

Neuerungen in CSEARCH

Wolfgang Robien

Institut für Organische Chemie, Universität Wien
Währingerstr. 38, A-1090 Wien
Wolfgang.Robien@univie.ac.at

Im Rahmen des Vortrags werden folgende Punkte angesprochen

Entwicklungen im Bereich der Daten

- 1) Aufbau der Datenbanken
- 2) Auswahl der Literaturstellen
- 3) Überprüfung der Datenqualität
- 4) Datenkorrektur

Entwicklungen im Bereich der Algorithmen

- 1) Neuerungen bei der Spektrenabschätzung
- 2) Verwendung „anonymisierter“ Daten
- 3) Analyse von Trefferlisten nach strukturellen Gemeinsamkeiten
- 4) Entwicklungen bei Webservices – bereitgestellte Infrastruktur
- 5) INCHIKEYS als einfache Möglichkeit zur Verlinkung mit anderen Datenbeständen
- 6) Zugriffsmöglichkeiten für den Benutzer auf die Datenevaluierung

WEBServices:

Datenbestand: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/csearchlite/update.htm>
Spektrensuche: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/case/propose.php>
Spektrensuche: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/identify/>
Inchikeys: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/csearchlite/inchikey.htm>
Inchikeys: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/inchikey/csinchi.php>
Robot-Referee: <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/c13robot/robot.php>
Datenfehler: http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/csearchlite/NMR_misinterpretation.html

Alle Webservices sind kostenlos, nur für den 'Robot-Referee' ist eine einmalige Registrierung (bestehend aus Email, Nickname und Password) notwendig