





Wissenschaftliche Illustrationen

Zitierweise: *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202114910 Internationale Ausgabe: doi.org/10.1002/anie.202114910 Deutsche Ausgabe: doi.org/10.1002/ange.202114910

# Coloring Chemistry – Wie eine bewusste Farbwahl die chemische Kommunikation verbessert

Felix Kaspar\* und Fabio Crameri\*

Abstract: Farbe ist ein zentrales Element in der wissenschaftlichen Kommunikation, jedoch bringt ihre Verwendung die Verantwortung mit sich, eine allgemein zugängliche und akkurate Darstellung von Daten und Zusammenhängen zu gewährleisten. Dieser kurze Viewpoint soll dazu dienen, die chemische Gemeinschaft für die Bedeutung einer bewussten Farbwahl in wissenschaftlichen Illustrationen zu sensibilisieren

Chemische Kommunikation ist auf allen Ebenen auf eine akkurate Beschreibung von Strukturen, Transformationen und Daten in Abbildungen, Schemata oder Kombinationen daraus angewiesen: Chemie ist eine visuelle Wissenschaft. In diesem Kontext kann Farbe ein wirkungsvolles Stilmittel sein, um bestimmte Elemente einer Abbildung hervorzuheben, den Blick des Lesers zu lenken oder Informationen zu vermitteln. Farben sind oft leichter wiederzuerkennen und zu unterscheiden als Formen und können besonders hilfreich sein, um wiederkehrende Elemente besser zu erkennen oder intuitive Verknüpfungen zu Konzepten und Zusammenhängen herzustellen. Eine ungeeignete (oder unbewusste) Auswahl von Farben in einer Abbildung kann jedoch zu einer ungenauen, falschen oder unzugänglichen Darstellung der zugrunde liegenden Informationen führen.[1] Eine kürzliche Untersuchung mehrerer neuerer Ausgaben namhafter Chemiezeitschriften ergab, dass mehr als zwei Drittel der darin enthaltenen Artikel farbige Abbildungen im Haupttext aufweisen, deren Informationsgehalt für Menschen mit Farbwahrnehmungsschwächen nicht zugänglich ist.<sup>[2]</sup> Diese Prävalenz unzugänglicher visueller Darstellungen von Daten, Zusammenhängen und Schlussfolgerungen steht in einem starken Kontrast zu den Idealen einer inklusiven und offenen Wissenschaft. Daher möchten wir hier das allgemeine Bewusstsein für die Bedeutung einer reflektierten und durchdachten Farbwahl in der chemischen Kommunikation schärfen und Leitprinzipien formulieren, um eine gewissenhafte und integrative Darstellung von Informationen in wissenschaftlichen Illustrationen zu gewährleisten.

Farbe kann in Abbildungen verschiedensten Zwecken dienen und es ist wichtig, zwischen Farbe als unterstützendes Element und Farbe als informationscodierendes Element zu unterscheiden. Als unterstützendes Element dient Farbe dazu, zum visuellen Anreiz einer Illustration beizutragen oder bestimmte Teile einer Grafik oder eines Schemas hervorzuheben. Hier ist die Auswahl von Farbe unproblematisch und kann frei nach persönlicher Vorliebe entschieden werden. Die zusätzliche Informationsebene, die in diesen Fällen durch die Verwendung von Farbe eingeführt wird, dient lediglich zur Orientierung des Lesers und vermittelt keine essenziellen Informationen. Ein potenzieller Verlust dieser zusätzlichen Ebene schmälert also nicht den Informationsgehalt oder die Gesamtaussage einer Abbildung, was Autoren nahezu unbegrenzte Freiheiten in der Farbauswahl lässt. Im Gegensatz dazu ist die Verwendung ausgewählter Farben (bzw. deren Kombination) von zentraler Bedeutung, wenn Farbe als Informationsträger dient. Die Codierung und Vermittlung von Informationen durch Farbe verlangt von Natur aus, dass Leser die verwendeten Farben erkennen und zwischen ihnen unterscheiden können, was in vielen Fällen für Menschen mit Farbwahrnehmungsschwächen (ca. 4% der Gesamtbevölkerung) extrem herausfordernd oder gar unmöglich sein kann.<sup>[3]</sup>

