

Fachkollegien Chemie

Handlungsempfehlung zum Umgang mit Forschungsdaten

Die vorliegende Handreichung soll als fachspezifische Empfehlung, ergänzend zu allgemein gültigen und vorhandenen Leitlinien, wie etwa den Leitlinien zum Umgang mit Forschungsdaten ([Leitlinien zum Umgang mit Forschungsdaten \(dfg.de\)](https://www.dfg.de/leitlinien-zum-umgang-mit-forschungsdaten)), oder dem Kodex „Leitlinien zur Sicherung guter Wissenschaftlichen Praxis“ ([Home | Wissenschaftliche Integrität \(wissenschaftliche-integritaet.de\)](https://www.wissenschaftliche-integritaet.de/)), als Orientierung für Antragstellende und Gutachtende dienen.

Ebenso soll sie als Impuls zu einem im Fachgebiet anerkannten Umgang mit Forschungsdaten beitragen.

Als Forschungsdaten werden in den chemischen Disziplinen zum überwiegenden Teil Messdaten und Laborwerte verstanden. Diese nehmen in ihrer Anzahl und Größe stetig zu, worin die Fachkollegien der Chemie eine der wesentlichen Herausforderungen für das Forschungsdatenmanagement sehen. Die entstehenden Forschungsdaten verantwortungsvoll zu dokumentieren, zu speichern, zu archivieren und für eine spätere Überprüfung oder Nachnutzung aufzubereiten sind aus Sicht der Fachkollegien essentielle Bestandteile von Forschungsvorhaben. Ebenso essentiell ist dieser verantwortungsvolle, transparente und nachhaltige Umgang mit Forschungsdaten für eine erfolgreiche Digitalisierung.

Daher begrüßen es die Fachkollegien der Chemie, den Umgang mit Forschungsdaten in Forschungsvorhaben stärker in den Blick zu nehmen.

Aus Sicht der Fachkollegien ist aufgrund zahlreicher Aktivitäten im Bereich des Forschungsdatenmanagements, unter anderem der Förderung der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI), aktuell der richtige Zeitpunkt, um die Wahrnehmung für den Umgang mit Forschungsdaten in der gesamten Breite der Community zu schärfen. So sind die geförderten NFDI-Konsortien und die von ihnen geschaffenen, oder sich im Aufbau befindlichen, fachspezifischen Angebote und Dienstleistungen aus Sicht der Fachkollegien ein enormer Gewinn für die Community. Die Nutzung dieser Infrastrukturen kann für Forschungsvorhaben sowohl in der Einzelförderung, als auch den koordinierten Verfahren von hohem Wert sein. Auch andere zertifizierte Datenzentren bieten hervorragende Möglichkeiten zur Unterstützung des Forschungsdatenmanagements.

Neben Forschungsvorhaben in der Einzelförderung bieten auch die koordinierten Verfahren eine hervorragende Plattform um für den Verbund ein gemeinsames Forschungsdatenmanagement auf hohem Niveau aufzubauen. Insbesondere ortsverteilte Verbünde können daraus einen hohen Nutzen ziehen. Zusätzlich bieten die koordinierten Verfahren die einmalige Gelegenheit, auch Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in frühen Karrierephasen, die der Thematik meist sehr interessiert gegenüberstehen und oftmals über hervorragende technische Vorkenntnisse verfügen, für ein sorgfältiges Datenmanagement zu sensibilisieren und geeignete Werkzeuge an die Hand zu geben.

Angaben zum Umgang mit Forschungsdaten in Anträgen der DFG

Bestehende Standards sollten in allen Forschungsvorhaben berücksichtigt und genannt werden. Unter Berücksichtigung dieser Standards sollten zu den folgenden Punkten konkrete und verbindliche Angaben gemacht werden, die jeweils die wesentlichen Informationen wiedergeben sollten (weitere Beschreibungen finden Sie im Fragenkatalog [forschungsdaten_checkliste_de.pdf \(dfg.de\)](#)):

1. Datenbeschreibung
2. Dokumentation und Datenqualität
3. Speicherung und technische Sicherung während des Projektverlaufs
4. Rechtliche Verpflichtungen und Rahmenbedingungen
5. Datenaustausch und dauerhafte Zugänglichkeit der Daten
6. Verantwortlichkeit und Ressourcen

1. Datenbeschreibung

Zu den im Projekt entstehenden oder verwendeten Daten sollten Art und Umfang bereits im Vorfeld zur Antragstellung beleuchtet werden, auch um den Aufwand und ggf. zu anfallende projektspezifische Kosten für das Datenmanagement beurteilen zu können. Im Antrag sollten wenigstens summarische Angaben zu Art und Umfang der im Laufe des Projektes vermutlich anfallenden Forschungsdaten genannt sein.

