

Bausteine Forschungsdatenmanagement Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von Forschungsdatenmanagerinnen und -managern

NFDI for Catalysis-Related Sciences

NFDI4Catⁱ

Sara Espinoza David Linke Christoph Wulf Sonja Schimmler
Stephan Andreas Schunk Peter Benner Ralph Kraehnert Udo Kragl
Regina Palkovits Stefan Palkovits Mehtap Oezaslan Roger Gläser
Thomas Bönisch Nils Bohmer Michael Resch Matthias Beller
Olaf Deutschmann Uwe Bornscheuer Mark Greiner Walter Leitner
Kurt Wagemann

2021

Zitiervorschlag

Espinoza, Sara et al. 2021. NFDI for Catalysis-Related Sciences. NFDI4Cat. *Bausteine Forschungsdatenmanagement. Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von Forschungsdatenmanagerinnen und -managern* Nr. 2/2021: S. 57-71. DOI: [10.17192/bfdm.2021.2.8333](https://doi.org/10.17192/bfdm.2021.2.8333).

Dieser Beitrag steht unter einer
[Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz \(CC BY 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

ⁱSara Espinoza (ORCID: [0000-0002-5902-650X](https://orcid.org/0000-0002-5902-650X)), David Linke (ORCID: [0000-0002-5898-1820](https://orcid.org/0000-0002-5898-1820)), Christoph Wulf (ORCID: [0000-0001-6476-7049](https://orcid.org/0000-0001-6476-7049)), Sonja Schimmler (ORCID: [0000-0002-8786-7250](https://orcid.org/0000-0002-8786-7250)), Stephan Andreas Schunk (ORCID: [0000-0002-1253-4566](https://orcid.org/0000-0002-1253-4566)), Peter Ben-

1 Zusammenfassung

Die Katalyse ist ein sehr komplexes und interdisziplinäres wissenschaftliches Gebiet, das die effiziente Herstellung einer Vielzahl von Produkten für verschiedene Branchen und in unterschiedlichen Produktionsgrößen ermöglicht. Somit ist die Katalyse eine der Schlüsseltechnologien zur Bewältigung wesentlicher Herausforderungen wie einer nachhaltigen Energieversorgung oder des Klimawandels. Das Datenmanagement in der Katalyse ist derzeit überwiegend auf institutioneller oder Arbeitsgruppenebene organisiert und basiert auf lokalen Konventionen. Übergreifende Repositorien und Standards, wie Daten inklusive Metadaten gespeichert werden sollen, existieren nur in rudimentärer Form. Um den höchstmöglichen Mehrwert aus der Katalysforschung zu generieren, ist ein grundlegender Wandel in der Katalysforschung und den katalyseverwandten Wissenschaften wie Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik erforderlich. Die verschiedenen Disziplinen der Katalyse im Hinblick auf das Datenmanagement zusammenzuführen, ist die zentrale Herausforderung. Aus all diesen Notwendigkeiten heraus wurde im Rahmen der Initiative zur Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) das NFDI4Cat-Konsortium gegründet. Als eines von derzeit neun geförderten Konsortien konzentriert sich NFDI4Cat auf die Wissenschaften rund um die Katalyse. Dieser Artikel beschreibt die Motivation der Gründungsmitglieder für dieses im Oktober 2020 gestartete Konsortium und wie die Ziele in Bezug auf die Fachcommunity, die technische Infrastruktur und insbesondere das Forschungsdatenmanagement erreicht werden sollen. Darüber hinaus eröffnet die dynamische Entwicklung moderner Technologien zur Erfassung, Bereitstellung und zur Analyse großer Datenmengen neue Möglichkeiten für wissenschaftlichen Fortschritt in den Einzeldisziplinen und insbesondere an deren Nahtstellen.

2 Das Wissenschaftsgebiet der Katalyse

2.1 Kurzübersicht Katalyse

Katalyse ist die Wissenschaft der Beschleunigung von chemischen Transformationen. Ein Katalysator ist eine Substanz, die eine chemische Reaktion beschleunigt, ohne selbst verbraucht zu werden. Mit geeigneten Katalysatoren können Reaktionen mit

ner (ORCID: [0000-0003-3362-4103](https://orcid.org/0000-0003-3362-4103)), Ralph Kraehnert (ORCID: [0000-0002-6159-9585](https://orcid.org/0000-0002-6159-9585)), Udo Kragl (ORCID: [0000-0002-2507-7472](https://orcid.org/0000-0002-2507-7472)), Regina Palkovits (ORCID: [0000-0002-4970-2957](https://orcid.org/0000-0002-4970-2957)), Stefan Palkovits (ORCID: [0000-0003-4809-2939](https://orcid.org/0000-0003-4809-2939)), Mehtap Oezaslan (ORCID: [0000-0001-8545-7576](https://orcid.org/0000-0001-8545-7576)), Roger Gläser (ORCID: [0000-0002-8134-4280](https://orcid.org/0000-0002-8134-4280)), Thomas Bönisch (ORCID: [0000-0003-3108-8597](https://orcid.org/0000-0003-3108-8597)), Nils Bohmer (ORCID: [0000-0002-5448-6240](https://orcid.org/0000-0002-5448-6240)), Michael Resch (ORCID: [0000-0002-7159-9634](https://orcid.org/0000-0002-7159-9634)), Matthias Beller (ORCID: [0000-0001-5709-0965](https://orcid.org/0000-0001-5709-0965)), Olaf Deutschmann (ORCID: [0000-0001-9211-7529](https://orcid.org/0000-0001-9211-7529)), Uwe Bornscheuer (ORCID: [0000-0003-0685-2696](https://orcid.org/0000-0003-0685-2696)), Mark Greiner (ORCID: [0000-0002-4363-7189](https://orcid.org/0000-0002-4363-7189)), Walter Leitner (ORCID: [0000-0001-6100-9656](https://orcid.org/0000-0001-6100-9656)), Kurt Wagemann (DECHEMA e. V.)

hoher Effizienz und hoher Ausbeute ablaufen, und gleichzeitig kann die Bildung unerwünschter Nebenprodukte vermieden werden. Das komplexe Gebiet der Katalyse umfasst verschiedene Disziplinen wie z. B. die homogene, die Photo-, die Bio-, die heterogene und die Elektrokatalyse. Ebenso umfasst die Katalyse auch Disziplinen, die sich prozessbedingt nicht von der Reaktion an sich entkoppeln lassen. Dazu gehören das Reaktordesign und das Prozessingenieurwesen. Der wissenschaftliche Fortschritt beruht sowohl auf experimentellen als auch auf computerunterstützten Methoden. Für Katalysatoren, die als Feststoffe vorliegen, besteht zudem ein enger Bezug zu den Materialwissenschaften, während es im Bereich der Biokatalyse eine enge Wechselwirkung mit der Mikro- und Molekularbiologie gibt.