Dies gilt insbesondere für Kombinationen aus Rot, Blau, Schwarz und Grün, die allgegenwärtig in der chemischen Literatur zu sein scheinen,[4] vermutlich weil sie zu den Standardfarben vieler populärer Datenverarbeitungsprogramme gehören.<sup>[5,6]</sup> Das Hauptproblem bei dieser Farbkombination (und vielen anderen) ist der geringe visuelle Unterschied zwischen mindestens zwei dieser Farben für Menschen mit eingeschränkter Farbwahrnehmung.<sup>[7]</sup> Dies kann den Informationsgehalt einer Abbildung teilweise oder vollständig unzugänglich machen, wenn Farben in der Legende oder Farben von strukturellen Elementen visuell identisch erscheinen (Abbildung 1 A). Während eine vollständige Farbenblindheit selten ist, sind verringerte Empfindlichkeiten von roten (Protanomalie) oder grünen Netzhautrezeptoren (Deuteranomalie) relativ häufig. Daher besteht eine besondere Tendenz für irreführende Darstellungen und/oder Informationsverlust in Abbildungen, die Kombi-

[\*] Dr. F. Kaspar

Technische Universität Braunschweig Institut für Biochemie, Biotechnologie und Bioinformatik Spielmannstraße 7, 38106 Braunschweig (Deutschland)

Fachgebiet Bioverfahrenstechnik, Institut für Biotechnologie

Fakultät III Prozesswissenschaften

Technische Universität Berlin

Ackerstraße 76, 13355 Berlin (Deutschland)

E-Mail: felix.kaspar@tu-bs.de

felix.kaspar@web.de

Dr. F. Crameri

Centre for Earth Evolution and Dynamics (CEED)

University of Oslo

Postbox 1028, Blindern, 0315 Oslo (Norwegen)

und

Undertone Design

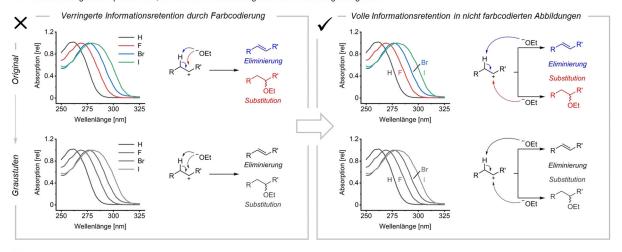
Wildermettweg 58, 3006 Bern (Schweiz)

E-Mail: fabiocrameri@undertone.design

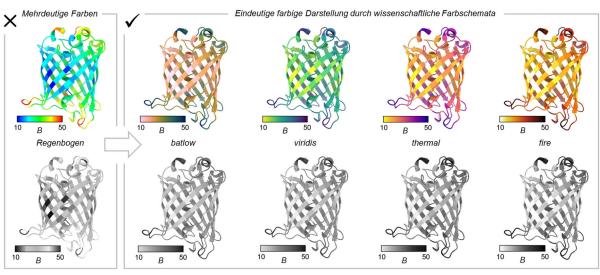
(D) Identifikationsnummern (ORCIDs) der Autoren sind unter: https://doi.org/10.1002/ange.202114910 zu finden.



