



Neues Jahr

Liebe Mitglieder (w/m), vielleicht (hoffentlich !) haben einige von Ihnen die übliche Weihnachtsausgabe von MARS vermisst. Aus aktuellem Anlass wurde diese auf das Neue Jahr verschoben, um Ihnen ganz aktuell die neuesten Informationen von der ersten Sitzung des neuen Vorstandes zukommen zu lassen. Sie hatten hoffentlich alle geruhsame Festtage und haben das Neue Jahr inzwischen mit altem Eifer (oder vielleicht vielen guten neuen Vorsätzen) begonnen. Wir wünschen Ihnen und Ihren Angehörigen alles Gute und weiterhin viel Erfolg. Der scheidende Vorstand möchte sich bei Ihnen allen nochmals sehr herzlich für die gute und konstruktive Zusammenarbeit und das uns in der Regel entgegengebrachte Wohlwollen bedanken. Wir wünschen den neuen Mitgliedern alles Gute, ein glückliches Händchen für alle Vorhaben und viel Erfolg.

(etkh)

Vorstand

Am 11.1.2013 hat der neue Vorstand mit einer Sitzung in Frankfurt die Amtsgeschäfte übernommen. Als neue Vorsitzende wurde

Frau Prof. C. Thiele (Darmstadt)

und als ihr Stellvertreter

Herr Prof. S. Glaser (München)

gewählt.



Ernst-Awards 2013

Also in 2013, up to three Ernst Awards are given to eminent Ph.D. students from Germany and abroad. Candidates should be Ph.D. students on the basis of their genuine published work. The

papers must have been refereed and accepted by an international scientific journal. The deadline this year:

June 1st, 2013.

Please ensure that you send your contribution in time. All manuscripts will be evaluated by members of a scientific committee under the guidance of Dr. W. Jahnke and should be send in electronic form to

Prof. C.M. Thiele
cthiele@thielelab.de

The Awards ceremony will be embedded as a special session during the Annual Meeting of the Discussion Group in Frauenchiemsee.

Please download the **actual assignment criteria** (2013) from the FGMR-Meeting webpage (www.fgmr2013.de) or from the Magnetic Resonance webpage at the GDCh (follow MR on the Periodic Table).

NMRSHIFT.db

Datenbank und Labor-Informations- und Management-System (LIMS) unter einem Dach:

Auch in akademischen NMR-Labors hat sich in den letzten Jahrzehnten mit der

zunehmenden Verfügbarkeit gradientenselektierter Experimente und dem Einsatz von Robotern der Probanddurchsatz vervielfacht. Während aber „Synthese-Chemiker“ sich in der alltäglichen Routine ganz selbstverständlich das Vorhandensein von Datenbanken für die Recherche zunutze machen ist sowohl auf der Nutzer- als auch auf der Spezialistenseite im Bereich der NMR kleiner Moleküle bisher kein einheitliches Konzept zur Datenarchivierung und -suche vorhanden. Oft fehlt ausserdem - wegen fehlender IT oder aus mangelndem know-how – eine elektronische Laboradministration, obwohl diese viele Vorgänge vereinfachen und effizienter gestalten kann. Aus diesem Grund möchten wir im Folgenden auf eine bereits existierende, frei verfügbare Lösung für Servicelabors im akademischen Bereich hinweisen, die gleichzeitig die Erstellung einer In-House-Datenbank ermöglicht: Die LIMS-Erweiterung von nmrshiftdb2.[1]

Die Spektrendatenbank nmrshiftdb2 existiert seit fast zehn Jahren als open source-Projekt und ist inzwischen zur größten freien NMR-Datenbank gewachsen. Als Erweiterung mit Blick auf die praktische Anwendung in NMR-Labors wurde ausserdem ein Labor-Informations- und Management-System (LIMS) entwickelt, das mit der Datenbanksoftware verbunden ist. Dies erfolgte in enger Zusammenarbeit mit dem NMR-Labor des Departments für Chemie der Universität zu Köln. Dort wird das System inzwischen seit mehreren Jahren im täglichen Routineeinsatz in der Praxis erprobt. Hierbei wird ein lokaler Server betrieben, der vom öffentlichen, unter www.nmrshiftdb.org erreichbaren Server unabhängig ist.

In nmrshiftdb2 können Informationen zu allen vernetzten Geräten und Rechnern der Laborinfrastruktur hinterlegt werden. Bei den Spektrometern kann beispielsweise definiert werden welche Experimente auf welchem Gerät zulässig sind, ob das Gerät im „Open Access“, per Probenwechsler oder vom Personal bestückt wird. Sowohl für die Auftraggeber von Messungen als auch für die Mitarbeiter des Labors

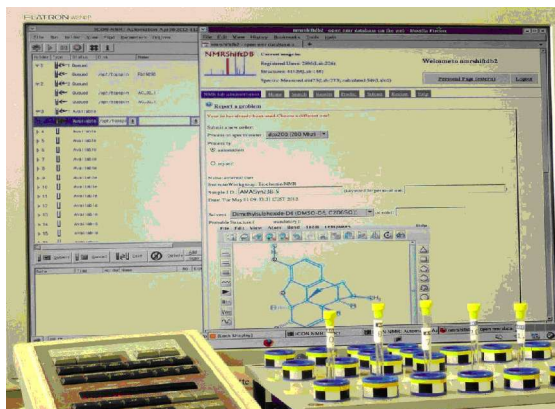
existieren individuelle Profile. Beiden Nutzergruppen steht nach Anmeldung über das „Webfrontend“ eine Vielzahl von Funktionen zur Verfügung, die auf das jeweilige Nutzungsprofil zugeschnitten sind. So können von den „Messkunden“ Aufträge aufgegeben und Spektrendaten abgeholt werden, außerdem Meßzeit gebucht und der Auftragsstatus abgefragt werden. Daneben können eine integrierte Zuordnungshilfe sowie Spektren-Vorhersage- und -Suchfunktionen genutzt werden. Die Profile der NMR-Labor-Mitarbeiter besitzen außer einer Monitorfunktion für alle im System aktiven oder bereits bearbeiteten Aufträge u.a. auch eine Statistik-Option für Buchführungs-Zwecke.

