

# KI-gestützte Lernumgebungen für naturwissenschaftliche Laborpraktika: Integration von Simulationen, virtuellen Laboren und maschinellem Lernen

## Persönliche Motivation

Als Fellowship-Bewerber motiviert mich, Prof. Dr. Christoph Steinbeck, die Überzeugung, dass moderne chemische Ausbildung die digitale Transformation des Faches reflektieren muss. Durch meine langjährige Erfahrung in Chemieinformatik und KI-basierter Werkzeuge für die Chemie [1] sowie als Leiter des NFDI4Chem-Konsortiums [2] kann ich ein umfassendes digitales Lehrkonzept realisieren, das den Anforderungen moderner wissenschaftlicher Praxis gerecht wird.

In enger Zusammenarbeit mit Dr. Kevin Maik Jablonka, der als Experte für computergestützte Materialwissenschaft und virtuelle Laborumgebungen das Projekt unterstützt, werden wir die komplementären Expertisen verbinden, um sowohl materialwissenschaftliche als auch molekulare Aspekte in der digitalen Chemieausbildung abzudecken.

In meiner Forschung und Lehre erlebe ich täglich, dass Studierende nicht nur chemisches Fachwissen benötigen, sondern auch die Fähigkeit, mit modernen KI-basierten Werkzeugen komplexe Probleme zu lösen. Die rasante Entwicklung von Methoden des maschinellen Lernens und künstlicher Intelligenz in der Chemie – vom computergestützten Moleküldesign bis hin zur automatisierten Versuchsauswertung – schafft neue Anforderungen an die Ausbildung, die in traditionellen Curricula bisher kaum abgebildet sind.

Ein besonderes Anliegen ist mir dabei die Vermittlung systemischen Denkens. Viele der drängendsten gesellschaftlichen Herausforderungen – vom Klimawandel über Energiespeicherung bis hin zu nachhaltigen Materialkreisläufen – sind komplexe systemwissenschaftliche Probleme, die ein integratives Verständnis verschiedener Disziplinen erfordern. Die Integration von KI-Methoden in die naturwissenschaftliche Ausbildung bietet eine einzigartige Chance, diese systemwissenschaftlichen Kompetenzen zu vermitteln, da KI-Methoden äußerst interdisziplinär sind.

Mit dem Fellowship möchte ich nun drei Ansätze – die Verknüpfung von Laborexperimenten mit Simulationen, die Entwicklung virtueller Labore und die Integration von KI-gestützter Datenanalyse – zu einem kohärenten Lehrkonzept zusammenführen und curricular verankern. Dabei ist mir besonders wichtig, dass die Studierenden nicht nur passive Nutzer dieser

Technologien sind, sondern ein tieferes Verständnis für deren Möglichkeiten und Grenzen entwickeln und lernen, KI-Werkzeuge kritisch in ihrer wissenschaftlichen Praxis einzusetzen.

## Problemstellung und Relevanz

Die derzeitige naturwissenschaftliche Ausbildung weist eine zunehmende Diskrepanz zur modernen Forschungs- und Berufspraxis auf. Wie eigene Umfragen zeigen, sind viele Absolventen unzureichend auf die digitale Transformation ihres Fachgebiets vorbereitet – beispielsweise kennen nur 23% der Chemiestudierenden die Anwendungen von maschinellem Lernen in ihrem Fach [3].