2. Dokumentation und Datenqualität

Wesentliche Schritte zur Aufbereitung, Qualitätssicherung und Dokumentation der Forschungsdaten sollten im Antrag kurz erläutert werden (s. auch Kodex Leitlinien zur Sicherung guter Wissenschaftlichen Praxis, Leitlinie 12).

Aus Sicht der Fachkollegien ist die Dokumentation der Forschungsdaten in geeigneter Qualität der grundlegendste Schritt für ein sorgfältiges Forschungsdatenmanagement.

Digitale Laborjournale bieten vielerlei Vorteile für eine geordnete Ablage von Daten, ihre Digitalisierung, ihre Recherchierbarkeit und die Einbindung verschiedener Messdaten. Die Fachkollegien erachten digitale Laborjournale als zukunftsweisend. Aktuell müssen jedoch noch verschiedene Herausforderungen überwunden werden, da die zurzeit verfügbaren Lösungen noch nicht für sämtliche Daten in allen Bereichen der Chemie anwendbar und von Nutzen sind. Auch ist die Verwendung digitaler Laborjournale im Laboralltag nicht immer praktikabel. Eine Digitalisierung und Archivierung handschriftlicher Laborbücher ist im Hinblick auf die Archivierung von Daten zwar weiterhin sinnvoll, kann aber nur ein erster Schritt sein. Es wird deshalb empfohlen, frühzeitig auf elektronische Laborbücher umzustellen. Derzeit in der Chemie viel genutzte elektronische Laborjournale sind unter anderem Chemotion, elabFTW und E-Notebook.

Eine Archivierung handschriftlicher Laborbücher ist im Hinblick auf die Archivierung von Daten zwar weiterhin sinnvoll, ist aber auf alle Fälle durch eine geeignete Digitalisierung zu ergänzen.

Für die Dokumentation der Daten sowie ihre Zuordnung und spätere Nutzung ist, nach Ansicht der Fachkollegien der Chemie, ihre eindeutige Identifikation unerlässlich. Dies ist beispielsweise im Sinne eines Identifikators für Proben und Messungen realisierbar. Auch der chronologische Messablauf für eine Probe ist so klar nachvollziehbar, ebenso wie die Gesamtzahl der Messungen sowie die ggf. vorgenommene Nichtberücksichtigung von Messdaten. Zu einer transparenten Dokumentation der Daten kann ebenfalls eine geordnete Ablage, beispielsweise projekt- oder publikationsbezogen, beitragen.

Die Verantwortung für die Qualitätskontrolle liegt nach Ansicht der Fachkollegien bei den beteiligten Mitarbeitenden und den Antragstellenden (Projektleitenden). Für Projektmitarbeitende, die die Forschungsdaten tagtäglich erheben, ist eine umfangreiche Einweisung in das Forschungsdatenmanagement essenziell. Dies muss jeweils zentrale Aufgabe der Antragstellenden (Projektleitenden) sein. In koordinierten Programmen sollte dies über den/die Sprecher/in oder den/die Koordinator/in organisatorisch arrangiert werden, z.B. in den integrierten Doktorandenschulen bzw. über zentrale Projekte. Promovierende und Postdocs, aber auch wissenschaftliche Hilfskräfte, werden so in einem frühen Karrierestadium bereits für eine sorgfältige und nachhaltige Datendokumentation geschult.

Die Datenqualität kann nicht einheitlich für alle Felder der Chemie definiert werden. Aus Sicht der Fachkollegien liegt die erforderliche Datenqualität, in Abhängigkeit des jeweiligen Projekts, in der Kompetenz und Verantwortung der Antragstellenden, ebenso wie die spätere Auswahl der Daten für eine Archivierung und dauerhafte Zugänglichkeit (s. Punkt 5).

3. Speicherung und technische Sicherung während des Projektverlaufs

Im Antrag sollte erläutert werden, wie die Speicherung der Forschungsdaten erfolgt (Sicherung, Schreibschutz, Zugriffsrechte, Ordnungssystem, etc.). Wie bereits unter 2. beschrieben, ist eine geordnete Ablage und ebenso eine geordnete und nachvollziehbare Speicherung anzuraten (beispielsweise projekt- oder publikationsbezogen). Bestehende Vorgaben der jeweiligen Forschungseinrichtung sollten erwähnt werden. Generell ist für Forschungsdaten aus allen DFG-geförderten Vorhaben eine Archivierung für zehn Jahre verpflichtend (Kodex Leitlinien zur Sicherung guter Wissenschaftlichen Praxis, Leitlinie 17). Dies schließt sowohl die analog, wie digital vorliegenden Daten ein.

