



# IDNMR

Initiative Datenqualität in der NMR-Spektroskopie

## Zusammenfassung Umfrage ID-NMR

Dr. Johannes Liermann

### 1. An welcher Hochschule/Einrichtung arbeiten Sie?

Uni Köln	22
TU Dresden	16
MPI KoFo Mülheim	10
Uni Mainz	7
TU Berlin	5
Uni Bochum	4
Uni Leipzig	4
Uni Hohenheim	2
Uni Würzburg	2
Leibniz-Institut für Katalyse Rostock	1
TU Darmstadt	1
privat	1
Uni Innsbruck	1
Uni Frankfurt	1
Uni Freiburg	1
<b>Summe</b>	<b>78</b>

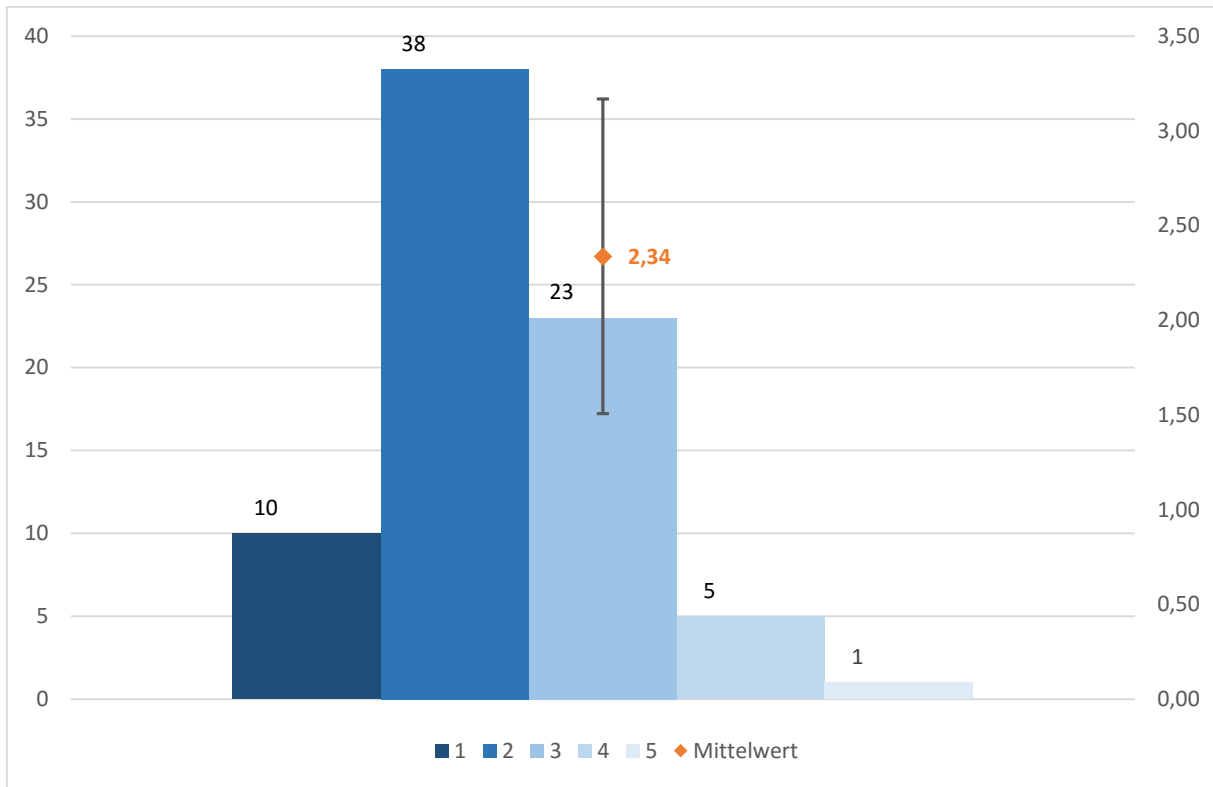
### 2. Was ist Ihr höchster Abschluss?

Abitur	2
Bachelor Sc.	3
Diplom	10
Master Sc.	44
Promotion	16
Sonstiges	3

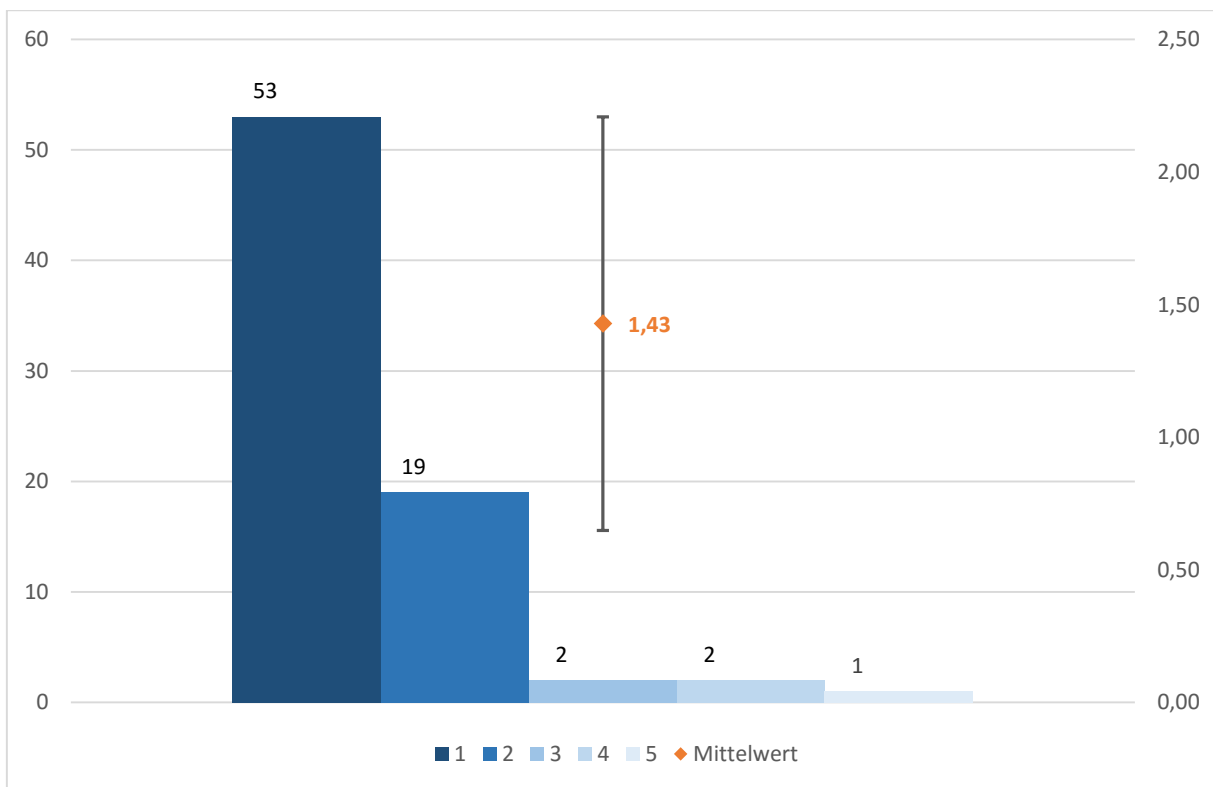
### 3. In welchem Fachbereich sind Sie tätig?

OC	62
AC	8
Sonstiges	6
Sonstiges / Institut f. Angewandte Photophysik	1
Keine Angabe	1

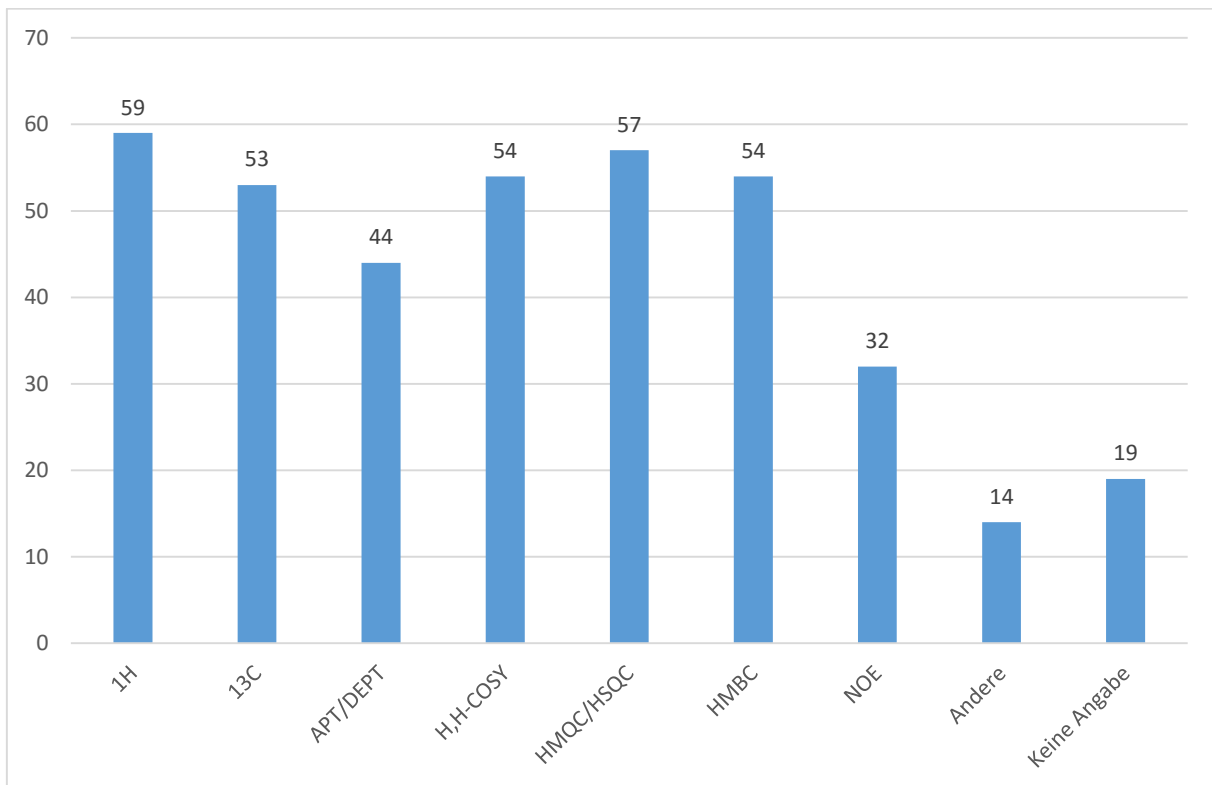
**4. Wie schätzen Sie Ihr wissenschaftliches Know-How auf dem Gebiet NMR-Spektroskopie ein, wenn 1 sehr gut und 5 mangelhaft ist?**



**5. Wie wichtig ist Ihnen die korrekte Zuordnung von Kohlenstoff- und Protonensignalen zueinander, wenn 1 sehr wichtig und 5 unwichtig ist?**



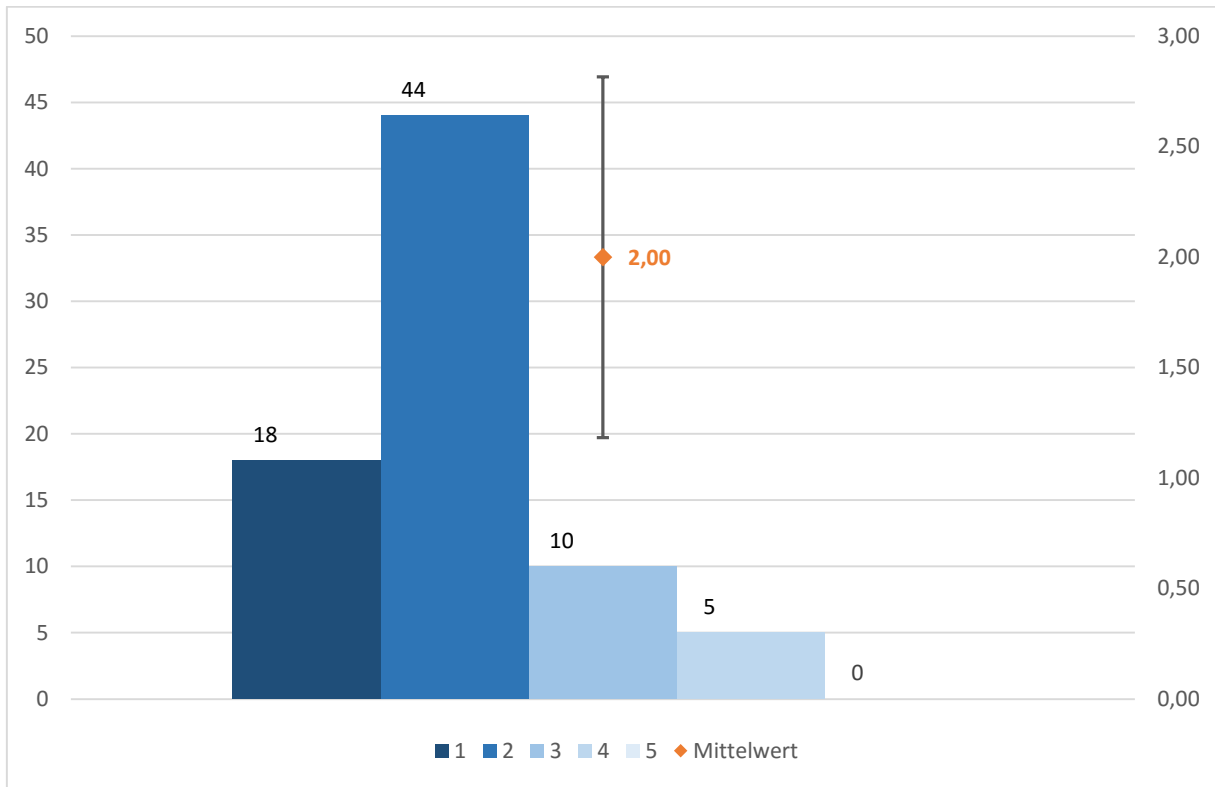
## 6. Welche NMR-Spektren messen Sie für die Zuordnung Ihrer Signale?



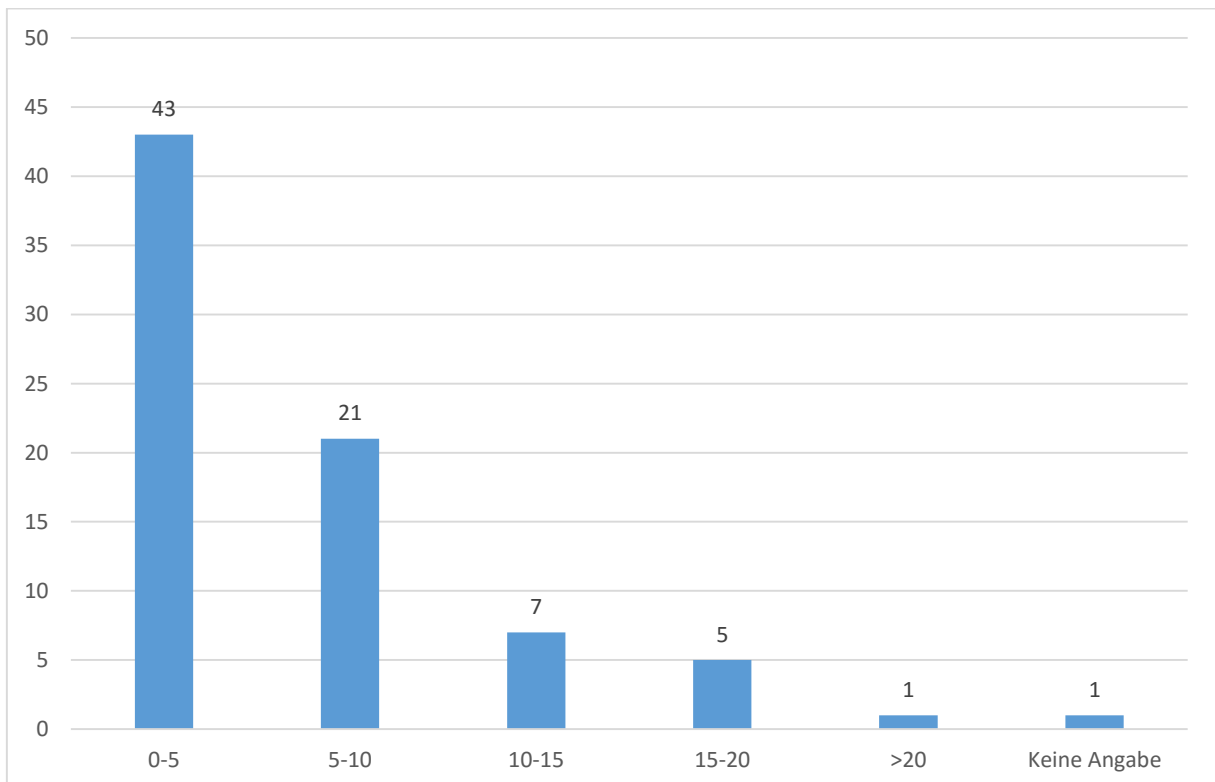
Folgende Kombinationen wurden angegeben:

