

Zusammenfassung

Helmholtz Open Science Workshop

„Elektronische Laborbücher“

Frank Lange
(<https://orcid.org/0000-0002-9346-6031>)

Mein Eindruck

- vorgestellte Systeme mit Fokus auf Natur-/Ingenieurwiss. bzw. biochemisch-medizinischen Forschungsbereich
- nur Info-Veranstaltung; kein „übergeordnetes Ziel“ (=Vernetzung der Helmholtz-Institute untereinander, um ELN-Projekte gemeinsam anzugehen)
- keine Diskussion zu Risiken (z.B. *vendor-lock-in*)
- z.T. verschiedene Anwendungsfälle mit ähnlichen Datenstrukturen behandelt (Nicole Jung, KIT: „Warum haben wir uns nicht schon vor 3 Jahren getroffen?“)

Vorgestellte ELN-Systeme / -Szenarien

„weißes Blatt“ / generisch

- iLabber/BIOVIA Notebook am DKFZ
- eLabFTW
- Labfolder

strukturiert / fachspezifisch

- MEDUSA (ELN+LIMS, Geowiss.)
- JuliaBase, ELN PVcomB (Materialwiss., Ing.-Wiss.)
- Chemotion ELN (Chemie/Synthese)
- UniMed Göttingen: RSpace + Probenmanagement (Medizin, Biochemie)
- OpenBIS (ELN+LIMS, Molekularbiologie, Biochemie)
- Dotmatics (ELN+LIMS, Chemie/Synthese, Biologie)

blau = Freie Software



ELNs und Repositorien

Use case: ELN-Eintrag soll mit wenigen Klicks ins Repositorium exportiert werden

The screenshot displays the RSpace web interface. On the left, a workspace titled 'ETL Script' contains R code for data processing. A modal window titled 'Required Information for Repository Deposit' is open, prompting the user to choose a repository from 'DATAVERSE' or 'FIGSHARE'. Below this, a 'Göttingen/eResearch Alliance' banner is visible. The main content area shows the 'electroniclabnotebook' dataset page, including author information (Harald Kusch), a search bar, and a list of results for 'ETL Script 0.1' dated Nov 17, 2017. The right sidebar displays citation metadata, including the Dataset Persistent ID (doi:10.5072/TXS37) and the author's ORCID.

Three-click action: Data export into Dataverse repository

Kusch *et al.*: Pilot integration of an electronic lab notebook and an open source research data repository as part of a modular biomedical research data platform

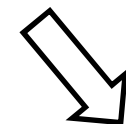
https://os.helmholtz.de/fileadmin/user_upload/os.helmholtz.de/Workshops/elN18hzi_kusch.pdf

ELNs und Repositorien

Use case: ELN-Eintrag soll mit wenigen Klicks ins Repositorium exportiert werden

The screenshot displays the Chemotion ELN interface. On the left, a sidebar lists various synthesis procedures. The main area shows a chemical reaction: benzene + prop-1-ene reacting with O₂ at 22 °C to produce propan-2-one (100% yield) and phenol (0% yield). Below the reaction, there are tabs for Scheme, Properties, References, Analyses, Green Chemistry, and Zotero. A table of starting materials is visible, listing FRL-8 prop-1-ene and FRL-7 benzene. Below the table, there are sections for Reactants (O₂) and Products (FRL-9 FRL-R2-A propan-2-one and FRL-10 FRL-R2-B Phenol). At the bottom, a chemical structure of a complex molecule is shown, along with the text 'Published a week ago by Sylvia Vanderheiden-Schroen' and a 'View' button.

