

Stefan Bräse, Nicole Jung

Digitalisierung und Künstliche Intelligenz in Akademischer Synthese-Forschung am Beispiel von Chemotion ELN

Die Digitalisierung ist in vielen Bereichen des täglichen Lebens bereits fest verankert und bildet auf vielfältige Art die Basis für Künstlicher Intelligenz (KI)-basierten Fortschritt. Bisher sind allerdings umfassende Strategien zur Digitalisierung der Abläufe in Forschungseinrichtungen, insbesondere akademischen Forschungseinrichtungen, selten etabliert. Auch in der chemischen Forschung werden manuelle, konventionelle Dokumentationen und Verfahren meist noch nicht durchgängig durch digitale Prozesse abgebildet und KI-unterstützte Strategien bilden eine bisher untergeordnete Rolle. Dies gilt insbesondere für die synthetische Chemie. Es gibt einige Beispiele in der Literatur, die belegen, wie Digitalisierung und damit einhergehend auch Methoden der KI die Arbeitsweise in der Synthesechemie verändern und optimieren können¹, allerdings hat sich deren Anwendung meist noch nicht durchgesetzt. Ein häufiger Grund hierfür ist häufig die Verwendung von proprietären Modellen und der damit verbundene fehlende Zugang zu den Entwicklungen für den großen Teil der Gemeinschaft der Chemiker.

Die Umstellung von Arbeitsbereichen auf digitale Prozesse mit einem hohen Anteil an experimenteller Forschung bedeutet eine große Herausforderung, da vielfältige Aspekte und etablierte Methoden neu betrachtet werden müssen. Die Arbeitsgruppe von Stefan Bräse am Karlsruher Institut für Chemie (KIT) in Karlsruhe hat sich zum Ziel gesetzt, Verfahren zur Digitalisierung von Arbeitsabläufen zu entwickeln und als Open Source anderen Wissenschaftler(inne)n zur Verfügung zu stellen.² So soll ein für alle Wissenschaftler(innen) frei zugängliches Software-Portfolio für eine gemeinschaftliche Weiterentwicklung etabliert werden. Die Beiträge zur Gestaltung der Digitalisierungsprozesse in der Chemie sollen die Grundlage zur weiteren Entwicklung und Bereitstellung von verschiedensten Methoden der künstlichen Intelligenz bilden.

Das elektronische Laborbuch (ELN) als zentrales Digitalisierungsinstrument

Ein wichtiges Instrument zur Digitalisierung von Forschungsabläufen in der experimentellen Forschung sind elektronische Laborjournale (ELN). Sollen diese in der chemischen Forschung effizient eingesetzt werden, müssen sie zusätzlich zu meist üblichen generischen ELN-Funktionen chemie-spezifische Funktionen beinhalten. Es müssen zum Beispiel Funktionen zum Abbilden und Verarbeiten von chemischen Strukturen zur Verfügung stehen, es müssen einfache Rechnungen zum automatischen Ausfüllen von Reaktionstabellen zur Reaktionsplanung und Ausbeuteberechnung eingebettet werden und auch die Darstellung von analytischen Datenfiles oder Messdaten im Allgemeinen unterstützt werden. Das ELN sollte für eine weitere Abbildung des Forschungsprozesses eine Anbindung an Messgeräte oder Geräte zur Reaktionsdurchführung unterstützen, auch sollte es an interne oder externe Datenbanken angeschlossen werden können, sodass den Wissenschaftler(inne)n ein erweiterbares Konzept zum Managen der Laborprozesse bereitsteht. Neben anderer ELN-Software verschiedener Anbieter^{3,4} bietet das von der Gruppe Bräse entwickelte ELN namens Chemotion^{5,6} solche Möglichkeiten. Neben den typischen Grundfunktionen, die für chemisches Arbeiten nötig sind (Abb. 1A), werden Abläufe zur automatischen Generierung von Projektberichten oder der Supplemental Information für Publikationen unterstützt. Das ELN bietet Möglichkeiten, den Forschungsablauf durch digitale Dokumentation zu vereinfachen und die digitale Erfassung der Prozesse erlaubt wiederum die Anpassung der Forschung an die Anforderungen zur Erzeugung von FAIRen (*Findable, Accessible, Interoperable, Reusable*) Daten. Dies kann Vorteile für die eigene Arbeit oder die der Forschungsgruppe bieten, da Dokumentation und Daten nachhaltig gesichert und auch wieder gefunden werden können. Die Erzeugung von FAIRen Daten ist darüber hinaus ein wesentlicher Aspekt für die Generierung von maschinenlesbaren Daten, die eine Grundvoraussetzung für die Entwicklung von Methoden künstlicher Intelligenz sind. Die Erfüllung der FAIR Data Prinzipien wird von mehr und mehr Journalen aber auch Fördergeldgebern erwartet und die Nutzung von ELNs kann einen wesentlichen Beitrag zum Erreichen dieses Ziels leisten.

