

## Detailseite

### NMR-Datenbank für kleine Moleküle mit LIMS-Einbindung für akademische Forschungslabors (nmrshiftdb2)

Nmrshiftdb2 ist eine freie Datenbank mit zusätzlichen Funktionalitäten für die NMR-Strukturanalyse und die Qualitätskontrolle von Zuordnungen. Die Software kann lokal installiert und für den Aufbau einer lokalen Datenbank mit vollem Zugriff auf die Daten der öffentlichen Version von nmrshiftdb2 verwendet werden. Lokale Datensammlungen können so getrennt gespeichert und vor öffentlichem Zugriff geschützt werden. Optional bietet nmrshiftdb2 ein eingebundenes Labor-Informations- und Management-System (LIMS) für akademische NMR-Labors an. Es ermöglicht -plattformunabhängig über eine webbasierte Oberfläche- eine komplette Auftragsabwicklung auf elektronischem Weg, die Anbindung an ein Scheduling-System und eine Auswertefunktion zur Erstellung von Nutzerstatistiken.

**Adresse:** Greinstrasse 4  
50939 Köln  
Nordrhein-Westfalen  
Deutschland  
[Zur Webseite](#)

## Träger

### Universität zu Köln, Department für Chemie

Greinstrasse 4  
50939 Köln  
Nordrhein-Westfalen  
Deutschland

<http://nmr.chemie.uni-koeln.de/>

### Regionales Rechenzentrum der Universität zu Köln (RRZK), Institut für Informatik

Robert-Koch-Strasse 10, Gebäude 52  
50931 Köln  
Nordrhein-Westfalen  
Deutschland

<http://vis.uni-koeln.de/>

## Wissenschaftsgebiet

### Hauptgebiete:

- Chemie

### Nebengebiete:

- Biologie

## Kategorie

Forschungsdaten-Repositoryen

## Wissenschaftliche Dienstleistungen

Neben einer Vorhersage-Funktion für die in einem NMR-Spektrum zu erwartenden chemischen Verschiebungen bietet nmrshiftdb2 den Einsatz verschiedener Suchoptionen an: Es können u.a. chemische Verschiebungen, (Sub-)Strukturen, Strukturähnlichkeiten, Summenformeln oder Metadaten als Suchkriterium herangezogen werden. Darüberhinaus können halbautomatische Zuordnungen vorgenommen werden. Bei Überweisung eines zugeordneten Spektrums an die Datenbank wird ausserdem die Qualität der Zuordnung mit für den Benutzer sichtbarem Resultat durch Vergleich mit gespeicherten Daten und einer CSEARCH-Vorhersage überprüft, ehe der Eintrag an ein Referencesystem zur Begutachtung weitergeleitet wird. Die LIMS-Einbindung ermöglicht NMR-Labors -plattformunabhängig- über eine webbasierte Oberfläche eine komplette Auftragsabwicklung auf elektronischem Weg, die Anbindung an ein Scheduling-System und eine Auswertefunktion zur Erstellung von Archivierung, Nutzerstatistiken und Accounting. Das LIMS-Modul ist mit der freien Datenbank verknüpft und bietet dadurch zugleich die Möglichkeit, sowohl eine lokale, hausinterne Datenbank aufzubauen als auch die Tools der www-Datenbank für wissenschaftliche und edukative Zwecke einzubinden.

## Wissenschaftliche Geräte

### Schlagworte

- NMR-Spektroskopie
- NMR-Automation
- LIMS
- Dereplikation
- Spektrensuche
- Vorhersage NMR-chem. Verschiebungen
- Zuordnungs-Tools
- Spektrendatenbank
- Archivierung von Spektrendaten
- Qualitätssicherung von NMR-Zuordnungen
- Papierfreies NMR-Labor

### Netzwerke

### Nutzer/Jahr

**Interne Nutzer:** 400

**Externe Nutzer gesamt:** 12.000

**Externe Nutzer in Deutschland:**

**Externe Nutzer im europ. Ausland:**

**Externe Nutzer außerhalb Europas:**