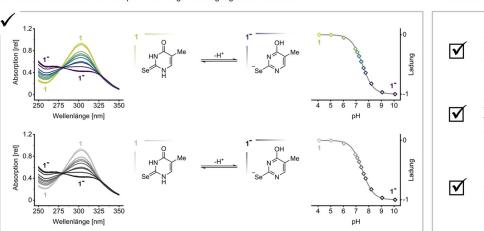
A Farberkennung sollte optional sein, um auf den Informationsgehalt einer Abbildung zuzugreifen



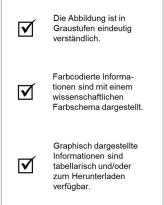
B Wenn Farbe zur Informationsvermittlung benötigt oder vorteilhaft ist, sollten einheitlich wahrnehmbare Farbschemata verwendet werden



C Eine Kombination dieser Prinzipien liefert allgemein zugängliche Illustrationen



D Checkliste für Barrierefreiheit



**Abbildung 1.** Die Farbauswahl beeinflusst die Zugänglichkeit einer Abbildung, da die Retention von Informationen während der Farbreduktion von der Rolle der Farbe sowie den verwendeten Farbkombinationen abhängt. Der Graph in (A) stellt UV-Absorptionsspektren einer Halogenid-Reihe von Uridinanaloga dar (Rohdaten aus Lit. [10] online verfügbar bei Lit. [11]). Für die Kolorierung des Graphen und der Strukturzeichnung wurden die Standardfarben von Origin 2020b und ChemDraw 16 verwendet. (B) stellt B-Faktoren (B) einer GFP-Variante (PDB ID 5b61) dar, die mit UCSF ChimeraX 1.2.5 in einigen frei verfügbaren Farbschemata, wie batlow aus Lit. [1] (online erhältlich bei Lit. [12]), farblich codiert wurden. (C) zeigt die pH-abhängigen UV-spektroskopischen Eigenschaften eines Selenopyrimidins (1), die dessen pK<sub>a</sub>-Wert widerspiegeln (Rohdaten aus Lit. [13] online verfügbar bei Lit. [14]) und die in (D) zusammengefassten Prinzipien illustrieren.





nationen von Rot und Grün oder verschiedenen Farbtönen davon enthalten (siehe Abbildung 2 für eine Fallstudie). Darüber hinaus stellt die Verwendung mehrerer Farben ähnlicher Helligkeit in einer Abbildung eine Barriere für Leser dar, die einen Artikel in Graustufen drucken, da dies den dreidimensionalen RGB-Farbraum (trichromatischer Raum) auf ein eindimensionales Helligkeitsspektrum (monochromatischer Raum) reduziert. Hierbei kann es passieren, dass Farben, die in einem dreidimensionalen Farbraum leicht erkannt werden können, allein auf Basis ihrer Helligkeit nicht mehr zu unterscheiden sind, wodurch die zugrundeliegenden Informationen einer Abbildung nicht mehr zugänglich sind. Daher empfehlen wir, Illustrationen so zu gestalten, dass Farberkennung von Datenzugänglichkeit entkoppelt wird: Farberkennung sollte optional sein, um auf den Informationsgehalt einer Abbildung zuzugreifen (Abbildung 1A).

Obwohl viele Illustrationen so konzipiert werden können, dass Farberkennung nicht strikt notwendig ist, gibt es Fälle, in denen die Kommunikationen von Daten als Farbe von großem Nutzen oder sogar eine Notwendigkeit ist. Multidimensionale Daten profitieren beispielsweise oft von einer kondensierten Darstellung in Heatmaps, Konturdiagrammen oder Strukturzeichnungen.<sup>[8]</sup> Solch eine Farbcodierung erfordert jedoch eine sorgfältige Farbauswahl, um Fehldarstellungen und Informationsverluste zu vermeiden.<sup>[9]</sup> Die gleichen Probleme, die bei Kombinationen von Rot, Blau, Schwarz und Grün auftreten, übertragen sich auf das beliebte Regenbogen-Farbschema (auch bekannt als jet). Dieses und andere Farbschemata erzeugen aufgrund eines ungleichmä-Bigen und nichtlinearen Helligkeits- und Sättigungsgradienten entlang des Schemas häufig optische Mehrdeutigkeiten, Artefakte und fehlleitende Darstellungen (siehe auch Lit. [1], zit. Lit.). Daher weisen regenbogenfarbene Illustrationen typischerweise künstliche Farbverläufe und Kontraste auf, die von den zugrundeliegenden Daten nicht widergespiegelt werden und/oder echte Details der Daten verschleiern. Dies ist insbesondere dann problematisch, wenn die zugrundeliegenden Daten nicht zusammen mit der Abbildung veröffentlicht werden, da dies zwangsläufig zu einem Informationsverlust führt, auch wenn die Abbildung wie vom Autor beabsichtigt betrachtet und interpretiert werden kann. Um dieses Problem zu beheben, empfehlen wir die konsequente Verwendung von einheitlich wahrnehmbaren Farbschemata (auch bekannt als wissenschaftliche Farbschemata, "scientific color maps"),[1] welche farbcodierte Informationen für alle Leser akkurat zugänglich machen (Abbildungen 1B und 2B).