Vier zentrale Probleme stechen hervor:

- 1. Trennung von Experiment und Theorie:** Laborpraktika und theoretische Modelle/Simulationen werden meist getrennt vermittelt, obwohl in der modernen Forschung deren Integration entscheidend ist.
- 2. Begrenzte praktische Erfahrung:** Aufgrund von Zeit-, Material- und Sicherheitsbeschränkungen können Studierende nur eine limitierte Anzahl von Experimenten durchführen, was die Entwicklung eines intuitiven Verständnisses für naturwissenschaftliche Zusammenhänge erschwert.
- 3. Fehlende Kompetenzen in datengestützter Analyse:** Trotz der wachsenden Bedeutung von maschinellem Lernen in den Naturwissenschaften fehlen in den Curricula oft entsprechende Anwendungsmöglichkeiten.
- 4. Mangelnde Ausbildung im Forschungsdatenmanagement:** Obwohl professionelles Forschungsdatenmanagement heute als grundlegende wissenschaftliche Kompetenz gilt und über nationale Infrastrukturen wie die NFDI-Konsortien gefördert wird, ist es in der universitären Ausbildung kaum verankert. Studierende lernen selten, wie sie Daten FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) dokumentieren und speichern, was später zu Ineffizienzen und Qualitätsproblemen in der Forschung führt.

Diese Probleme sind in der naturwissenschaftlichen Ausbildung fächerübergreifend relevant und beeinträchtigen die Fähigkeit der Studierenden, ihr Wissen in komplexen Kontexten anzuwenden und interdisziplinär zu denken.

# Ziele und Innovation des Vorhabens

Das Fellowship-Projekt verfolgt folgende Ziele:

## 1. Integration von ELNs in Grundpraktika

Aufbauend auf meinen Erfahrungen als Leiter des NFDI4Chem-Konsortiums und in Zusammenarbeit mit NFDI FAIRmat werden elektronische Laborbücher (ELNs) systematisch in chemische Grundpraktika eingeführt. Durch diese frühe Einführung lernen Studierende direkt aktuelle Best Practices und werden zu "ELN-Native"-Wissenschaftlern ausgebildet, die digitale Dokumentation als Standard betrachten. Dies ist ein entscheidender Aspekt für die Zukunftsfähigkeit unseres Fachgebiets.

Konkret werden folgende Maßnahmen umgesetzt:

- Entwicklung interaktiver Kursmaterialien für die korrekte Nutzung der ELNs
- Integration der ELN-Funktionen in die Praktikumsaufgaben, darunter:
- Interaktive Datenanalyse direkt aus den erfassten Experimentdaten
- Kollaborative Arbeitsweisen durch Teilen und gemeinsames Bearbeiten von Protokollen
- Integration verschiedener Datenquellen in einem einheitlichen System

Die ELNs werden die Zusammenarbeit in den Laborkursen fördern, da Studierende auf Ergebnissen früherer Jahrgänge oder anderer Studierender desselben Jahrgangs aufbauen können. Forschungsdatenmanagement und -publikation werden zudem expliziter Bestandteil der Laborkurse: Studierende müssen ihre Daten aus den Laborkursen in Repositories exportieren und in ihren Laborberichten eine DOI hinterlegen. Dies vermittelt grundlegende Kompetenzen im Umgang mit FAIRen Daten, die in der modernen Wissenschaft unerlässlich sind.

## 2. Schaffung virtueller Laborumgebungen

Basierend auf den Vorarbeiten von Dr. Kevin Maik Jablonka im Rahmen des Cheminfo ELN werden interaktive, browser-basierte Anwendungen entwickelt, die auch ohne physischen Laborbesuch eingesetzt werden können [4,5]. Die virtuellen Labore spiegeln den tatsächlichen modernen Forschungsprozess wider, bei dem stets ein Wechselspiel zwischen Simulation und Experiment stattfindet.

Der Vergleich von Simulationsergebnissen und experimentellen Daten fördert das kritische Denken der Studierenden und regt sie an, über die Annahmen und Grenzen sowohl theoretischer als auch experimenteller Methoden zu reflektieren. Diese virtuellen Umgebungen ermöglichen:

- Exploration eines breiteren Spektrums an Experimenten ohne materielle Einschränkungen
- Wiederholung komplexer Versuche mit systematischer Variation von Parametern

- Vorbereitendes Training für anspruchsvolle oder sicherheitskritische Laborverfahren

### **3. Einführung KI-gestützter Datenanalyse**

Die Integration von Werkzeugen des maschinellen Lernens zur Analyse experimenteller Daten direkt in die Lehrveranstaltungen zeigt den unmittelbaren Nutzen und die Bedeutung von KI-Techniken für die chemische Laborarbeit. Die Grenzen und Voraussetzungen des maschinellen Lernens werden durch die direkte Anwendung auf selbst erhobene Daten erfahrbar gemacht.