Die digitale Erfassung von Forschungsdaten durch ein ELN ermöglicht die Einbindung von KI-basierten Methoden und deren Nutzung für die eigene Forschung. Eine Implementierung von einzelnen Methoden auch außerhalb einer ELN-Arbeitsumge-

Prof. Dr. Stefan Bräse, Dr. Nicole Jung
Institut für Chemische und Biologische Systeme
Karlsruher Institut für Technologie
Hermann-von-Helmholtz Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen
braese@kit.edu, nicole.jung@kit.edu

DOI:

Die Abbildungen wurden innerhalb des Projektes Dora4KIT (Dr. Carolin Henken, Manuela Schmidt) am ZML des KIT, unterstützt durch Bilder durch Freepik erstellt.

bung ist zwar in vielen Fällen auch denkbar, eine Verbindung von Dokumentation bzw. Planung und KI-Modell unterstützt jedoch darüber hinaus eine effiziente Einbringung in den gesamten Forschungsprozess. Dies wurde im Falle von Chemotion beispielhaft für die Generierung von kombinatorischen Molekülbibliotheken, die Vorhersage von physikalischen Parametern, die Einbindung von Synthese-Vorhersage bzw. Retrosynthese-Modellen und die KI-basierte Qualitätsanalyse gezeigt.

Syntheseplanung - Generierung von (virtuellen) Molekülbibliotheken und Vorhersage

Der Einsatz von neuen Methoden in der Synthesechemie kann schon sehr früh im Planungsstadium der Synthese beginnen. Insbesondere in der anwendungsorientierten Forschung sind Wissenschaftler(innen) auf Experimente mit verschiedenen Derivaten einer Substanzklasse angewiesen. In jenen Fällen, in denen eine Bibliothek an Verbindungen in Betracht gezogen werden kann, kann ein ELN die Tools zur Verfügung stellen, die zur Erzeugung der theoretisch möglichen Derivate und deren Bewertung nötig sind. In Chemotion ist dies durch die Funktion ChemScanner⁷ möglich, die es erlaubt, eine Grundstruktur zu definieren und an gekennzeichneten Positionen der Grundstruktur verschiedenste Reste einzuführen. Die Erstellung der theoretisch denkbaren Molekülstrukturen erfolgt durch eine kombinatorische Zusammenstellung der Grundstruktur und den gewünschten Resten. Die Einzelergebnisse der erzeugten virtuellen Molekülbibliothek können in einem nächsten Schritt durch theoretische Modelle bewertet werden, um die Relevanz der einzelnen Moleküle für eine spezielle Anwendung abschätzen zu können. Beispiele für ein solches virtuelles Screening von Molekülen wurden zur Identifizierung von Materialien für OLEDs (*Organic Light Emitting Diodes*) auf Basis von DFT (*density functional theory*)-Rechnungen implementiert (Abb. 1B). Die im ELN abgebildeten DFT-Rechnungen⁸ können wertvolle Hinweise auf die Eignung der Materialien zur Verwendung als Emitter, Dopant oder Organische Halbleiter in den jeweiligen Schichten einer OLED liefern. Prinzipiell ist aber auch die Einbringung anderer theoretischer Modelle zum Beispiel aus dem Bereich der pharmazeutischen Chemie⁹ in ein ELN denkbar. Hierzu müssen die Modelle für eine Nutzung entweder direkt eingebunden oder über einen Web-Service zur Verfügung gestellt und angebunden werden. Die Kombination von elektronischen Laborjournalen

und Simulationsmodellen bietet einen großen Mehrwert für Wissenschaftler(innen), denn die bereitgestellten Informationen können einen wesentlichen Beitrag zum Erfolg von anwendungsorientierten Syntheseprojekten leisten.