Im Gegensatz zum beliebten Regenbogen-Farbschema haben wissenschaftliche Farbschemata vier Hauptmerkmale, die für ihre Verwendung in der gesamten wissenschaftlichen Literatur sprechen. Erstens sorgt die Einheitlichkeit ihrer Wahrnehmbarkeit (perceptual uniformity) für eine gleichmäßige Gewichtung der Daten über den angezeigten Datenraum. Somit führt eine gegebene Variation der Daten zu einer bestimmten Farb-(oder Helligkeits-)Variation, unabhängig davon, wo im Datenraum diese Variation auftritt. Zweitens stellt ihre einheitliche Wahrnehmungsreihenfolge (perceptual order) sicher, dass alle einzelnen Farben in einem Schema ohne Zuhilfenahme der Legende sequenziell sortiert werden können. Dies verbessert das intuitive Verständnis des

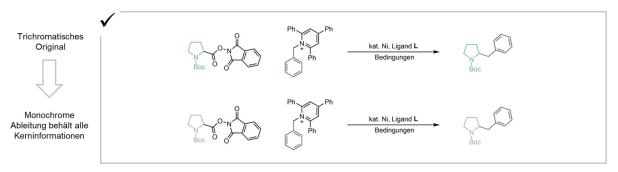
Parameterraums sowie der zugrundeliegenden Trends erheblich. Eine solche Ordnung kann erzeugt werden, indem man einen monotonen Farbtonwechsel von einer Farbe zur anderen oder einen Helligkeitsgradienten von Hell zu Dunkel (oder beides) kreiert. Drittens ermöglicht ihre universelle Lesbarkeit (universal readability), dass eine Abbildung von allen Lesern verstanden werden kann. Zu diesem Zweck benötigen Farbschemata einen monotonen Helligkeitsverlauf, der den vollen Informationsgehalt auch dann gewährleistet, wenn Teile (Farbwahrnehmungsschwäche) oder die Gesamtheit (Farbenblindheit) des mehrdimensionalen Farbraums aus einer Abbildung entfernt werden. Im Allgemeinen ist eine Betrachtung in Graustufen sehr wirksam, um eine Abbildung auf die Einhaltung dieser ersten drei Prinzipien zu überprüfen. Zuletzt macht eine instinktive Lesbarkeit (instinctive readability) den Informationsgehalt einer Illustration durch intuitive Farbgebung so verständlich wie möglich. Dies kann durch die Verwendung von Farben erzielt werden, die die Natur des abgebildeten Parameters oder seine hohen und niedrigen Werte widerspiegeln oder sich darauf beziehen (z.B. durch die Darstellung von hohen Temperaturen als Rot oder leerem Raum als Schwarz).