Hierbei fließt meine Expertise in der KI-Forschung für Chemie ein, um intuitive Werkzeuge zu schaffen, die komplexe KI-Methoden zugänglich machen. Durch diese Herangehensweise wird zudem die interdisziplinäre Arbeit an der Schnittstelle von Chemie, Informatik und Datenanalyse gefördert, was den Studierenden hilft, Brücken zwischen traditionell getrennten Disziplinen zu schlagen.

### **4. Förderung des kritischen Denkens**

Studierende sollen nicht nur digitale Werkzeuge anwenden, sondern deren Grundlagen, Annahmen und Grenzen verstehen und kritisch reflektieren. Durch die Integration von Theorie (Simulationen), Praxis (Experimente) und Datenanalyse (KI) entsteht ein ganzheitliches Verständnis des wissenschaftlichen Prozesses.

Die Studierenden lernen:

- Experimentelle Ergebnisse mit Simulationen zu vergleichen und Abweichungen zu interpretieren
- Die Grenzen beider Ansätze zu verstehen und methodologische Einschränkungen zu erkennen
- Zu erfahren, wie KI-Methoden bei der Analyse komplexer Daten helfen können
- Zu verstehen, welche Voraussetzungen für verlässliche KI-Vorhersagen erfüllt sein müssen

Dieses kritische Verständnis ist angesichts der rasanten Entwicklung von KI in der Chemie essenziell für zukünftige Wissenschaftler.

Die Innovation meines Vorhabens liegt in der nahtlosen Integration dieser Technologien in bestehende Laborpraktika und deren curricularer Verankerung. Anders als bei vielen bestehenden Ansätzen werden digitale Werkzeuge nicht als separate Lerneinheiten behandelt, sondern direkt mit der experimentellen Arbeit verknüpft.

Ein besonderer Mehrwert entsteht durch die Verbindung mit den nationalen Forschungsdateninfrastrukturen NFDI4Chem und NFDI FAIRmat. Die entwickelten Lehrmaterialien basieren dadurch auf denselben Standards, die auch in der aktuellen

Forschung verwendet werden. Dies bereitet Studierende optimal auf moderne wissenschaftliche Arbeitsweisen vor und stellt sicher, dass die entwickelten Materialien als Open Educational Resources in einem nachhaltigen, national vernetzten Ökosystem bereitgestellt werden können.

## Implementierung und Zielgruppe

Das Vorhaben wird zunächst an der Friedrich-Schiller-Universität Jena pilotiert, wobei der Schwerpunkt auf den Grundpraktika der organischen Chemie liegt. Die Implementierung erfolgt schrittweise, beginnend mit der Nutzung von ELNs für die digitale Datenerfassung, dem Teilen von Daten und der Zusammenarbeit zwischen Studierenden. Diese inkrementelle Einführung ermöglicht es, Erfahrungen zu sammeln und das System kontinuierlich an die Bedürfnisse von Studierenden und Lehrenden anzupassen.

Für die Entwicklung der Kursmaterialien werden studentische Hilfskräfte eingebunden, die sowohl fachliche Expertise als auch die studentische Perspektive einbringen können. Die technische Umsetzung wird durch *In-kind*-Beiträge von Entwicklern unterstützt, die für die Anpassung und Bereitstellung der ELNs zuständig sind. Während und nach den Kursen wird systematisch Feedback von Studierenden durch Umfragen und Interviews gesammelt, um die Wirksamkeit der Maßnahmen zu evaluieren und kontinuierliche Verbesserungen vorzunehmen.

