

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

Forschungsdatenmanagement für alle: Universitätsweite Einführung von Chemotion ELN

Theo Benderⁱ Christoph Brüningⁱⁱ Daniel Bellingerⁱⁱ
Thomas Schmidpeterⁱⁱ Ulrich Schatzschneiderⁱⁱⁱ

2025

Zitiervorschlag

Bender, Theo, Brüning, Christoph, Bellinger, Daniel, Schmidpeter, Thomas, und Schatzschneider, Ulrich. 2025. Forschungsdatenmanagement für alle: Universitätsweite Einführung von Chemotion ELN. *Bausteine Forschungsdatenmanagement. Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von Forschungsdatenmanagerinnen und -managern* Nr. 2/2025: S. 1-9. DOI: [10.17192/bfdm.2025.2.8761](https://doi.org/10.17192/bfdm.2025.2.8761).

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

ⁱ Johannes Gutenberg-Universität Mainz. ORCID: [0009-0004-4064-6065](https://orcid.org/0009-0004-4064-6065)

ⁱⁱ Julius-Maximilians-Universität Würzburg

ⁱⁱⁱ Julius-Maximilians-Universität Würzburg, ORCID: [0000-0002-1960-1880](https://orcid.org/0000-0002-1960-1880)

Abstract

In diesem Artikel möchten wir aus Sicht der Beteiligten von den Erfahrungen berichten, die mit der Einführung eines Elektronischen Laborjournals (engl. electronic lab notebook, ELN) an der Julius-Maximilians-Universität Würzburg gemacht wurden. Mit der zunehmenden Digitalisierung von Forschung wächst der Druck auf die Akteure, ihren Workflow ebenfalls zu digitalisieren. Die instituts- oder wie im vorliegenden Fall universitätsweite Einführung eines ELN ist eine komplexe Aufgabe, deren erfolgreiche Umsetzung und Akzeptanz durch die Forschenden von vielen Faktoren abhängt. Dabei ist das gewählte ELN, in diesem Fall Chemotion ELN, nicht für alle Fachbereiche gleichermaßen geeignet, die Auswahl berücksichtigt vor allem die Bedürfnisse der Chemie und angrenzender Forschungsgebiete. Insofern können noch weitere ELN folgen. Dennoch kann das gewählte ELN gerade durch seine Anpassbarkeit für weitere Fachbereiche interessant sein. Somit zeigt der Weg, den die Universität Würzburg prototypisch gegangen ist, eine kostengünstige und gelungene Einführung eines ELN, wie sie auch an anderen Universitäten erfolgen kann.

Einführung

Wer in einem (chemischen) Labor arbeitet, braucht Aufzeichnungen: Zu den Vorüberlegungen, zum Versuchsaufbau, zu Messungen und deren Ergebnissen, zu Notizen etc. In der Chemie hat sich über Jahrhunderte nahezu nichts an der Art der Aufzeichnungen geändert: Von Hand geschriebene Informationen in gebundenen Laborbüchern auf Papier, heute oft ergänzt durch eingeklebte Bilder von Messergebnissen. Computer haben sich in den letzten 40 Jahren hingegen um ein Vielfaches beschleunigt.

Mit der Digitalisierung von Forschung ist bereits der *input*, die Entstehung von Informationen digital, zum Beispiel als Daten aus Analysegeräten wie NMR- oder Massenspektrometern. Auch der *output*, die Publikation in wissenschaftlichen Fachzeitschriften, erfolgt in der Regel digital. Vor diesem Hintergrund verursacht ein von Hand geschriebenes Laborjournal einen Medienbruch, der Folgearbeiten erfordert. Das Abtippen von Messdaten ist nicht nur aufwändig, sondern auch fehleranfällig. Händisch erfasste Messdaten zu Publikationen hinzuzufügen, ist nur schwer möglich. Offene oder gar FAIRe Daten (siehe Wilkinson et al., 2016) zu veröffentlichen, ist auf diese Weise praktisch nicht umsetzbar. Für die Einführung eines ELN mit all den Vorteilen, die sich ergeben (s. u.), steht an der Universität Würzburg zudem auch die Synergie von Forschung und Lehre im Fokus. So profitiert die Lehre aus dem Erfahrungsschatz, der unter der Verwendung in der Forschung gemacht wird bei gleichzeitiger Grundsteinlegung des Wissens bei den Studierenden und künftigen Forscher*innen auf dem Weg ins komplett FAIRe und digitale Labor.

