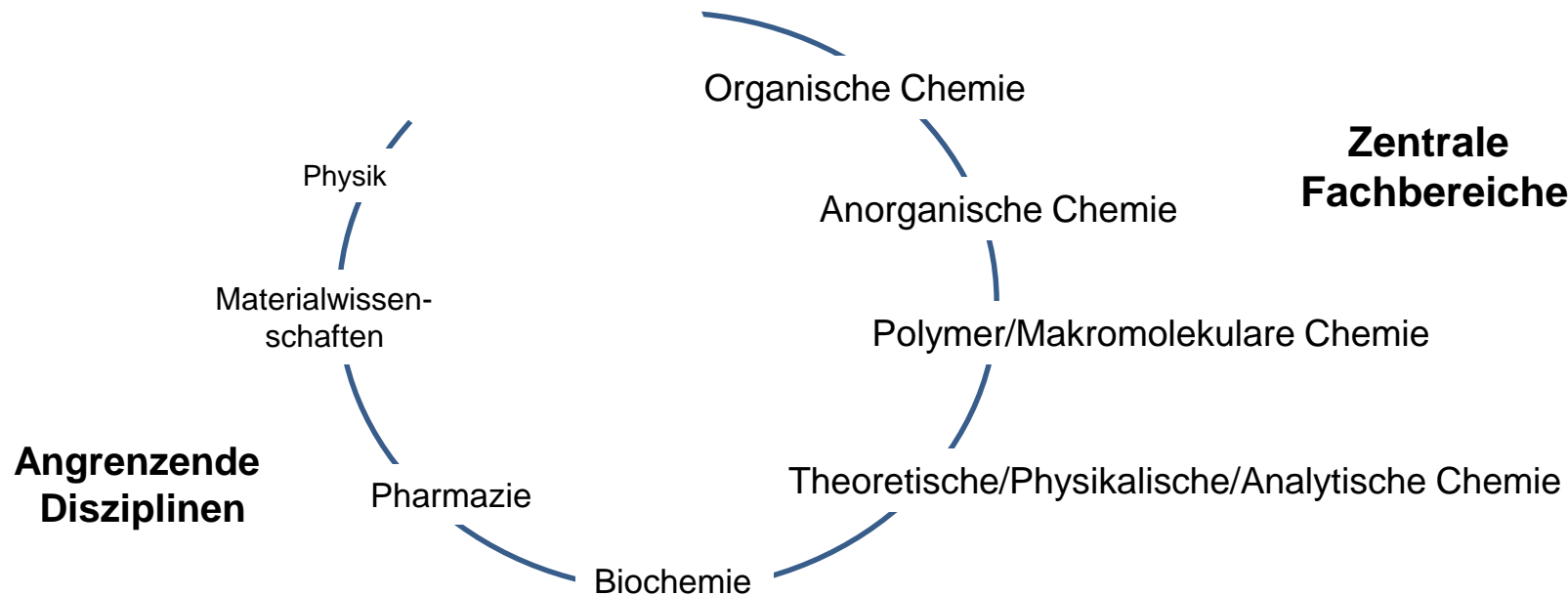
- Aufbau einer koordinierten, **vernetzten** Informationsinfrastruktur zur Entwicklung eines **nachhaltigen interoperablen FDM**;
- **Etablierung von in den wissenschaftlichen Disziplinen akzeptierten Prozessen und Verfahren zum standardisierten Umgang mit Forschungsdaten**;
- Schaffung nachhaltiges Dienste-Angebots, zur Abdeckung **übergreifender und fachspezifischer Bedarfe des Forschungsdatenmanagements**
- Entwicklung **disziplinübergreifender Metadatenstandards** zur breiten (Nach-)Nutzbarkeit von Forschungsdaten
- **Anbindung an europäische und internationale Plattformen**
- Optimierung der **Nachnutzbarkeit** bereits erhobener Forschungsdaten
- gemeinsamen Basis für Datenschutz sowie der Souveränität, Integrität, Sicherheit und **Qualität von Daten**

Vision:

- Anstoß des **digitalen Wandels im Umgang mit Forschungsdaten in der Chemie**. Forcierung von Veränderungsprozessen und Schaffung sowie Vernetzung von Infrastruktur

Die NFDI4Chem hat den Anspruch allen Disziplinen der Chemie offen zu stehen. Bei fachlichen Überlappungen mit anderen Konsortien strebt sie die gemeinsame Betrachtungen und Gestaltungen an. In der Anfangsphase steht die experimentelle und/oder theoretische Betrachtung von Molekülen, deren Eigenschaften und Verhalten im Fokus.