Nach erfolgreicher Erprobung und Optimierung an der FSU Jena soll die Implementierung auf weitere Laborpraktika ausgeweitet werden. Die Reichweite des Projekts umfasst damit jährlich etwa 50 Studierende. Nach erfolgreicher Erprobung ist eine Ausweitung auf weitere naturwissenschaftliche Fächer wie Physik und Materialwissenschaften geplant.

Ein zentrales Element meines Ansatzes ist die Bereitstellung aller entwickelten Materialien als Open-Source-Ressourcen. Sowohl das Kursbuch als auch die Infrastruktur für die ELNs werden unter offenen Lizenzen veröffentlicht, sodass andere Hochschulen die Materialien übernehmen und an ihre Bedürfnisse anpassen können. Dies fördert nicht nur die Nachhaltigkeit des Projekts, sondern trägt auch zur Verbreitung digitaler Lehrinnovationen in der chemischen Ausbildung bei.

# Evaluationsstrategie

Die Evaluation des Projekts erfolgt pragmatisch durch die Integration in bestehende Evaluationsstrukturen und gezielte zusätzliche Erhebungen:

## **1. Integration in bestehende Kursevaluationen**

Ich werde spezifische Fragen zu den digitalen Werkzeugen und ihrem Nutzen in die regulären Kursevaluationen integrieren. Dies ermöglicht eine effiziente Datenerhebung ohne zusätzlichen bürokratischen Aufwand und stellt die Vergleichbarkeit mit früheren Kohorten sicher.

## **2. Mid-Term-Feedback**

Während des Semesters werden kurze, fokussierte Umfragen durchgeführt, um zeitnah Anpassungen vornehmen zu können. Diese formative Evaluation erlaubt es, technische oder didaktische Probleme frühzeitig zu erkennen und zu beheben.

## **3. Qualitative Interviews**

Nach Abschluss der Kurse werden gezielte Interviews mit einer repräsentativen Gruppe von Studierenden durchgeführt. Diese liefern tiefere Einblicke in die Nutzerfahrung mit den implementierten Tools sowie Verbesserungsvorschläge aus erster Hand.

## **4. Feedback der Laborbetreuenden**

Die Laborassistent/innen und Tutor/innen, die die Praktika direkt betreuen, werden systematisch durch Interviews und spezifische Umfragen in die Evaluation eingebunden. Als direkte Lehrpersonen im praktischen Teil erleben sie sowohl die technischen Herausforderungen als auch die Lernfortschritte der Studierenden unmittelbar und können wertvolle Einblicke in die praktische Umsetzbarkeit und didaktische Wirksamkeit der digitalen Werkzeuge geben.

Potenzielle Risiken des Projekts liegen in technischen Hürden bei der Integration der Werkzeuge sowie in möglichen Akzeptanzproblemen bei Lehrenden und Studierenden. Diese Risiken werden durch intensive Schulungen für alle Beteiligten und eine schrittweise Implementation adressiert. Die enge Einbindung von studentischen Hilfskräften in die Entwicklung der Materialien stellt zudem sicher, dass die Perspektive der primären Nutzergruppe von Anfang an berücksichtigt wird.

Die Evaluationsergebnisse fließen direkt in die kontinuierliche Weiterentwicklung der digitalen Werkzeuge und didaktischen Konzepte ein und bilden die Grundlage für Entscheidungen über die Ausweitung des Ansatzes auf weitere Kurse und Fachbereiche.

# Nachhaltigkeitsstrategie

Zur langfristigen Verstetigung des Projekts sind folgende Maßnahmen geplant:

## **1. Curriculare Verankerung**

Die entwickelten digitalen Komponenten werden fest in die Modulbeschreibungen integriert und als fester Bestandteil der chemischen Ausbildung etabliert.