ELN haben eine Reihe von Vorteilen:

Digitale Basis: Ein ELN (Adam et al., 2023) bietet die Möglichkeit, alle Labortätigkeiten in einer Software zu erfassen, sie mit digitalen Messdaten zu verknüpfen und für eine anschließende (Daten-)Publikation mit Metadaten zu versehen. Damit existiert eine Basis zu digitalem Forschungsdatenmanagement (FDM), wie es die Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG fordert (Forschungsgemeinschaft, 2022).

Druck der Verlage: Wissenschaftsverlage können in naher Zukunft die Veröffentlichung von Rohdaten verpflichtend machen (Parks et al., 2023). Bei Röntgen-Kristallstrukturen ist das bereits seit vielen Jahren der Fall: Wer die zugrundeliegenden Daten nicht in einem empfohlenen Repositorium (z. B. Cambridge Structural Database (Taylor & Wood, 2019) hinterlegt, kann keinen Artikel mit einer Kristallstruktur in den Zeitschriften der International Union of Crystallography – und vielen anderen – publizieren (Journals, n.d.).

Backup-Optionen: Datensicherheit im FDM ist heutzutage von entscheidender Bedeutung. Ein ELN liefert Sicherheitsfeatures, weil alle Forschungsdaten auf zentralen Servern gespeichert werden, die sich in Backup-Routinen einbinden lassen.

Zeitersparnis: Das Erstellen von Reports gehört zu den Standardaufgaben in der Forschung: Supporting Informations (SI) in der Chemie sind oft 100 Seiten und länger. Wer seine Daten im ELN korrekt pflegt, kann die SI mit wenigen Mausklicks generieren.

Dennoch nutzen erst 30 % der Chemiker*innen ein ELN (Ortmeyer et al., 2024). Wie die gelungene Implementierung eines ELN in der Lehre aussehen kann, zeigt die Umsetzung in Würzburg.

Umsetzung

Die Einführung eines zentral betriebenen ELN für die Fakultät für Chemie und Pharmazie der Universität Würzburg beginnt im Jahr 2019, initiiert durch einen Austausch auf einem Workshop in Köln. Ulrich Schatzschneider, Professor für Bioanorganische Chemie, wird von Prof. Sonja Herres-Pawlis (RWTH Aachen) auf das NFDI4Chem-Konsortium und dessen Ziele aufmerksam gemacht (NFDI4Chem, n.d.), die darin bestehen, Infrastruktur und Wissen für Forschungsdaten in der Chemie bereitzustellen (zur Aufgabe der NFDI siehe Kraft et al., 2021). Eine anschließende Anfrage beim Dekanat bezüglich des Einsatzes digitaler Tools im Fachbereich Chemie und Pharmazie zeigt eine geringe Verwendung auf. Da gleichzeitig das Universitätspräsidium eine ähnliche Anfrage ans Dekanat stellt, wird dort die Dringlichkeit der Thematik offensichtlich.

Schatzschneider übernimmt daraufhin die Verantwortung für die Einführung eines ELN an der Fakultät. Zu diesem Zeitpunkt nutzen einzelne Arbeitsgruppen eigene Software. Ein zentrales ELN ist jedoch effizienter, da Admin-Tätigkeiten wie professionelles

