

Der „elektronische Auftragszettel“ – auf dem Weg zum (beinahe) papierfreien NMR-Labor an der Uni

**Nils Schlörer, Stefan Kuhn
und Christoph Steinbeck**

Department für Chemie, Universität zu Köln
Greinstrasse 4, 50939 Köln
e-Mail: nils.schloerer@uni-koeln.de

In vielen universitären NMR-Service-Labors, die nicht an ein Accounting-System angeschlossen sind, werden auch heute noch für jede Probe Auftragsformulare in Papierform ausgefüllt und Spektren z.T. nur als Ausdruck an die Nutzer abgeliefert. Die spätere Zuordnung der Spektren (vorgenommen durch die Nutzer) führt oft im günstigsten Fall zu einer Archivierung der Daten in Form einer Veröffentlichung. Ausgangspunkt des Projekts war es daher, neben dem Aufbau einer Spektrendatenbank für die Kölner Chemie auch ein Modul zur elektronischen Auftragsbearbeitung, Zuordnung von Spektren und bei gleichzeitiger Verknüpfung mit einer Mess-Statistik zu entwerfen. Dies sollte unabhängig von kommerziellen Anbietern oder verwendeter Spektrometersoftware geschehen. Wir haben für die Kölner NMR-Abteilung in Zusammenarbeit mit Stefan Kuhn und der Gruppe um Christoph Steinbeck (EBI) eine Erweiterung der NMRshiftDB [1] entwickelt, die einige dieser „Problemzonen“ in elektronischer Form löst.

Zusätzlich zur Weiterentwicklung der Datenbank NMRshiftDB mit einer Funktion zur leichteren, „halbautomatischen“ Zuordnung von NMR-Spektren, die auch „unbedarften“ NMR-Nutzern die Überweisung von Spektrenmaterial an die Datenbank erlaubt, wurde ausserdem eine Funktion hinzugefügt, die die elektronische Auftragsbearbeitung für NMR-Proben ermöglicht. Basierend auf einem Nutzer- und einem Operator-Profil wurde so im Lauf der inzwischen fast dreijährigen Erprobung eine volle Funktionalität für den täglichen Abteilungsbetrieb mit sieben NMR-Spektrometern erreicht, es sind etwa 100 aktive Nutzer aus den verschiedenen Arbeitsgruppen des Departments für Chemie an der Kölner NMRshiftDB registriert. Das System konnte flexibel an die lokalen Gegebenheiten angepaßt werden. Obwohl sich die Software noch im Weiterentwicklungsstadium befindet, ist sie in vielen Bereichen bereits komplett einsatzfähig und in den Messablauf der Kölner NMR-Abteilung integriert. Im Vortrag sollen neben dem Gesamtkonzept die einzelnen Funktionen auf dem derzeitigen Entwicklungsstand vorgestellt werden.

[1] K. A. Blinov, Y. D. Smurnyy, M. E. Elyashberg, T. S. Churanova, M. Kvasha, C. Steinbeck, B. A. Lefebvre, A. J. Williams, *J. Chem. Inf. Model.*, **2008**, *48*, 550-555; S. Kuhn, B. Egert, S. Neumann, C. Steinbeck, *BMC Bioinformatics* **2008**, *9*:400 (doi: 10.1186/1471-2105-9-400); C. Steinbeck, S. Kuhn, *Phytochemistry* **2004**, *65*, 2711–2717; C. Steinbeck, S. Krause, S. Kuhn, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **2003**, *43*, 1733-1739.