Nutzung von Modellen zur Synthese und Retrosynthese

In üblichen Forschungsvorhaben wird nach der Definition von Zielverbindungen für die Synthese im Labor eine Recherche der möglichen Syntheseschritte vorgenommen. Dies wird typischerweise mit Hilfe von Datenbanken durchgeführt, oder kann auch, unterstützt durch KI, für viele Moleküle gleichzeitig erfolgen. Besonders hilfreich ist es für Wissenschaftler(innen), wenn die jeweils relevante Informationsquelle direkt über das ELN verfügbar ist und damit die nötigen Informationen zentral zusammengeführt werden können. In Chemotion ELN werden Möglichkeiten für beide Verfahren, Datenbank- und KI-unterstützte Reaktionsplanung, eingebunden. Zur Recherche in der Datenbank SciFinder (Chemical Abstract Service) wurde eine Anwendungsprogrammierschnittstelle (API) eingebunden, die die Recherche von Reaktionen und Molekülen über die Oberfläche des ELNs ermöglicht und die Ergebnisse der Suche anzeigt. Durch einen Link zur SciFinder-Datenbank können alle weiteren verfügbaren Informationen zugänglich gemacht werden. Insbesondere durch Fortschritte in den letzten Jahren wurde Maschinelles Lernen erfolgreich zur Retrosynthese und auch Reaktionsvorhersage eingesetzt und einige automatisierte Verfahren sind mittlerweile in weiten Bereichen durchaus konkurrenzfähig zu manuell durchgeführten Syntheserecherchen. Modelle von Unternehmen wie IBM¹⁰ oder auch akademischen Gruppen¹¹ konnten in der Vergangenheit ihre Leistungsfähigkeit unter Beweis stellen und können entweder über Web-Services¹² oder die Lizenzierung der Software¹³ in die Syntheseplanung einbezogen werden. Insbesondere jene Verfahren, die durch Publikationen der zugrundeliegenden Modelle in bestehender Software abgebildet werden können, besitzen hier einen großen Nutzen für die Allgemeinheit. Eine Einbindung eines solchen offenen Modells¹⁴ wurde in Chemotion ELN vorgenommen und konnte so in die Arbeitsabläufe der Wissenschaftler(innen) direkt integriert werden. Die Synthesechemiker erhalten so unabhängig von der Verwendung verschiedener externer Datenbanken Zugang zu den KI-Entwicklungen und werden in der Planung der einzelnen Syntheseschritte direkt über das ELN unterstützt.