## **2. Verbreitung über nationale Forschungsdateninfrastrukturen**

Die erstellten Kursmaterialien werden über die NFDI-Konsortien (NFDI4Chem und NFDI FAIRmat) anderen Universitäten zur Verfügung gestellt. Dies ermöglicht eine breite Nachnutzung ohne zusätzlichen Aufwand und stellt sicher, dass die Materialien auch nach Projektende zugänglich bleiben.

## **3. Technische Nachhaltigkeit durch NFDI-Infrastruktur**

Die technische Infrastruktur wird nach der Projektlaufzeit durch die NFDI-Konsortien weiter gepflegt und betrieben. Da die technischen Komponenten auf den in den NFDI-Konsortien ohnehin betriebenen Systemen aufbauen, ist der zusätzliche Wartungsaufwand nach der initialen Entwicklung minimal.

## **4. Schulung von Lehrenden**

Eine Workshop-Reihe für Dozenten und Laborbetreuer zur Nutzung und Anpassung der Tools wird durchgeführt, um ein breiteres Kollegium zu befähigen, diese in ihren eigenen Lehrveranstaltungen einzusetzen. Die Schulungen werden aufgenommen und online bereitgestellt, um auch neue Mitarbeitende effizient einarbeiten zu können.

## **5. Finanzielle Nachhaltigkeit**

Aufgrund der geringen Wartungsanforderungen und der Integration in die NFDI-Infrastrukturen sind die langfristigen Kosten minimal. Der eventuell notwendige Aufwand für Anpassungen und Aktualisierungen kann aus den regulären Budgets der beteiligten Fachbereiche gedeckt werden.

## **6. Studentische Beteiligung**

Durch die Einbindung fortgeschrittener Studierender als Tutoren für die digitalen Komponenten wird nicht nur die Betreuungsqualität erhöht, sondern auch sichergestellt, dass das Wissen über die Systeme innerhalb der Studierendenschaft weitergegeben wird.

# Transferpotential

Die im Projekt entwickelten Konzepte und Werkzeuge besitzen ein hohes Transferpotential, das sich auf mehreren Ebenen entfalten kann:

## 1. Fachübergreifender Transfer

Das Grundkonzept ist auf alle naturwissenschaftlichen Fächer mit Laborpraktika anwendbar. Die Integration von ELNs, virtuellen Laboren und KI-gestützter Datenanalyse ist nicht auf die Chemie beschränkt, sondern lässt sich ebenso auf Disziplinen wie Physik, Biologie oder Materialwissenschaften übertragen, da in all diesen Fächern ähnliche Herausforderungen bei der digitalen Transformation der praktischen Ausbildung bestehen.

## 2. Hochschulübergreifender Transfer

Andere Hochschulen können die Materialien direkt nutzen oder an ihre Bedürfnisse anpassen. Durch die Anbindung an die nationalen Forschungsdateninfrastrukturen NFDI4Chem und NFDI FAIRmat wird dieser Transfer erheblich erleichtert, da die entwickelten Materialien auf gemeinsamen Standards basieren und über etablierte Kanäle verbreitet werden können.

## 3. OER-Strategie

Die Bereitstellung als Open Educational Resources unter der Lizenz CC BY-NC 3.0 DE bildet die rechtliche Grundlage für eine breite Nachnutzung. Konkret werde ich eine umfassende OER-Strategie verfolgen, bei der die Projektergebnisse über verschiedene, sich ergänzende Kanäle zugänglich gemacht werden:

- Ein GitHub-Repository wird den vollständigen Quellcode und detaillierte Anleitungen zur Implementation enthalten
- Die Lehr- und Lernmaterialien werden zusätzlich in etablierten OER-Repositories wie OERhub hinterlegt
- Für die wissenschaftliche Community werden die technischen Entwicklungen und pädagogischen Konzepte auf fachspezifischen Plattformen wie ChemRxiv publiziert
- Eine eigene Projektwebseite mit interaktiven Demonstrationen wird einen niedrighwelligen Zugang zu den entwickelten Tools ermöglichen

