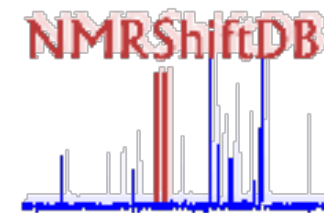


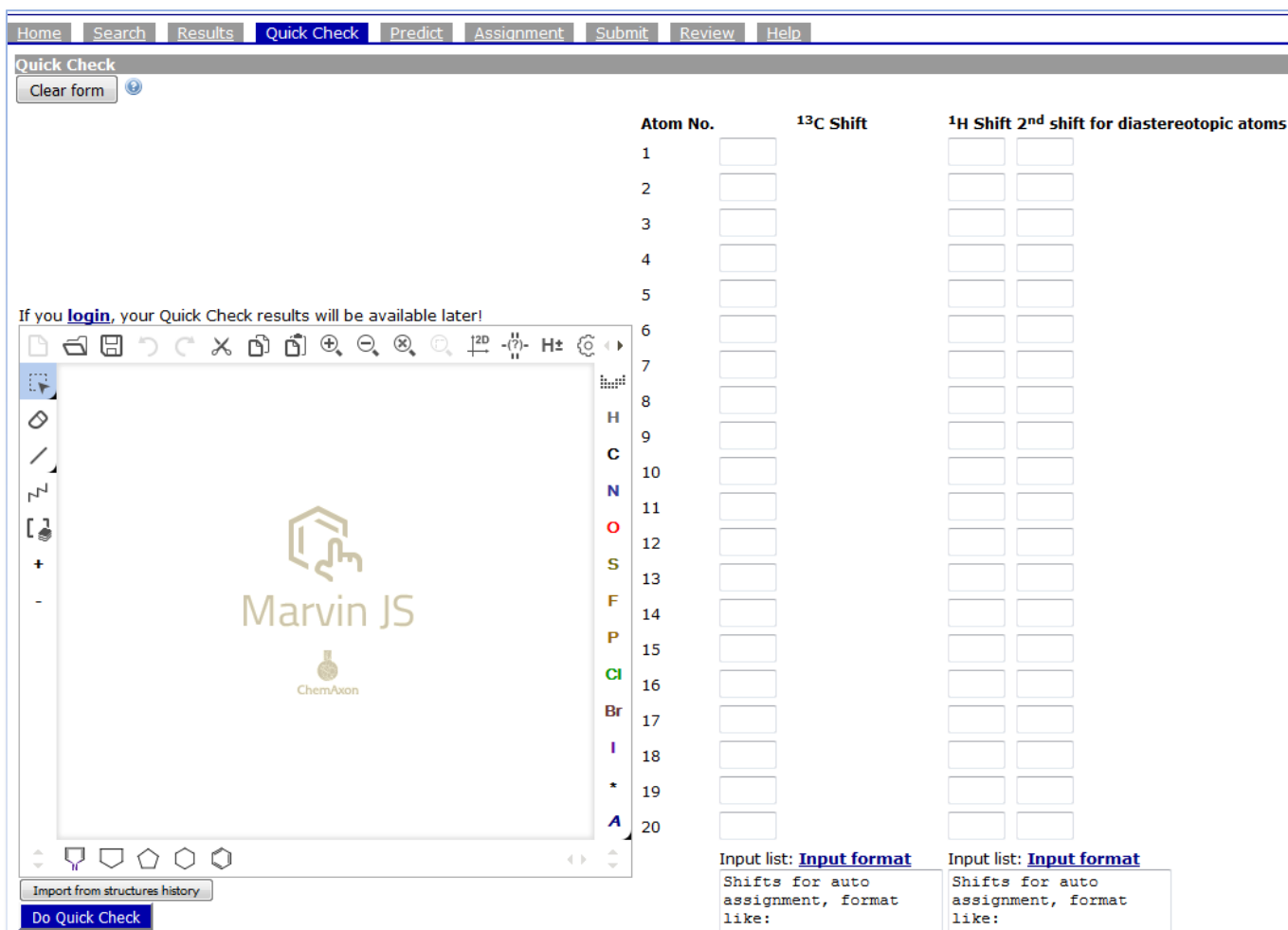
## Kurzanleitung zur QuickCheck-Funktion

(Lokale Datenbank auf laplace, <http://laplace.nmr.uni-koeln.de> im lokalen Subnetz)



## Überprüfung einer NMR-Zuordnung mit dem QuickCheck

(1) Klicken Sie auf das blaue QuickCheck-Icon (s.o.) oder loggen Sie sich ein (optional) und klicken Sie auf der den Reiter „QuickCheck“. Geben Sie im aktiven Fenster links im Structureditor die Formel der Molekülstruktur, deren Zuordnung überprüft werden soll, ein. Wenn Sie sich einloggt haben können an dieser Stelle einen Namen (Personal ID) für die Eingabe wählen.