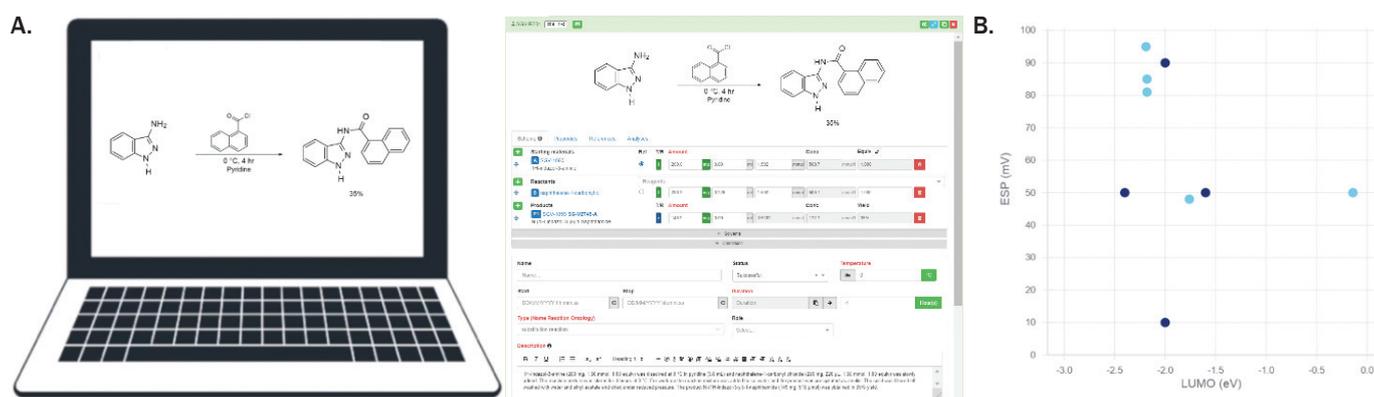


Abb. 1: A. Übersicht einer beispielhaften Synthese-Dokumentation in Chemotion ELN. B. Grafische Übersicht über durchgeführte DFT-Rechnungen (hellblau); Darstellung ausgewählter Parameter im User Interface des ELNs und Einordnung gegenüber Referenzwerten (dunkelblau).

Geräteintegration und Erarbeitung von maschinenlesbaren Beschreibungen

ELNs unterstützen viele Bereiche der Reaktionsplanung und Vorbereitung, sie sind auch eine wertvolle Stütze zur Dokumentation der synthetischen Arbeit und der Speicherung der während des Prozesses entstehenden Forschungsdaten. Der Nutzen einer solchen Software erhöht sich weiter, wenn sie mit Maschinen und Geräten interoperabel eingesetzt werden kann. Dies ist zunächst wichtig, um einzelne Laborgeräte steuern zu können und die resultierenden Daten speichern zu können. In Zukunft könnte durch Interoperabilität von ELNs mit Maschinen der Weg hin zu roboterunterstützter oder automatisierter Syntheseforschung geebnet werden. Zur Interoperabilität eines ELNs mit maschinellen Prozessen werden gut definierte Schnittstellen zur Anbindung benötigt. Für eine erfolgreiche Anbindung von Automationsanlagen müssen allerdings ebenfalls Methoden zum Generieren von maschinenlesbaren Synthesebeschreibungen eingebunden sein. Während die Anbindung von Geräten zur Remote-Steuerung für viele Anwendungen in Chemotion ELN gelöst wurde¹⁵ und auch die Integration von Analyseinstrumenten zum automatischen Transfer von Messdaten für viele Beispielimplementierungen gelang¹⁶, wird ein Fokus der nächsten Arbeiten auf einer Anpassung der Systembeschreibungen an maschinenlesbare Prozesse liegen. Arbeiten von Gruppen wie Lee Cronin¹⁷ und Alan Coope¹⁸ zeigen bereits jetzt beispielhaft, inwieweit sich maschinenlesbare Synthesedaten von bisherigen digitalen Formaten unterscheiden, und weisen Wege auf, wie beide Konzepte im Laboralltag miteinander in Einklang gebracht werden können.

Einbindung von KI-basierter Qualitätsanalyse zur automatischen Auswertung von Ergebnissen

Nicht nur digitalisierte und maschinenlesbare Protokolle, sondern insbesondere auch die Erzeugung lesbarer, digitaler Messdaten spielt eine wichtige Rolle. Nur auf Basis von digital erfassten und lesbaren Messdaten könnten in Zukunft effiziente, KI-basierte Qualitätsanalysen durchgeführt werden. Diese sind wichtig, um Schritt für Schritt Wissenschaftler(innen) zu entlasten, sie sind aber auch eine notwendige Voraussetzung zur Realisierung KI-basierter, autonomer Syntheseprozesse. Erste Schritte hin zu einer automatisierten Qualitätsanalyse und der damit einhergehenden Möglichkeit der Bewertung von Forschungsdaten ohne manuelles Prüfen wurden in Chemotion ELN für den Bereich analytische Daten zur Molekülcharakterisierung implementiert. Hierzu wurde eine Kombination verschiedener Verfahren gewählt. Die sich ergänzenden Modelle sollen so zu einer schnellen und (treff)sicheren Analyse kommen und die jeweiligen Besonderheiten der einzelnen Nachweisverfahren berücksichtigen. Es wurden Modelle zur Überprüfung von Daten anhand errechenbarer Molekülkenngrößen, wie z.B. der molekularen Masse oder der Anzahl der zu erwartenden Atome in NMR-Analysen verwendet. Darüber hinaus wurden die erhaltenen Daten mit simulierten Daten verglichen und eine Abschätzung der Plausibilität der Daten vorgenommen. Simulationsmodelle stehen zum Beispiel durch die NMRshiftDB für ¹H- und ¹³C-NMR Daten zur Verfügung

