

# FAIRe Dateninfrastruktur für die Materialwissenschaften und verwandte Forschungsgebiete – FAIRmat

Claudia Draxl (HU Berlin), Carsten Baldauf (U Leipzig, FHI Berlin), Matthias Scheffler (FHI Berlin)

Kontakt: [fairmat@fairdi.eu](mailto:fairmat@fairdi.eu) und <https://fairmat.fairdi.eu>

## **Thema/Schlagwort/Fach:**

Computer-gestützte und experimentelle Materialwissenschaften, Festkörperphysik, Metallphysik, Halbleiterphysik, Chemische Physik Fester Stoffe, Elektronenmikroskopie, Spektroskopie (inkl. Synchrotrons), Oberflächenphysik, Katalyse, Physik der weichen Materie, Biophysik

## **Beschreibung des Vorhabens:**

FAIRmat vertritt die Materialwissenschaften und verwandte Forschungsgebiete mit dem Ziel Infrastrukturen zu verbessern, miteinander zu vernetzen und – wo nötig – neue Infrastrukturen zu schaffen. Die bestehende enge Zusammenarbeit zwischen universitären und außeruniversitären Forschungseinrichtungen, Daten- und Rechenzentren sowie der Industrie wird genutzt und intensiviert. FAIRmat geht aus Teilen des Vereins FAIR-DI e.V. (FAIR Data Infrastructure for Physics, Chemistry, Materials Science, and Astronomy e.V., <https://fairdi.eu>) hervor, um Dateninfrastrukturen nach den FAIR Prinzipien zu schaffen, wie im FAIR-DI e.V. Mission Statement zusammengefasst:

*Scientific data are a significant raw material of the 21st century. To exploit its value, a proper infrastructure that makes it Findable, Accessible, Interoperable, and Re-purposable – FAIR – is a must. For the fields of computational and experimental materials science, chemistry, and astronomy, FAIR-DI e.V. sets out to make this happen. This enabling of extensive data sharing and collaborations in data-driven sciences (including artificial-intelligence tools) will advance basic science and engineering, reaching out to industry and society.*

Basierend auf dem Projekt NOMAD<sup>1</sup> bringt FAIRmat bereits umfangreiche, praktische Erfahrungen aus dem Bereich der Computational Materials Science ein. Aufbauend auf diesen Erfahrungen wird in FAIRmat das bereits Erreichte in Hinblick auf die Interessen der experimentellen und chemischen Physik der kondensierten Materie, funktioneller Materialien und der Katalyse weiterentwickelt. FAIRmat legt großen Wert darauf, dass die zu entwickelnde Dateninfrastruktur und die dazugehörigen Metadatenstruktur von den aktiven WissenschaftlerInnen und dem breiten Benutzerkreis konzipiert und entwickelt werden. Die Akzeptanz des Feldes durch eine unbürokratische Teilnahme aller interessierten Personen und Institutionen ist dabei sehr wichtig. Deshalb organisiert FAIRmat auch entsprechende Workshops, z.B. zur Weiterentwicklung und Verknüpfung von Metadaten des Feldes.<sup>2</sup> Anders als bei dem „Erfolgsmodell“ NOMAD, wird es bei den nächsten Schritten nicht grundsätzlich darum gehen, zentrale Repositorien für das gesamte Feld zu erstellen. Es werden auch verteilte Lösungen entwickelt, die den Ansprüchen des jeweiligen Experiments und/oder Forschungsbereichs genügen.

Viele KollegInnen kämpfen bereits heute mit Big Data als Problem bzw. haben erkannt, dass dies in wenigen Jahren ihre Arbeit stark beeinflussen wird. Gemeinsam wollen wir mit FAIRmat dazu beitragen, Grundlagenforschung, angewandte Forschung und Industrie in die Lage zu versetzen, die dringenden Herausforderungen unseres Forschungsgebietes und unserer Gesellschaft effizienter als bisher zu lösen (Energiewende, Ressourcenknappheit, Umweltverschmutzung, Medizintechnik, Kommunikation, Mobilität sind nur einige Themen).

FAIRmat versteht sich als deutsches Konsortium im internationalen Austausch mit Initiativen wie der European Open Science Cloud (EOSC), um Insellösungen zu vermeiden. FAIRmat eine enge Abstimmung und Zusammenarbeit mit anderen NFDI-Initiativen, wie NFDI4Chem und NFDI4Ing.

---

<sup>1</sup> Novel Materials Discovery (<https://nomad-coe.eu>) betreibt innerhalb von FAIR-DI e.V. das weltweit größte Datenrepositorium im Bereich Computational Materials Science und entwickelt die zugehörigen Metadaten und Infrastrukturen.

<sup>2</sup> Metadata workshop, organisiert von FAIR-DI/FAIRmat, Juli 2019 <https://th.fhi-berlin.mpg.de/meetings/meta2019>