The screenshot shows the 'Quick Check' web interface. At the top, there is a navigation menu with tabs: Home, Search, Results, Quick Check (selected), Predict, Assignment, Submit, Review, and Help. Below the menu is a 'Quick Check' header with a 'Clear form' button. The main area is divided into two sections. On the left is a 'Structureditor' window showing the 'Marvin JS' logo and a 'ChemAxon' logo. On the right is a table for entering NMR data.

Atom No.	<sup>13</sup> C Shift	<sup>1</sup> H Shift	2 <sup>nd</sup> shift for diastereotopic atoms
1	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
2	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
3	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
4	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
5	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
6	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
7	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
8	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
9	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
10	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
11	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
12	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
13	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
14	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
15	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
16	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
17	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
18	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
19	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
20	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Below the table, there are two input fields for 'Input list: [Input format](#)' and 'Shifts for auto assignment, format like:'. A 'Do Quick Check' button is located at the bottom left of the interface.

(2) Klicken Sie anschließend auf das Icon „Do Quick Check“, wodurch die Anzahl von Feldern für die Eingabe der chemischen Verschiebungen an die Struktur angepasst wird. Die Ampelfarben für die Verschiebungen können ignoriert werden.

**NMRShiftDB** Current usage is:  
Registered Users: 642 (Lab: 4)  
Structures: 42444 (Lab: 0)  
Spectra: Measured 50527 (Lab: 0), calculated 549 (Lab: 0)

Username:  [Login](#)  
Password:  [Logon with SSL](#)  
 Use cookies for persistent login [Forgot password?](#)

Problems using nmrshiftdb? See our [tips on browsers to use](#)!

Home | Search | **Quick Check** | Predict | Assignment | Submit | Review | Help

Quick Check  
Clear form

Atom No.	<sup>13</sup> C Shift	Auto reassign	<sup>1</sup> H Shift	Auto reassign	2 <sup>nd</sup> shift for diastereotopic atoms
1	<input type="text"/> 37.94	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 7.19	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
2	<input type="text"/> 18.44	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.57	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
3	<input type="text"/> 39.30	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.77	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
4	<input type="text"/> 31.00	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
5	<input type="text"/> 51.86	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 2.12	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
6	<input type="text"/> 35.00	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
7	<input type="text"/> 30.15	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 0.94	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
8	<input type="text"/> 30.15	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 0.94	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
9	<input type="text"/> 47.87	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 2.96	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
10	<input type="text"/> 21.06	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 0.92	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
11	<input type="text"/> 26.34	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.46	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
12	<input type="text"/> 25.80	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.58	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
13	<input type="text"/> 45.40	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 2.31	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
14	<input type="text"/> 138.95	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
15	<input type="text"/> 143.59	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
16	<input type="text"/> 41.34	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 3.34	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
17	<input type="text"/> 17.20	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.68	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
18	<input type="text"/> 148.00	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
19	<input type="text"/> 38.36	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 2.44	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
20	<input type="text"/> 35.95	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 2.75	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
21	<input type="text"/> 110.19	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 5.14	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
22	<input type="text"/> 38.61	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.89	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
23	<input type="text"/> 78.17	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 4.88	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
24	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
25	<input type="text"/> 155.97	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
26	<input type="text"/> 92.18	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 4.70	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
27	<input type="text"/> 20.10	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/> 1.92	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
28	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
29	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
30	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
31	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
32	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>

If you [login](#), your Quick Check results will be available later!