<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, NOE	17
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC	9
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, NOE, Andere	8
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC	6
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, NOE	3
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, NOE, Andere	2
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, Andere	2
<sup>1</sup> H, APT/DEPT, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC	2
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, H,H-COSY, HMQC/HSQC	2
<sup>1</sup> H, APT/DEPT	1
<sup>1</sup> H, APT/DEPT, HMQC/HSQC, HMBC	1
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, HMQC/HSQC, Andere	1
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, APT/DEPT, HMQC/HSQC, HMBC	1
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C, H,H-COSY, HMQC/HSQC, HMBC, Andere	1
<sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C	1
Keine Angabe	19

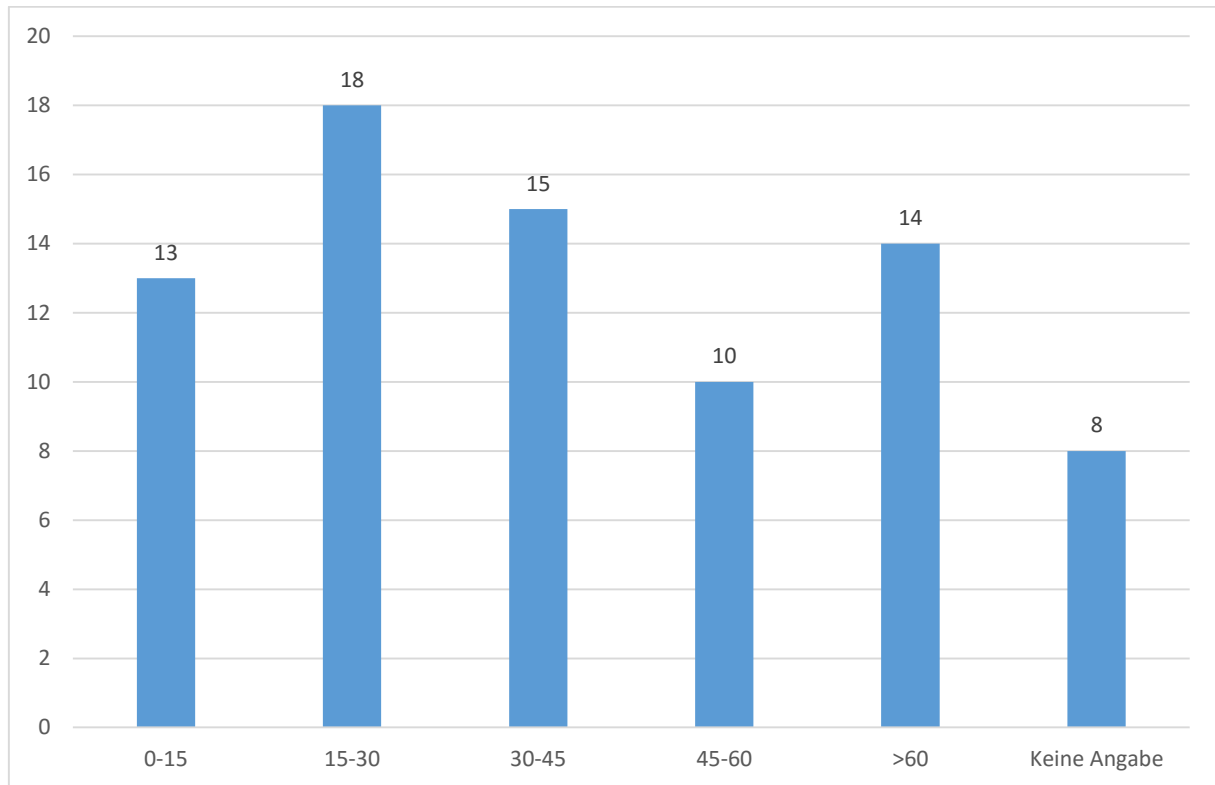
**7. Wie gut lässt sich die Zuordnung für die von Ihnen gemessenen Substanzen durchführen, wenn 1 sehr gut und 5 mangelhaft ist?**



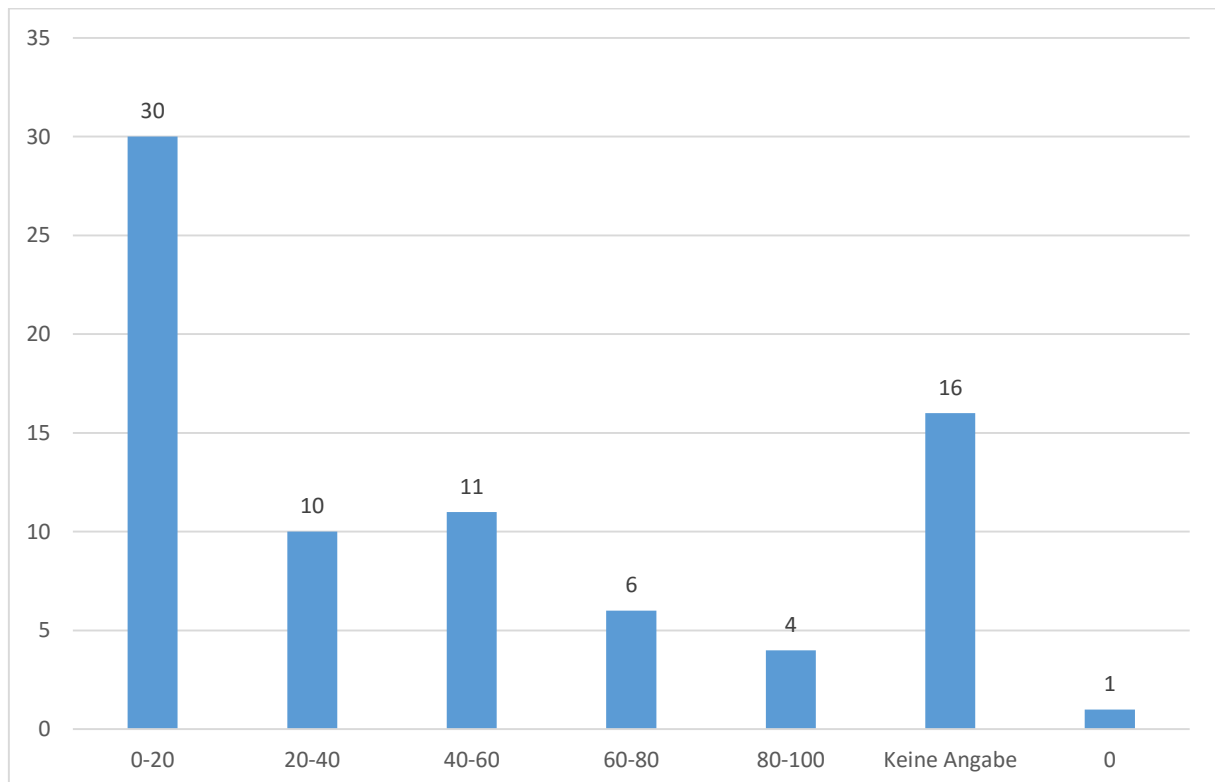
**8. Wie häufig im Monat messen Sie Vollanalysen (also alle 1D- und 2D-Experimente aus Frage 6)?**



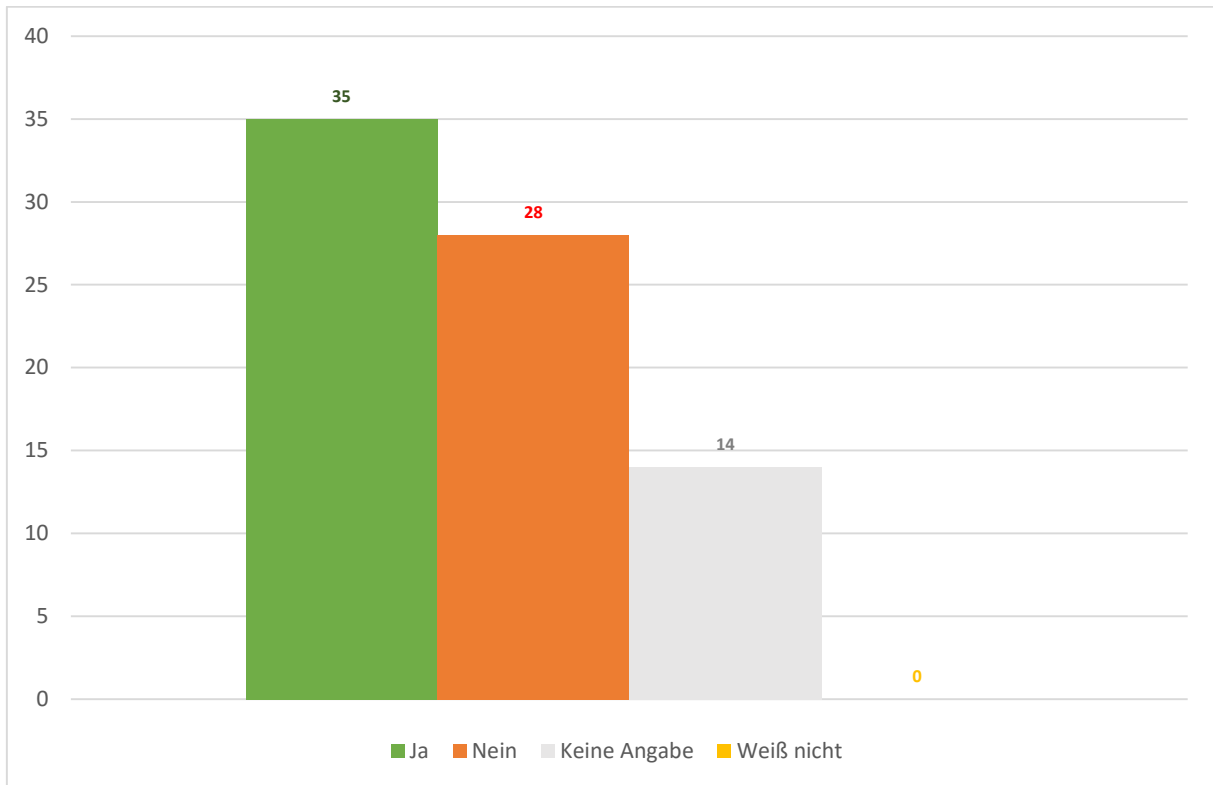
**9. Wie viel Zeit verwenden Sie zum Auswerten der gemessenen Spektren pro Verbindung in Minuten?**



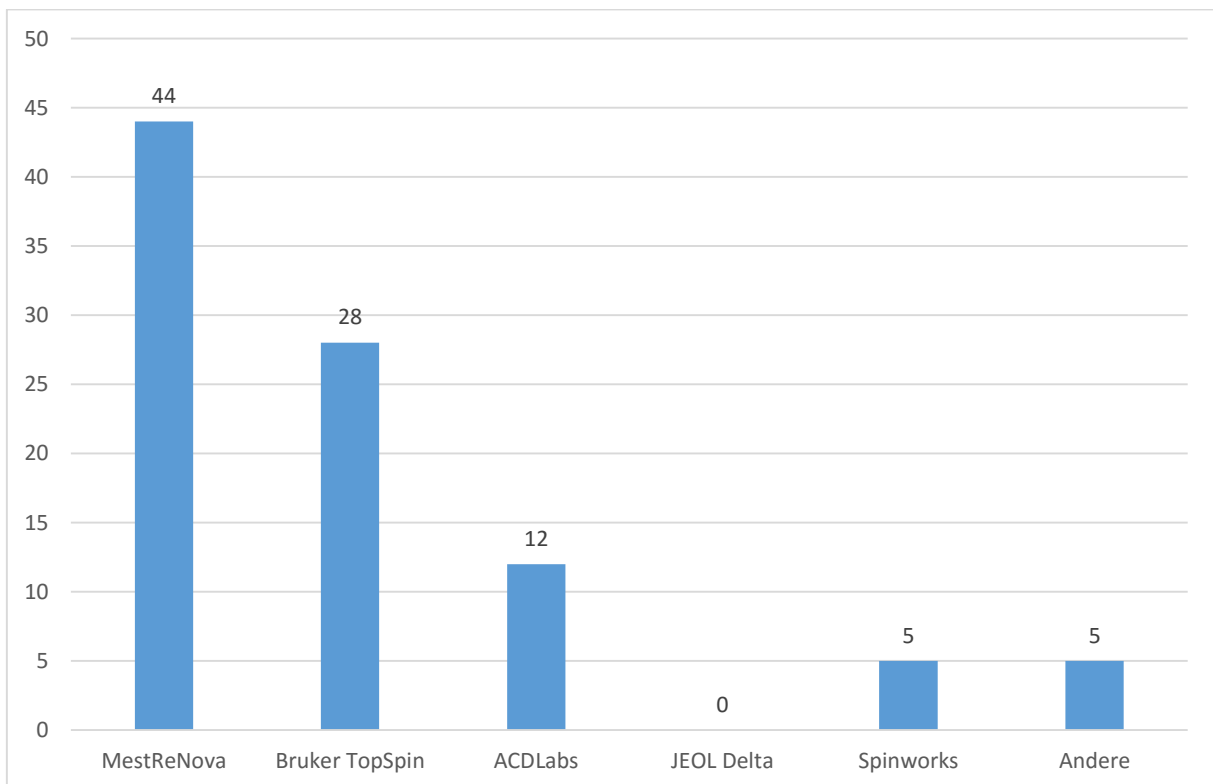
**10. Wie viel Prozent der von Ihnen gemessenen Zuordnungsspektren werden veröffentlicht?**



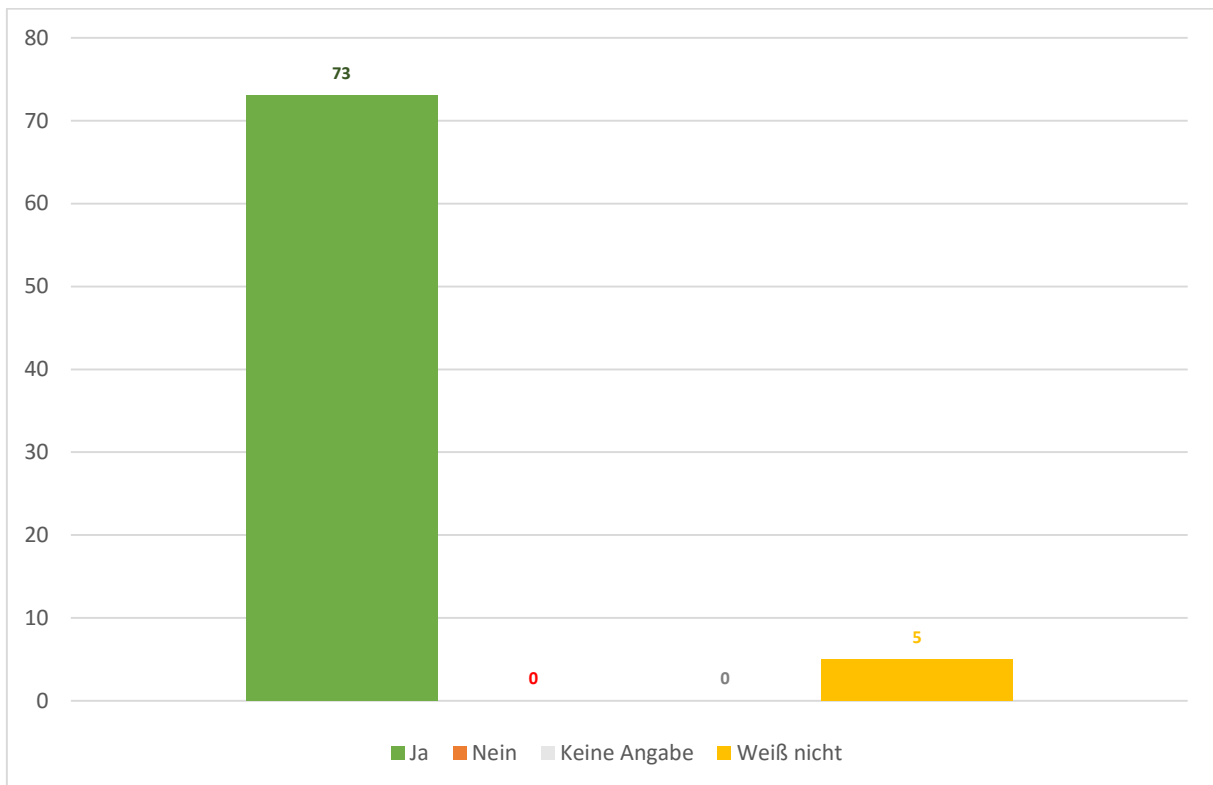
### 11. Werden in Ihrem Arbeitskreis nur Verbindungen publiziert, bei denen alle Signale aus den Spektren zugeordnet sind?