Chemotion ELN



Chemotion Repo



Repository for
molecules and
research data

Visibility and Impact

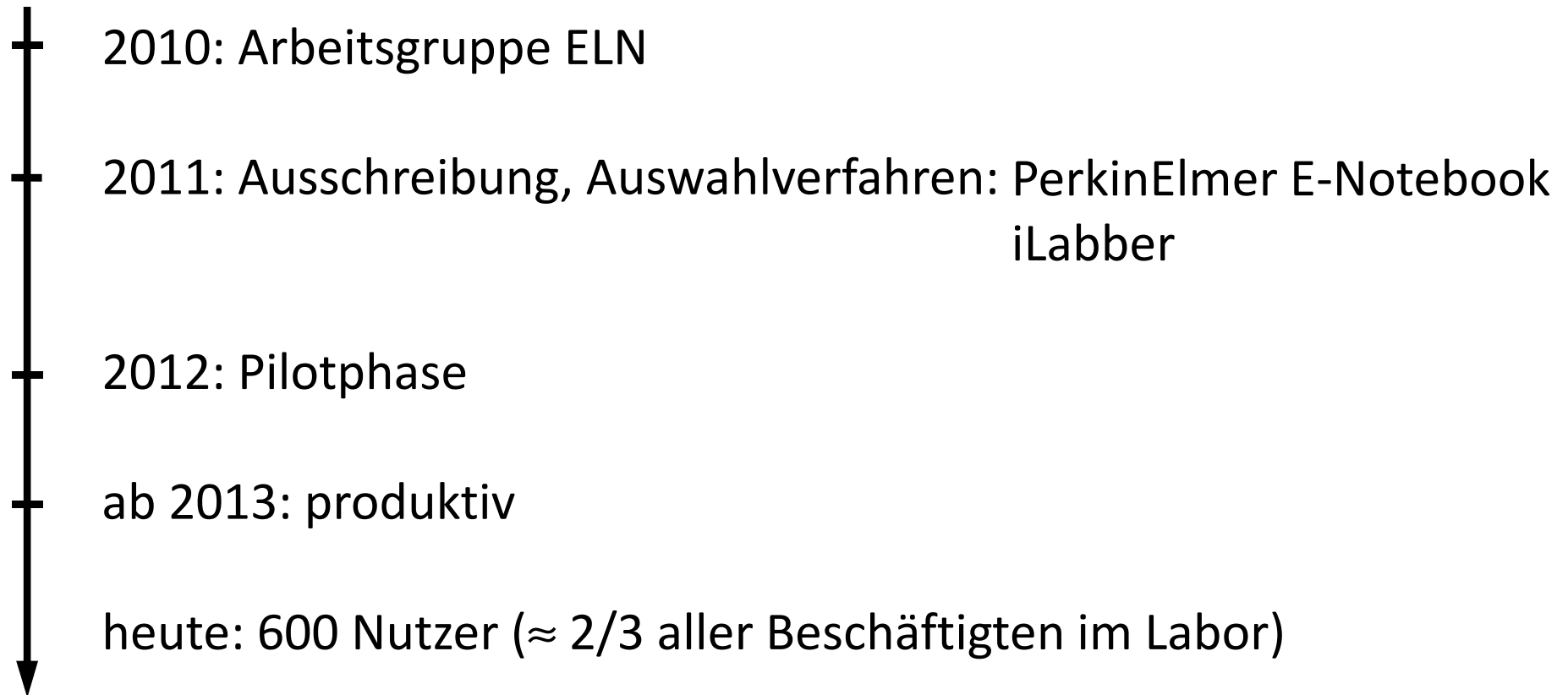
- Publish your structures, attach your characterization data, and make them citable via DOI
- Automated registration at various scientific data providers
- Long-term archival - from scientists for scientists