und können über Web-APIs eingebunden werden. Simulationsmodelle zur Plausibilitätsprüfung von IR-Daten wurden durch das Chemotion-Projektteam über Methoden des Maschinellen Lernens generiert und in die Gesamtbewertung eingebracht. So können, unterstützt durch wenige manuelle Schritte, sehr schnell automatische Prüfungen für Molekülcharakterisierungen vorgenommen werden. Solche Methoden geben nicht nur eine systematische Hilfestellung zur Prüfung der eigenen Forschungsdaten, sie können auf lange Sicht die automatisierte Analyse von Reaktionsergebnissen aus Syntheseprozessen zur automatisierten Substanzherstellung unterstützen.



Abb. 2: ELN-Einbindung KI-unterstützter, automatisierter Qualitätsanalysen für Daten aus der Molekülcharakterisierung.

Ein Repository für Forschungsdaten aus der Synthesechemie

Während das Bereitstellen nicht-digitaler Daten meist erheblichen Arbeitsaufwand bedeutet, können digital vorhandene Daten einfacher mit anderen geteilt werden. Das Chemotion ELN bietet einen Mehrwert im Vergleich zu vielen anderen chemiespezifisch ausgelegten elektronischen Laborbüchern: durch Interoperabilität mit einem Repository für Datensätze aus der Chemie¹⁹ bietet es die Möglichkeit, die digital verfügbaren Forschungsdaten direkt -ohne den Aufwand des zusätzlichen Daten-Uploads und der Annotation- unter Generierung einer DOI zu publizieren (Abb. 3). Damit ist es möglich, Daten der Forschungsergebnisse offenzulegen, sobald dies durch den Wissenschaftler(innen) gewünscht ist. Dies kann entweder parallel zu einer Publikation der Ergebnisse in Fachzeitschriften, zu einem späteren Zeitpunkt oder auch unabhängig von einer Manuskript-Publikation erfolgen. Ein solcher Prozess stellt auch einen Zugang zu jenen Ergebnissen aus Forschungsprojekten her, die in der Regel unzugänglich bleiben. Die Bereitsteller der Daten können einen einfachen Weg nutzen, die Anforderungen von Journalen und Fördergeldgebern bezüglich der Offenlegung von Forschungsdaten und der Beachtung der FAIR-Data Prinzipien zu erfüllen. So werden, durch die Verfügbarkeit von Forschungsdaten und Informationen in digitaler Form, Vorteile für den einzelnen Wissenschaftler(innen) aber auch Vorteile für die ganze Forschungsgemeinschaft geschaffen. Diese Vorteile zeigen sich nicht nur durch einen schnellen Zugang zu Daten. Auf lange Sicht können durch Repositorien die nötigen Daten bereitgestellt werden, die für eine Weiterentwicklung von KI-basierten Werkzeugen nötig sind. Wissenschaftler(innen) erhalten durch eine Bereitstellung ihrer Daten die Möglichkeit, die eigene KI-Community zu unterstützen und die Qualität der KI-Forschungsinstrumente zu verbessern.

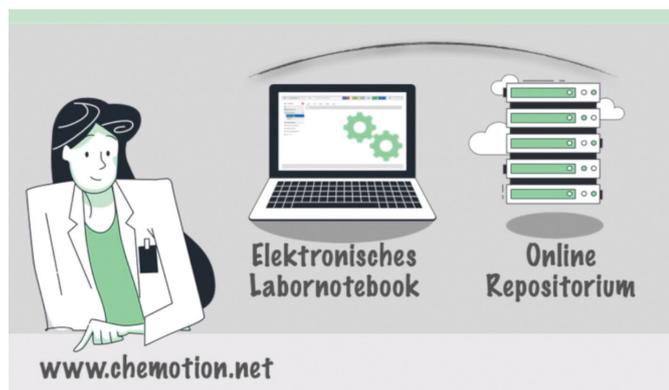


Abb. 3: Nutzung einer Kombination aus elektronischem Labornotebook und Repositorium als Basis zur schnellen Bereitstellung von Forschungsdaten.