Mit anderen Worten: Katalyse ist ein sehr komplexes und interdisziplinäres Wissenschaftsgebiet und ermöglicht die effiziente Herstellung einer großen Bandbreite von Produkten für verschiedene Branchen und in verschiedenen Größenordnungen (von wenigen Gramm bis Millionen Tonnen/Jahr). Auch in der Umwelttechnik spielt die Katalyse zur Schadstoffzersetzung eine entscheidende Rolle. Damit ist die Katalyse eine der Schlüsseltechnologien, um die großen Herausforderungen des Klimawandels, der Versorgung mit nachhaltiger Energie, der Sicherung der Ernährung und der Versorgung mit nachhaltigen chemischen Produkten zugleich zu bewältigen.

2.2 Forschungsdaten in der Katalyse

Daten aus der Katalysatorforschung werden in einer Reihe von Teilschritten erzeugt: Typischerweise beginnt der Prozess mit der Synthese des jeweiligen Katalysatormaterials mit Hilfe verschiedener Materialien und auch verschiedener Synthesemethoden (**Synthesedaten**). Daraufhin werden die synthetisierten Katalysatormaterialien in einem Reaktor unter einer Abfolge von verschiedenen Reaktionsbedingungen, wie z. B. unterschiedlichen Temperaturen, Druck oder Durchflussraten, den Reaktanten wie Gasen oder Flüssigkeiten ausgesetzt. Die dabei entstehenden Produkte werden hinsichtlich der gebildeten Substanzen und deren Quantitäten mit verschiedenen Analyseverfahren wie z. B. Massenspektrometrie oder Gaschromatographie analysiert (**Reaktionsdaten**). Die Katalysatorforschung verfolgt das Ziel, Zusammenhänge zwischen der Struktur eines funktionierenden Katalysators und seiner Aktivität aufzuklären. Dieses Ziel wird idealerweise durch direkte Überwachung der Katalysatoren unter relevanten Bedingungen erreicht (**Operandodaten**) und oft durch quantenchemische Berechnungen unterstützt. Strukturelle Eigenschaften werden vor, während oder nach der katalytischen Reaktion aus der Materialanalytik ermittelt, z. B. spektroskopische, Beugungs- oder Absorptionsmessungen (**Charakterisierungsdaten**). Die erhaltenen Reaktionsdaten werden zur Berechnung der Leistung des Katalysators genutzt, die auf verschiedene Weise quantifiziert und dargestellt werden kann, z. B. als Konzentrationen, Umsatz, oder Selektivität (**Leistungsdaten**). Diese Daten dienen als Eingabe für die Modellierung der Reaktionskinetik (**Molekulare Modellierung**), für Reaktor-Simulationen (**Multiskalenmodellierung**) und Prozess-Simulationen. Anhand dieser Simulationen können katalytische Reaktoren und Verfahren konzipiert

werden (Abbildung 1). Der Erfolg dieser Vorgehensweise wird sowohl durch experimentelle als auch durch computergestützte Methoden vorangetrieben, die oft isoliert von verschiedenen Expert*innen durchgeführt werden. Während der Gesamtworkflow und die grundlegenden Konzepte in den einzelnen Katalysedisziplinen ähnlich sind, werden in jeder dieser Disziplinen leicht unterschiedliche Ansätze, unterschiedliche Nomenklaturen, experimentelle Methoden sowie Eigenschafts- und Leistungsdeskriptoren verwendet.

Das Datenmanagement in der Katalyse ist aktuell meist auf Instituts- oder Arbeitsgruppenebene organisiert und basiert auf lokalen Konventionen. Übergreifende Repositorien sowie Standards, wie Daten inkl. Metadaten abgelegt werden sollten, existieren nur in Ansätzen, z. B. in der Biokatalyse oder im Bereich der Theoretischen Katalyse. Datenpublikation spielt demzufolge in der Disziplin noch keine Rolle.¹

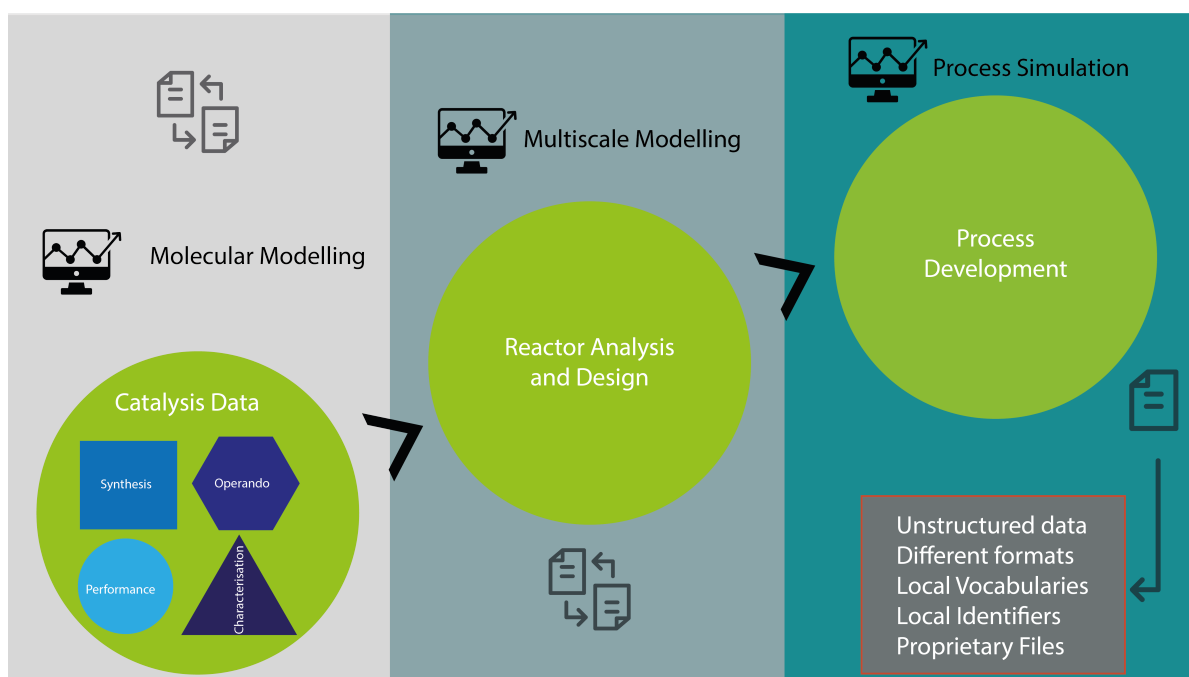


Abbildung 1: **Grafische Darstellung des aktuellen Stands des Datenmanagements in der Katalyse.** Daten werden in einer Reihe von Schritten generiert und dienen als Input für die Modellierung der Reaktionskinetik und für die Reaktorauslegung. Basierend auf diesen Simulationen können katalytische Prozesse entworfen und hochskaliert werden.