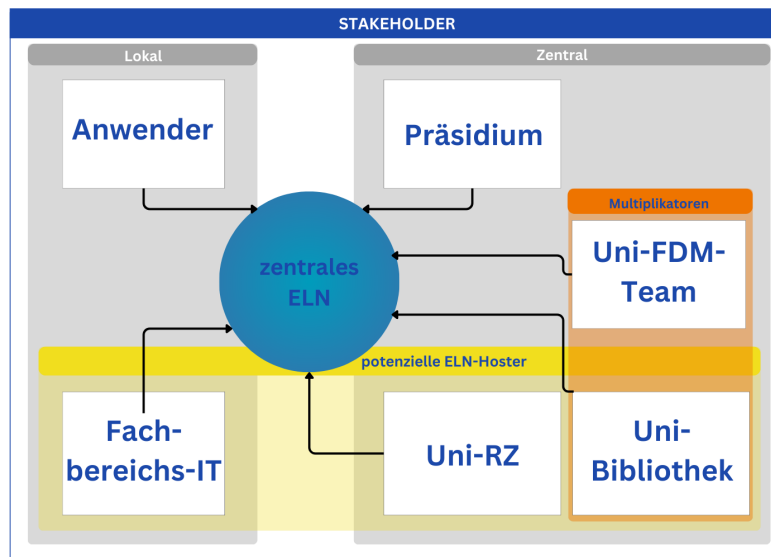


Abbildung 1: Stakeholder für ein zentrales ELN. Neben den Anwender*innen sind dies die Gruppe der potenziellen Hosts: Fachbereichs-IT, Uni-Rechenzentrum (RZ) und Uni-Bibliothek. Diese sowie universitäre Forschungsdatenmanagement (FDM)-Gruppen sind zusätzlich wichtige Verteiler. Das Präsidium nimmt eine Sonderstellung ein, weil es den legalen und möglicherweise auch finanziellen Rahmen setzt.

Hosting, Update- und Benutzerrechte-Verwaltung und Backup auf diese Weise nur einmal anfallen. Hinzu kommt, dass das Rechenzentrum (RZ) der JMU Würzburg die Strategie verfolgt, Dienste grundsätzlich universitätsweit und nicht nur für einzelne Fachbereiche anzubieten. Aus der Idee eines ELN für seinen Arbeitskreis wird ein universitätsweites Projekt. Dies ist durchaus auch im Interesse der Hochschulleitung, weil eine vorhandene ELN-Infrastruktur mittlerweile für Exzellenzanträge oder andere große Verbundprojekte nachgewiesen werden muss.

Infolgedessen vergrößert sich der Kreis derjenigen, für die das ELN potenziell relevant ist. Gespräche mit zentralen Stellen wie der Universitätsbibliothek folgen (Abbildung 1). Zum damaligen Zeitpunkt wird am RZ bereits ein kommerzielles ELN gehostet. Es ist jedoch nicht für die Chemie geeignet, da es weder die Suche nach chemischen Strukturformeln noch das struktur- bzw. reaktionsorientierte Arbeiten unterstützt und zudem lizenzpflichtig ist. Obwohl das RZ in Würzburg üblicherweise für eine Aufgabe nur ein Tool anbietet, gilt das nicht für ELNs. Das RZ erkennt die unterschiedlichen Anforderungen verschiedener Fachbereiche an, das neue ELN soll daher weder das bestehende ablösen, noch können und sollen alle Fakultäten auf das neue ELN verpflichtet werden.

Für die Auswahl eines geeigneten ELN kommen der ELN-Wegweiser der ZBMed (Adam & Lindstädt, 2020) sowie der ELN-Finder (<https://eln-finder.ulb.tu-darmstadt.de/home>)

der TU Darmstadt zum Einsatz. Darin werden für die Chemie 21 ELNs gelistet. Bei der Suche in Würzburg stellt sich das Open-Source-ELN Chemotion (<https://chemotion.net/>) als geeignete Alternative heraus.

Entscheidungskriterien dafür sind

- Open-Source, lizenzfrei, keine Bindung an kommerzielle Abomodelle,
- ein „kurzer Draht“ zum Entwicklerteam für Support, aber auch Integration in die aktive Gestaltung und Entwicklung,
- Integrierbarkeit in Uni-Infrastruktur (Nutzer*innen und Datenverwaltung),
- Datensicherheit,
- die spezielle Optimierung für die Chemie,
- die Importschnittstellen, mit denen Messdaten vieler Gerätehersteller direkt eingelesen werden können und
- die Vereinfachung von Daten- sowie Artikelpublikationen.