Import from structure history

[Do Quick Check](#)

**Submit <sup>13</sup>C**

Input list: [Input format](#)

Shifts for auto assignment, format like:  
58.21:2B  
64.11:6Q  
Intensity and multiplicity optional

**Submit <sup>1</sup>H**

Input list: [Input format](#)

Shifts for auto assignment, format like:  
54.21:2B  
64.11:6Q  
Intensity and multiplicity optional

Quality report for carbon spectrum: 1: Poor [Show full report](#)

Quality report for hydrogen spectrum: 1: Poor [Show full report](#)

If your structure has more atoms, submit to get more fields!  
\*-symmetrical atom, if left empty it will be filled in automatically

nmrshiftdb2 (V. \$Name: \$, nmr-subtest.nmr.uni-koeln.de, currently 0 users, 236862 since 2010-12-14 23:09:00.0) © NMRShiftDB project 2002-2010, © Stefan Kuhn 2010 - 2014. [Credits](#)

(3) Geben Sie jetzt in die entsprechenden Spalten die Werte der chemischen Verschiebung für die  $^{13}\text{C}$ - und/oder  $^1\text{H}$ -NMR-Signale der Verbindung ein. Im Fall von  $\text{CH}_2$ -Gruppen bietet die Eingabemaske zwei Felder an. Wenn nur das erste davon ausgefüllt wird nimmt die Software für beide Protonen dieselbe Verschiebung an.

Atom No.	$^{13}\text{C}$ Shift	Auto reassign	$^1\text{H}$ Shift	Auto reassign	2 <sup>nd</sup> shift for diastereotopic atoms
1	38.6  37.94, diff: 0.66	<input type="checkbox"/>	1.08  7.19, diff: 18.38	<input type="checkbox"/>	1.54
2	18.7  18.44, diff: 0.26	<input type="checkbox"/>	1.50  1.57, diff: 1.56	<input type="checkbox"/>	1.59
3	39.2  39.30, diff: 0.10	<input type="checkbox"/>	1.11  1.77, diff: 1.71	<input type="checkbox"/>	1.37
4	30.8  31.00, diff: 0.20	<input type="checkbox"/>			
5	50.5  51.86, diff: 1.36	<input type="checkbox"/>	1.08  2.12, diff: 2.01	<input type="checkbox"/>	1.38
6	36.0  35.00, diff: 1.00	<input type="checkbox"/>			
7	33.9  30.15, diff: 3.75	<input type="checkbox"/>	0.86  0.94, diff: 0.94	<input type="checkbox"/>	
8	28.5  30.15, diff: 1.65	<input type="checkbox"/>	0.98  0.94, diff: 0.94	<input type="checkbox"/>	

Stattdessen können Sie auch in dem jeweils unter den Verschiebungs-Spalten angebrachten Feld „input list“ eine Liste der Verschiebungen eingeben (pro Zeile ein Shift). Die Zuordnung wird in diesem Fall im nächsten Schritt automatisch vorgeschlagen.

(4) Klicken Sie abschließend auf das Icon „Do QuickCheck“: Nun werden die Zuordnungen evaluiert und mit den Ampelfarben grün (in Ordnung), gelb (evtl. kritisch) und rot (falsch) bewertet. Wenn ein oranges oder rotes Warndreieck zu sehen ist, dann ist die Anzahl Sphären, die für die Vorhersage genutzt werden konnte zu gering. Solche Shifts sind nur bedingt aussagekräftig.

**NMRShiftDB** Current usage is: Registered Users: 642 (Lab: 4) Structures: 42444 (Lab: 0) Spectra: Measured 50527 (Lab: 0), calculated 549 (Lab: 0)

Username: \_\_\_\_\_ Login Create New Account (Only necessary for contributing data)  
 Password: \_\_\_\_\_ Logon with SSI  
 Use cookies for persistent login [Forgot password?](#)

Problems using nmrshiftdb? See our [tips on browsers to use!](#)