¹Mendes, Pedro SF. et al. „Open data in catalysis: from today's big picture to the future of small data.“ ChemCatChem 13, no. 3 (2021): 836-850. <https://doi.org/10.1002/cctc.202001132>

3 NFDI4Cat

3.1 Hintergrund

Um aktuelle Herausforderungen zu meistern und den größtmöglichen Mehrwert aus der Katalyseforschung zu ziehen, ist ein grundlegender, digitaler Wandel in diesem Wissenschaftsbereich sowie in der Prozess- und Verfahrenstechnik erforderlich. Notwendig ist eine gemeinsame Vorgehensweise, um das volle Potenzial der in der Katalyseforschung generierten Daten auszunutzen.² Aus dieser Notwendigkeit heraus wurde im Rahmen der Initiative zur Nationalen Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) das NFDI4Cat-Konsortium gebildet, das seit Oktober 2020 von der DFG gefördert wird. Das NFDI4Cat-Konsortium zielt darauf ab, eine Transformation vom derzeitigen Status (Abbildung 1) hin zur „digitalen Katalyseforschung“ zu ermöglichen und zu beschleunigen (Abbildung 2).³ Die entscheidenden Elemente, die für die „digitale Katalyseforschung“ benötigt werden, sind die Vereinheitlichung von Konzepten, Vokabularen und Datenformaten. Dabei strebt das NFDI4Cat-Konsortium die Umsetzung der FAIR-Prinzipien durch technische, organisatorische und rechtliche Regelungen an, welche die Auffindbarkeit und Wiederverwendung von entsprechenden Daten erleichtern.⁴ Die semantisch reichhaltigen Daten werden in vernetzten Informationsarchitekturen gespeichert, die ebenfalls im Rahmen dieses Projekts aufgebaut werden. Diese Dateninfrastrukturen sollen den Einsatz moderner Analyseansätze, insbesondere mit Werkzeugen auf Basis künstlicher Intelligenz, ermöglichen.

Die Zusammenarbeit aller NFDI Konsortien ist eine Grundvoraussetzung für NFDI4Cat und die angestrebte „digitale Katalyseforschung“. So werden beispielsweise die Konsortien NFDI4Cat und NFDI4Chem gemeinsam Ansätze zur digitalen Darstellung der Chemie molekularer Verbindungen entwickeln und an übergreifenden Themen wie Ontologien und Metadaten arbeiten. Technische Aspekte der Katalyse und Gerätecharakterisierung werden innerhalb von NFDI4Cat in engem Dialog mit NFDI4Ing behandelt. Sobald es eine positive Förderentscheidung gibt, ist es geplant, Chemie und Physik von Oberflächenmaterialien und die Multiskalenmodellierung mit verschiedenen Reaktoren in Zusammenarbeit mit FAIRmat zu erforschen. NFDI4Cat und DAPHNE haben zudem ein gemeinsames Interesse an Daten zur Charakterisierung von Katalysatoren und werden, daher gemeinsame Ansätze zur Verknüpfung dieser Daten mit der Funktionalität von Materialien entwickeln, sobald dies auch hier möglich sein sollte.

²Vgl. hierzu: Demtröder, Dana et al. „Whitepaper: The Digitalization of Catalysis-Related Sciences.“ (2019). http://gecats.org/gecats_media/Downloads/GeCatS_Whitepaper+2019_engl_ezl.pdf

³Wulf, Christoph et al. „A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research—Challenges and Concepts.“ ChemCatChem (2021). <https://doi.org/10.1002/cctc.202001974>

⁴Wilkinson, Mark D. et al. „The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship.“ Scientific data 3, no. 1 (2016): 1-9. <https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18>

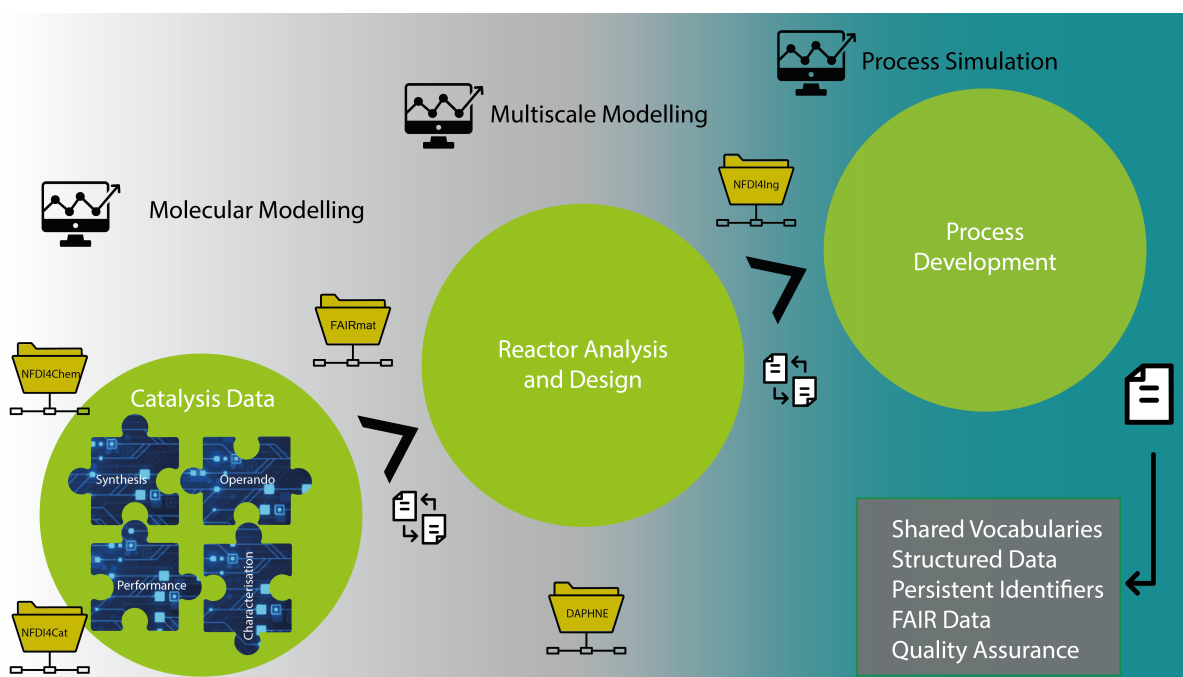


Abbildung 2: **Grafische Darstellung der anvisierten digitalen Katalyse.** Die digitale Katalyse-Wertschöpfungskette basiert auf FAIRen Katalysedaten vom Molekül bis hin zum chemischen Prozess.

