

## **CSEARCH NMR-Datenbank: Datenkorrektur – Frustration oder Erfolgsgeschichte ?**

**Wolfgang Robien**  
**Fakultät für Chemie der Universität Wien**  
**Institut für Organische Chemie**  
**A-1090 Wien**  
**email: [Wolfgang.Robien@univie.ac.at](mailto:Wolfgang.Robien@univie.ac.at)**

In der chemischen Fachliteratur finden sich publizierte  $^{13}\text{C}$ -NMR Daten unterschiedlicher Qualität. Die Korrelation von Qualität der experimentellen Daten mit dem Impaktfaktor des jeweiligen Journals [1] zeigt ein interessantes Phänomen – nicht notwendigerweise stammen qualitativ hochwertige C-NMR Daten aus renommierten Journalen.

Ausgehend von der sehr inhomogenen Datenqualität werden die Effekte der Datenkorrektur sowohl statistisch als auch für Einzelfälle ausgewertet. Der Einfluß deutlich verbesserter Experimentalbedingungen im Laufe der letzten 40 Jahre, wie höhere Meßfrequenzen sowie die Anwendung komplexer Pulstechniken zur Zuordnung werden in ihren Auswirkungen auf die Datenqualität untersucht.

[1] Robien W., Trends in Analytical Chemistry 28, 914-922 (2009)