4. Rechtliche Verpflichtungen und Rahmenbedingungen

Rechtliche Verpflichtungen und Rahmenbedingungen sollten bereits im Vorfeld des Vorhabens überprüft und im Antrag kurz benannt werden. Die rechtlichen Verpflichtungen beziehen sich übergreifend auf die Aufnahme, Dokumentation, Speicherung, Archivierung und Nachnutzung der erhobenen oder verwendeten Daten.

5. Datenaustausch und dauerhafte Zugänglichkeit der Daten

Aus dem Vorhaben sollte klar hervorgehen, warum welche Daten als extern archivierungswürdig angesehen werden. Eine dauerhafte Zugänglichkeit der Daten bedingt nicht nur ihre Archivierung, sondern eben auch nach Möglichkeit einen verlässlichen Zugang (s. auch Kodex Leitlinien zur Sicherung guter Wissenschaftlichen Praxis, Leitlinie 13).

Alle relevanten und reproduzierbaren Daten, die Publikationen zugrunde liegen, sollten aus Sicht der Fachkollegien neben den Daten, die bereits über Publikationen zugänglich sind, dauerhaft zugänglich archiviert werden. Dazu gehören beispielsweise weitere projektbezogenen Messungen oder Daten aus Messreihen, die zu einem Forschungsprojekt mit resultierender Publikationen gehören, jedoch noch nicht konkret über eine Publikation einsehbar und nachnutzbar sind. Eine sinnvolle Auswahl dieser Daten sollte mit Augenmaß eigenverantwortlich von den Projektleitenden erfolgen und begründet sein. Aus Sicht der Fachkollegien lässt sich der überwiegende Teil der Daten, insbesondere diese, die auf etablierten Methoden und der Messung mit kommerziell erhältlichen Geräten basieren, standardmäßig handhaben. Eine Archivierung und dauerhafte Zugänglichkeit der Daten ist für diesen Großteil der Daten technisch gut realisierbar. Für einen geringen Teil von Daten, die nicht einem solchen Standard zugeordnet werden können, mag eine Archivierung und Gewährleistung von dauerhaftem Zugang aufgrund des aufzuwendenden Aufwands, oder der Datengröße, nicht möglich oder nicht praktikabel sein. In diesen Ausnahmefällen sollte eine Erläuterung eingereicht werden.

Die Archivierung der digitalen Daten sollte in zertifizierten Repositorien oder Datenzentren erfolgen. Es ist anzuraten, dass sich Antragstellende bereits vor Projektbeginn mit den projektspezifischen Anforderungen an ein Repository befassen und auf Basis dieser Anforderungen geeignete Repositorien identifizieren und ggf. Kontakt zu den Betreibenden aufnehmen. Auch hier sind die fachspezifischen Service-Angebote der NFDI-Konsortien, deren Nutzung von den Fachkollegien sehr begrüßt wird, hervorzuheben. Insbesondere die Konsortien NFDI4chem, NFDI4cat und FAIRmat bieten aufgrund ihrer fachlichen Ausrichtung geeignete Infrastrukturen. Einen weiteren Überblick über existierende Strukturen bietet das Portal für Forschungsinfrastrukturen RIsources (<https://risources.dfg.de>) sowie das Verzeichnis von Forschungsdatenrepositorien re3data (<http://re3data.org>). Es wird empfohlen frühzeitig Kontakt zu Serviceeinrichtungen aufzunehmen um zeitlichen und finanziellen Bedarf rechtzeitig im Forschungsvorhaben berücksichtigen zu können.

Für eine spätere Nachnutzbarkeit sollten archivfähige, standardisierte Datenformate verwendet werden. Die technische Kompatibilität verschiedenster Datensätze und Softwarelösungen stellt aus Sicht der Fachkollegien eine weitere große Herausforderung des Datenmanagements dar. Sollten im Projekt Lösungen für eine praktikable Umwandlung von Datenformaten entwickelt werden, ist es wünschenswert, diese Lösungen zur Nutzung bereitzustellen, um eine generelle Standardisierung von Datenformaten weiter voranzutreiben. Wichtig ist aber immer eine parallele Speicherung aller Original-Rohdaten.

6. Verantwortlichkeit und Ressourcen

Im Antrag sollte klar dargelegt werden, wer im Projektverlauf für die einzelnen Schritte des Forschungsdatenmanagements zuständig und verantwortlich ist. Auch der Aufwand sollte berücksichtigt werden, auch im Hinblick auf die Beantragung projektspezifischer Mittel. Die Verantwortung für ein sorgfältiges Datenmanagement selbst sowie eine abschließende Qualitätskontrolle liegt aus Sicht der Fachkollegien bei den Projektleitenden.