Quo Vadis Chemie 4.0

Während viele Bereiche unseres täglichen Lebens schon durch KI unterstützt werden, steht die Synthesechemie in den akademischen Laboren noch am Anfang der möglichen Entwicklungen. Die Weiterentwicklung und Integration der modernen Werkzeuge der Digitalisierung und KI wird auch für die nächsten Generationen zentral sein. Für eine zielführende und umfassende Verwendung dieser Werkzeuge müssen aber nicht nur weiterhin Fortschritte in deren Entwicklung erreicht werden. Auch erfordern die modernen Methoden, dass die Möglichkeiten, Limitierungen und auch die Werkzeuge zur ihrer weiteren Verbesserung in unsere Curricula in der Lehre übernommen werden. Dieses betrifft sowohl die Studienanfänger(innen) als auch (Post)doktorand(inn)en, die in entsprechenden Forschungsumgebungen trainiert werden müssen, um eine breite Akzeptanz und ein weitreichendes Verständnis der Prozesse zu erreichen. Diesen Weg können z.B. landesweite Projekte,²⁰ nationale Konsortien wie z.B. die NFDI4Chem (Nationale Forschungsdaten Infrastruktur für Chemie)²¹ und die Fachgesellschaften begleiten und unterstützen.

Referenzen

- [1] A. Filipa de Almeida, Rui Moreira, Tiago Rodrigues: Synthetic organic chemistry driven by artificial intelligence, *Nature Reviews Chemistry* 2019 **3**, 589 – 604. <https://doi.org/10.1038/s41570-019-0124-0>
- [2] Projektseite der Chemotion-Entwicklungen: Chemotion. <https://chemotion.net/>
- [3] Felix Rudolphi, Sciformation ELN - Sciformation Consulting GmbH. http://sciformation.com/sciformation_eln.html?lang=de
- [4] Cerys Willoughby, Colin L. Bird, Simon J. Coles, Jeremy G. Frey: Creating Context for the Experiment Record. User-Defined Metadata: Investigations into Metadata Usage in the LabTrove ELN, *Journal of Chemical Information and Modeling* 2014 **54**, 3268 – 3283.
- [5] Pierre Tremouilhac, An Nguyen, Yu-chieh Huang, Serhii Kotov, Dominic S. Lütjohann, Florian Hübsch, Nicole Jung, Stefan Bräse: Chemotion ELN: an Open Source electronic lab notebook for chemists in academia, *J Cheminform* 2017 **9**, 54. <https://doi.org/10.1186/s13321-017-0240-0>.
- [6] Serhii Kotov, Pierre Tremouilhac, Nicole Jung, Stefan Bräse: Chemotion-ELN part 2: adaption of an embedded Ketcher editor to advanced research applications, *J. Cheminform.* 2018 **10**, 38. <https://doi.org/10.1186/s13321-018-0292-9>.
- [7] An Nguyen, Yu-Chieh Huang, Pierre Tremouilhac, Nicole Jung, Stefan Bräse: ChemScanner: extraction and re-use(ability) of chemical information from common scientific documents containing ChemDraw files, *J. Cheminform.* 2019 **11**, 77. <https://doi.org/10.1186/s13321-019-0400-5>.
- [8] Die Berechnung der nötigen Parameter wird durch eine Turbomol-Implementierung gelöst
- [9] Eine Sammlung von Modellen in der Biologie wurde z.B. zur Erstellung der Web-Services des Swiss Institute of Bioinformatics erarbeitet, z.B. <http://www.swissadme.ch/>
- [10] Philippe Schwaller, Teodoro Laino, Théophile Gaudin, Peter Bolgar, Christopher A. Hunter, Costas Bekas, and Alpha A. Lee: Molecular Transformer: A Model for Uncertainty-Calibrated Chemical Reaction Prediction, *ACS Cent. Sci.* 2019 **5**, 1572–1583. <https://doi.org/10.1021/acscentsci.9b00576>.
- [11] Marwin H. S. Segler, Mike Preuss, Mark P. Waller: Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI. *Nature* 2018 **555**, 604 – 610. <https://doi.org/10.1038/nature25978>.
- [12] IBM RXN for Chemistry. <https://rxn.res.ibm.com/>.
- [13] Elsevier. <https://www.elsevier.com/solutions/reaxys/predictive-retrosynthesis>
- [14] Jiahua Rao, Zhongyue Zhang, Jun Xu, Yuedong Yang: Predicting Retrosynthetic Reactions Using Self-Corrected Transformer Neural Networks, *J. Chem. Inf. Model.* 2020 **60**, 47 – 55. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00949>.
- [15] Dominic S. Lütjohann, Nicole Jung, Stefan Bräse: Open source life science automation: Design of experiments and data acquisition via 'dial-a-device', *Chemometrics Intellig. Lab. Syst.* 2015 **144**, 100 – 107. <https://doi.org/10.1016/j.chemo-lab.2015.04.002>.
- [16] Jan Potthoff, Pierre Tremouilhac, Patrick Hodapp, Bernhard Neumair, Stefan Bräse, Nicole Jung: Procedures for systematic capture and management of analytical data in academia, *Analytica Chimica Acta: X* 2019 **1**, 100007. <https://doi.org/10.1016/j.acax.2019.100007>.
- [17] Sebastian Steiner, Jakob Wolf, Stefan Glatzel, Anna Andreou, Jaroslaw M. Granda, Graham Keenan, Trevor Hinkley, Gerardo Aragon-Camarasa, Philip J. Kitson, Davide Angelone, Leroy Cronin: Organic synthesis in a modular robotic system driven by a chemical programming language, *Science* 2019 **363**, 144. DOI: 10.1126/science.aav2211.
- [18] Benjamin Burger, Phillip M. Maffettone, Vladimir V. Gusev, Catherine M. Aitchison, Yang Bai, Xiaoyan Wang, Xiaobo Li, Ben M. Alston, Buyi Li, Rob Clowes, Nicola Rankin, Brandon Harris, Reiner Sebastian Sprick, Andrew I. Cooper: A mobile robotic chemist, *Nature* 2020 **583**, 237 – 241. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>.
- [19] Pierre Tremouilhac, Chia-Lin Lin, Pei-Chi Huang, Yu-Chieh Huang, An Nguyen, Nicole Jung, Felix Bach, Robert Ulrich, Bernhard Neumair, Achim Streit, Stefan Bräse: The Repository Chemotion: Infrastructure for Sustainable Research in Chemistry, *Angew. Chem. Int. Ed Engl.* 2020 **59**, 22771 – 22778. <https://doi.org/10.1002/anie.202007702>.
- [20] Science Data Center für Molekulare Materialforschung (MoMaF), <https://momaf.scc.kit.edu/>
- [21] Nationale Forschungsdateninfrastruktur, <https://nfdi4chem.de/>