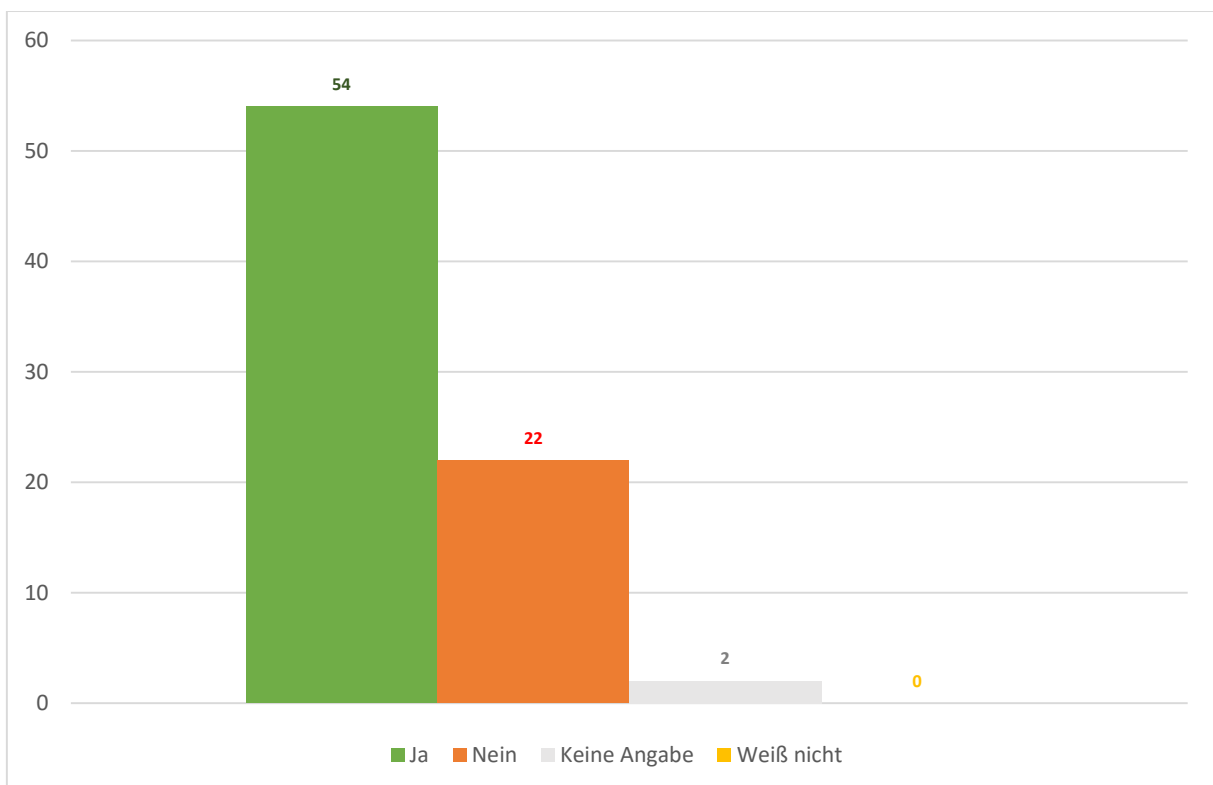
### 12. Welche NMR-Software verwenden Sie zur Auswertung Ihrer Spektren?



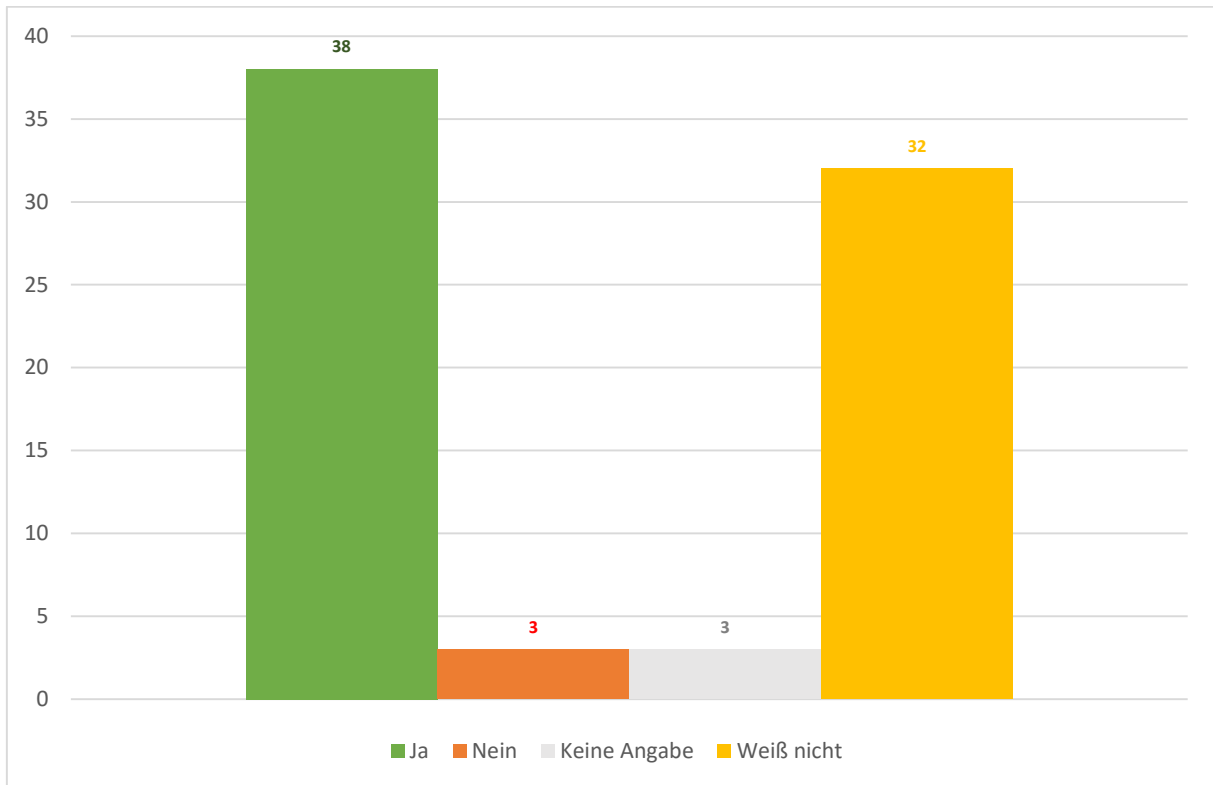
### 13. Kann das von Ihnen genutzte Programm Kopplungskonstanten auswerten?



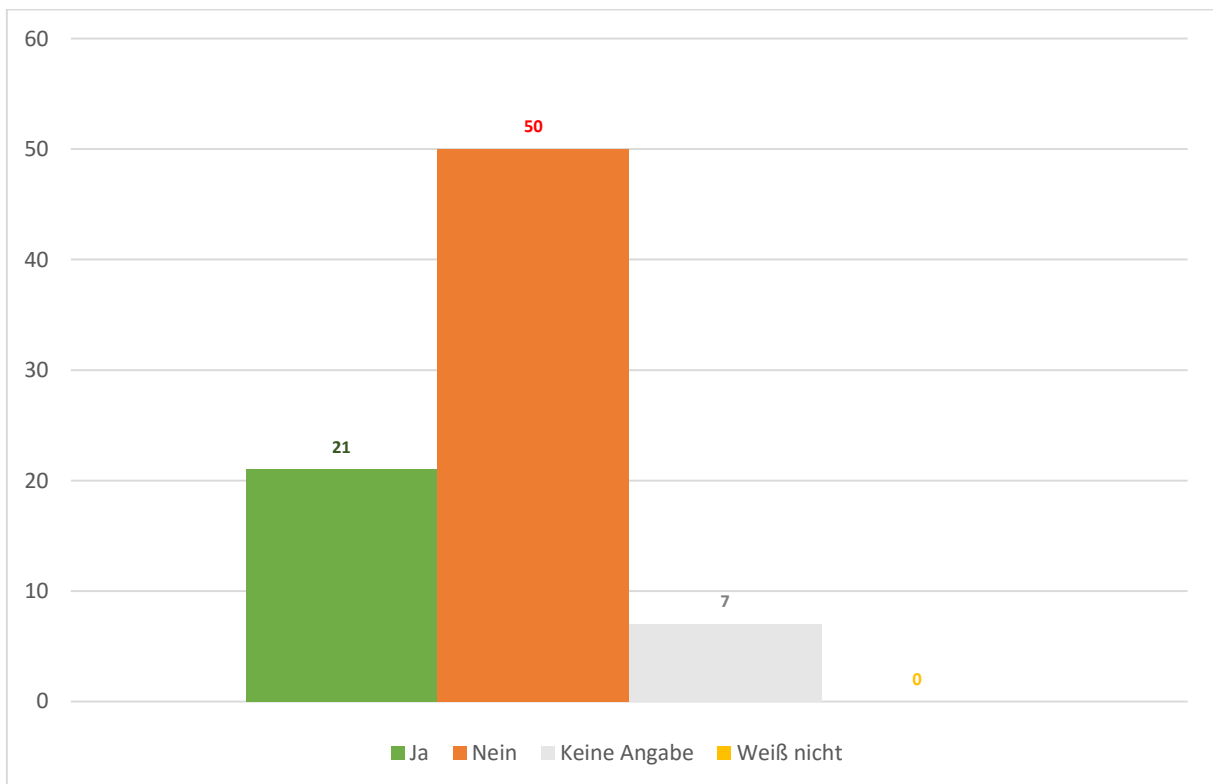
### Benutzen Sie diese Funktion bei der Auswertung Ihrer Spektren?



#### 14. Kann das von Ihnen genutzte Programm Cross-Peaks in 2D-NMR-Spektren auswerten?

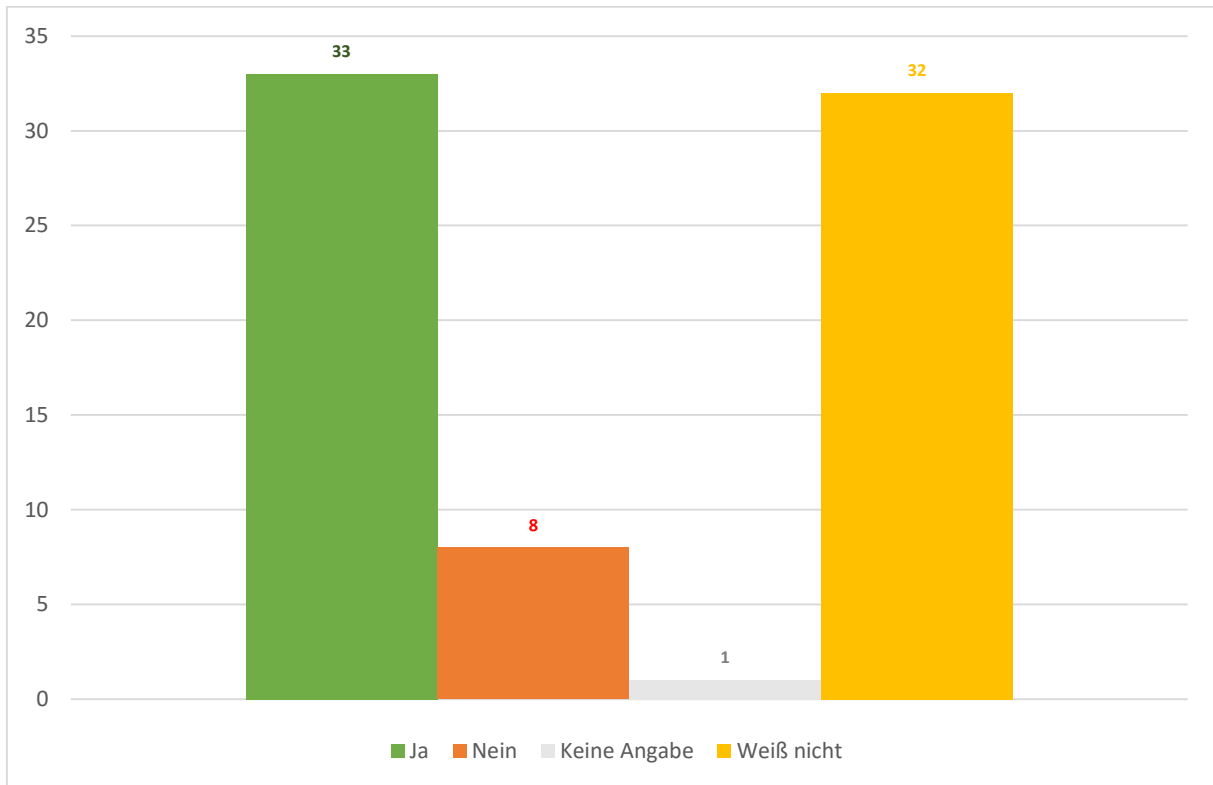


#### 15. Benutzen Sie diese Funktion bei der Auswertung Ihrer Spektren?

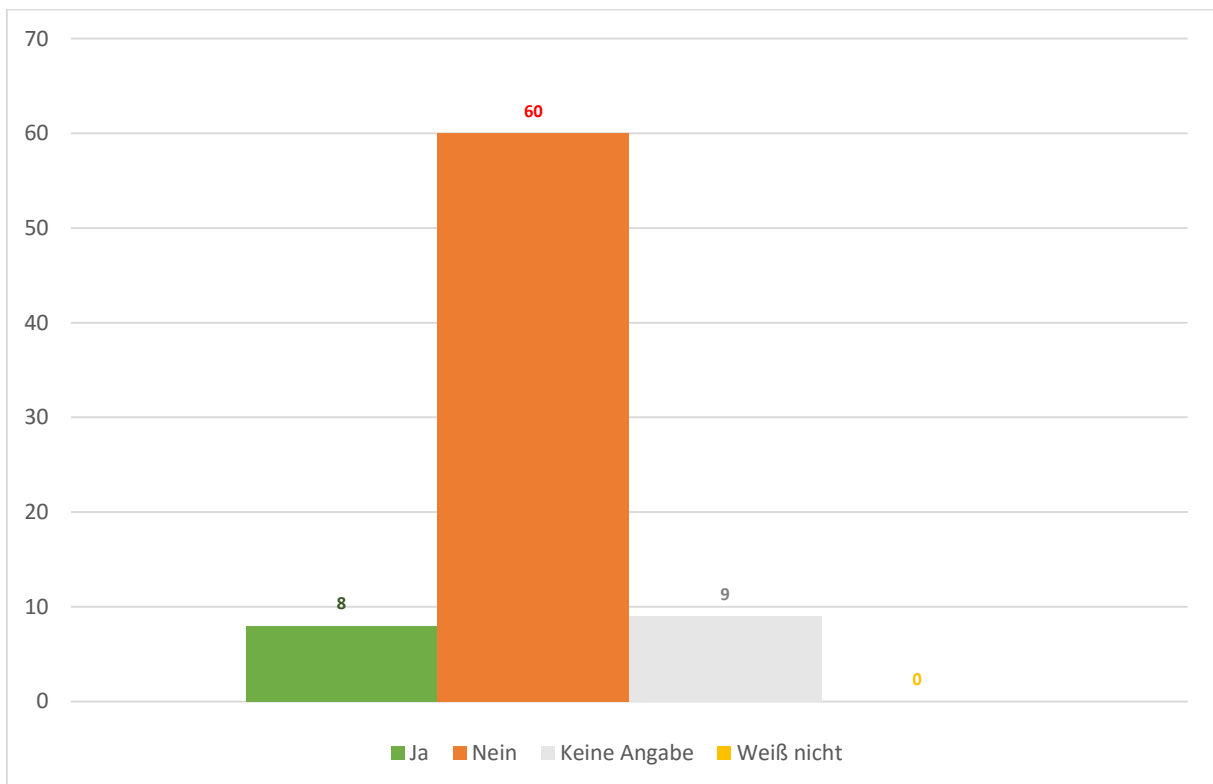




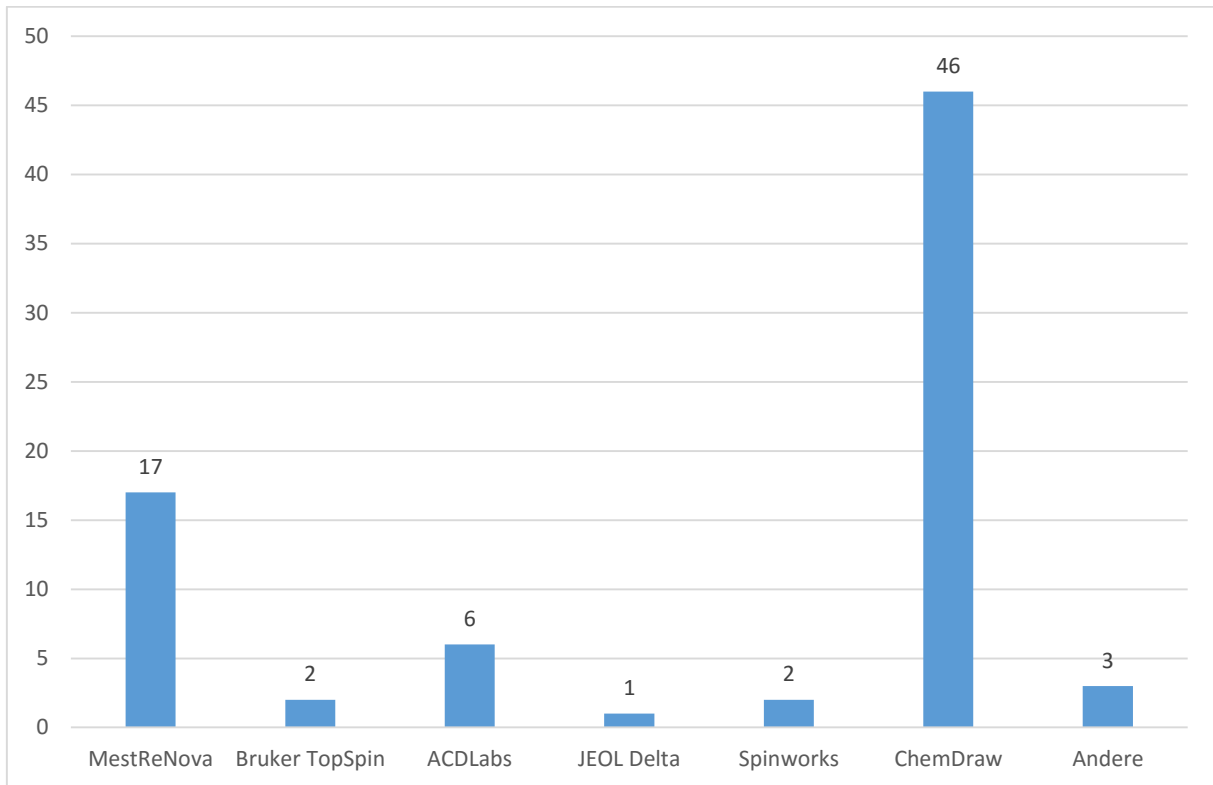
### 16. Besitzt das von Ihnen verwendete NMR-Programm eine interaktive Zuordnungsfunktion?



