

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
1.1 Stand der Wissenschaft und Technik	5
1.1.1 Digitale Repräsentation von Molekülstrukturen	5
1.1.2 ELN und LIMS.....	6
1.1.3 Suchmaschinen und Wissensdatenbanken	8
1.1.4 Semantic Web Technologie	9
1.1.5 Cloud-Computing in den Lebenswissenschaften	11
1.2 Problemstellung.....	12
2. Ziel der Arbeit	17
3. Hauptteil: Erfassen, Finden und Veröffentlichen	19
3.1 Ansatz.....	19
3.1.1 Transparenz: Open Source als Grundgedanke	19
3.1.2 Dezentralität: Verteilter Ansatz.....	19
3.1.3 Reproduzierbarkeit: Software Design und Plattformauswahl	20
3.2 Erfassen, Steuern und Teilen.....	20
3.2.1 dial-a-device	20
3.2.1.1 Methode und Funktionen	22
3.2.1.2 Implementierung	40
3.2.1.3 Resultate	52
3.2.2 Datenmanagement und Steuerung bei HCS	52
3.2.2.1 Methode und Funktion	53
3.2.2.2 Implementierung	54
3.3 Finden und Verwenden von Informationen.....	57
3.3.1 sciencenet	57
3.3.1.1 Methode und Funktionen	58
3.3.1.2 Implementierung	59

3.3.1.3 Resultate	63
3.4 Veröffentlichen und Kommunizieren von Wissen	64
3.4.1 scity.....	65
3.4.1.1 Methode und Funktionen	65
3.4.1.2 Implementierung	68
3.4.2. chemotion	71
3.4.2.1 Methode und Funktionen	72
3.4.2.2 Implementierung	74
3.4.2.3 Resultate	77
4. Zusammenfassung.....	81
5. Ausblick	83
6. Abkürzungsverzeichnis.....	85
7. Literaturverzeichnis.....	89
8. Anhang.....	97
8.1. PerformTemplateCreation.cs.....	97
8.2. PerformVarSub.cs	100
8.3. yacy-smw-extension.....	103
8.4 Lebenslauf	109
8.5 Publikationsliste	110
8.6 Danksagung.....	111