Angesichts dieser Voraussetzungen für wissenschaftliche Farbschemata ist es leicht zu erkennen, warum die meisten Farbschemata keine idealen Optionen sind. Umfangreiche Forschungen zur menschlichen Farbwahrnehmung und inklusiven Datendarstellung haben jedoch Leitprinzipien für die wissenschaftliche Farbwahl<sup>[17-21]</sup> sowie eine Vielzahl wissenschaftlich akkurater Farbschemata hervorgebracht. Viele solcher Schemata sind online frei verfügbar (z. B. bei Lit. [12]) und beliebte Optionen sind beispielsweise die Schemata viridis, thermal (oder ihre Varianten plasma und magma) und fire (auch bekannt als kry, Abbildung 1B). Gängige Alternativen sind die Farbschemata cividis, das so konzipiert wurde, dass es aus der Perspektive aller Farbwahrnehmungsschwächen identisch aussieht, oder batlow, das eine besonders breite Palette an deutlich unterscheidbaren Farben bietet. In Anbetracht der immensen Heterogenität und der unterschiedlichen Arten von Daten, die Autoren in den chemischen Wissenschaften möglicherweise darstellen möchten, ist es unmöglich, ein "bestes" wissenschaftliches Farbschema zu küren, oder eines, das für jeden Zweck geeignet ist. Daher ist es häufig am besten, mehrere verschiedene Optionen für einen bestimmten Datensatz auszuprobieren, um das geeignetste Farbschema zu ermitteln (ein Flussdiagramm für die Auswahl von Farbschemata für verschiedene Datentypen ist zusätzlich beschrieben in Lit. [1] und zum Herunterladen verfügbar bei Lit. [22]). Da sich viele Parameter für die Darstellung mit mehreren unterschiedlichen Farbschemata anbieten, lässt die verfügbare Vielfalt wissenschaftlicher Farbschemata Autoren durchaus viele künstlerische Freiheiten. Es sollte diesbezüglich auch erwähnt werden, dass wissenschaftliche Farbschemata überaus nützlich sind für Zwecke, die über die genaue Farbcodierung von Informationen hinausgehen. Ihre inhärente Ordnung und instinktive Lesbarkeit machen sie auch bemerkenswert wirksam als unterstützende Elemente für Abbildungen, die sie nicht unbedingt benötigen (beispielsweise viridis in Abbildungen 1C und





A Farbe als unterstützendes Element mindert nicht den zentralen Informationsgehalt, wenn sie (teilweise) entfernt wird



B Farbe als informationscodierendes Element erfordert eine sorgfältige Auswahl des Farbschemas, um fehlleitende Darstellungen zu vermeiden