Home Search Results **Quick Check** Predict Assignment Submit Review Help

Quick Check Clear form

Atom No.	$^{13}\text{C}$ Shift	Auto reassign	$^1\text{H}$ Shift	Auto reassign	$2^{\text{nd}}$ shift for diastereotopic atoms
1	38.6 <span style="color: green;">●●●</span> 37.94, dff: 0.66 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.08 <span style="color: red;">●●●</span> 7.19, dff: 5.65	<input type="checkbox"/>	1.54
2	18.7 <span style="color: green;">●●●</span> 18.44, dff: 0.26	<input type="checkbox"/>	1.5 <span style="color: green;">●●●</span> 1.57, dff: 0.02	<input type="checkbox"/>	1.59
3	39.2 <span style="color: green;">●●●</span> 39.30, dff: 0.10	<input type="checkbox"/>	1.11 <span style="color: green;">●●●</span> 1.77, dff: 0.40 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.37
4	30.8 <span style="color: green;">●●●</span> 31.00, dff: 0.20	<input type="checkbox"/>			
5	50.5 <span style="color: green;">●●●</span> 51.86, dff: 1.36 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.08 <span style="color: green;">●●●</span> 2.12, dff: 0.74 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.38
6	36.0 <span style="color: green;">●●●</span> 35.00, dff: 1.00 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>			
7	33.9 <span style="color: green;">●●●</span> 30.15, dff: 3.75 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	0.86 <span style="color: green;">●●●</span> 0.94, dff: 0.08	<input type="checkbox"/>	
8	28.5 <span style="color: green;">●●●</span> 30.15, dff: 1.65 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	0.98 <span style="color: green;">●●●</span> 0.94, dff: 0.04	<input type="checkbox"/>	
9	57.3 <span style="color: green;">●●●</span> 47.87, dff: 9.43 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	2.08 <span style="color: green;">●●●</span> 2.96, dff: 0.88	<input type="checkbox"/>	
10	22.1 <span style="color: green;">●●●</span> 21.06, dff: 1.04 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.14 <span style="color: green;">●●●</span> 0.92, dff: 0.22	<input type="checkbox"/>	
11	19.2 <span style="color: green;">●●●</span> 26.34, dff: 7.14	<input type="checkbox"/>	1.42 <span style="color: green;">●●●</span> 1.46, dff: 0.18	<input type="checkbox"/>	1.64
12	159.5 <span style="color: red;">●●●</span> 138.95, dff: 20.55 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>			
13	25.6 <span style="color: green;">●●●</span> 27.33, dff: 1.73 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	1.92 <span style="color: green;">●●●</span> 1.58, dff: 0.39	<input type="checkbox"/>	1.19
14	43.2 <span style="color: green;">●●●</span> 42.24, dff: 0.96 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	2.24 <span style="color: green;">●●●</span> 1.70, dff: 0.54	<input type="checkbox"/>	
15	119.5 <span style="color: red;">●●●</span> 131.20, dff: 11.70 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>			
16	45.1 <span style="color: green;">●●●</span> 48.01, dff: 2.91 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	2.92 <span style="color: green;">●●●</span> 2.91, dff: 0.01	<input type="checkbox"/>	
17	15.6 <span style="color: green;">●●●</span> 17.20, dff: 1.60	<input type="checkbox"/>	2.39 <span style="color: green;">●●●</span> 1.68, dff: 0.71	<input type="checkbox"/>	
18	167.7 <span style="color: red;">●●●</span> 170.28, dff: 2.58 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>			
19	103.9 <span style="color: green;">●●●</span> 103.30, dff: 0.60 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	6.07 <span style="color: green;">●●●</span> 5.22, dff: 0.85	<input type="checkbox"/>	
20		<input type="checkbox"/>			
21		<input type="checkbox"/>			
22	103.8 <span style="color: green;">●●●</span> 107.90, dff: 4.10 <span style="color: orange;">!</span>	<input type="checkbox"/>	5.93 <span style="color: green;">●●●</span> 5.22, dff: 0.71	<input type="checkbox"/>	
23		<input type="checkbox"/>			
24		<input type="checkbox"/>			
25	169.7 <span style="color: green;">●●●</span> 169.74, dff: 0.04	<input type="checkbox"/>			
26	21.2 <span style="color: green;">●●●</span> 21.05, dff: 0.15	<input type="checkbox"/>	2.08 <span style="color: green;">●●●</span> 2.06, dff: 0.02	<input type="checkbox"/>	
27		<input type="checkbox"/>			
28		<input type="checkbox"/>			
29		<input type="checkbox"/>			
30		<input type="checkbox"/>			
31		<input type="checkbox"/>			
32		<input type="checkbox"/>			

If you [login](#), your Quick Check results will be available later!

