

# Zur Qualität publizierter Spektraldaten

**Wolfgang Robien**

Institut für Organische Chemie  
Universität Wien  
Email: Wolfgang.Robien@univie.ac.at

Die Qualität publizierter Spektraldaten überspannt einen weiten Bereich. Innerhalb des CSEARCH-Systems sind derzeit 584,000 gewartete C13-NMR-Spektren verfügbar, wobei von jedem Datensatz jede Version zurück bis 1993 online ist. Eine systematische Auswertung dieser etwa 2,000,000 Versionen ergibt, dass sich die fehlerhaften Zuordnungen auf etwa 7% der Verbindungen konzentrieren – dort dafür aber erhebliche Zuordnungsfehler auftreten.

Es werden einige symptomatische Beispiele mit eklatanten Zuordnungsfehlern, bzw. falschen Strukturherleitungen gezeigt. Im zweiten Teil des Vortrags werden diese Fehlerraten mit den Impaktfaktoren der Journale korreliert<sup>(1)</sup>, wobei der Mythos, dass hohe Qualität mit dem Impaktfaktor synchron geht, in Frage gestellt wird.

(1) W. Robien; TrAC, 28, 914 (2009)