## 4. Wissenschaftliche Dissemination

Die wissenschaftliche Verbreitung wird durch Veröffentlichungen in Fachzeitschriften für Hochschuldidaktik (z.B. Journal of Chemical Education) und durch Vorträge auf einschlägigen Konferenzen (z.B. GDCH-Jahrestagung) sichergestellt. Dies fördert nicht nur die Bekanntheit der entwickelten Lehrmaterialien, sondern trägt auch zum wissenschaftlichen Diskurs über digitale Transformation in der Hochschullehre bei.

Diese vielschichtige Transferstrategie stellt sicher, dass die Projektergebnisse nicht nur dokumentiert, sondern aktiv verbreitet werden und zu einer nachhaltigen Verbesserung der digitalen naturwissenschaftlichen Ausbildung über die eigene Hochschule hinaus beitragen können.

## Erwartungen an den Austausch im Fellowship

Vom Austausch mit anderen Fellows erhoffe ich mir wertvolle Impulse für mein Projekt sowie Möglichkeiten zur Vernetzung über Fachgrenzen hinweg. Besonders interessant erscheint mir die interdisziplinäre Perspektive, da digitale Transformationsprozesse in verschiedenen Fachbereichen oft ähnlichen Herausforderungen begegnen, aber durchaus unterschiedliche Lösungsansätze hervorbringen können. Der Einblick in die Erfahrungen und Strategien von Kolleginnen und Kollegen aus anderen Disziplinen könnte mein Projekt um neue Aspekte bereichern und blinde Flecken aufdecken, die aus der rein fachspezifischen Perspektive nicht erkennbar sind.

Auf methodischer Ebene sehe ich großes Potential im gemeinsamen Nachdenken über didaktische Konzepte zur Integration digitaler Werkzeuge in die Hochschullehre. Während ich mich auf die spezifischen Anforderungen naturwissenschaftlicher Laborpraktika konzentriere, könnten übergreifende Prinzipien des digital unterstützten Lehrens und Lernens identifiziert werden, die in verschiedenen Kontexten Anwendung finden können. Diese Meta-Ebene der Reflexion ist für die Weiterentwicklung der Hochschullehre insgesamt von großer Bedeutung.

Ich erhoffe mir zudem technische Synergien durch die Identifikation von Schnittstellen zwischen verschiedenen digitalen Lehrprojekten. Möglicherweise lassen sich gemeinsame technische Lösungen entwickeln, die in mehreren Projekten zum Einsatz kommen können, oder es ergeben sich Möglichkeiten zur Integration verschiedener digitaler Werkzeuge zu umfassenderen Lernumgebungen. Durch die Bündelung technischer Ressourcen und Expertise könnten so nachhaltigere und leistungsfähigere Lösungen entstehen.

Nicht zuletzt interessiert mich der Austausch über Methoden zur Evaluation und Wirkungsmessung digitaler Lehrinnovationen. Die Frage, wie der Erfolg und die langfristige Wirkung neuer Lehrkonzepte gemessen werden können, beschäftigt alle innovativen Lehrprojekte gleichermaßen. Ein gemeinsames Nachdenken über geeignete Indikatoren und Evaluationsmethoden könnte dazu beitragen, die Qualität der Evaluation in allen Projekten zu verbessern und belastbarere Erkenntnisse über die Wirksamkeit digitaler Lehrinnovationen zu gewinnen.

## Expertise und Vernetzung

Als Leiter des NFDI4Chem-Konsortiums bringe ich umfassende Expertise in der Entwicklung einer nationalen Forschungsdateninfrastruktur für die Chemie ein, wobei elektronische Laborbücher als zentrales Element integriert werden. Meine langjährige Erfahrung in der Chemieinformatik und der Entwicklung digitaler Werkzeuge für die Strukturaufklärung und chemische Datenverarbeitung liefert wertvolle Perspektiven für die Gestaltung nutzerfreundlicher digitaler Lernumgebungen.

