

Soo! muss Strukturaufklärung

Wolfgang Robien

Department für Organische Chemie, Universität Wien, Währinger Straße 38, A-1090 Wien
wolfgang.robien@univie.ac.at

Es wird im Rahmen des Vortrags ein Überblick über den 'CSEARCH-Robot-Referee'[1] gegeben; die wichtigsten Eckdaten sind:

Wissensbasis: 321,000 zugeordnete ¹³C-NMR-Spektren aus der Literatur
Aufbau eigener Datenbank mit bisherigen Anfragen möglich
Eigene Daten können allgemein zur Verfügung gestellt werden

Komponenten: Bewertung von Kompatibilität der Peakliste und dem vorgegebenen
Strukturvorschlag (ACCEPT/MINOR/MAJOR/REJECT)
Ähnlichkeitssuche über 65 Millionen vorhergesagte ¹³C-NMR Spektren
Erzeugung von alternativen Strukturvorschlägen

Um die Effizienz dieser Technologie zu demonstrieren wurden im 1. Schritt bekannte Strukturrevisionen aus mehreren Review-Artikeln bearbeitet. Hier konnte gezeigt werden, dass diese falschen Strukturherleitungen in der überwiegenden Mehrzahl der Fälle detektiert werden, in vielen Fällen wird auch die korrekte Alternative gefunden.

Basierend auf diesen Vorarbeiten wurden 2,500 Beispiele aus dem Bereich der Naturstoffchemie, (ausgewählt aus den Journalen: Chem.Pharm.Bull., J.Nat.Prod., Phytochemistry, Planta Medica, usw.) wo erhebliche Abweichungen zwischen Messwert und Vorhersage bestehen, demselben Analyseverfahren unterworfen. Die jeweiligen Inkonsistenzen wurden erkannt und die Klassifikation war zumindest 'Minor revision', meist jedoch schlechter. Etwa 15% dieser ausgewählten Beispiele zeigen höchstwahrscheinlich eine falsche Struktur; in der überwiegenden Mehrzahl dieser Fälle konnte eine besser passende Alternative aufgefunden werden.

Es wird ausdrücklich betont, dass diese Analyse ausschließlich die ¹³C-Verschiebungsdaten verwendet und keine Information aus 2D-Spektren verwendet bzw. braucht. Die Strukturzeugung erfolgt nicht mit einem Isomergenerator im eigentlichen Sinne dieser Definition, sondern mit einem regelbasierten Strukturzeugungsprogramm, welches ähnliche Strukturen erzeugt, die durchaus eine andere Summenformel haben können.

Die Integration dieser Technologie in den Publikationsprozess des Wiley-Journals „European Journal of Organic Chemistry“[2], sowie in die TOPSPIN und CMC-se Programmfamilie von BRUKER[3] ist abgeschlossen.

[1] <http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/c13robot/robot.php>

[2] [http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1099-0690](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1099-0690)

[3] <https://www.bruker.com/>