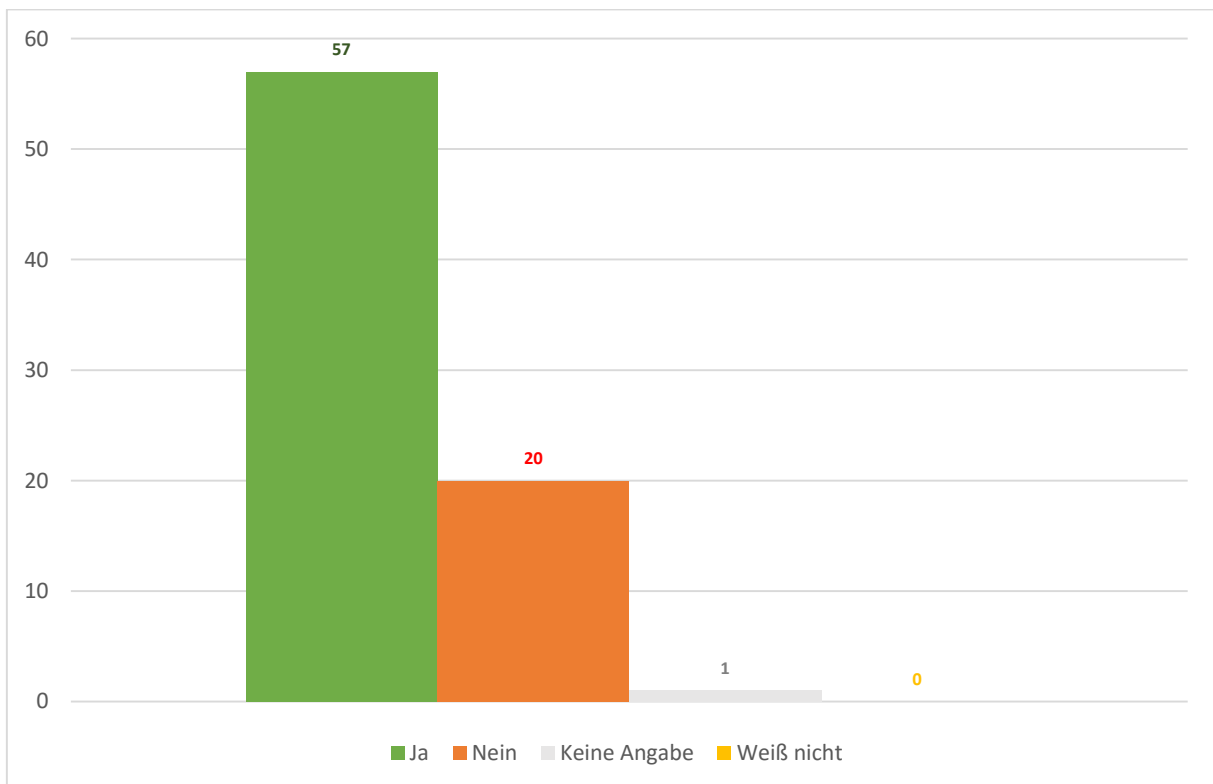
### 17. Benutzen Sie diese Funktion bei der Auswertung Ihrer Spektren?



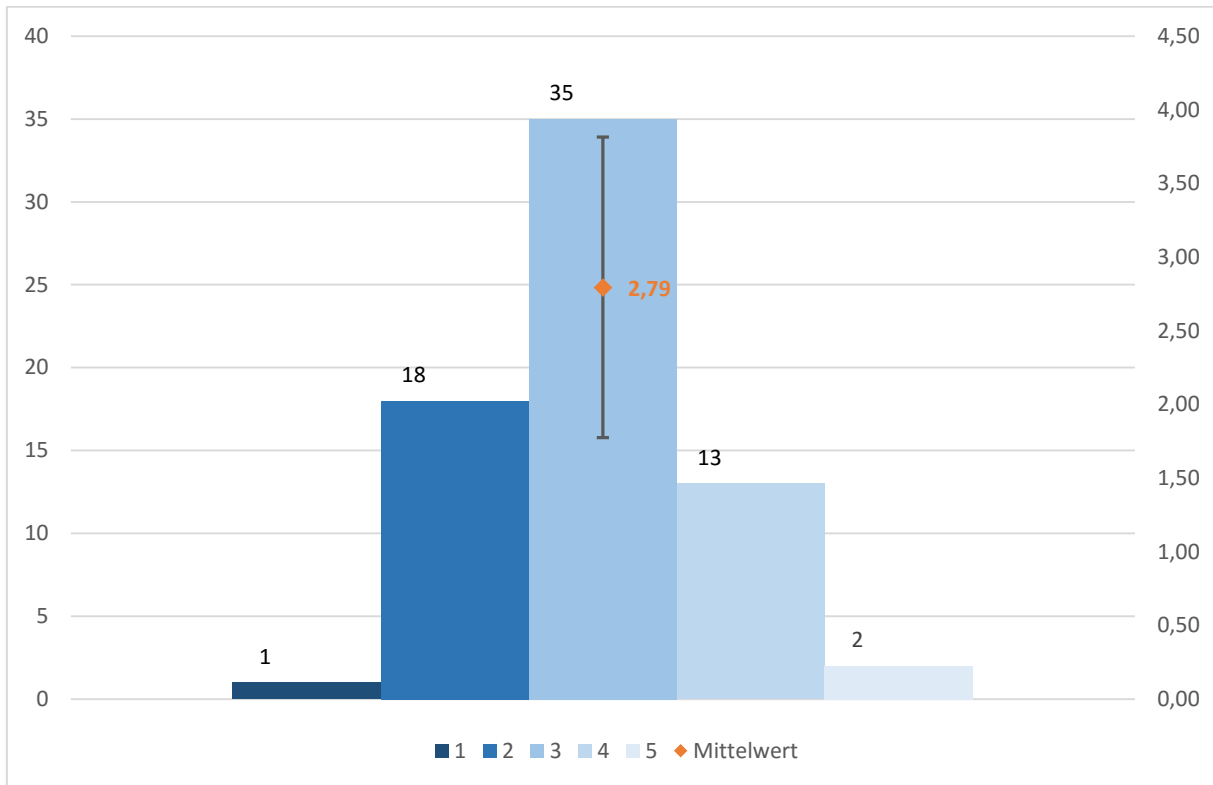
**18. Welches von Ihnen genutzte Programm kann Spektren vorhersagen und wird von Ihnen regelmäßig dafür benutzt?**



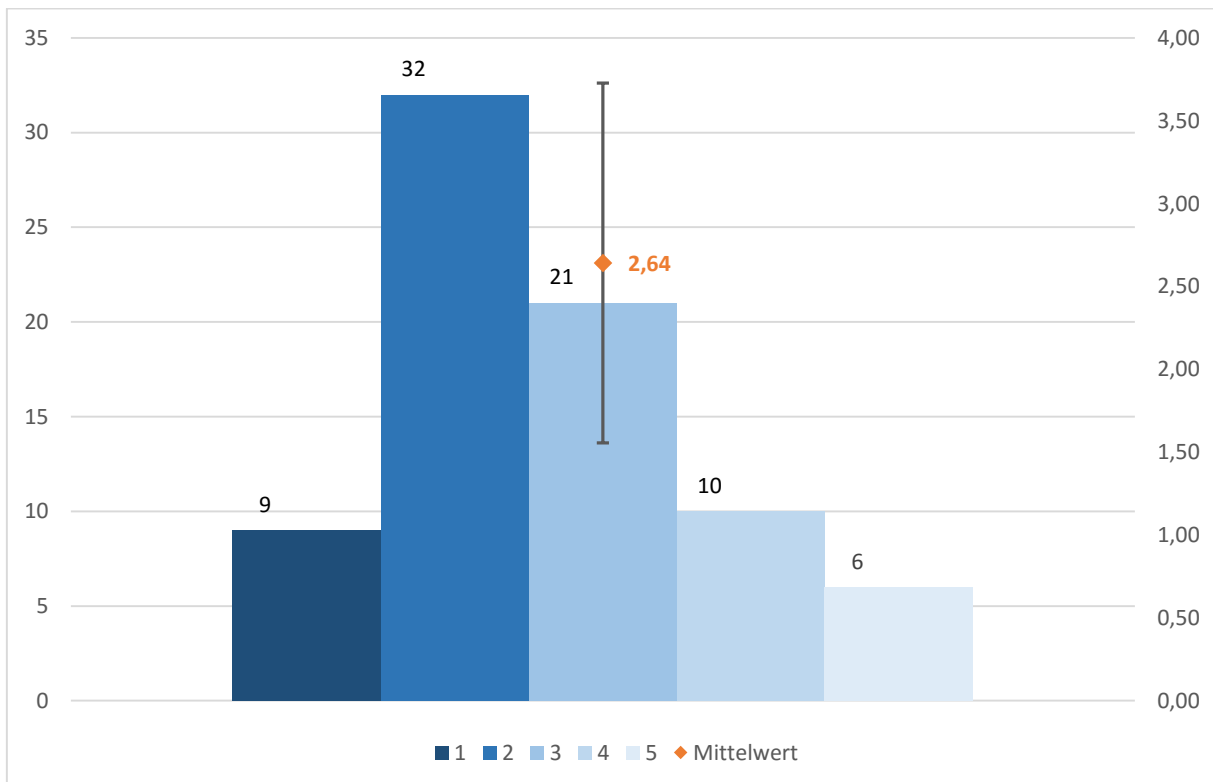
**19. Benutzen Sie diese Funktion zum Vergleich Ihrer Spektren?**



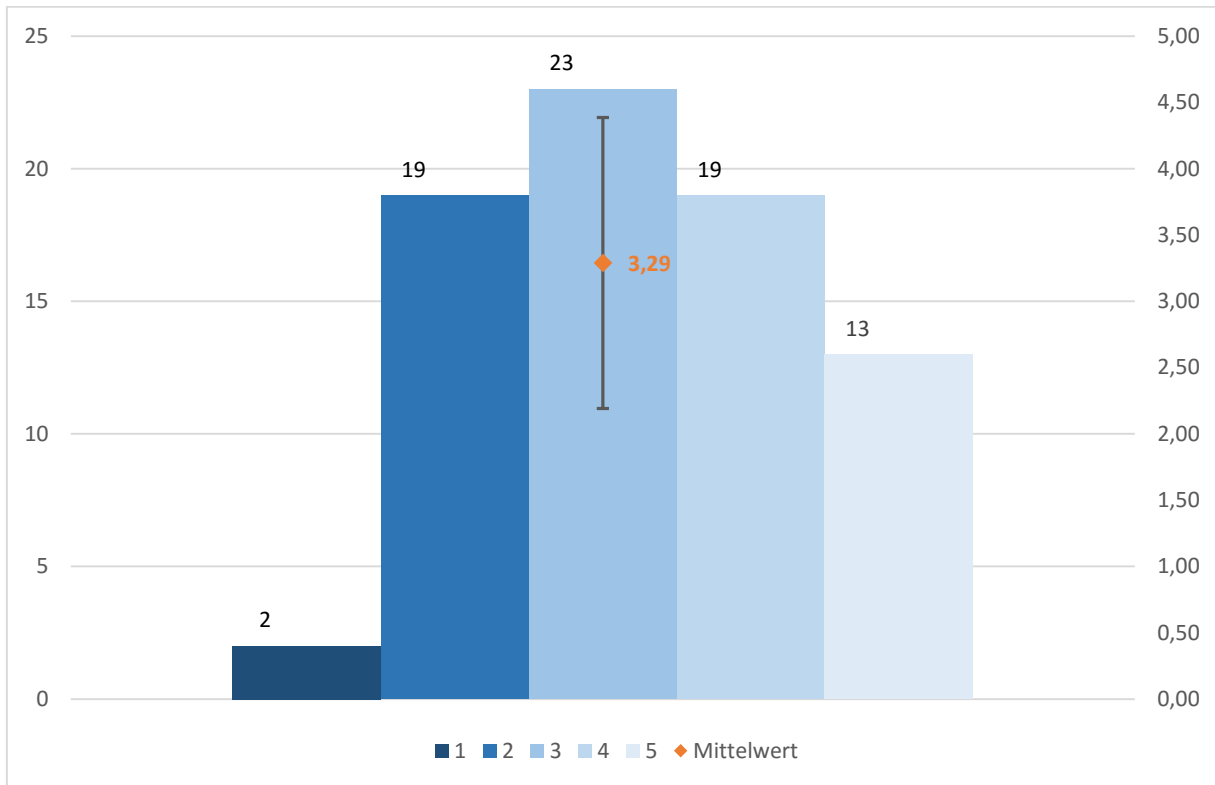
**20. Wie gut ist diese Vorhersage Ihrer Meinung nach, wenn 1 sehr gut und 5 mangelhaft ist?**



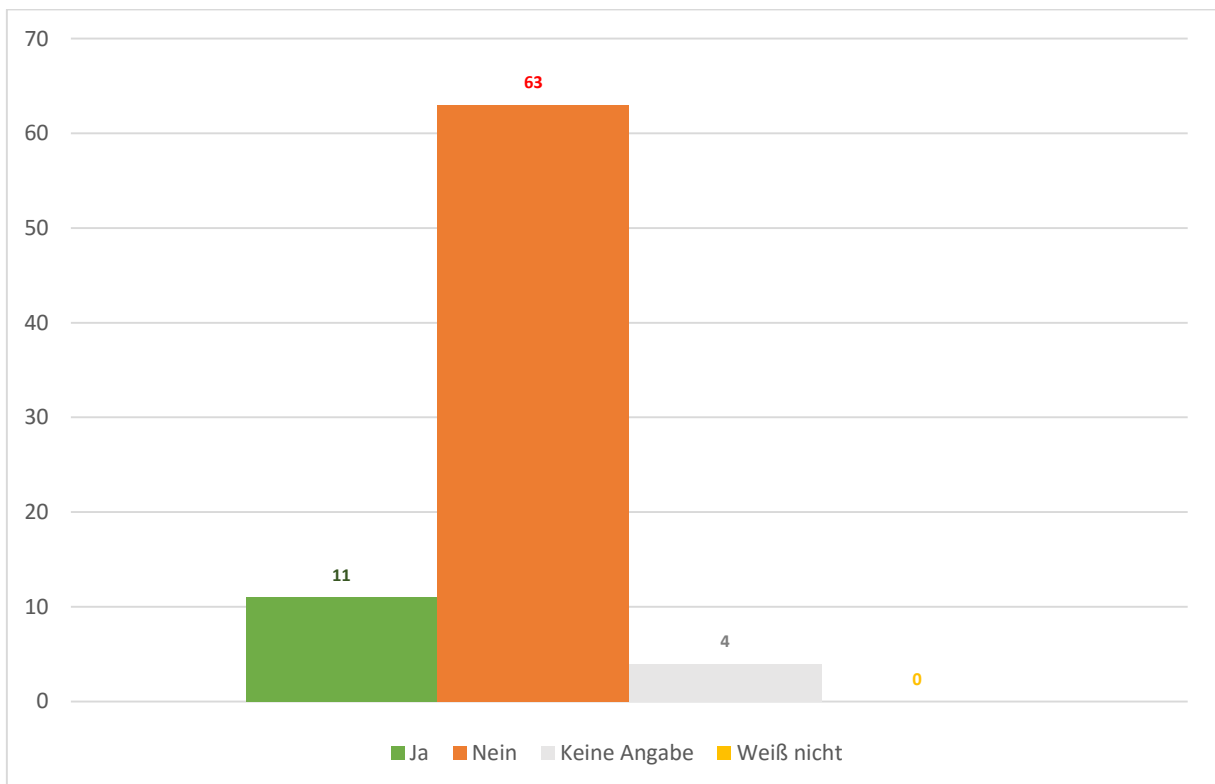
**21. Wie häufig suchen Sie in Literatur-Datenbanken speziell nach NMR-Daten, wenn 1 häufig und 5 selten ist?**