Die typischen Arbeitsabläufe einer Serviceabteilung können so elektronisch abgebildet und die Auftragsdaten zusammen mit den Messergebnissen abgelegt werden. Alle Daten sind für spätere Auswertungen verfügbar. Darüberhinaus können die Ergebnisse einer Zuordnung leicht in die nmrshiftdb2-Datenbank übertragen werden. Im Falle der Kölner Installation werden hierzu die Daten der öffentlichen Datenbank auf die laborinterne Instanz kopiert. Nach abgeschlossener Messung kann ein Benutzer die zugeordneten Daten in die Datenbank eingeben, wobei existierende Informationen aus dem Auftrag (wie der Strukturvorschlag) übernommen werden. Diese Daten sind dann lokal (!) zusammen mit den öffentlichen Daten durchsuchbar. Damit werden die Ergebnisse auch für die weitere Forschung nutzbar. Zusätzlich kann solch ein System auch einen wichtigen Beitrag zur Qualitätssicherung der Zuordnungen leisten: Viele NMR-Spektroskopiker beobachten bei gleichzeitig immer hochwertiger werdender instrumenteller und experimenteller Ausstattung einen Trend zur Vernachlässigung eines soliden Strukturbeweises und zu fehlerhaften oder unvollständigen Zuordnungen bei neu zu charakterisierenden Verbindungen. In einem Datenbanksystem können die von der Software angebotenen Werkzeuge zur

Erleichterung der Zuordnung herangezogen und die Zuordnungen nach dem Mehr-Augen-Prinzip kontrolliert werden, was eine nachvollziehbare Qualitätskontrolle ermöglicht.

Das Labor hat hierbei weitgehende Kontrolle über Software und Daten. Da die Software lokal installiert wird und unter einer OpenSource-Lizenz verfügbar ist, ist ein Weiterbetrieb des Systems unabhängig von Zufälligkeiten des Projekts und der Mitarbeiter immer möglich. Ebenso erfolgt die Datenarchivierung in Verantwortung des Labors (entweder direkt oder auch ausgelagert, z. B. beim Rechenzentrum der Hochschule). Hierdurch werden zum einen rechtliche Probleme mit dem Datenschutz und der Geheimhaltung von Ergebnissen vermieden, zum anderen ist die Unabhängigkeit von einem einzelnen Anbieter gegeben. Finanziell ist das Modell auch für Labors ohne großes Software-Budget erschwinglich, da keine (einmaligen oder laufenden) Lizenzkosten anfallen. Lediglich die Hardware (Server) und deren Betrieb müssen vom Labor finanziert werden. Anpassungen an die individuelle Situation im Labor sind aufgrund des OpenSource-Status der Software möglich, wobei auch Unterstützung durch die Autoren möglich ist.

Damit kann das LIMS auch einen Weg in Richtung der Etablierung einer effizienten Auftragsabwicklung und Datenverwaltung in zentralen NMR-Labors aufzeigen und u.U. auch in anderem Zusammenhang von Nutzen sein: Beim ersten Treffen der G-NMR-Initiative in Halle im September, bei dem die Initiative für eine Reihe von wichtigen und zukunftsweisenden Themen angestoßen wurde, war die Notwendigkeit der elektronischen Labor- und Datenorganisation ebenfalls ein diskutiertes Thema. In diesem Zusammenhang würden wir eine mögliche Einbindung der



nmrshiftdb2 in die Initiative als schon vorhandene freie Software und Datenbank gerne unterstützen, da sich hieraus sicherlich ein für die gesamte NMR-Gemeinde hilfreicher Synergismus ergeben könnte.

Zum Schluss eine Bitte: nmrshiftdb2 ist als freie Datenbank

und Software für NMR-Nutzer und -Labors gedacht. Dazu ist eine enge Anbindung an die „NMR Community“ wichtig. Wir möchten daher einen „Beirat“ etablieren, der die Entwicklung der Datenbank begleitet, beispielsweise um uns bei der Implementierung von in der Praxis brauchbaren und gewünschten Features zu beraten. Auch die Bereitschaft zur gelegentlichen Übernahme von Reviews von Daten-Eingaben und die Unterstützung durch Beiträge zur „Problem of the Month“-Rubrik wäre gerne gesehen. Wer (auch nur zu einem dieser Bereiche) etwas beitragen möchte ist herzlich eingeladen, sich an die Autoren zu wenden.

[1] Über nmrshiftdb2 wurde kürzlich in den „Blauen Blättern“ berichtet (Nachr. Chemie **2012**, *60*, 1106-1107), doi: 10.1515/nachrchem.2012.60.11.1106

(ns,sk,rs)

nils.schloerer@uni-koeln.de // stefhk3@web.de
raphael.stoll@ruhr-uni-bochum.de

Zu guter Letzt: 😊

- A. What do you especially like about this instructor and this course?
Gave us worksheets that were helpful
- B. What suggestions do you have for improvement of this course and the quality of instruction in this course?
Making the tests actually following the review sheets.
- C. Further comments concerning course and/or instructor.
HATE NMR - can't understand it

<http://beratemyprofessor.blogspot.de/2012/06/hate-nmr.html>