3.2 Herausforderungen und Ziele

Das NFDI4Cat-Konsortium wird eine Infrastruktur erarbeiten, um sowohl dem Wunsch nach einem offenen und FAIRen Umgang mit Katalysedaten nachzukommen als auch praktische Werkzeuge für die Forscher*innen bereitzustellen. Eine zentrale Herausforderung besteht darin, die verschiedenen Disziplinen der Katalysforschung und -technologien auf digitaler Ebene zu vereinen. Die größten Schwierigkeiten liegen zunächst in der historisch begründeten individualisierten und daher häufig uneinheitlichen Erhebung und Ablage von Daten innerhalb der Fachcommunity. Der Fokus liegt daher zu Beginn darauf, gemeinsame Konventionen, Standards und Vorgehensweisen im Hinblick auf Metadatensätze, Ontologien und Datenformate zu erarbeiten.

Ein weiteres Ziel dieser Infrastruktur ist es, eine Brücke zwischen den verschiedenen Katalyse-Communities, zwischen Chemiker*innen und Ingenieur*innen sowie zwischen Industrie und Wissenschaft zu schlagen. Eine Zusammenführung und eine vollständige Transformation können nur erreicht werden, wenn das volle Potenzial der Datenwissenschaften für jede*n Katalysforscher*in zugänglich gemacht und somit zu einem unverzichtbaren und sich stetig weiterentwickelnden Werkzeug für die Fachcommunity ausgebaut wird. Des Weiteren ist es nötig, einen Kulturwandel zu bewirken und in die bestehende Bildung und Lehre zu integrieren, um zukünftige Generationen von (Katalyse-)Wissenschaftler*innen in Methoden und Theorien des digitalen Forschungsdatenmanagements zu schulen. Nur eine breite Akzeptanz wird eine NFDI

mit Leben füllen. Dazu gehören auch zentrale Fragen zu Zugriffsrechten, geistigem Eigentum, Anreizsystemen und zur Datenpublikation.

Diese anspruchsvolle Aufgabe lässt sich in drei Handlungsfelder einteilen: gemeinschaftsbezogene Ziele, technische Ziele und NFDI-bezogene Ziele.

Ziele für die Fachcommunity

- a) Die Förderung und die Unterstützung der disziplinübergreifenden Forschung im Bereich der grundlegenden und angewandten Katalyse, um die Vision „Vom Molekül zum Prozess“ auf digitaler Ebene zu verwirklichen.
- b) Aufbau und Verbesserung der digitalen Vernetzung und des Forschungsdatenmanagements innerhalb der Fachcommunities unter Konsolidierung und Vereinheitlichung bestehender Bemühungen.
- c) Etablierung, Förderung und Anreiz zur Nutzung offener, klar definierter Datenstrukturen und Metadatenstandards für die interdisziplinäre und erweiterte Nutzung (z. B. Simulationen).
- d) Erleichterung der Zusammenarbeit auf Datenebene (über institutionelle Grenzen hinweg).
- e) Ausbildung und Training in angewandtem Forschungsdatenmanagement und Datenwissenschaften für Katalyse in der Chemie, dem Chemieingenieurwesen und der Chemieinformatik.

Technische Ziele

- a) Bereitstellung von Lösungen zur Einrichtung einer hierarchischen und verteilten Repositorien-Struktur für experimentelle und theoretische Daten; Realisierung eines Metaportals, das eine übergreifende Suche und Exploration der Daten ermöglicht.
- b) Ermöglichung der Erhebung und Bereitstellung von Daten unter Berücksichtigung der FAIR-Prinzipien, bei der ein Gleichgewicht zwischen Privatsphäre/Vertraulichkeit und offenem Datenaustausch gewährleistet wird.
- c) Einbindung von und Verbindung mit deutschen sowie europäischen und weltweiten Diensten.
- d) Etablierung einer Plattform, die einen definierten Übergang zwischen privaten/lokalen Daten, Gruppen-/Projektdateien und veröffentlichten Daten ermöglicht.
- e) Bereitstellung von Werkzeugen zur Unterstützung des gesamten Forschungsdatenlebenszyklus, die u. a. möglichst automatisch die Einheitlichkeit, Richtigkeit, Vollständigkeit und Reproduzierbarkeit der Daten prüfen.

NFDI-bezogene Ziele

- a) Ein Konsortium, welches die stark interdisziplinäre Natur und den inhärenten Industriebezug repräsentiert und somit NFDI-übergreifende Synergien aufzeigen kann.
- b) Gestaltung von Querschnittsthemen innerhalb des NFDI e. V.

3.3 Geförderte Institutionen

Die Strategie zur Transformation der Katalysforschung zur digitalen Katalyse erstreckt sich über viele verschiedene Fachgebiete und es werden Experten in allen Disziplinen benötigt. Das NFDI4Cat-Konsortium besteht aus 16 erfahrenen Partnern aus dem Bereich der homogenen, heterogenen, Photo-, Bio- und Elektrokatalyse. Auch die Disziplinen der Reaktions- und Verfahrenstechnik sind im Konsortium vertreten. Die Katalyse- und Ingenieurkompetenzen werden durch Expertise in den Bereichen der Datenwissenschaften, des Hochleistungsrechnens und des maschinellen Lernens ergänzt. Eine kurze Beschreibung jeder antragstellenden Einrichtung, die im Projekt jeweils verwendete Abkürzung und weiterführende Links sind im Folgenden angegeben:

1. Die DECHEMA e. V. (**DECHEMA**) ist das Expertennetzwerk für Chemische Technik und Biotechnologie in Deutschland seit 1926 und vertritt als gemeinnützige Fachgesellschaft diese Gebiete in Wissenschaft, Wirtschaft, Politik und Gesellschaft. Rund 100 Fachgruppen und Arbeitskreise, darunter die Deutsche Gesellschaft für Katalyse (GeCatS), bieten ein Forum für den vertrauensvollen Wissensaustausch unter Expert*innen. Die DECHEMA ist die Sprecherorganisation von NFDI4Cat.⁵
2. Die Forschungsaktivitäten des Leibniz-Institut für Katalyse (**LIKAT**) konzentrieren sich auf Implementierung und Nutzung von angewandten nachhaltigen Katalyseverfahren, Entwicklung von innovativen Methoden und Technologien für katalytische Prozesse sowie Studien zu speziellen (metall-)organischen Synthesen und Katalysen. Im LIKAT sind verschiedene Katalyseexpertisen sowie Reaktionstechnik und Data-Science vertreten.⁶
3. Das Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (**HLRS**) ist Spezialist auf dem Gebiet des Forschungsdatenmanagements und verfügt über langjährige Erfahrung in der Entwicklung von Metadaten und Ontologien, der Entwicklung von Werkzeugen, der Implementierung von Repositorien sowie der Verwaltung von Daten.⁷
4. Das Fraunhofer-Institut für offene Kommunikationssysteme (**FOKUS**) betreibt anwendungsorientierte Forschung zur digitalen Transformation und verfügt über langjährige Erfahrung im Bereich strategisches Datenmanagement und Datenplattformen. Die Forschungsgruppe von Dr. Sonja Schimmler konzentriert sich auf die Digitalisierung und Öffnung der Wissenschaft und legt einen besonderen Schwerpunkt auf Forschungsdateninfrastrukturen.⁸
5. Das Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme (**MPI-DCTS**) beschäftigt sich theoretisch und experimentell mit neuen verfahrens- und prozesstechnischen Ansätzen für die Chemie- und Energiesystemtechnik. Insbesondere werden dabei derzeit Methoden der heterogenen Katalyse bei der

⁵<https://dechema.de/>

⁶<https://www.catalysis.de/>

⁷<https://www.hlrs.de/home/>

⁸<https://www.fokus.fraunhofer.de/>

- CO₂-Methanisierung und anderen Power2X-Anwendungen sowohl experimentell als auch *in silico* untersucht.⁹
6. Die Arbeitsgruppe Bornscheuer am Institut für Biochemie der Universität Greifswald (**UHGW**) hat eine herausragende Expertise in der Identifizierung und Optimierung von Enzymen für biokatalytische Anwendungen in der organischen Synthese und für chirale pharmazeutische Zwischenprodukte. Ein Schwerpunkt ist das Protein-Engineering und Hochdurchsatz-Screening mit einer automatisierten Roboterplattform.¹⁰
 7. Die Arbeitsgruppe Deutschmann am Karlsruher Institut für Technologie (**KIT**) beschäftigt sich mit umwelt- und klimafreundlichen neuartigen chemischen Technologien. Der aktuelle Schwerpunkt liegt auf der energiebezogenen Katalyse für die Entwicklung von grünen und emissionsfreien Produkten und Prozessen. Darüber hinaus war das KIT an der Entwicklung mehrerer Software-Tools beteiligt, die die Digitalisierung durch numerische Simulation molekularer Systeme (TURBOMOLE) und katalytischer Reaktoren (DETCHEM) sowie im Datenmanagement (CaRMen) vorangetrieben haben.¹¹
 8. Die Universität Leipzig (**UL**) verfügt über langjährige Expertise in den katalysebezogenen Wissenschaften, die sich heute in den strategischen Forschungsprofilen „Nachhaltige Systeme und Biodiversität“ sowie „Komplexe Materie“ widerspiegelt und in den Strukturen des Forschungsdatenmanagements von den *Digital Humanities* bis zu den Naturwissenschaften berücksichtigt wird. Die UL wird mit ihrer Research Academy Leipzig ein modularisiertes Programm zur Graduiertenausbildung zum Forschungsdatenmanagement in der Katalyse erarbeiten (*Research Data Management School of Catalysis*).¹²
 9. Der Lehrstuhl für Chemische Reaktionstechnik der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (**FAU**) hat langjährige Expertise in der Entwicklung von katalytischen Materialien. Der Schwerpunkt der Forschungsarbeit liegt auf dem Gebiet der homogenen und heterogenen Katalyse sowie deren hybriden Kombinationen, deren Einsatz in speziellen Reaktoren sowohl im Batch- als auch im kontinuierlichen Betrieb sowie die kinetische Auswertung der gewonnenen Daten.¹³
 10. An der Technische Universität Dortmund (**TUDO**) beschäftigt sich die Arbeitsgruppe Apparatedesign von Prof. Dr.-Ing. Norbert Kockmann mit der Entwicklung neuartiger Reaktoren, insbesondere Mikroreaktoren, mit entsprechenden Trennschritten wie Destillation, Flüssig-Flüssig-Extraktion oder Kristallisation. Der Aufbau und die Weiterentwicklung von Ontologien in der Katalyse und Prozesstechnik wird ergänzt durch die Entwicklung von Schnittstellen zu anderen Ontologien wie NFDI4Ing und NFDI4Chem.¹⁴