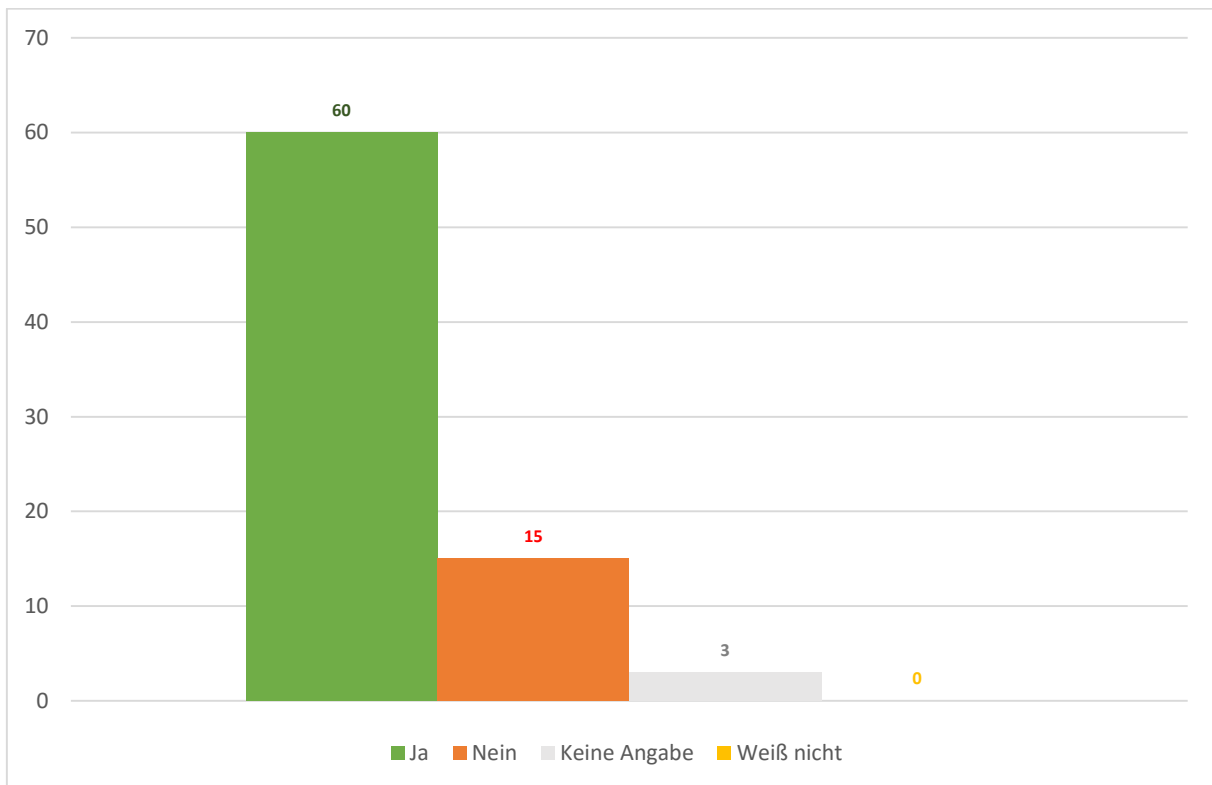
**22. Wie häufig finden Sie bei Ihrer Suche Ihrer Meinung nach brauchbare Spektren, wenn 1 häufig und 5 selten ist?**



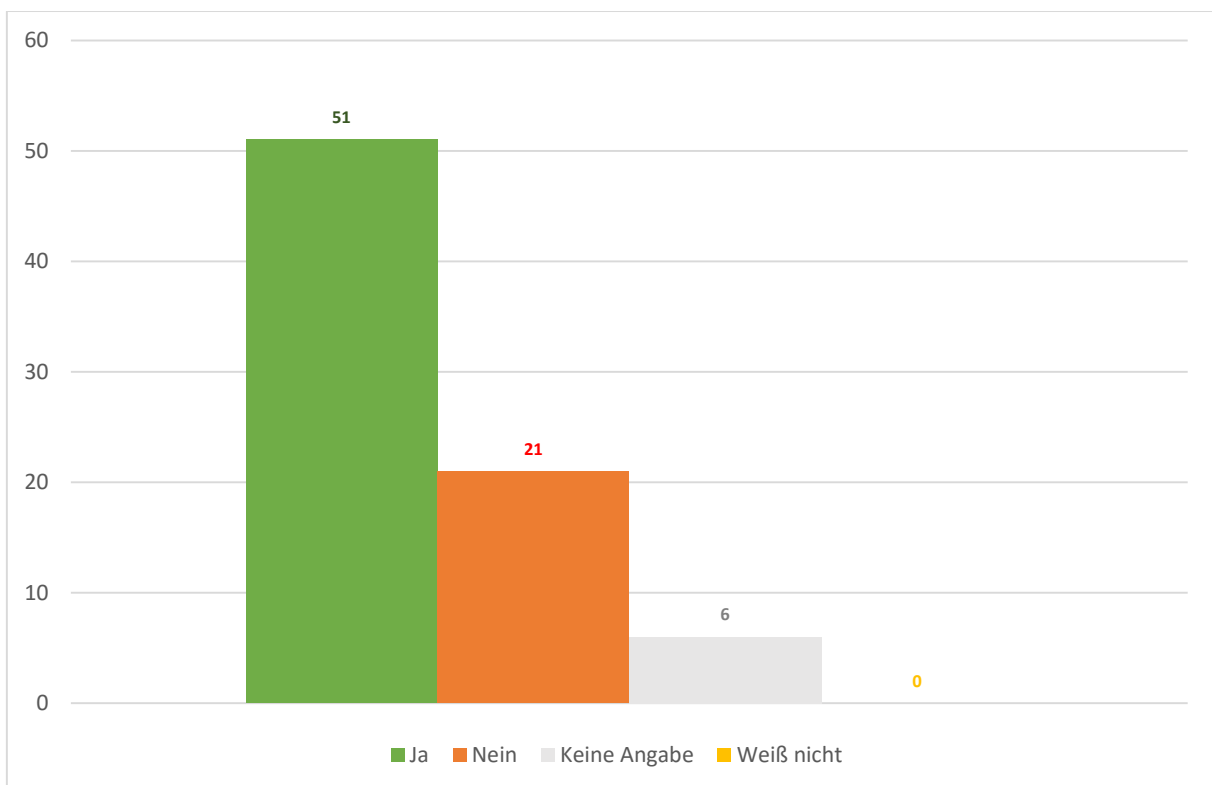
**23. Enthalten diese Spektren für jedes Signal eine korrekte Zuordnung?**



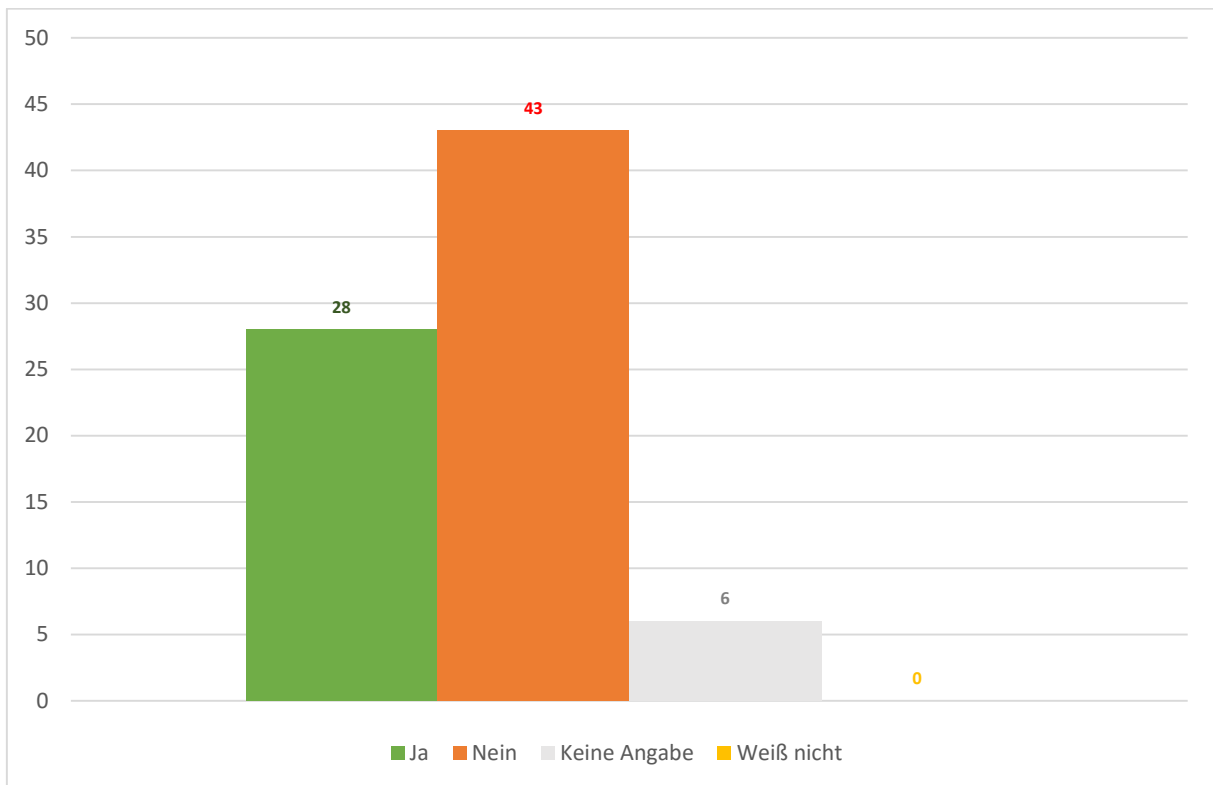
## 24. Sollte die Signalzuordnung Ihrer Meinung nach verpflichtend sein?



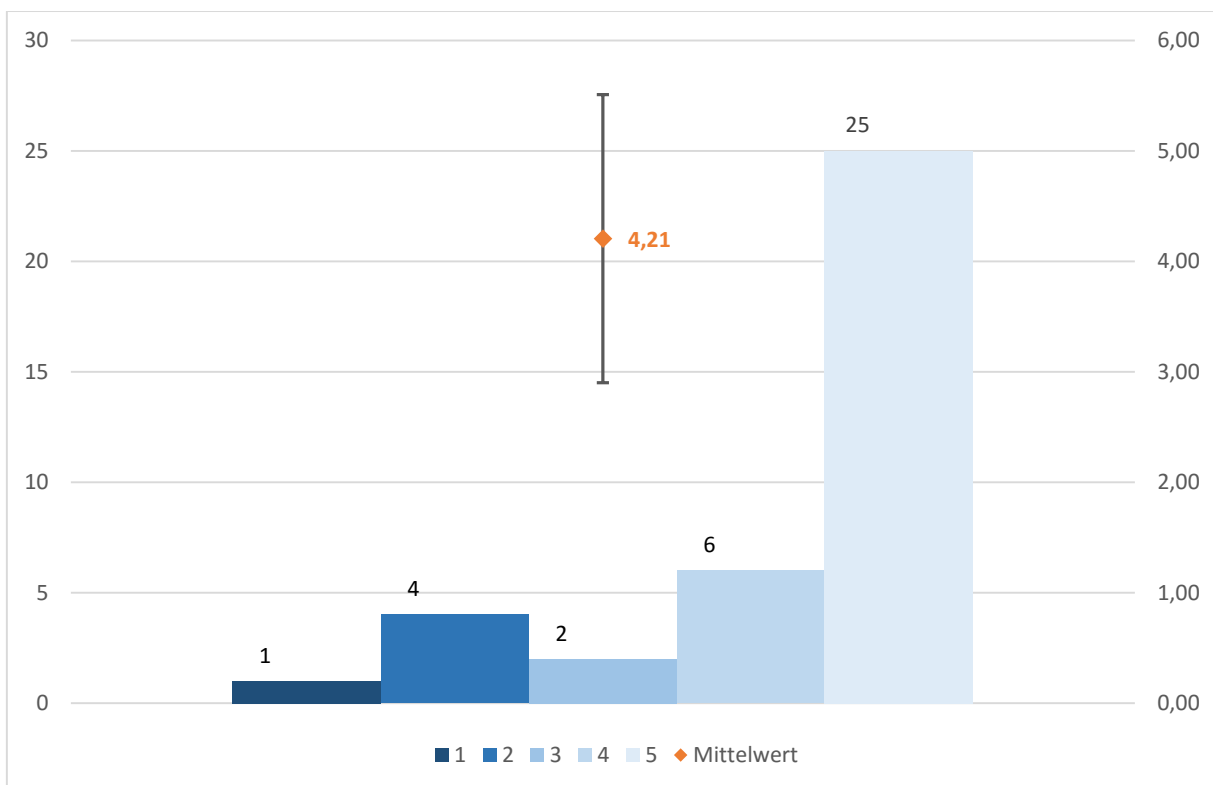
## 25. Sollte die Angabe von Kopplungskonstanten Ihrer Meinung nach verpflichtend sein?



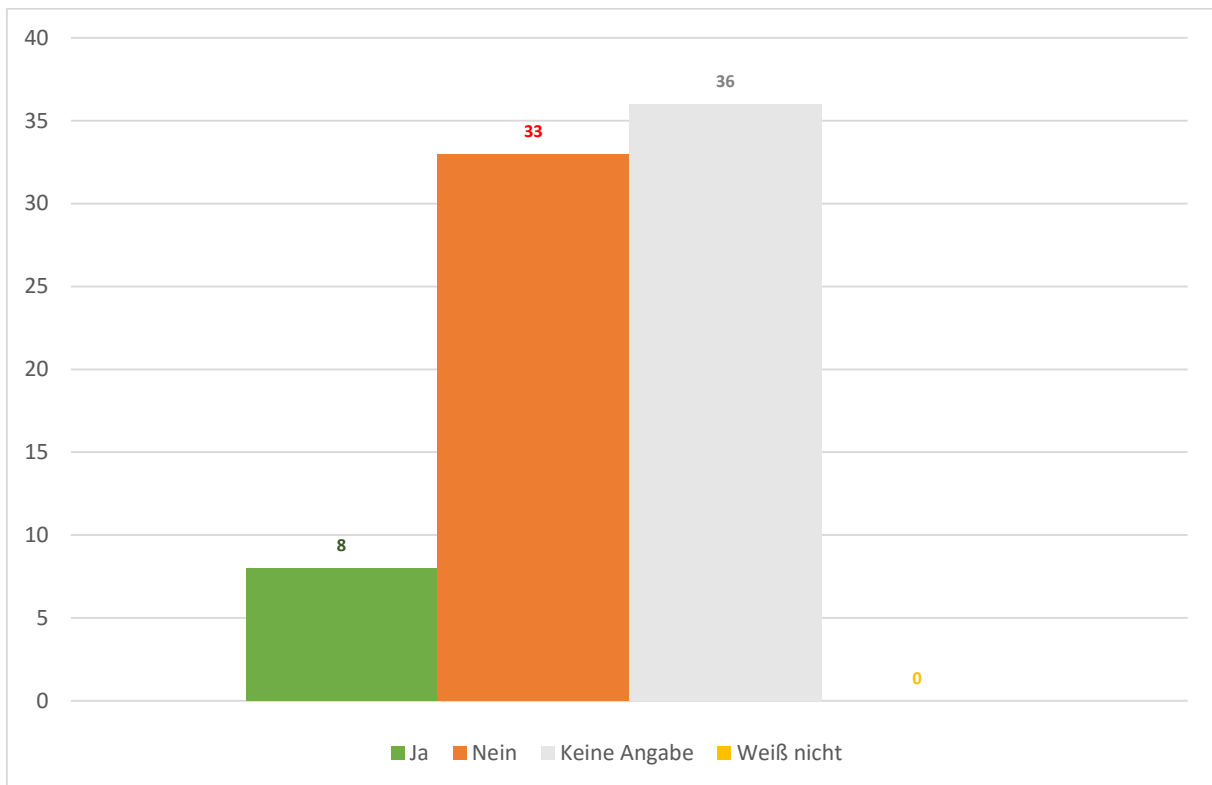
## 26. Gibt es an Ihrer Hochschule eine hausinterne NMR-Datenbank?