Im Jahr 2013 wurden am Karlsruher Institut für Technologie die Projekte mit dem Namen Chemotion initiiert. Ziel der Projekte war und ist es, Wissenschaftler in der Chemie mit Open-Source-Software und Open-Access-Infrastruktur zu unterstützen. Die Förderung der Aktivitäten Chemotion Electronic Lab Notebook (ELN) und Chemotion Repository durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) sowie die Unterstützung des KIT erlaubten eine sukzessive Erweiterung der Software. Durch viele engagierte Kooperationspartner wurden mehr und mehr Funktionen ermöglicht, die zunächst in Karlsruhe getestet und dann in die Basissoftware übernommen wurden. Seit 2019 sind die

Chemotion-Projekte in das Science Data Center MoMaF des MWK (Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg) integriert. Chemotion ELN und Repository wurden 2020 in die Digitalisierungsstrategie der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Chemie (NFDI4Chem) aufgenommen. Die Entwicklung der Software entlang der Bedarfe verschiedener Teildisziplinen der Chemie wird in Zukunft durch die Beteiligung von sieben weiteren wissenschaftlichen Gruppen innerhalb Deutschlands getragen. So werden die Funktionen an and die Bedarfe der chemischen Gemeinschaft in der Breite angepasst.



Das Chemotion-Team in 2020: Stefan Bräse, Nicole Jung, Pierre Tremouilhac, Pei-Chi Huang, Yu-Chieh Huang, Chi-Lin Lin, An Nguyen. (von links nach rechts, oben nach unten)