⁹<https://www.mpi-magdeburg.mpg.de/>

¹⁰<https://lara.uni-greifswald.de/>

¹¹<https://www.itcp.kit.edu/deutschmann/>

¹²<https://itc.chemie.uni-leipzig.de/>

¹³<https://www.crt.tf.fau.de/>

¹⁴<https://www.bci.tu-dortmund.de/>

11. An der Universität Rostock (**UHRO**) wird zusätzlich zur außerordentlichen Expertise in der Prozessentwicklung für die Chemo- und Biokatalyse einschließlich Downstream-Processing für komplexe Moleküle aktiv die Implementierung einer Forschungsdateninfrastruktur verfolgt. Module werden entwickelt, um die Prinzipien und Werkzeuge frühzeitig in die studentische Lehre und Aus- und Weiterbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses einzubringen.¹⁵
12. Die Technische Universität Berlin (**TUB**) betreibt Methoden- und Materialentwicklung im Bereich der heterogenen Katalyse. Aufgabe im Konsortium ist u. a. die Umsetzung eines typischen Workflows der Katalysatorforschung in digitaler Form bis hin zur Erstellung eines lokalen Pilotsystems.¹⁶
13. Die Technische Universität München (**TUM**) befasst sich mit grundlegenden Fragestellungen zu Katalysatoren und katalysierten Reaktionen, um durch radikal neue Lösungsansätze bei der Synthese von Energieträgern und chemischen Zwischenprodukten den Carbon Footprint zu senken. Die Forschung konzentriert sich darauf, katalysierte Umsetzungen bei deutlich niedrigeren Reaktionstemperaturen und mit höherer Selektivität zu ermöglichen, als dies heute möglich ist.¹⁷
14. Das Max-Planck-Institut für Chemische Energiekonversion (**MPI-CEC**) erforscht die Grundlagen für das Design, das Verständnis und die Kontrolle katalytischer Systeme an der Schnittstelle von Energie und Chemie. Ein zentraler Fokus liegt auf der katalytischen Aktivierung von kleinen Molekülen wie H₂ oder CO₂ u. a. zur Speicherung und Nutzung erneuerbarer Energie in chemischen Energieträgern und Produkten.¹⁸
15. Die Arbeitsgruppe Technische Elektrokatalyse an der Technische Universität Braunschweig (**TUBS**) von Frau Prof. Dr. Mehtap Özaslan beschäftigt sich mit Entwicklung und Diagnostik von neuen Materialien für regenerative Energieumwandlungs- und Energiespeichersysteme. Im Rahmen der NFDI4Cat werden Ontologien und Metadatenstandards für die Elektrokatalyse entwickelt und mit fachnahen Konsortien wie NFDI4Chem und NFDI4Ing abgestimmt.¹⁹
16. Der Lehrstuhl für Heterogene Katalyse und Chemische Technologie an der RWTH Aachen (**RWTH**) beschäftigt sich mit der Ableitung von Struktur-Aktivitäts-Beziehungen in der heterogenen Katalyse und Elektrokatalyse vor allem in der Nachhaltigkeits- und Umweltchemie, aber auch mit datenwissenschaftlichen Ansätzen.²⁰

¹⁵<https://www.kragl.chemie.uni-rostock.de/>

¹⁶<https://www.bascat.tu-berlin.de/>

¹⁷<https://www.department.ch.tum.de/>

¹⁸<https://www.cec.mpg.de>

¹⁹<https://www.tu-braunschweig.de/itc/oezaslan>

²⁰<https://www.itmc.rwth-aachen.de/>

3.4 Arbeitsprogramm und Übersicht der Aufgabenbereiche

Um unsere Ziele und Schwerpunkte strategisch anzugehen und zu erarbeiten, wurde ein Arbeitsprogramm erstellt. Das Arbeitsprogramm wurde in acht Aufgabenbereiche (*Task Areas*; TA1-8) strukturiert, wie in [Tabelle 1](#) aufgelistet.

Tabelle 1: **Übersicht über die TAs und die beteiligten Partner**

TA #	Beschreibung der TAs	Beteiligte Partner
1	Ontologieentwicklung und Metadatenstandards	LIKAT, TUDO, HLRS, KIT, MPI-CEC, MPI-DCTS, FAU, RWTH, TUBS, TUM, UHGW
2	Datenstandards, Datenerfassung und Schnittstellen	LIKAT, FOKUS, TUDO, HLRS, KIT, FAU, RWTH, TUB, TUDO, UHGW
3	Datenanalyse, Qualitätsmanagement und Wiederverwendbarkeit von Daten	FOKUS, KIT, LIKAT, MPI-CEC, MPI-DCTS, RWTH, TUB, HLRS
4	Verknüpfte erweiterbare Infrastruktur und Zugriffsmanagement	FOKUS, HLRS
5	Öffentlichkeitsarbeit und Ausbildung	TUM, UHRO, UL
6	Vernetzung mit NFDIs, Sonderforschungsbereiche (SFBs) und internationalen Organisationen	HLRS, UL, DECHEMA
7	Geistiges Eigentum, Geheimhaltung, Lizenzen und Belohnungsmodelle	UL, KIT, LIKAT
8	Management	DECHEMA

Eine Übersicht über die Projektstruktur und wie die einzelnen TAs zueinander in Beziehung stehen, ist in [Abbildung 3](#) verdeutlicht. Alle Schritte der Katalyseforschung, wie z. B. Synthese oder Charakterisierung ([Abbildung 1](#)), werden von verschiedenen Projektpartnern bearbeitet. TA1 und TA2 befassen sich mit der Herausforderung, Daten einschließlich Metadaten innerhalb der verschiedenen Katalysedisziplinen zu sammeln. Aus Experimenten gewonnene Daten müssen weiterverarbeitet werden, um einen maximalen Wert für eine verbesserte Katalyseforschung zu liefern. TA3 befasst sich mit der Datenkuratierung und -konservierung sowie mit der Untersuchung verschiedener *data-to-value* Konzepte. TA1-TA3 arbeiten eng zusammen und umfassen

die Mehrzahl der Partnerinstitutionen. TA4 ist verantwortlich für den Entwurf, die Bereitstellung und den Betrieb der dezentralen Repositorien-Infrastruktur für NFDI4Cat. Die wichtigen gemeinschafts- und anwenderbezogenen Aspekte werden in TA5 und TA6 behandelt. TA5 konzentriert sich auf die Verbreitung der Ergebnisse über verschiedene Kanäle wie Konferenzen, Workshops sowie den Aufbau einer *Research Data Management School of Catalysis*, die auf dem erarbeiteten Wissen innerhalb von NFDI4Cat basiert. Der Schwerpunkt von TA6 liegt hingegen auf der stärkeren Vernetzung innerhalb der NFDI e. V., mit anderen SFBs und Schwerpunktprogramme (SPPs) sowie auf internationaler Ebene. Der Austausch von Daten zum Nutzen der Gemeinschaft und der Wissenschaft im Allgemeinen ist einer der zentralen Eckpunkte innerhalb der NFDI.

TA7 adressiert die sensiblen Punkte rund um die Verfahren zur gemeinsamen Nutzung von Daten und die daraus resultierenden Konsequenzen und wird daran arbeiten, Wege und Verfahren für die Behandlung dieser Themen auf einer Konsensbasis der Community zu definieren, auch jenseits des Konsortiums selbst. TA8 wird von der DECHEMA geleitet. Die DECHEMA ist für die Verwaltung und Verteilung der Mittel an die mitantragstellenden Institutionen sowie für verschiedene Aspekte des wissenschaftlichen und administrativen Projektmanagements zuständig.