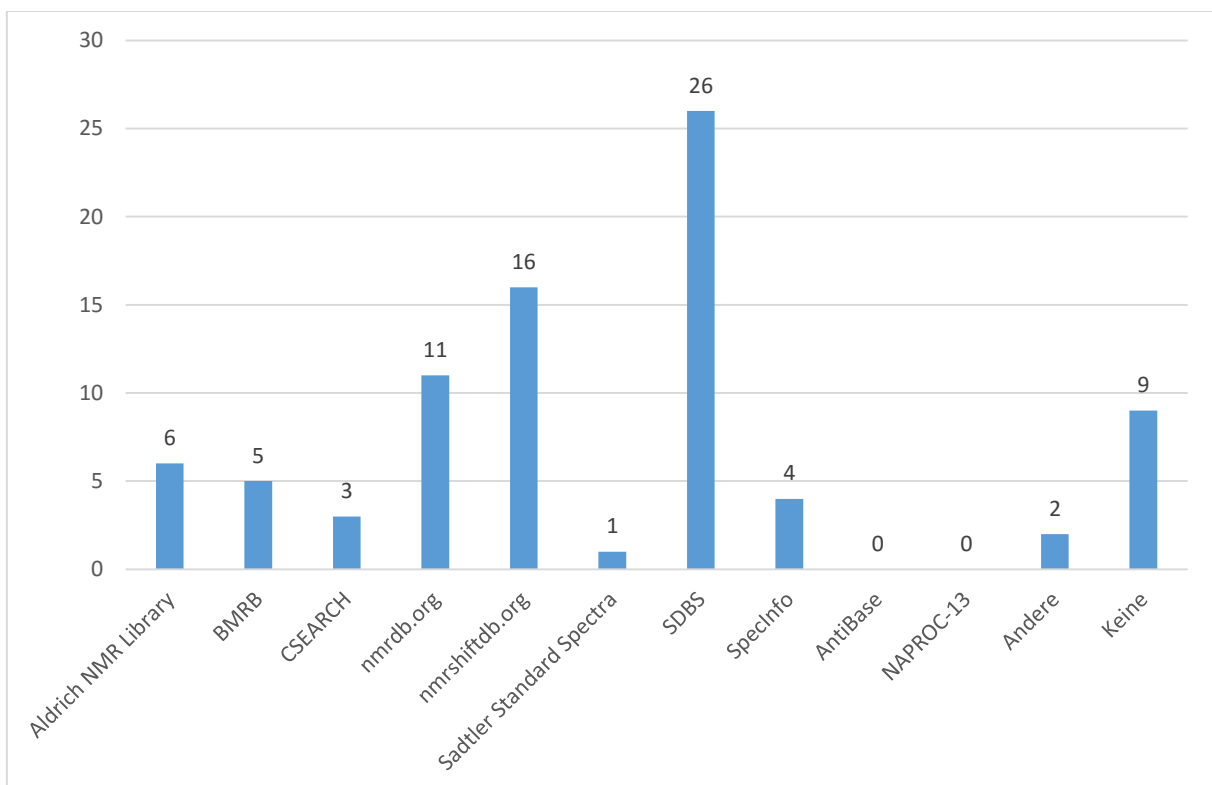
## 27. Wie häufig nutzen Sie diese Datenbank, wenn 1 häufig und 5 selten ist?



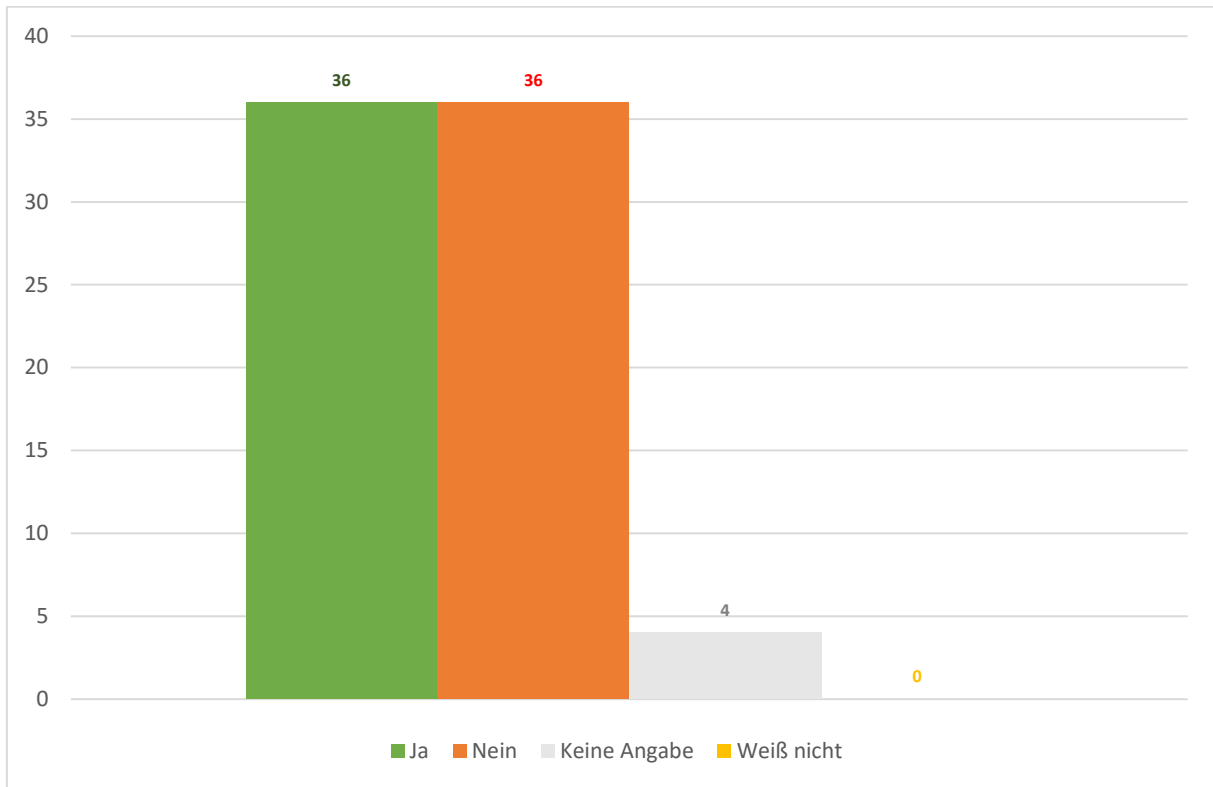
## 28. Tragen Sie Ihre Verbindungen in diese Datenbank ein?



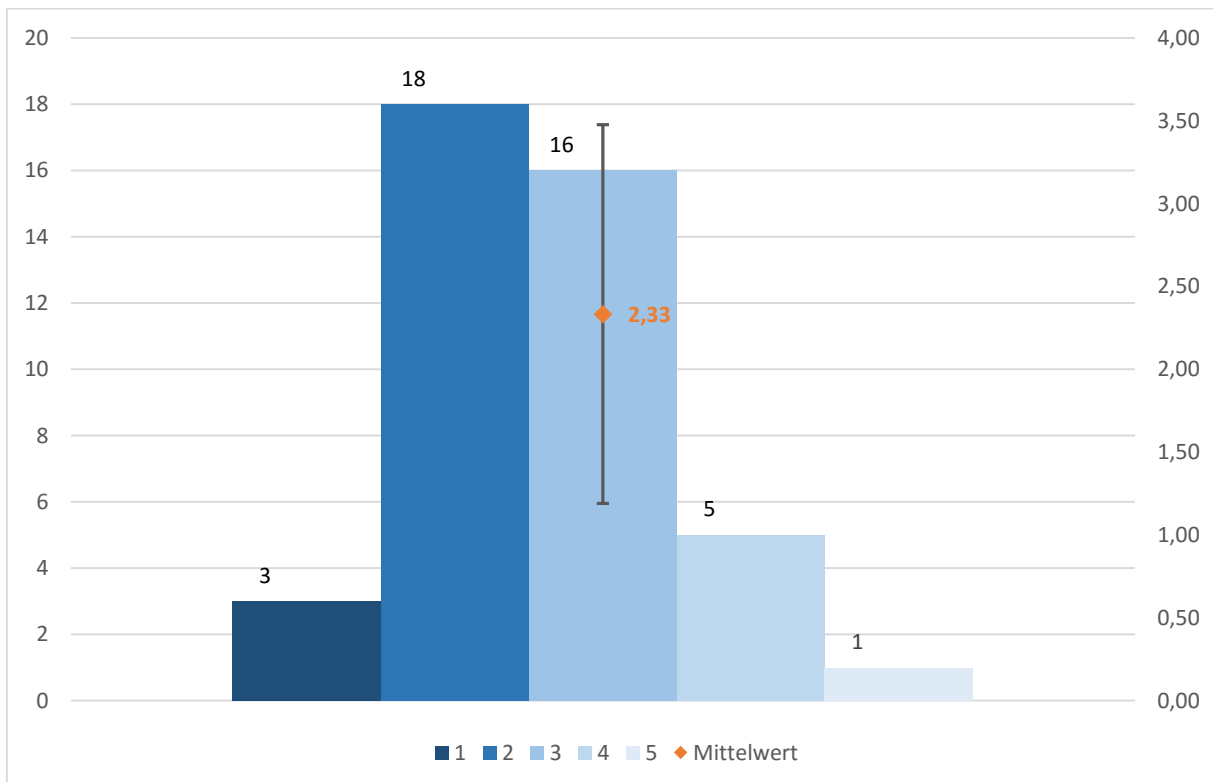
## 29. Kennen Sie eine der folgenden Spektrendatenbanken?



**30. Benutzen Sie eine Spektrendatenbank zur Vorhersage oder zum Vergleich Ihrer Spektren?**

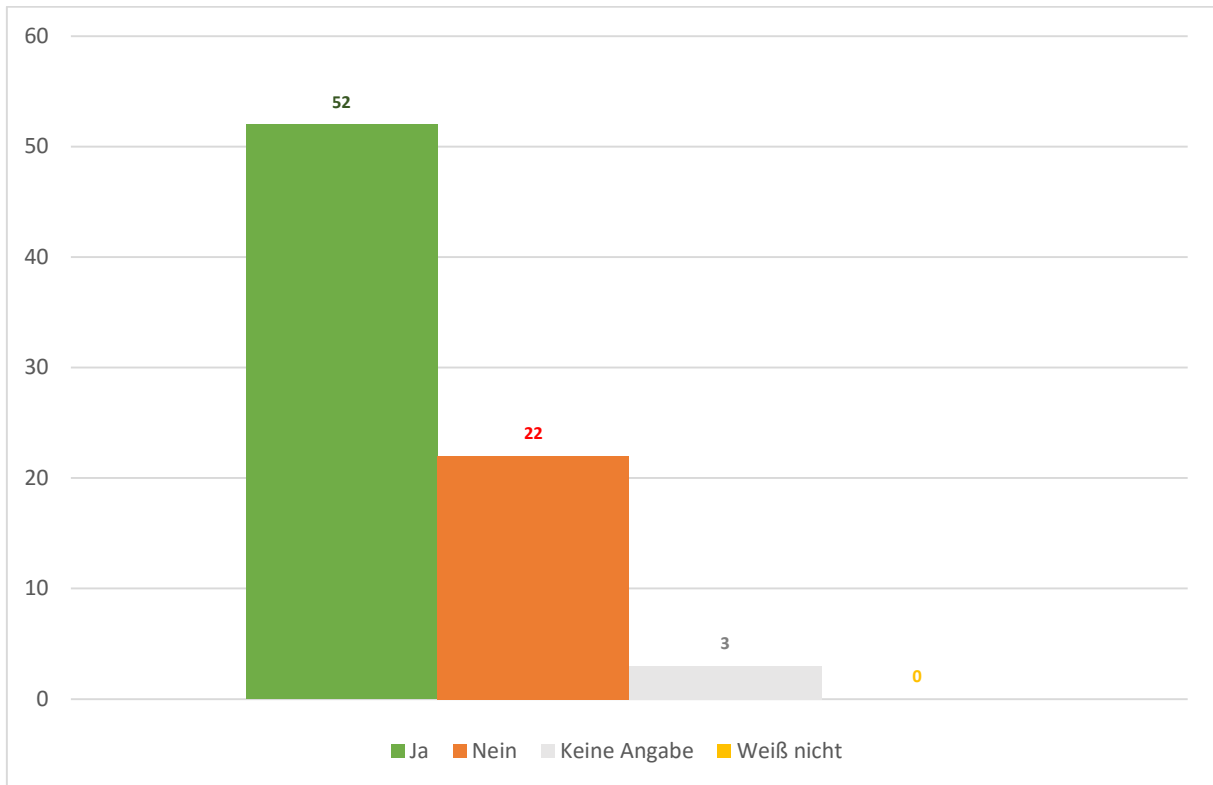


**31. Wie gut ist diese Vorhersage Ihrer Meinung nach, wenn 1 sehr gut und 5 mangelhaft ist?**

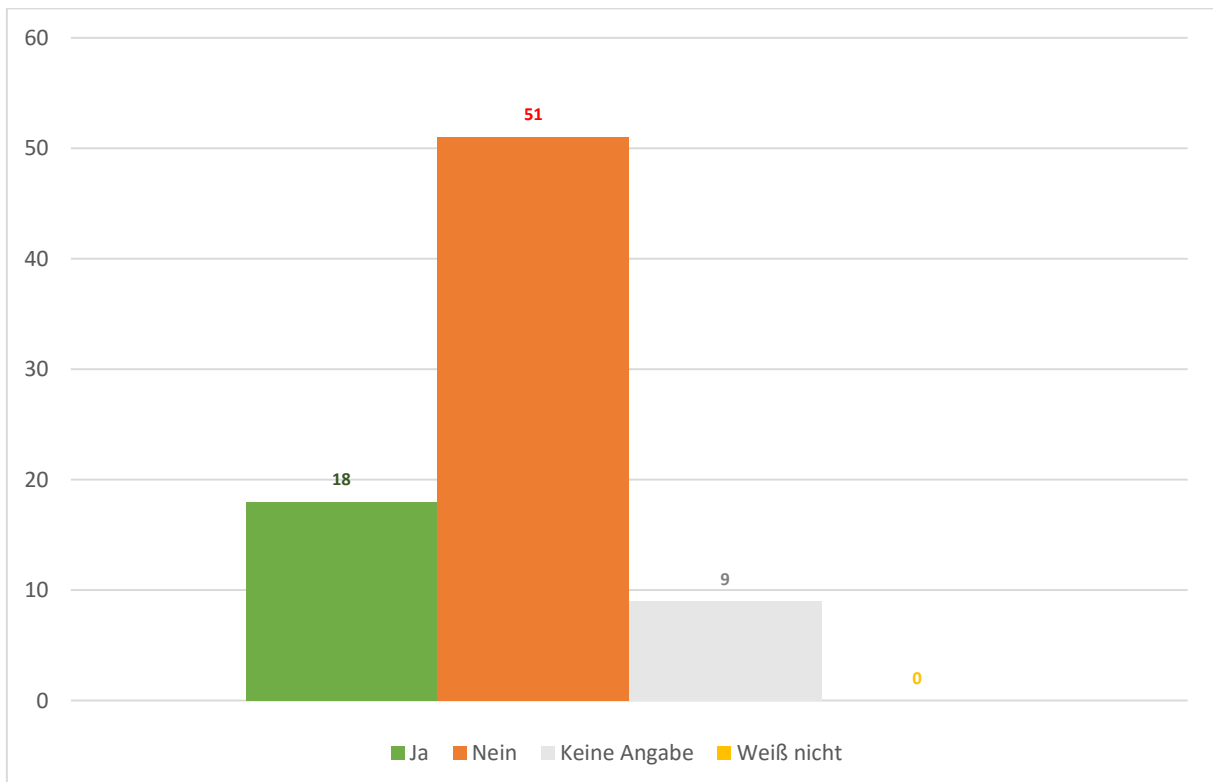




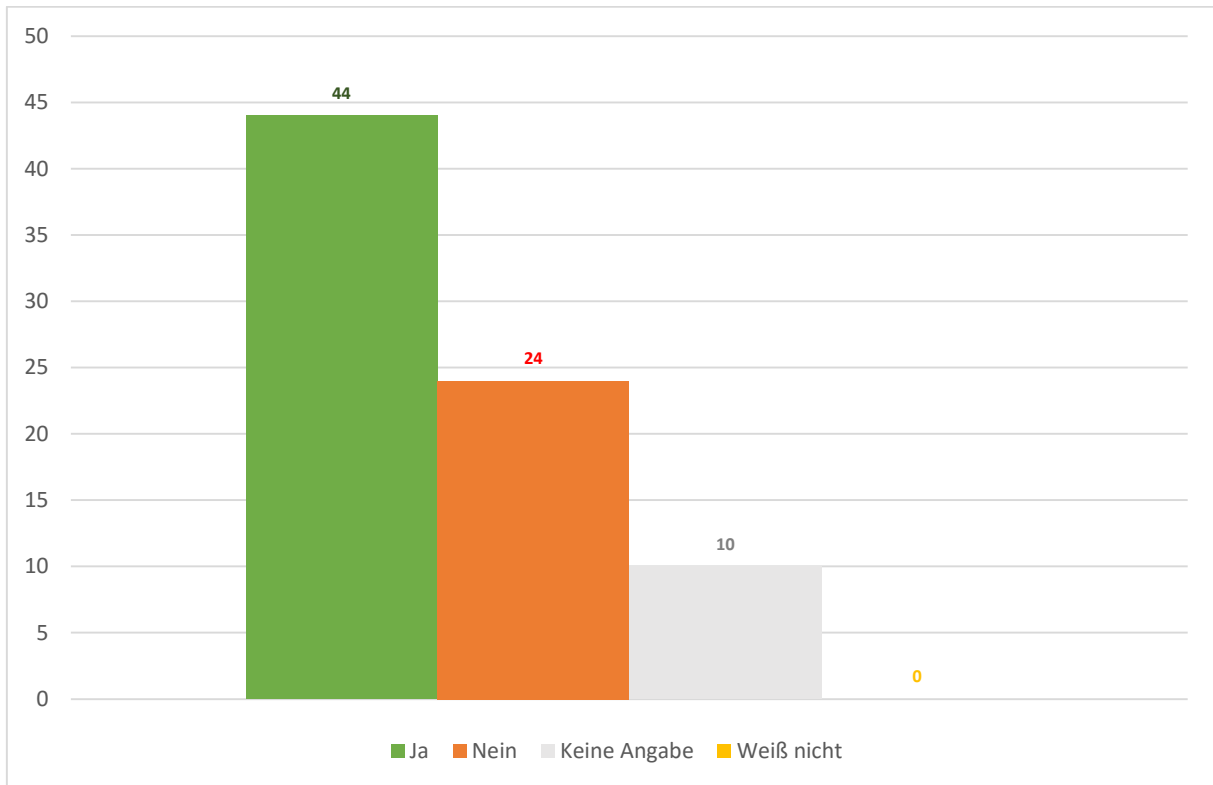
**32. Fänden Sie es hilfreich, wenn man durch ein "Gütesiegel" die Qualität einer Zuordnung abschätzen koennte?**