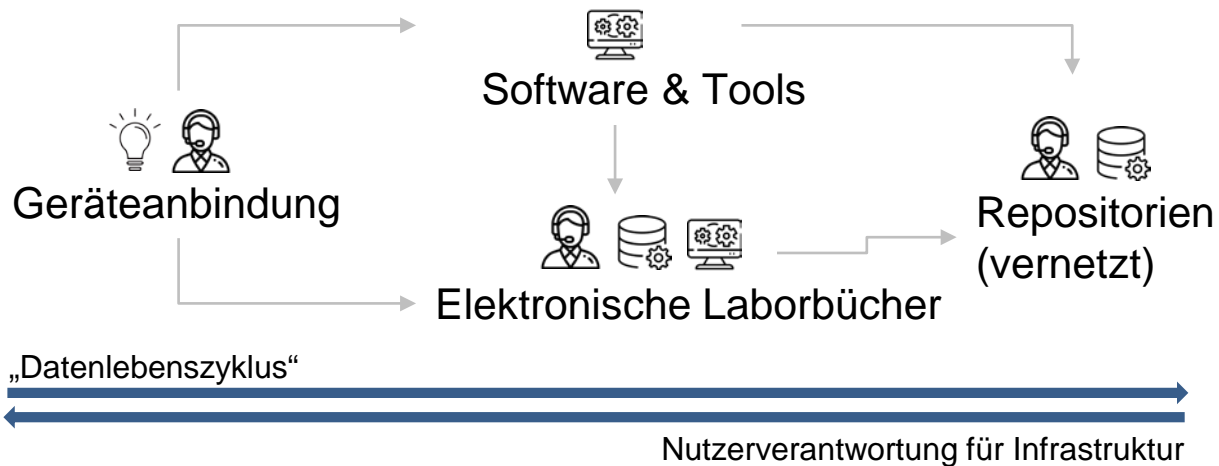
NFDI 4Chem: fachliche Abdeckung



Themenschwerpunkte / Struktur



Speziell

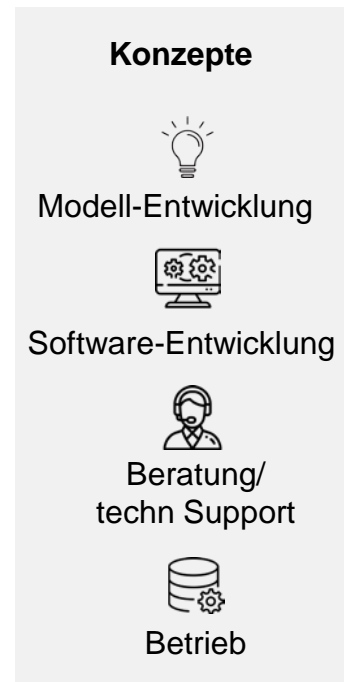


Übergreifend


Datenstandards
& Formate


Communities


Juristische Aspekte



Konsortium - Entwicklungen



- Ermittlung der Bedarfe der Wissenschaftler
- Ermittlung und Definition von benutzter Software, Repositorien, Standards und Datenformaten
- Schaffung eines Bewusstseins für FDM
- Verknüpfung von bestehender Software und Repositorien entsprechend des Bedarfs und Entwicklung fehlender Komponenten (Gap-Analyse)
- Service, Beratung, Training
- Implementierung von FDM Kompetenzen in das Curriculum
- Verankerung neuer Rollen (Daten-Manager, Daten-Stewards, Daten-Scientists)

Internationale Vernetzung



- CPCDS Committee on Publications and Chemoinformatics Data Standards, IUPAC
- SCDS Subcommittee on Chemoinformatics Data Standards, IUPAC
- Chemistry GO FAIR Implementation Network ChIN (IUPAC, CRDIG)

- CRDIG Chemistry Research Data Interest Group, Research Data Alliance (RDA)
- **DIGChem: Projektgruppe von CRDIG**

Vielen Dank!

Kontakt: www.nfdi4chem.de

E-Mail: contact@nfdi4chem.de