2015/01 Competition
supported by

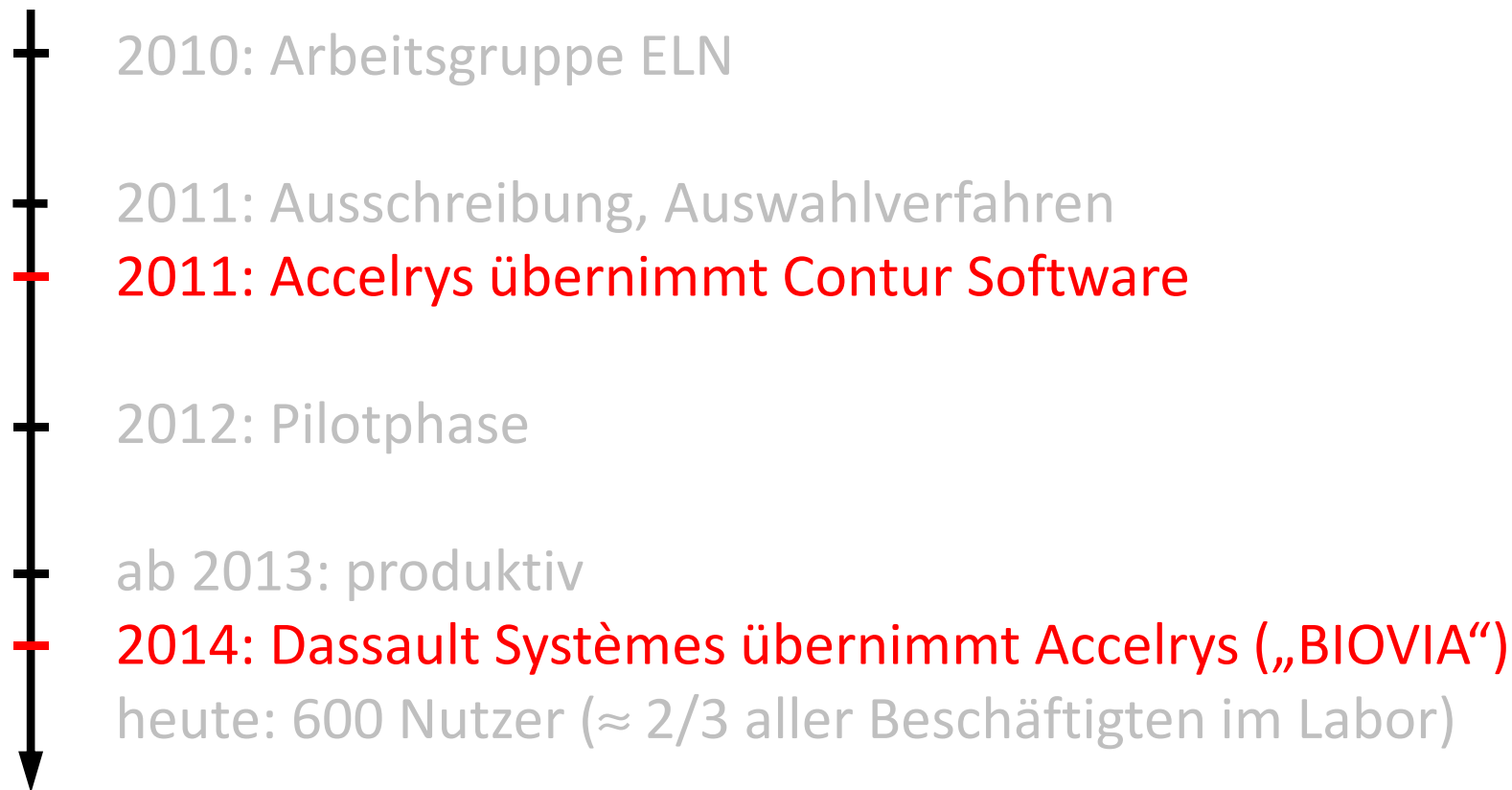
DKFZ: iLabber/BIOVIA Notebook

Chronologie



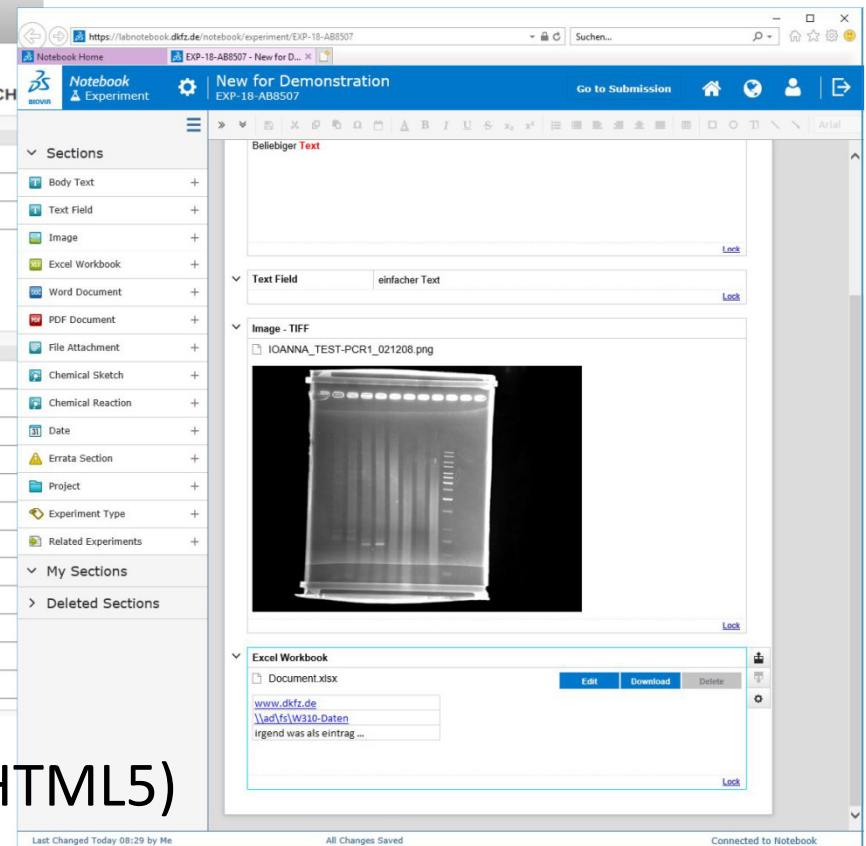
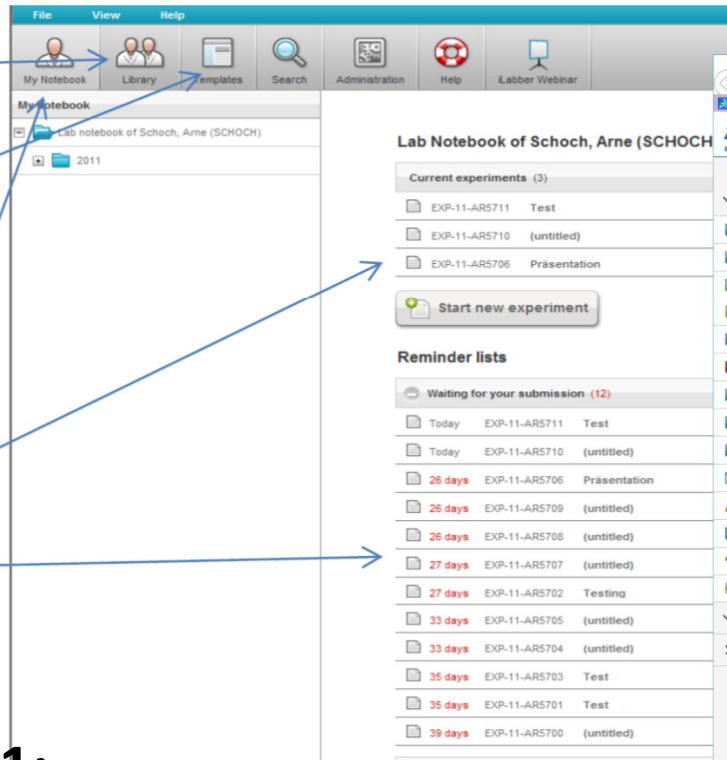
DKFZ: iLabber/BIOVIA Notebook