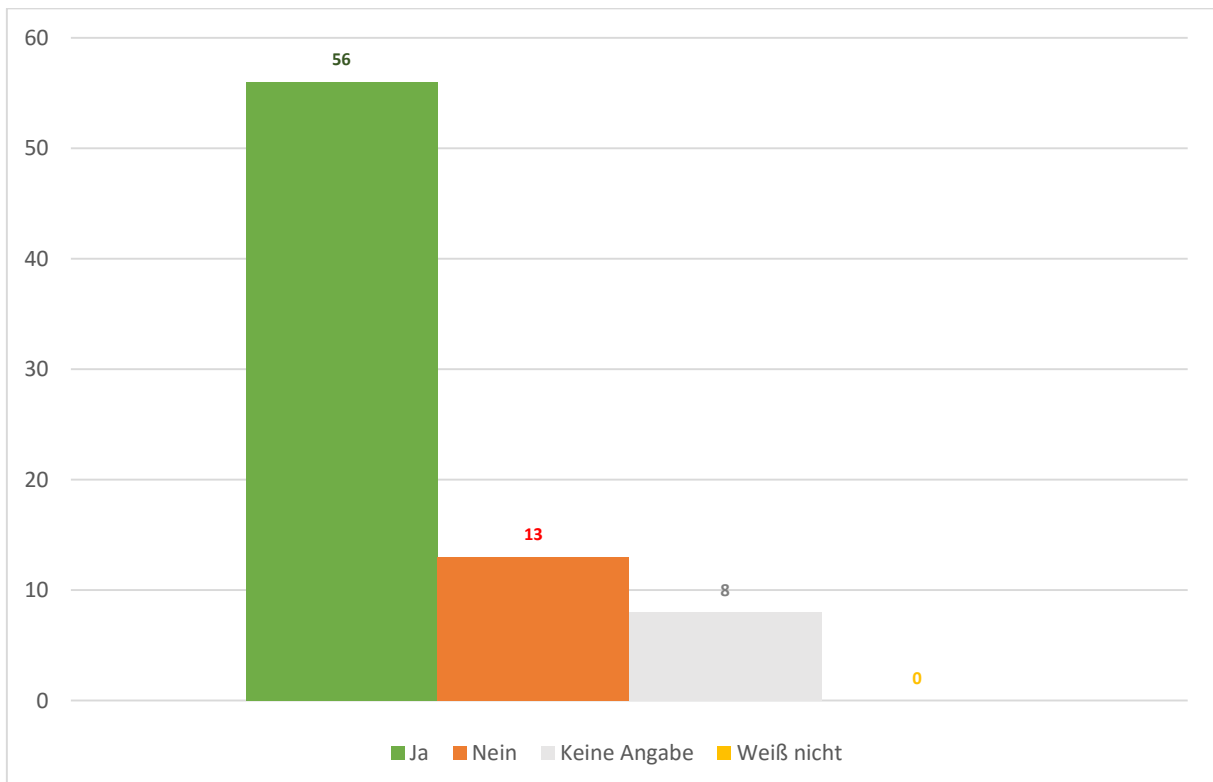
**33. Sollte dieser Wert ausschlaggebend für die Veröffentlichung von NMR-Daten sein?**



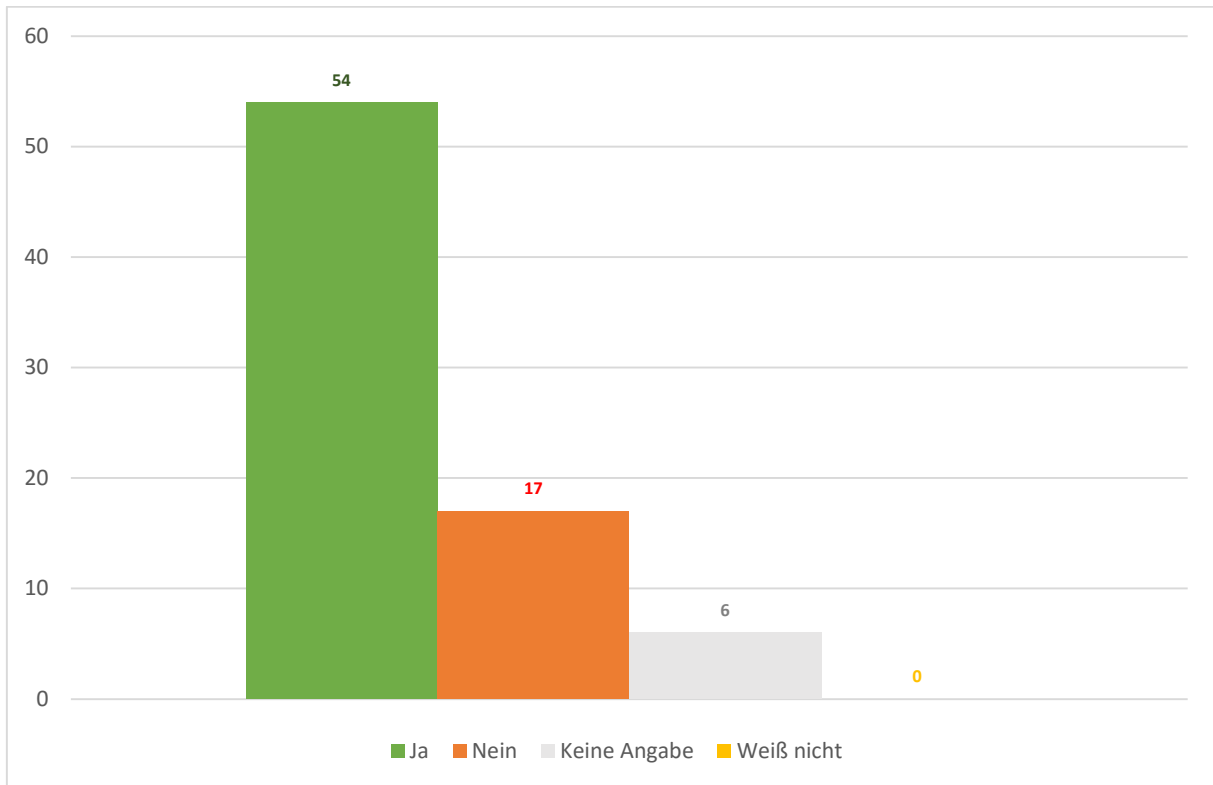
**34. Würden Sie Datensätze für 2D-NMR-Korrelationen in Literatur-Datenbanken sinnvoll finden?**



**35. Würden Sie einer (anonymen) Evaluation Ihrer eigenen Zuordnungen zustimmen?**



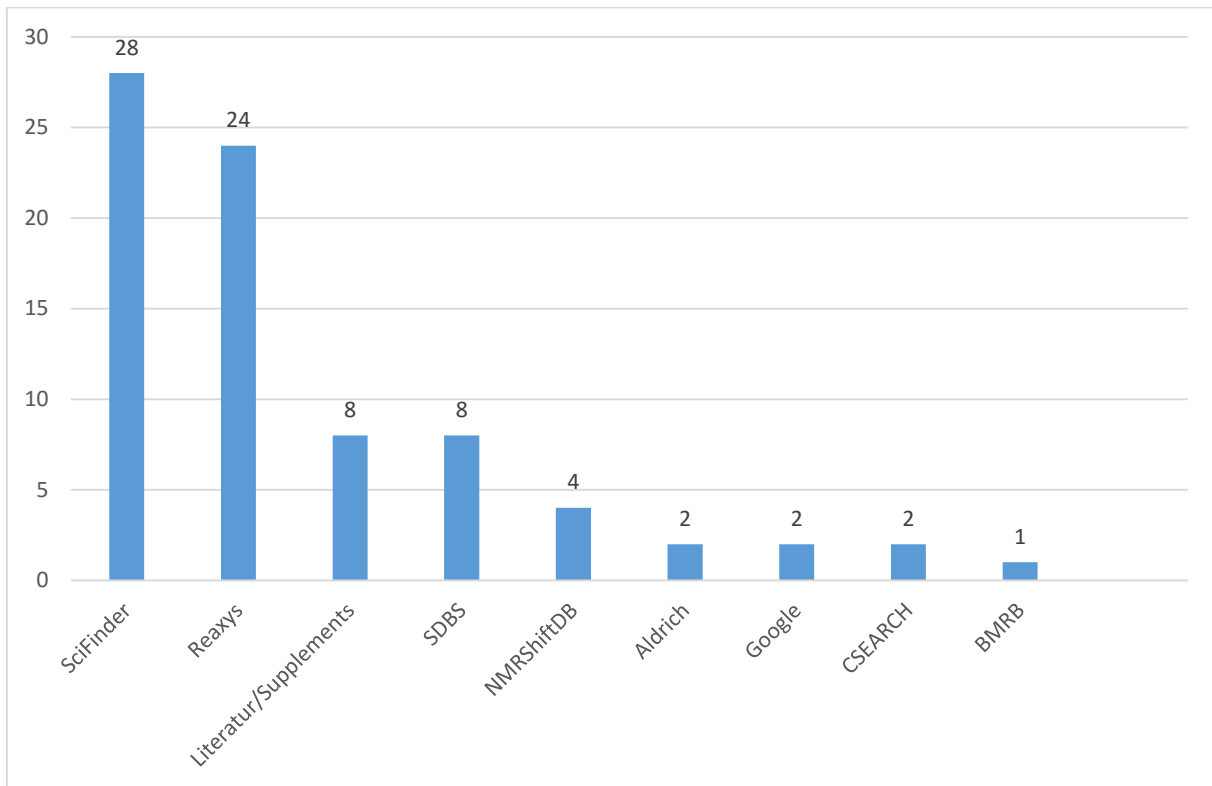
### 36. Würden Sie eine Homepage zur Evaluation mit einer intelligenten Datenbank nutzen?



## Freie Fragen

### 37. Auf welchen Seiten suchen Sie nach NMR-Datensätzen?

Zu dieser Frage haben sich 45 Teilnehmer geäußert:



### 38. Wo sehen Sie Probleme in der gängigen Publikationspraxis in Bezug auf NMR-Daten?

Zu dieser Frage haben sich 43 Teilnehmer geäußert. Die Antworten lassen sich zu folgenden Punkten zusammenfassen:

- In fehlenden/falschen Zuordnungen oder in fehlerhafter/unvollständiger Auswertung (z. B. von Multiplizitäten)
- In Strukturen, die nicht zu den Daten passen
- In fehlenden Angaben zu experimentellen Bedingungen
- Im Fehlen eindeutiger Regeln (z. B. für die Numerierung der Atome)
- Im Umstand, dass 2D-Daten in Publikationen meist nicht dokumentiert werden
- In Spektrenabbildungen, die entweder nicht vorhanden sind oder nur geringen Nutzen haben
- Im generell unkritischen Umgang mit Daten und Vorhersagen
- In Übertragungsfehlern
- In der geringen Übersichtlichkeit
- In falscher Referenzierung

### 39. Was erhoffen Sie sich von einer NMR-Datenbank, die es erlaubt, eine Zuordnung evaluieren zu lassen?

Zu dieser Frage haben sich 32 Teilnehmer geäußert. Die Antworten lassen sich zu folgenden Punkten zusammenfassen:

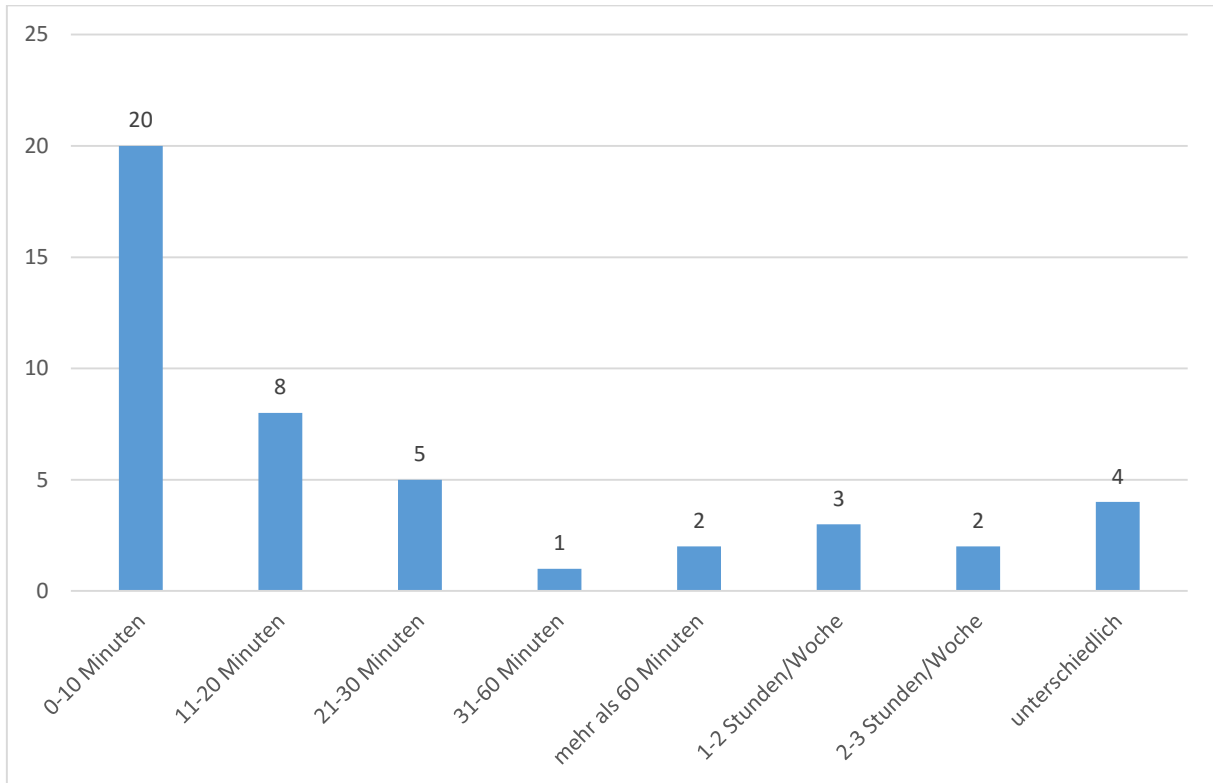
- Verlässlichere Zuordnungen und Strukturen
- Eine Reduktion sinnlos aufgewendeter Messzeit
- Ein grobes Vorsortieren abstruser Zuordnungen
- Einen schnelleren Vergleich mit literaturbekannten Verbindungen
- Einen Wissenszuwachs für Wissenschaftler
- Eine Motivation, mit NMR-Daten sorgfältiger umzugehen
- Eine schnelle Rückmeldung und damit mehr Sicherheit für die eigene Arbeit
- Bessere Vorhersagen
- 

Kritische Anmerkungen/Wünsche:

- Es kommt bei schwierigen Proben immer noch auf den Bearbeiter an
- Die Datenbank sollte nicht nur Zahlen, sondern auch Spektrenabbildungen enthalten

#### 40. Wie viel Zeit wären Sie bereit zu investieren um Ihre Zuordnungen einzugeben und zu evaluieren?

Zu dieser Frage haben sich 48 Teilnehmer geäußert. 45 Personen beantworteten diese Frage mit einer Zeitangabe, was sich wie folgt zusammenfassen lässt:

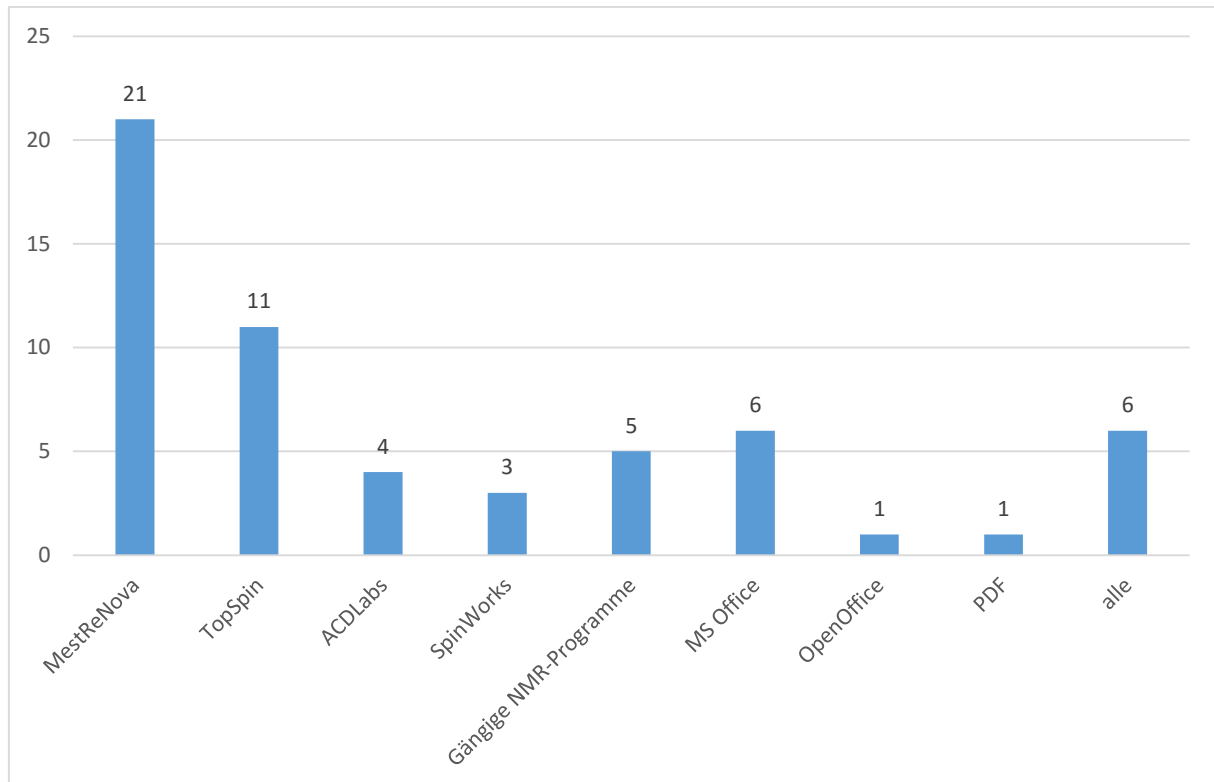


Darüber hinaus gemachte qualitative Aussagen:

- Eine Person merkte an, dass die Eingabe besonders benutzerfreundlich sein sollte
- Eine Person war nicht bereit, Zuordnungen zur Evaluation einzugeben, da nicht klar sei, was passiere, wenn Signale wegen Rotameren oder schlechtem Shim anders aussähen als erwartet
- Eine Person merkte an, dass sie Zuordnungen generell niederschreibe, um Sicherheit über die Struktur zu haben

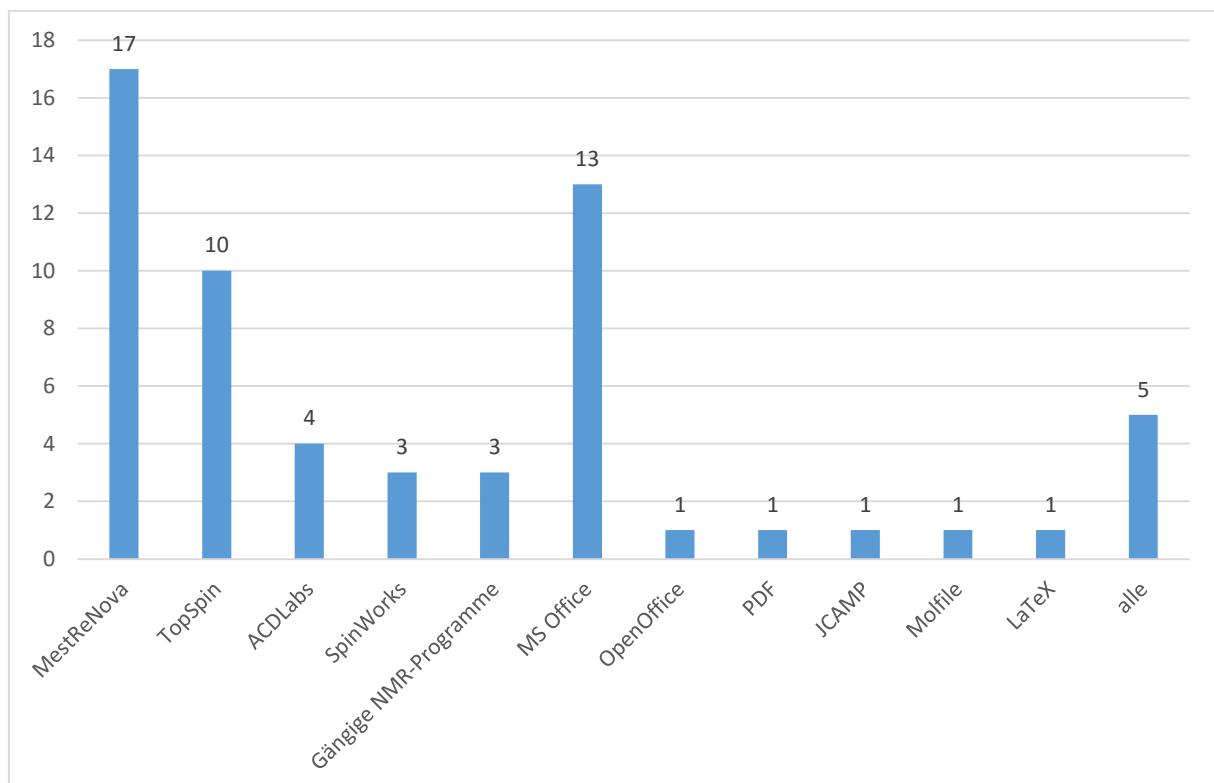
#### 41. Aus welchen Programmen sollten Datensätze in die NMR-Datenbank kopierbar sein?

Zu dieser Frage haben sich 40 Teilnehmer geäußert:



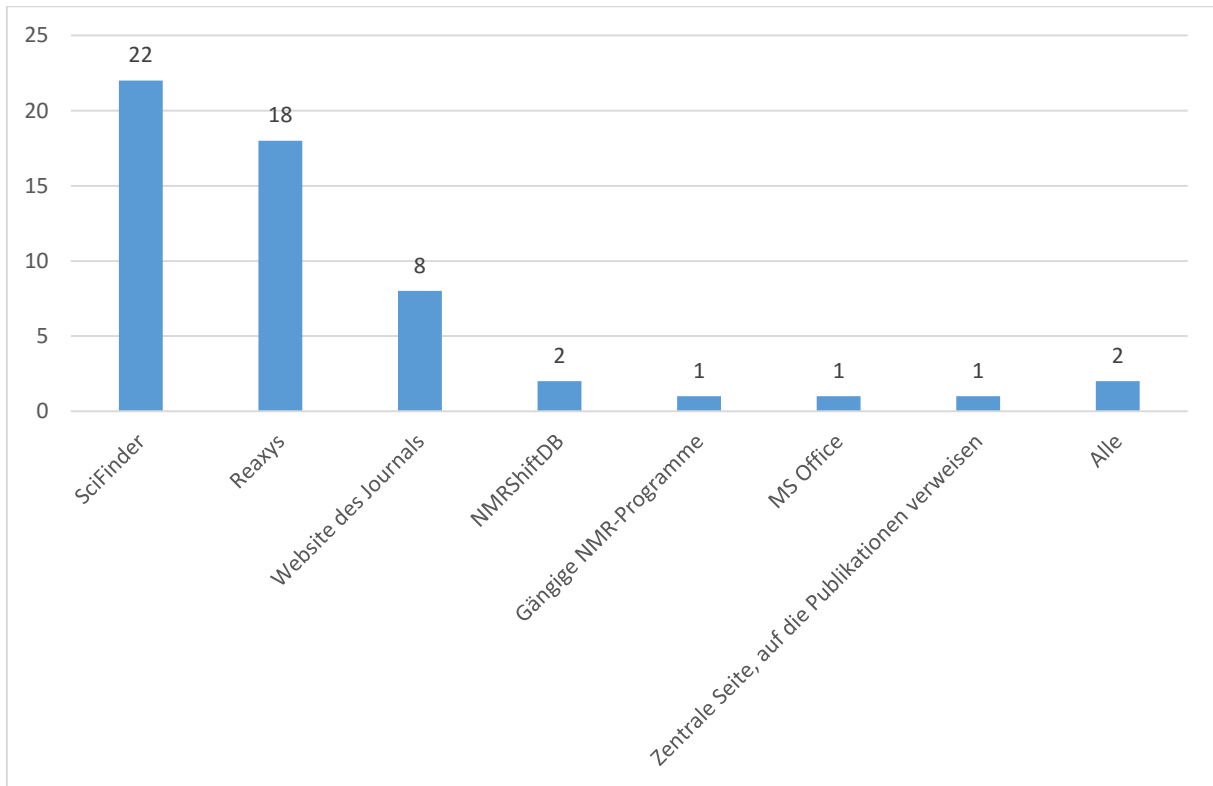
#### 42. In welche Programme sollten Datensätze aus der NMR-Datenbank kopierbar sein?

Zu dieser Frage haben sich 40 Teilnehmer geäußert:



### 43. Auf welchen wissenschaftlichen Websites sollte direkter Zugriff auf die Datensätze aus der NMR-Datenbank möglich sein?

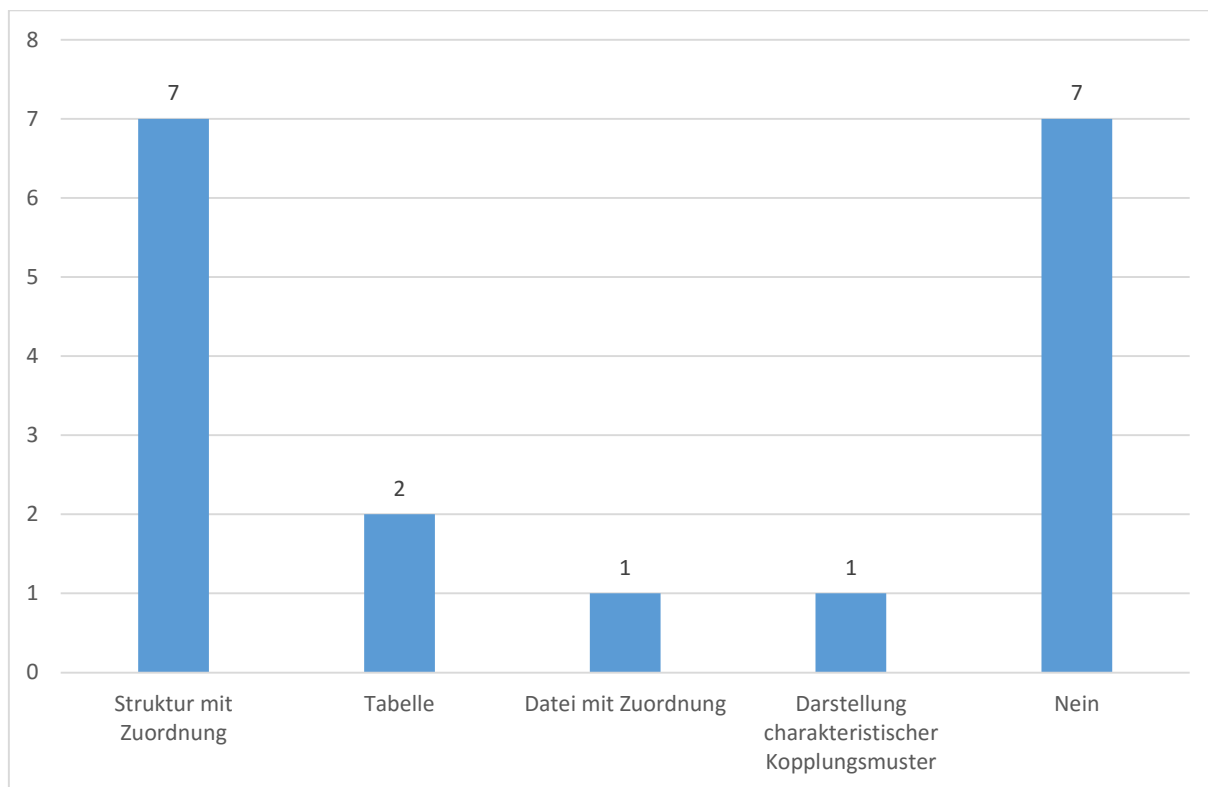
Zu dieser Frage haben sich 36 Teilnehmer geäußert:





**44. Können Sie sich ein besseres System für die Erfassung von NMR-Signalen vorstellen, als die Anordnung nach der chemischen Verschiebung? Wenn ja, wie sähe dieses System aus?**

Zu dieser Frage haben sich 15 Teilnehmer geäußert:



**45. Welche zusätzlichen Software-Features können Sie sich für die Datenbank vorstellen?**

Zu dieser Frage haben sich 16 Teilnehmer geäußert:

- Zwei Personen wünschten eine Kommentarfunktion für Korrekturen und Rückfragen
- Zwei Personen wünschten eine Suche nach korrelierten Spektrendaten (HSQC-Korrelationen, Shift-J-Kombinationen)
- Zwei Personen wünschten eine einfache Import-/Export-Funktion in gängige NMR-Programme, z. B. für eigene Auswertungen
- Eine Person wünschte eine Abschätzung von Shiftveränderungen für andere Lösungsmittel
- Eine Person wünschte eine Suche nach charakteristischen Kopplungsmustern
- Eine Person wünschte sich eine Mouse-Over-Information für die Strukturdarstellung
- Eine Person wünschte eine Schnittstelle zu anderen analytischen Methoden
- Eine Person wünschte Spektren von Übergangs- und Halbmetallen
- Eine Person wünschte die Hinterlegung von Rohdaten

Einige Äußerungen betreffen Funktionen, die bereits vorhanden sind:

- Eine Person wünschte eine Abschätzung von Shiftveränderungen bei Änderungen des Substitutionsmusters
- Eine Person wünschte eine Spektrensimulation und einen Abgleich mit gemessenen Daten
- Eine Person wünschte eine Suche nach Struktur, Summenformel, Name, CAS, charakteristischen Signalgruppen; eine weitere Person wünschte eine Suche nach ähnlichen Strukturen

#### 46. Haben Sie sonstige Anmerkungen oder Kritikpunkte?

Zu dieser Frage haben sich 14 Teilnehmer geäußert.

Allgemeine Anmerkungen:

- Eine Person schlug vor, dass die Verwendung von Kontrollmechanismen wie von IDNMR vorgeschlagen bei Publikationen Einfluss auf Spektrometerbewilligungen haben sollte
- Eine Person schlug vor, einen Formalismus für die Angabe überlappender Multipletts zu schaffen
- Eine Person merkte an, dass bei einer Publikation mit der Verpflichtung zur Hinterlegung von Rohdaten akzeptiert werden müsse, dass es keine perfekten NMR-Spektren gebe
- Eine Person kritisierte, dass in vielen Publikationen nicht einmal Spektrenabbildungen bereitgestellt würden

Anmerkungen zur Datenbank:

- Eine Person regte an, dass das Benutzerprofil häufig genutzte Einstellungen (z. B. Lösungsmittel) als Voreinstellung anbieten sollte
- Eine Person merkte an, dass die meisten Verbindungen im Hause zu exotisch für einen Abgleich mit Datenbanken seien
- Eine Person regte an, einige gängige Verbindungen bewusst zu Trainingszwecken nicht in der Datenbank vorzuhalten
- Eine Person kritisierte, dass die Datenbank schwierige Strukturen nicht lösen könne
- Eine Person merkte an, dass eine solche Datenbank in der Praxis fehlte

Anmerkungen zum Fragebogen:

- Zwei Person gaben ergänzende Auskünfte zu ihren Antworten im Fragebogen
- Zwei Personen merkten an, dass zu einigen Fragen ein Kommentarfeld für subjektive Ergänzungen sinnvoll gewesen wäre
- Eine Person merkte das Fehlen der ACD-Datenbank in Frage 30 an, sowie dass die Sadler Standard Spectra inzwischen unter dem Namen KnowItAll bekannt seien