

Automatisches Peer-reviewing von ^{13}C -NMR Literaturdaten - Beispiele und Statistiken

Wolfgang Robien

**Institut für Organische Chemie
Universität Wien
Währingerstraße 38, A-1090 Wien**

Email: Wolfgang.Robien@univie.ac.at

Die Qualität publizierter Spektraldaten überspannt einen weiten Bereich. Im Rahmen einer umfangreichen statistischen Analyse wurden die Fehlerraten mit den Impaktfaktoren der Journale korreliert⁽¹⁾, wobei der Mythos, dass hohe Qualität mit dem Impaktfaktor synchron geht, in Frage gestellt wurde.

Ausgehend von dieser Faktenlage wurde das CSEARCH-System deshalb erweitert um eine automatische Klassifizierung der Spektraldaten analog zur üblichen Einteilung in ‚Accept as it is‘, ‚Minor revision‘, ‚Major revision‘ und ‚Reject‘ zu erzielen. Etwa die Hälfte der Spektraldaten fällt in die Kategorie ‚Accept as it is‘, allerdings sind etwa 15% der Daten doch einer eingehenderen Qualitätsanalyse würdig.

Anhand von einigen typischen Beispielen wird die Funktionalität des ‚Robot-referees‘ erläutert und anschließend eine statistische Analyse nach Journalen präsentiert.

Das Gesamtsystem ist (nach vorheriger Registrierung) kostenfrei zugänglich unter

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

<http://synthon.pch.univie.ac.at/csearchlite/robot.php>

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