

Auf dem Wege zum elektronischen Laborjournal von Wolf Jürgen Richter

Laborjournale sollen alle Daten zur Planung und Durchführung von Experimenten festhalten; dazu werden diese datiert und mit fortlaufenden Chiffren versehen. Eingesetzte chemische Verbindungen werden in Formelsprache oder graphisch festgehalten. Die Versuchsergebnisse und die Art der Charakterisierung durch physikalisch-chemische Methoden müssen im Laborjournal zeitnah dokumentiert werden. Bedingt durch die Aufgabenstellung liegt eine heterogenen Datenstruktur vor, die zudem gegen nachträgliche Datenmanipulation gesichert sein muss. Zwar dient ein Laborjournal in erster Linie als Tätigkeitsnachweis, es ist aber auch ein Dokument, das bei einem Prioritätsstreit - etwa bei Patentansprüchen - als Beweismittel herangezogen wird. So spielten bei Erfindung des Polyethylens durch Ziegler Laborjournale eine zentrale Rolle.

Der Übergang von handgeschriebenen zum elektronischen Laborjournalen stellt durch die Zusammenführung von Textbausteinen, chemischen Formeln und analytischen Daten und deren dauerhafter Konservierung eine nicht-triviale Programmieraufgabe dar. Während es in der chemischen Industrie seit längerem Praxis ist, Laborjournale nur noch in elektronischer Form zu führen, und die Software in der Regel als Firmeneigentum unzugänglich ist, stehen Hochschul- oder Max-Planck-Institute bei einer Eigenentwicklung eines geeigneten Software-Paketes vor einer hohen Hürde, wenn kommerzielle Produkte als unzureichend befunden werden.