

CSEARCH NMR-Datenbank:

Folgende Webservices stehen kostenfrei und ohne Registrierung zur Verfügung; diese Services eignen sich auch zur Begleitung von NMR-Vorlesungen/NMR-Übungen um den aktuellen Stand der computergestützten Spektrenauswertung zu demonstrieren.

Qualitätskontrolle von C13-NMR Zuordnungen:



<https://nmrpredict.orc.univie.ac.at/c13robot/robot.php>

Hier werden mehr als **340,000 experimentelle und gewartete C13-NMR Spektren** aus der Literatur zur Qualitätsbeurteilung von Zuordnungen und Strukturvorschlägen verwendet.

Strukturherleitung aus C13-NMR Spektren:



<https://nmrpredict.orc.univie.ac.at/similar/eval.php>

Hier stehen derzeit **401,000,000 berechnete C13-NMR Spektren** kostenfrei als Referenzmaterial zur Verfügung - die Wachstumsrate ist ungefähr bei **10,000,000 Spektren pro Monat**. Aufgrund des umfangreichen Datenmaterials im TeraByte-Bereich wird die Verarbeitung mit massivem Parallel-Processing durchgeführt.

Beide Technologien werden von einigen Journalen im Rahmen der jeweiligen „Author-Guidelines“ empfohlen und sind sowohl von TOPSPIN als auch von MNova (in Vorbereitung) direkt ansprechbar.

Wie dringend notwendig die Evaluierung von publizierten C13-NMR Daten ist, zeigen folgende Beispiele:

https://nmrpredict.orc.univie.ac.at/peer_review/WR_SMASH_Porto_2019.pdf

<https://doi.org/10.1002/mrc.4977>

<https://www.springer.com/de/book/9783319497112>

Reinhard Meusingers „Through the looking-glass challenge”

<https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/s00216-017-0818-4.pdf>

Kontakt: Wolfgang.Robien@univie.ac.at