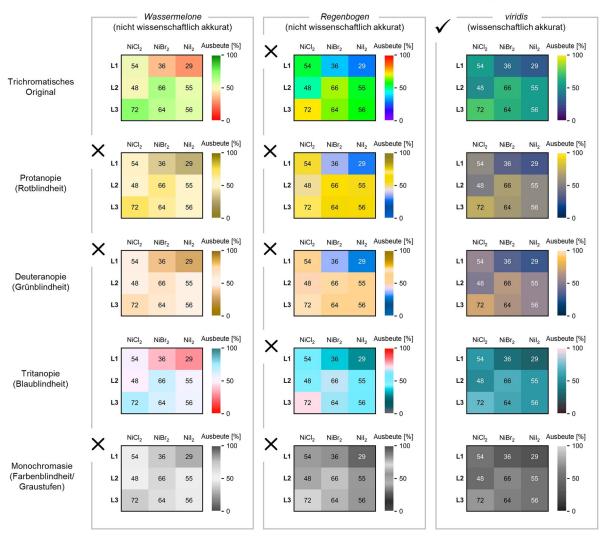


Abbildung 2. Die Funktion einer Farbe in einer Abbildung bestimmt das notwendige Maß an Detailgenauigkeit. A) Als unterstützendes Element übermittelt Farbe keine Schlüsselinformationen und die Farben einer Abbildung können nach persönlichen Vorlieben ausgewählt werden. Eine Reduzierung des dreidimensionalen (trichromatischen) Farbraums auf einen eindimensionalen (monochromatischen) behält den wesentlichen Informationsgehalt der Abbildung vollständig bei. B) Als informationscodierendes Element vermittelt Farbe quantitative Informationen, was die Verwendung eines wissenschaftlich genauen Farbschemas erfordert, um die Einführung visueller Artefakte oder künstlicher Gradienten zu vermeiden. Zum Beispiel sind die Optimierungsdaten für die in (A) gezeigte Reaktion zugänglich und akkurat durch ein viridis-Farbschema dargestellt (wie von Zhang und Cernak in der Originalveröffentlichung verwendet), [15] während ein Wassermelonen- oder Regenbogen-Schema nicht universell lesbar, gleichförmig wahrnehmbar oder geordnet sind. Die Daten in (B) sind ein Teil eines Datensatzes eines 24-Well-Experiments und wurden aus Zhang and Cernaks [15] Supporting Information entnommen (dargestellt in ihrer Abbildung S22 und online verfügbar bei Lit. [16]), wobei L1 = [2,2'-Bipyridin]-5,5'-dicarbonsäure, L2 = Dimethyl-[2,2'-bipyridin]-5,5'-dicarboxylat und L3 = 4,4'-Bis (trifluormethyl)-2,2'-bipyridin.





Zusammenfassend glauben wir, dass eine Kombination der hierin beschriebenen Prinzipien universell zugängliche Illustrationen hervorbringt, die Farbe verwenden, um den Betrachter durch die Abbildung zu leiten, gleichzeitig aber den vollen Informationsgehalt behalten, wenn sie in ihrem Farbgehalt reduziert werden (Abbildung 1 C). Um diese Prinzipien in der chemischen Literatur zu implementieren, appellieren wir an alle Autoren, Gutachter und Herausgeber, die Zugänglichkeit von Informationen in einer Abbildung während des Schreib- oder Veröffentlichungsprozesses einer Arbeit zu berücksichtigen. Eine ideale Abbildung sollte 1) auch mit reduziertem Farbgehalt vollständig verständlich sein, 2) farbcodierte Informationen mit einem wissenschaftlichen Farbschema darstellen, das frei von künstlichen Gradienten und Mehrdeutigkeiten ist (z.B. die Schemata in Lit. [1]), und 3) von den zugrunde liegenden Daten in tabellarischer oder herunterladbarer Form begleitet sein (Abbildung 1D). Letztlich sollten wissenschaftliche Illustrationen für jeden zugänglich sein. Um diesen Eckpfeiler einer offenen und integrativen Wissenschaft zu verwirklichen, erfordern visuelle Wissenschaften, wie die Chemie, jedoch eine reflektierte Gestaltung von Abbildungen. Wir hoffen, dass dieser kurze Viewpoint als Informationsquelle und Diskussionsgrundlage dient, um Kollegen, Abteilungen und Institutionen für das Thema bewusster Farbwahlen zu sensibilisieren, da eine echte Verbesserung der Zugänglichkeit der chemischen Literatur eine Gemeinschaftsarbeit ist und bleiben wird.

#### Danksagung

F.K. dankt Dr. M. Rhia L. Stone, Kerstin Kaspar sowie den Mitgliedern der Arbeitsgruppen von Prof. Schallmey (TU Braunschweig) und Prof. Neubauer (TU Berlin) für ergiebige Diskussionen. F.K. wurde durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Projektnummer 492196858, gefördert. F.C. wurde finanziell von Doris Crameri und teilweise vom Research Council of Norway durch die Centres of Excellence Förderschemata, Project Number 223272, unterstützt.

#### Interessenkonflikt

Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

#### Erklärung

Die in diesem Beitrag zum Ausdruck gebrachten Meinungen sind die der Autoren und spiegeln nicht unbedingt die Meinungen oder Ansichten der Zeitschrift Angewandte Chemie International Edition/Angewandte Chemie, des Verlags, der GDCh oder der Redaktion wider.