Chronologie

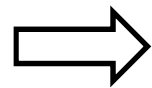


DKFZ: iLabber/BIOVIA Notebook

- Bibliotheksfunktion – Liste mit allen einsehbaren Journalen
- Erstellung von Templates
- „My Notebook“; Überblick über Aufgaben/Journale
- Selbst-erstellte Journale
- Journale, die auf Abzeichnung warten



Version 2011:
Webclient
Windows Fat Client



Website (HTML5)

Heiko Rosenfelder: Elektronisches Laborbuch

https://os.helmholtz.de/fileadmin/user_upload/os.helmholtz.de/Workshops/el18hzi_rosenfelder1.pdf

https://os.helmholtz.de/fileadmin/user_upload/os.helmholtz.de/Workshops/el18hzi_rosenfelder2.pdf



Leibniz-Institut für Pflanzenbiochemie | Frank Lange | 13.11.18



DKFZ: iLabber/BIOVIA Notebook

Dienstvereinbarung (Personalrat):

- keine Herabgruppierung; keine Leistungs- und Verhaltenskontrolle
- freiwillige Nutzung des ELN
- organisatorische Rollen

Einführungsphase:

- Werbung: Flyer, Newsletter, Aushänge, Wiki
- Schulungen für Benutzer; Gruppenadministratoren separat
- Support: Forum (mittlerweile eingeschlafen)

DKFZ: iLabber/BIOVIA Notebook

Integration von Office-Dokumenten im ELN

Unterschiedliche Konzepte:

- docx bzw. xlsx als Textfeld bzw. Tabelle expandieren
- in die Cloud schieben lassen und dort bearbeiten (SaaS)
- via WebDAV-Transfer im lokalen Office bearbeiten
- BIOVIA Notebook: via Browser-Plugin (vendor-lock-in?)

Diskussionen

Lassen sich mobile Geräte sinnvoll mit ELNs nutzen? (Tablets bzw. Smartphones)

- Dirnagl & Hauer: Top-Funktionalität in Umfragen, aber die Notwendigkeit wird überschätzt.
- Rosenfelder (DKFZ): Scheitert praktisch bei Benutzung mit Handschuhen.
- Jung (KIT): Das Interesse nimmt schnell ab. Man sollte eher in ordentliche PCs im Labor investieren.

Letzte Folie

Folien & Abstracts des Workshops:

<https://os.helmholtz.de/bewusstsein-schaerfen/workshops/helmholtz-open-science-workshop-elektronische-laborbuecher/>

Neu: Artikel Elektronische Laborbücher im Forschungsdaten-Wiki

[http://www.forschungsdaten.org/index.php/Elektronische Laborb%C3%BCcher](http://www.forschungsdaten.org/index.php/Elektronische_Laborb%C3%BCcher)

Danke für Ihre Aufmerksamkeit!

Fragen? Anmerkungen?