In regelmäßigen Gesprächen mit allen Beteiligten aus den Fachbereichen an der Fakultät für Chemie und Pharmazie, dem Rechenzentrum und der Fachbereichs-IT werden die Erwartungen der Forschenden mit den Leistungsanforderungen des Rechenzentrums abgestimmt. Ein Schwerpunkt liegt auf der Integration des ELN in bestehende Tool-Chains und die Authentifizierung mittels Shibboleth (<https://www.shibboleth.net/>), einem Single-Sign-On-Verfahren. Mit der Benutzer*innen-Authentifizierung über Shibboleth wird es möglich, dass Benutzer*innen während der gesamten Tätigkeitsdauer an der Universität eine einzige Kennung verwenden und auf die Daten zugreifen können, und zwar über alle Fakultäten hinweg.

Zeithorizonte

Die Erfahrungen in Würzburg zeigen, dass für eine Verhandlungsphase auf Universitätsebene genug Zeit eingeplant werden muss, damit Zuständigkeiten und Kostenübernahmen zufriedenstellend geklärt werden können. Bezüglich Datenschutz und Rechtskonformität wird die Stabsstelle aus dem Rechenzentrum im Prozess relativ früh 2022-2023 involviert. Auch der Schutz der Mitarbeiter*innen vor einer Arbeitsüberwachung durch Vorgesetzte kann durch die Wahl des ELN berücksichtigt werden. Chemotion ermöglicht eine vollständig nutzer*innenzentrierte Kontrolle: Die Freigabe von Daten erfolgt nur auf konkrete Freigabe durch die*den Nutzenden.

Die Besetzung einer Stelle mit entsprechenden Anforderungen an IT-Fachwissen erweist sich als herausfordernd und dauert lange. Als sich der neu eingestellte IT-Mitarbeiter ab Mai 2023 um die Bereitstellung des ELN kümmern kann, geht es schnell. Innerhalb von vier Wochen laufen die ersten Testserver, Anfang des Wintersemesters 2023/24 startet der offizielle Betrieb. Mit der wachsenden Zahl von 119 Nutzer*innen im März 2025 und dem Einpendeln der Bedarfe werden nun auch die Device Integration und weitere Anpassungsmöglichkeiten wie die Verwendung als Gefahrgutverzeichnis etc. in

den Fokus gerückt. Die Integration von Geräten auf Fachbereichs- bzw. Gruppenebene wird durch die Fachbereichs-IT gestützt, aber auch dezentral in den Arbeitsgruppen organisiert und betreut. Für 2025 werden dann die ersten Geräte und automatisierten Workflows von der Messung hin zum Journal starten können.

Kosten

Das Konzept der Total Cost of Ownership ist als ein Verfahren entwickelt und inzwischen standardisiert worden, das alle offenen und versteckten, sofortigen und zukünftigen, einmaligen und dauerhaften Kosten einer Erwerbsentscheidung zu berücksichtigen versucht (Weber, n.d.). Es wurde hier vor allem zur Gegenüberstellung der Kosten bei zentraler bzw. dezentraler Installation eines oder mehrerer ELN verwendet, wie sie im Folgenden aufgeführt werden.

Erwerbs-, Lizenz-, aber auch Verwaltungskosten (Vertragsgestaltung etc.): Mit Chemotion ELN hat sich die JMU Würzburg für ein Open-Source-Produkt entschieden, wodurch diese Kosten – wie bei Open-Source üblich – entfallen.

Kosten für dezentrale ELN: Durch das zentrale Hosting entfallen dezentrale Betriebskosten. Die Betreuung von Rollen und Rechten erfolgt in den Arbeitskreisen, sodass hier geringfügig Arbeitszeit entsteht.

Zentrale Betriebs- und Personalkosten im RZ: Neue Softwareinstallationen werden meist auf „virtuellen Maschinen“ installiert, das sind durch Software gekapselte Teile eines physischen Servers. Die Anfangsinvestitionen sind daher gering bis vernachlässigbar. Mit zunehmender Nutzung kann aber ein eigener Server notwendig werden. Die Betreuung verursacht in Würzburg etwa 0,25 VZÄ einer Administratorenstelle. Diese Kosten hat das Präsidium der Universität übernommen. Der Speicherbedarf im Rechenzentrum ist in der Anfangsphase vernachlässigbar, kann aber mit zunehmendem Einsatz relevant werden. In der Chemie fallen vergleichsweise geringe Datenmengen an, durch redundante Systeme und Backups potenzieren sich jedoch die Platzbedarfe.