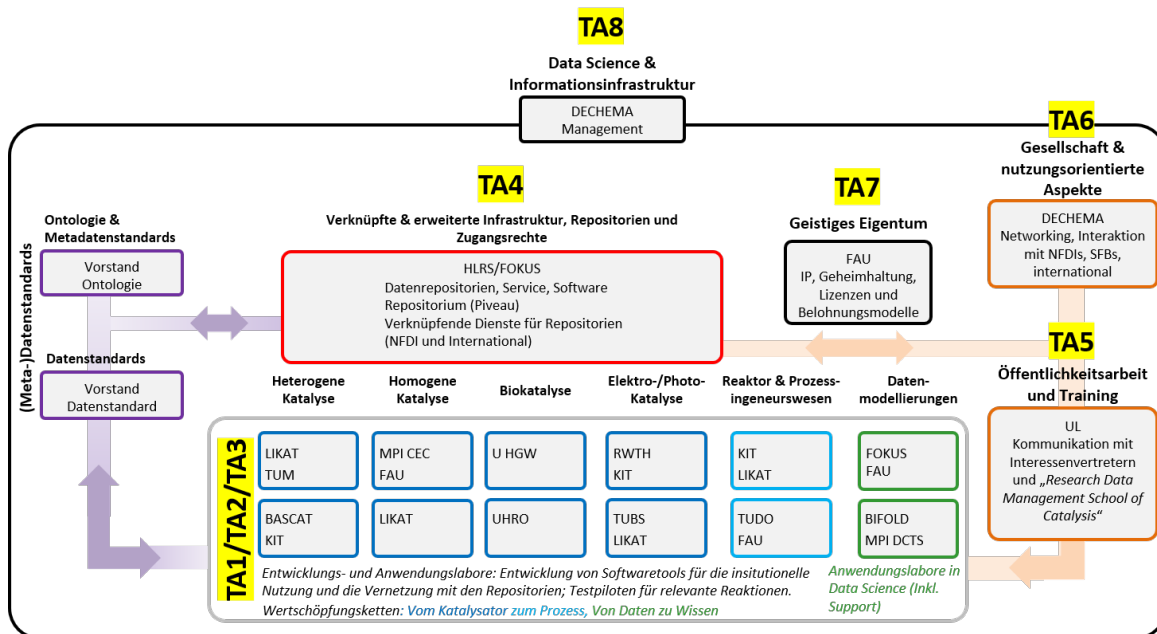


Abbildung 3: Überblick über die Projektstruktur mit den Rollen der geförderten Institutionen und der Interaktion zwischen den TAs.

3.5 Organisatorische Struktur und Tragfähigkeit

NFDI4Cat operiert wie ein klassisches Projektkonsortium, in dem die Beteiligten ihre Zusammenarbeit durch einen Kooperationsvertrag geregelt haben. Die DECHEMA

als Koordinatorin sichert die Gemeinnützigkeit des Konsortiums als gemeinnützige Organisation selbst. Unter dem Dach der DECHEMA hat sich NFDI4Cat eine eigene Organisationsstruktur erarbeitet. Die Organisationsstruktur ist in **Abbildung 4** detailliert dargestellt.

Die Generalversammlung, bestehend aus den Organisationen, die die größtmögliche wissenschaftliche Exzellenz in Deutschland in den jeweiligen Kernthemen von NFDI4Cat repräsentieren. Diese Generalversammlung befasst sich vor allem mit strategischen Entscheidungen, der Budgetplanung und der Einbindung neuer Partner. Die Generalversammlung ist eng mit dem Lenkungskreis verbunden, der sich aus den Leiter*innen der jeweiligen TAs zusammensetzt. Der Lenkungskreis soll die TA-Leiter*innen und die Generalversammlung unterstützen, sowie NFDI4Cat im Außenraum vertreten und die TAs weiterentwickeln.

Die interne Struktur wird flankiert durch die DECHEMA-Projektleitung und den Beratungsausschuss. Der Beratungsausschuss setzt sich aus Industrievertreter*innen großer deutschen Katalyseunternehmen zusammen. Dieses Konstrukt wurde gewählt, da Katalysatorforschung meist eng mit Reaktionen und Methoden in der industriellen Praxis verknüpft ist und daher oft in Kooperation zwischen Akademia und Industrie betrieben wird. Für einen maximalen Nutzen soll das in NFDI4Cat entwickelte Datenmanagement daher auch in diesem Kontext nutzbar sein. Die Industrie kann hier Hinweise zur Gestaltung liefern und ihre Erfahrung einbringen. Durch diese Struktur ist das Konsortium in der Lage, sowohl in einem übergeordneten NFDI e. V. mitzuarbeiten als auch im Laufe der Zeit neue Beteiligte zu integrieren.

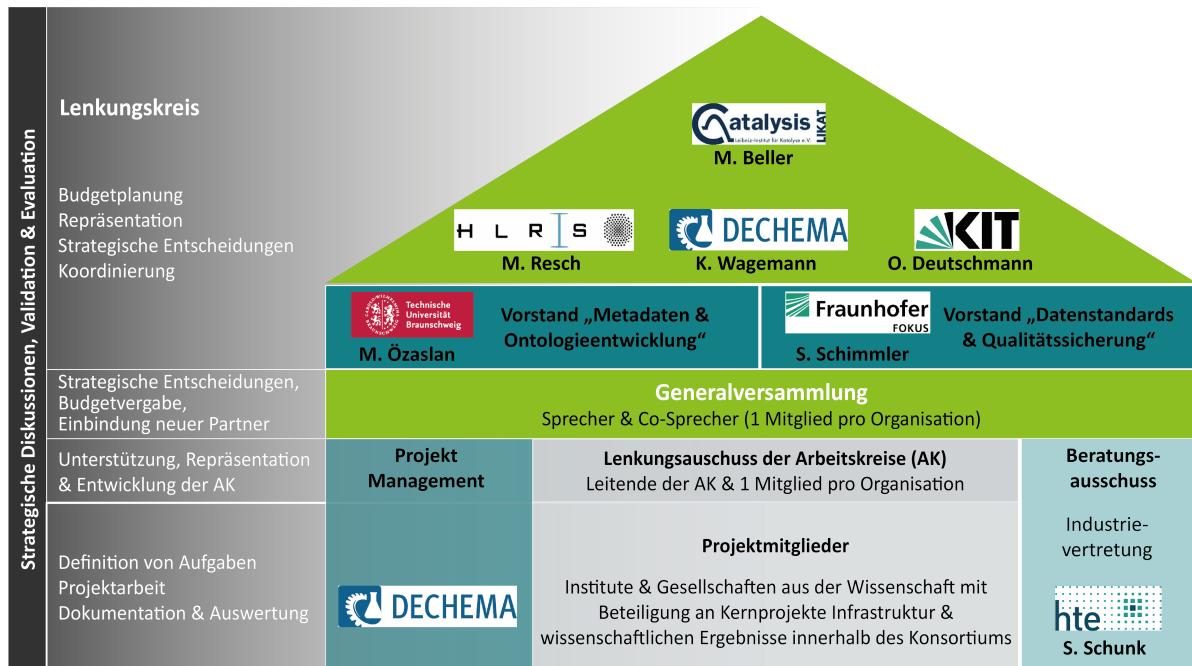


Abbildung 4: Organisationsstruktur von NFDI4Cat: Die Vertreter*innen der einzelnen Institutionen sind unter den jeweiligen Logos genannt. Die linke Seite des Diagramms erläutert die Aufgaben der einzelnen Einheiten.