Diese Expertise wird durch die Zusammenarbeit mit Dr. Kevin Maik Jablonka ergänzt, der als aktives Mitglied des NFDI FAIRmat-Konsortiums und Leiter des "AI Toolkits" an der Entwicklung

von Dateninfrastrukturen und KI-Methoden für die Materialwissenschaften mitwirkt. Während seiner Promotion an der EPFL hat er maßgeblich an der Entwicklung des Cheminfo ELN mitgewirkt und dabei insbesondere virtuelle Laborumgebungen und die Integration von Simulationen vorangetrieben. Diese Erfahrungen fließen direkt in das geplante Projekt ein und ermöglichen eine rasche Umsetzung der virtuellen Komponenten.

Gemeinsam verfügen wir über umfassende Expertise in der Anwendung von KI-Methoden für chemische Fragestellungen und in der Entwicklung von Methoden zur Integration von KI in wissenschaftliche Arbeitsabläufe. Diese Kompetenz ist entscheidend für die Gestaltung von KI-gestützten Analysewerkzeugen, die auch für Studierende ohne vertiefte Informatikkenntnisse zugänglich sind.

Meine Vernetzung umfasst sowohl nationale als auch internationale Strukturen. Durch die Mitarbeit in den NFDI-Konsortien bestehen bereits etablierte Kooperationen mit zahlreichen Hochschulen und Forschungseinrichtungen in Deutschland, die für die Verbreitung und Nachhaltigkeit des Projekts genutzt werden können. International bin ich in Fachgemeinschaften zur Digitalisierung in den Naturwissenschaften aktiv, was den Transfer der Projektergebnisse in internationale Kontexte erleichtert.

Auf lokaler Ebene profitiert das Projekt von meiner früheren Erfahrung als Vizepräsident für Digitalisierung an der Universität, die mir ein tiefgreifendes Verständnis der institutionellen Prozesse und exzellente Verbindungen zu relevanten Entscheidungsträgern eingebracht hat. Diese strategische Erfahrung ist besonders wertvoll für die nachhaltige Verankerung des Projekts in den universitären Strukturen. Darüber hinaus arbeite ich eng mit dem Zentrum für Hochschuldidaktik zusammen, das methodische Unterstützung bei der didaktischen Konzeption bietet, sowie mit dem Hochschulrechenzentrum, das die technische Infrastruktur bereitstellt.

Die von Dr. Jablonka entwickelten virtuellen Laborprototypen wurden bereits erfolgreich erprobt und haben positive Resonanz bei Studierenden und Lehrenden gefunden. Diese praktischen Erfahrungen bilden eine solide Basis für die Weiterentwicklung und Skalierung der Ansätze im Rahmen des Fellowship-Projekts. Durch die Verbindung mit den ELN-Entwicklungen aus den NFDI-Konsortien kann ich nun ein umfassendes und hochgradig interoperables System entwickeln, das national anschlussfähig ist und langfristig Bestand haben wird.

## Referenzen

1. Rajan K, Brinkhaus HO, Agea MI, Zielesny A, Steinbeck C: **DECIMER.ai: an open platform for automated optical chemical structure identification, segmentation and recognition in scientific publications**. *Nat Commun* 2023, **14**:5045.
2. Herres-Pawlis S, Koepler O, Steinbeck C: **NFDI4Chem: Shaping a digital and cultural change in Chemistry**. *Angew Chem Int Ed Engl* 2019, **58**:10766–10768.
3. Thrall E, Lee SE, Schrier J, Zhao Y: **Machine learning for functional group identification in vibrational spectroscopy: A pedagogical lab for undergraduate**