**Stichwörter:** Farbschema · Farbwahrnehmungsschwäche · Illustrationen · Open Science · Regenbogen

- F. Crameri, G. E. Shephard, P. J. Heron, Nat. Commun. 2020, 11, 5444.
- [2] Wir haben vier zufällig ausgewählte Ausgaben führender Chemiezeitschriften von vier verschiedenen Verlagen untersucht, die im Sommer 2021 online erschienen sind. Eine Analyse aller Originalartikel in diesen Ausgaben (n=149) ergab, dass 98% der Haupttextabbildungen Farbe verwendeten, 73% Farbe verwendeten, um Informationen zu vermitteln und 71% Farbe in einer Weise verwendeten, die den Informationsgehalt verringert, wenn der Farbgehalt reduziert wird (sprich, diese Abbildungen waren für Leser mit Farbwahrnehmungsschwächen teilweise oder vollständig unzugänglich).
- [3] J. Neitz, M. Neitz, Vision Res. 2011, 51, 633-651.
- [4] Die Analyse beschrieben in Lit. [2] ergab ferner, dass 87% aller untersuchten Artikel Kombinationen aus Rot, Blau, Schwarz und/oder Grün in ihren Haupttextabbildungen verwendeten.
- [5] K. Moreland, Electron. Imaging 2016, 1–6, https://doi.org/10. 2352/ISSN.2470-1173.2016.16.HVEI-133.
- [6] M. Stoelzle, L. Stein, Hydrol. Earth Syst. Sci. 2021, 25, 4549–4565.
- [7] C. A. Brewer, in Vis. Mod. Cartogr. (Hrsg.: A. M. MacEachren, D. R. F. Taylor), Academic Press, San Diego, 1994, S. 123–147.
- [8] A. Cairo, The Functional Art: An Introduction to Information Graphics and Visualization, New Riders, 2012.
- [9] R. Bujack, T. L. Turton, F. Samsel, C. Ware, D. H. Rogers, J. Ahrens, IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. 2018, 24, 923-933.
- [10] F. Kaspar, R. T. Giessmann, S. Westarp, K. F. Hellendahl, N. Krausch, I. Thiele, M. C. Walczak, P. Neubauer, A. Wagner, ChemBioChem 2020, 21, 2604.
- [11] F. Kaspar, Externally hosted supplementary data, https://doi. org/10.5281/zenodo.3723806.
- [12] F. Crameri, Scientific colour maps, https://doi.org/10.5281/ zenodo.1243862.
- [13] K. F. Hellendahl, F. Kaspar, X. Zhou, Z. Yang, Z. Huang, P. Neubauer, A. Kurreck, *ChemBioChem* 2021, 22, 2002 2009.
- [14] F. Kaspar, K. F. Hellendahl, Externally hosted supplementary data, https://doi.org/10.5281/zenodo.4506474.
- [15] Z. Zhang, T. Cernak, Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 27293–27298; Angew. Chem. 2021, 133, 27499–27504.
- [16] Cernaklab, Data from Zhang Cross Coupling Paper, https://github.com/cernaklab/Zhang-Cernak-Cross-Coupling-of-Activated-Amines-and-Acids.
- [17] B. Wong, Nat. Methods 2011, 8, 441.
- [18] N. Gehlenborg, B. Wong, Nat. Methods 2012, 9, 769.
- [19] G. Landini, D. G. Perryer, Nat. Methods 2011, 8, 891.
- [20] B. Wong, Nat. Methods 2011, 8, 525.
- [21] M. Albrecht, Nat. Methods 2010, 7, 775.
- [22] F. Crameri, Color map guideline, https://s-ink.org/colour-map-guideline.

Manuskript erhalten: 3. November 2021 Veränderte Fassung erhalten: 15. Dezember 2021 Endgültige Fassung online: ■■ ■■■■■■

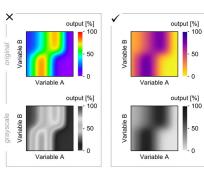


## Viewpoint Article

### Wissenschaftliche Illustrationen

F. Kaspar,\* F. Crameri\* \_\_\_\_ IIII - IIII

Coloring Chemistry – Wie eine bewusste Farbwahl die chemische Kommunikation verbessert



Farbe ist von zentraler Bedeutung für die wissenschaftliche Kommunikation, aber ihre Verwendung ist mit der Verantwortung verbunden, eine allgemein zugängliche und genaue Datendarstellung zu gewährleisten.