

Werkzeuge zur Strukturverifizierung

Wolfgang Robien

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

Die Qualität von ^{13}C -NMR Daten in der chemischen Fachliteratur überspannt einen sehr weiten Bogen beginnend von nicht zugeordneten Peaklisten bis hin zu perfekten Signalzuordnungen, die durch state-of-the-art 2D-Experimente durchgeführt wurden. Im Rahmen des Vortrags wird ein standardisierter Workflow vorgestellt, der einerseits eine Bewertung der Kompatibilität von Struktur und Peakliste ermöglicht und davon ausgehend bei Bedarf weitere Prozesse initiiert.

Wissensbasis: 340,000 zugeordnete ^{13}C -NMR-Spektren aus der Literatur [1]
Bisherige Anfragen erlauben den Aufbau einer eigenen Datenbank
Eigene Daten können allgemein zur Verfügung gestellt werden

Komponenten: Bewertung der Kompatibilität der Peakliste und des vorgegebenen Strukturvorschlags in Analogie zum 'peer-reviewing'
Ähnlichkeitssuche über 74 Millionen vorhergesagte ^{13}C -NMR-Spektren [2]
Erzeugung von alternativen Strukturvorschlägen
Bewertung von Strukturvorschlägen aus Isomerenerzeugungsprogrammen [3]

Schulungen: Die Möglichkeiten, Strukturvorschläge automatisiert auf Kompatibilität mit ihren ^{13}C -NMR Daten zu überprüfen, wurden an mehreren Universitäten im In- und Ausland präsentiert.

Integration dieser Technologien: „Peer-reviewing“ des „European Journal of Organic Chemistry“
Verwendung aus Bruker's TOPSPIN und CMC-se Programm
Verwendung aus Mestrelab's Mnova-Programm

Als Beispiel wird eine in der Literatur unbekannte Strukturrevision vollautomatisch durchgeführt und die notwendigen Einzelschritte werden im Detail diskutiert. Die Effizienz des vorgeschlagenen Workflows wurde an etwa 100 Beispielen in einem Übersichtsartikel präsentiert [4]. Bei systematischer Anwendung des „CSEARCH-Robot-Referees“ sind Erfolge bei der Verbesserung der NMR-Datenqualität mit wenig Aufwand erzielbar.

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

[2] <http://nmrpredict.org.univie.ac.at/similar/eval.php>

[3] <http://nmrpredict.org.univie.ac.at/rank/rank.php>

[4] W.Robien, in: Progress in the Chemistry of Organic Natural Products, Volume 105, in press