

## **Integration des CSEARCH-Robot-Referees zum 'Peer-reviewing' von $^{13}\text{C}$ -NMR Daten in den Publikationsprozess**

**Peter Fischer<sup>[a]</sup>, Norbert Haider<sup>[b]</sup>, Reinhard Neudert<sup>[a]</sup>,  
Wolfgang Robien<sup>[c]</sup>, Haymo Ross<sup>[a]</sup>**

[a] Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, BRD

[b] Department für Pharmazeutische Chemie, Universität Wien, AT

[c] Department für Organische Chemie, Universität Wien, AT

Die Qualität publizierter Experimentaldaten überstreicht einen weiten Bereich[1,2], wobei bei  $^{13}\text{C}$ -NMR Verschiebungen ihre extrem schnelle Vorhersagbarkeit aus der chemischen Struktur eine sehr effiziente Möglichkeit zur Überprüfung bietet. Diese Tatsache, sowie die Verfügbarkeit großer, qualitativ hochwertiger Referenzdatensammlungen, war der Ausgangspunkt zur Entwicklung des „CSEARCH Robot-Referees“.

Diese Überprüfung kann an zwei Stellen im Rahmen des Strukturaufklärungs- bzw. Strukturverifizierungsprozesses optimal eingesetzt werden.

1. Bei der erstmaligen Interpretation der Messdaten - hier setzt NMRShiftDB[3] an und erlaubt neben der Interpretation und der interaktiven Zuordnung der Resonanzsignale auch die Archivierung der Spektraldaten.
2. Während der Einreichung eines Manuskripts zur Publikation - genau hier nimmt der Wiley-Verlag eine Vorreiterrolle mit seinem 'High-Impact'-Journal „European Journal of Organic Chemistry“ ein[4] und bietet den Autoren die optionale Verwendung dieser Technologie zur Überprüfung der publizierten chemischen Strukturen und ihrer  $^{13}\text{C}$ -NMR Daten auf eventuelle Inkompatibilitäten an.

Die Kommunikation zwischen dem graphischen User-Interface und dem Robot-Referee erfolgt mittels etablierter Standards, wie SD-files und email. Die Datensicherheit ist durch gespiegelte, räumlich getrennt untergebrachte RAID-Arrays gegeben. Weiters werden sämtliche vom Robot-Referee erzeugten Web-Seiten mit einer digitalen Signatur versehen, um Fälschungssicherheit zu gewährleisten.

Im Rahmen dieses Vortrags werden Beispiele zum effizienten Einsatz dieses Methodenrepertoires[5,6] diskutiert und der daraus resultierende, potenzielle Qualitätsgewinn aufgezeigt.

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

[2] E.N. Brown, S. Ramaswamy; Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr. 63 (2007) 941

[3] <http://nmrshiftdb.org>

[4] H. Ross; Eur.J.Org.Chem. 2015, 4-6 DOI: 10.1002/ejoc.201403496

[5] <http://nmrpredict.org.univie.ac.at/cl3robot/robot.php>

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