Supportkosten: Entfallen, da bei Chemotion ELN der Support kostenfrei angeboten wird.

Als In-Kind-Leistung beteiligen sich ELN-Anwender*innen der JMU an der Weiterentwicklung der Software durch Bugmeldungen, Verbesserungsvorschläge und User-Feedback.

Schulungen

Obwohl Grundfunktionen oftmals schnell verständlich sind, erfordert die effiziente Nutzung eines so umfangreichen Tools wie eines ELN eine gründliche Einführung.

Für das Chemotion ELN existieren vielfältige Schulungsangebote (NFDI4Chem, [n.d.](#)) seitens des Fachkonsortiums NFDI4Chem. Diese umfassen Basiskurse für Forschungsdatenmanagement, Anfänger- und Fortgeschrittenenkurse für Chemotion ELN sowie für jeden Bedarf individuell buchbare Schulungen inhouse und online. Dank dieser Angebotspalette war es nicht notwendig, ein umfassendes Schulungskonzept an der Universität Würzburg zu entwickeln. Statt dessen greift die JMU Würzburg auf die Angebote des NFDI4Chem-Konsortiums zurück.

Kurz vor dem offiziellen Start der Anwendung werden Ende September 2023 zwei Trainerinnen von NFDI4Chem für einen zweitägigen Workshop vor Ort in Würzburg eingeladen, an dem die ersten 30 Anwender*innen teilnehmen. Weitere Anfangs- und Fortgeschrittenenkurse werden bedarfsorientiert geplant.

Einsatz in der Lehre

In der Lehre ergeben sich besondere Vorteile eines ELN. Studierende profitieren von der Zeitersparnis. Für Progress Reports vor der Lehrkraft und der Gruppe benötigt der Übertrag von Daten aus dem Papier-Notizbuch in eine Präsentation oft mehrere Stunden. Bei Verwendung eines ELN prüfen Studierende in ihrem Projekt, ob alles eingetragen ist, und können sofort vortragen.

Dozierende profitieren von der interaktiven Arbeit am geteilten Bildschirm, denn so kann man Labordaten gemeinsam diskutieren und analysieren. Früher haben Studierende in Besprechungen Kopien ihrer Spektren gezeigt, Nachfragen konnten erst beim nächsten Treffen geklärt werden. Wenn heute etwas auffällig ist, öffnen Dozent*innen mit ihren Studierenden den Spektren-Editor, zoomen in die Daten und können sofort besprechen, was zu tun ist. Im Gruppenseminar kann das ELN auf einem Projektor oder Großbildschirm geteilt werden, sodass alle mit schauen und lernen können.

Für die Zukunft ist geplant, das ELN bereits in die Praktika des Bachelorstudiengangs zu integrieren, so wie es bereits an der RWTH Aachen (Fink et al., [2023](#)) und RPTU Kaiserslautern umgesetzt wird. Damit erhalten Studierende zu einem frühen Zeitpunkt ihres Studiums Kontakt mit digitalen Daten-Tools, sodass sie bereits für ihre Bachelorarbeit und dann in allen späteren Stationen auf diese Kenntnisse zurückgreifen können.

Fazit

Wer mit digitalen Labordaten arbeitet, kommt um ein ELN langfristig kaum herum. Dabei ist die universitätsweite Einführung eines ELN sinnvoll. Denn je zentraler die Installation, desto geringer ist der Aufwand pro User. Insbesondere, wenn ELN generische Funktionen haben, sind sie instituts- und gegebenenfalls sogar fachbereichsübergreifend einsetzbar.

Tipps für eine gelungene Implementierung

- Zeit einplanen.
- Frühzeitig alle Nutzer*innen und Stakeholder einbinden. Dazu gehören lokale FDM-Teams, Universitätsbibliotheken, Instituts-IT, Uni-Rechenzentren, Präsidium.
- Total Cost of Ownership planen: Kaufkosten, Lizenzen, Personalkosten für Administration, Serverkosten.
- Zentralen Anmeldedienst berücksichtigen.
- Skalierbaren Datenspeicher verwenden (für zunehmende Nutzung).
- Frühzeitig Rechte- und Rollenkonzept planen.
- Schulungskonzept erstellen oder einkaufen.
- Nachnutzbarkeit der Daten berücksichtigen: Können die Datensätze übernommen werden, z. B. bei Wechsel des ELN. Vorsicht vor proprietären Formaten?

