

CSEARCH: Erweiterungen bei Algorithmen und Daten sowie ein Angebot an Verlage und die 'Community'

Wolfgang Robien

**Institut für Organische Chemie
Universität Wien
Währingerstrasse 38, A-1090 Wien
email: Wolfgang.Robien(at)univie.ac.at**

Im Rahmen dieses Vortrags werden die wesentlichen Neuentwicklungen im Bereich der Algorithmen und beim Datenvolumen innerhalb von CSEARCH vorgestellt. Wie schon in den vergangenen Jahren liegt der Schwerpunkt bei der Qualitätssicherung der in CSEARCH gespeicherten Zuordnungen. Mit der Entwicklung eines „Robot-Referees“, der am Internet frei verfügbar ist [1], steht der 'Community' ein mächtiges Werkzeug zur Verfügung, um Zuordnungen zu überprüfen und unvollständige Angaben bei C13-NMR-Spektren zu vermeiden. Die systematische Anwendung dieser Algorithmen auf bereits publizierte Spektren erlaubt die Klassifizierung von Journalen aufgrund der Qualität der darin enthaltenen NMR-Daten.

Gleichzeitig ergeht sowohl an die Verlage chemischer Fachpublikationen als auch an die „Community“ die Einladung diese Werkzeuge zur Steigerung der Qualität einzusetzen. Anschauliche Beispiele um die notwendige Überzeugungsarbeit grafisch zu untermauern, werden präsentiert.

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