3.6 Übersicht über die assoziierten Institutionen und Organisationen

Das Konsortium wird zusätzlich durch ein beratendes Expertengremium unterstützt. Dieses Gremium setzt sich aus engagierten Vertreter*innen der großen deutschen Unternehmen zusammen, die im Bereich der Katalyse aktiv sind, wie BASF SE, Clariant Produkte GmbH, Covestro Deutschland AG, Evonik Industries AG, hte GmbH, Linde AG und Thyssenkrupp Industrial Solutions AG. Durch den Austausch mit der Industrie kann NFDI4Cat wichtige Impulse aufnehmen und hat Zugriff auf Expertise mit hohem Praxisbezug. Die wichtigsten Konsortien und Industriepartner sind in [Abbildung 5](#) dargestellt.

Zudem ist in allen Handlungsfeldern eine enge Abstimmung mit anderen Konsortien (aus erster Förderrunde: NFDI4Chem, NFDI4Ing) und weiteren Fachgesellschaften von Bedeutung, um eine spätere NFDI über alle Disziplinen hinweg überhaupt erst möglich zu machen. Dafür wird ein Konzept entwickelt, wie basierend auf den Erkenntnissen der Arbeitskreise mit der Katalyse-Community interagiert wird bzw. die Ergebnisse kommuniziert werden sollen.

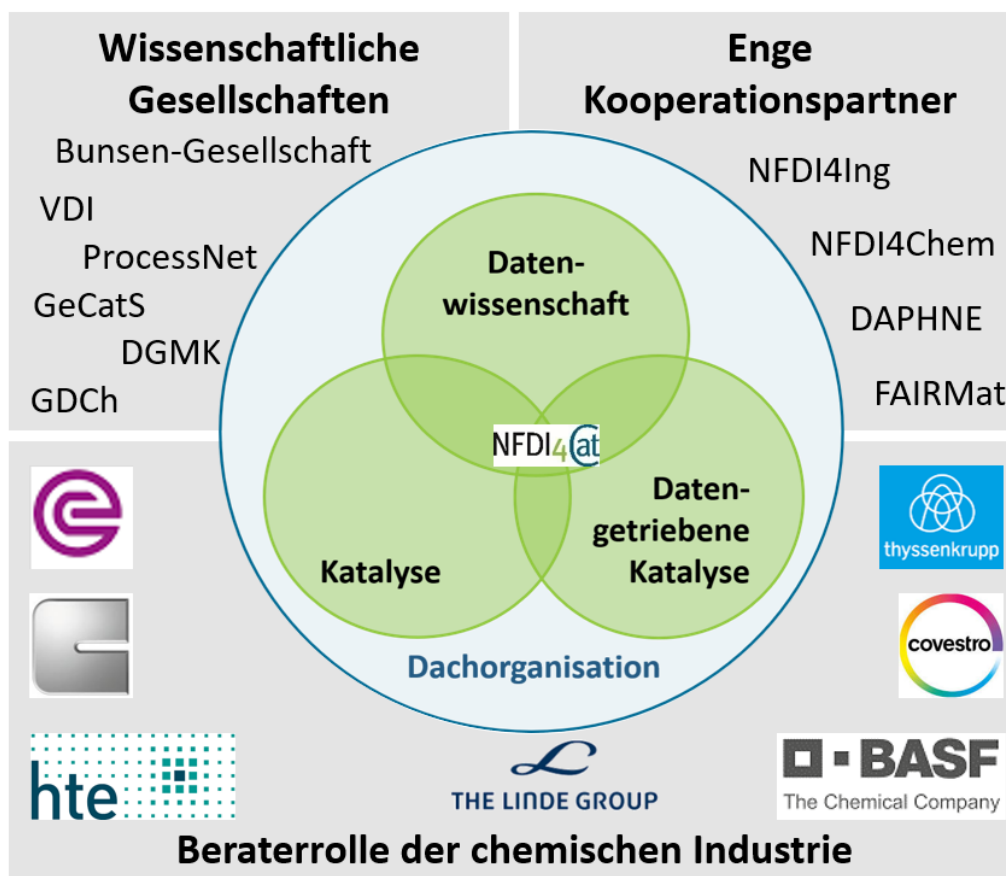


Abbildung 5: **Darstellung der beteiligten Institutionen:** das NFDI4Cat-Kernkonsortium (blauer Kreis), Industriepartner in beratender Funktion und weitere Konsortien mit enger Zusammenarbeit innerhalb der NFDI.

Das Konsortium bündelt nicht nur eine große Bandbreite an vorhandenem Know-how, sondern auch an Hardware, Repositorien und Software-Werkzeugen, auf die aufgebaut werden kann, um eine gezielte, effiziente und fächerübergreifende Arbeit zu gewährleisten.

4 Fazit

Die NFDI eröffnet einzigartige Möglichkeiten, das Forschungsdatenmanagement in vielen Disziplinen nachhaltig zu etablieren. Für die Katalyse als stark interdisziplinäre Wissenschaft mit hohem Anwendungsbezug ist NFDI4Cat die Gelegenheit, alle Teildisziplinen durch gemeinsame Nutzungsmöglichkeiten von Daten zu integrieren. Als Basis dienen gemeinsam erarbeitete Konzepte, Vokabularien und Ontologien. Individuell erhobene Daten werden so für die Community verfügbar, analysierbar und wiederverwendbar, und damit Teil eines integrierten Datennetzes. Diese Form der digitalen Vernetzung eröffnet zahlreiche neue datenbasierte Forschungsansätze und ermöglicht so die langfristige Vernetzung des Wissens in der Katalyse. NFDI4Cat wird als nationales Konsortium in der Lage sein, die für Deutschland spezifischen und rechtlichen Anforderungen zu erfüllen, so dass Forschende an deutschen Bildungseinrichtungen zukünftige internationale Standards für den Datenaustausch mitgestalten und eine führende Rolle in internationalen Forschungskonsortien einnehmen können.