Danksagung

Das NFDI4Chem-Konsortium dankt der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Förderung ihrer Arbeit (Projektnr. 441958208).

Literaturverzeichnis

- Adam, B., Bossert, L. C., Cyra, M. A., Grönewald, M., Janosch, S., Knipprath, N., Lindstädt, B., Schreyer, L., Strauß, F., Timm, H., Valencia-Schneider, M., Schröder, M., Zerr, S., & Zulauf, B. (2023). Raus aus dem Kladdenchaos: Elektronische Laborbücher als zentrale Dienstleistung – Erfahrungen und Empfehlungen. *Bausteine Forschungsdatenmanagement*, 5, 2–19.
<https://doi.org/10.17192/bfdm.2023.5.8553>
- Adam, B., & Lindstädt, B. (2020). *Elektronische Laborbücher im Kontext von Forschungsdatenmanagement und guter wissenschaftlicher Praxis – ein Wegweiser für die Lebenswissenschaften: ELN-Wegweiser* (2. aktualisierte und erweiterte Fassung). ZB MED – Informationszentrum Lebenswissenschaften.
<https://doi.org/10.4126/FRL01-006422868>
- Fink, F., Hoffmann, A., & Herres-Pawlis, S. (2023). Results of a Three-Year Survey on the Implementation of Research Data Management and the Electronic Laboratory Notebook (ELN) Chemotion in an Advanced Inorganic Lab Course. *Journal of Chemical Education*, 100(11), 4287–4297.
<https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00380>
- Forschungsgemeinschaft, D. (2022). *Guidelines for Safeguarding Good Research Practice. Code of Conduct*. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827>

- Journals, I. (n.d.). *Data-sharing policy*. Zugriff 10. Juli 2025 unter <https://journals.iucr.org/services/datasharingpolicy.html>
- Kraft, S., Schmalen, A., Seitz-Moskaliuk, H., Sure-Vetter, Y., Knebes, J., Lübke, E., & Wössner, E. (2021). Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) e. V.: Aufbau und Ziele. *Bausteine Forschungsdatenmanagement*, 2, 1–9. <https://doi.org/10.17192/bfdm.2021.2.8332>
- NFDI4Chem. (n.d.). *Workshops – ein Überblick*. Zugriff 10. Juli 2025 unter <https://www.nfdi4chem.de/de/workshops/>
- Ortmeyer, J., Hausen, D., & Herres-Pawlis, S. (2024). Wo befinden wir uns in der digitalen Transformation wirklich? *Nachrichten aus der Chemie*, 72(4), 15–17. <https://doi.org/10.1002/nadc.20244142251>
- Parks, N. A., Fischer, T. G., Blankenburg, C., Scalfani, V. G., McEwen, L. R., Herres-Pawlis, S., & Neumann, S. (2023). The current landscape of author guidelines in chemistry through the lens of research data sharing. *Pure and Applied Chemistry*, 95(49), 439–450. <https://doi.org/10.1515/pac-2022-1001>
- Taylor, R., & Wood, P. A. (2019). A million crystal structures: The whole is greater than the sum of its parts. *Chemical Reviews*, 119(16), 9427–9477. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00155>
- Weber, J. (n.d.). *Total Cost of Ownership*. Zugriff 10. Juli 2025 unter <https://wirtschaftslexikon.gabler.de/definition/total-cost-ownership-49401/version-272634>
- Wilkinson, M. D., Dumontier, M., Aalbersberg, I. J., Appleton, G., Axton, M., Baak, A., Blomberg, N., Boiten, J.-W., da Silva Santos, L. B., Bourne, P. E., Bouwman, J., Brookes, A. J., Clark, T., Crosas, M., Dillo, I., Dumon, O., Edmunds, S., Evelo, C. T., Finkers, R., ... Mons, B. (2016). The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Scientific Data*, 3(1). <https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18>