Submit  $^{13}\text{C}$  Input list: [Input format](#)  
 Shifts for auto assignment, format like: 56.2:23 64.1:60 Intensity and multiplicity optional

Submit  $^1\text{H}$  Input list: [Input format](#)  
 Shifts for auto assignment, format like: 56.2:23 64.1:60 Intensity and multiplicity optional

Quality report for carbon spectrum: 1: [Show full report!](#)  
 Quality report for hydrogen spectrum: 1: [Show full report!](#)

If your structure has more atoms, submit to get more fields!  
 \* = symmetrical atom, if left empty it will be filled in automatically

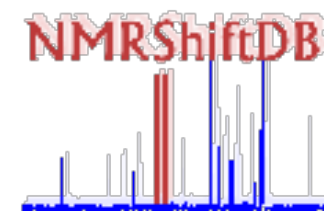
nmrshiftdb2 (V. \$Name: \$, nmr-sdbtest.nmr.uni-koeln.de, currently 0 users, 236862 since 2010-12-14 23:09:00.0) © NMRShiftDB project 2002-2010, © Stefan Kuhn 2010 - 2014. Credits

(5) Wenn Sie die **ausführliche Bewertung der Zuordnung** (Report) anschließend als pdf-Datei herunterladen möchten klicken Sie auf den Link „Show full report“ (nach der farbig unterlegten Zuordnungsbeurteilung). Die von Ihnen durchgeführten QuickCheck-Abfragen und – Zuordnungen bleiben gespeichert und abrufbar, wenn Sie sich vorher eingeloggt haben.

(6) Wenn Sie die **Zuordnung in die Datenbank eingeben** möchten klicken Sie auf den Link „Submit  $^{13}\text{C}$ “, bzw. „Submit  $^1\text{H}$ “ (jeweils direkt unterhalb der letzten chemischen Verschiebung in den Spalten). Falls Sie noch nicht eingeloggt waren müssen Sie dies nun tun. Fahren Sie dann wie auf der folgenden Seite beschrieben mit der Eingabe fort.

## Kurzanleitung für die Eingabe von Zuordnungen in die nmrshiftdb2-Datenbank

(lokale Datenbank auf laplace, <http://laplace.nmr.uni-koeln.de> im lokalen Subnetz)



### B. Eingabe einer Zuordnung

(1) Nach dem Einloggen wechselt das aktuelle Fenster zum Reiter „Submit“. Hier zeigt jeweils der **gelbe Pfeil** den aktuellen Stand der Eingabe an. Zur Vervollständigung der Eingabe in die Datenbank ist noch ein Schritt obligatorisch, zwei weitere (Literaturangaben und Anfügen von Spektren) sind optional.

Additional molecule information:	8	27.8		
Molecule keywords:	9	25.7		
Additional comments:	10	44.2		
Additional spectrum information:	11	46.4		
Spectrum keywords:	12	46.8		
No JCAMP-DX file attached!	13	77.2		
No PDF file attached!	15	32.7		
No raw data file attached!	16	76.2		
No image file attached!	17	35.0		
No other files attached!	18	32.7		
	20	25.3		
	21	63.1		
	22	60.5		
	24	48.5		
	25	13.2		

Get this molecule as  file

Get this spectrum as  file

Get this spectrum and its molecule as

Enter molecule → Set spectrum type → Add shifts → **Doing assignment** → Add miscellaneous data → Add literature items → Attach files → Final submit

(2) Im Schritt „Doing assignment“ kann bei Bedarf die Zuordnung korrigiert, die Numerierung der Atome geändert oder die Multiplizität geändert werden. Zur Angabe von Kopplungskonstanten wird durch Klick auf den Link unter der Tabelle das Untermenü geöffnet.

Choose experiment
Enter molecule
Set spectrum type

Assign shifts to atoms					
Atom No.	New Atom No. <small>?</small>	Atom identifier <small>?</small>	Shift	Predicted shift	Mult. <small>?</small>
1	1 ▾		39.2 ▾	35,60	T
2	2 ▾		54.2 ▾	53,70	D
3	3 ▾		133.5 ▾	131,70	D
4	4 ▾		174.5 ▾	174,80	S
5	5 ▾		81.0 ▾	80,80	S
6	6 ▾		28.0 ▾	27,80	Q
7	7 ▾		28.0 ▾	27,80	Q
8	8 ▾		28.0 ▾	27,80	Q
9	9 ▾		118.4 ▾	121,60	T
10	10 ▾				
11	11 ▾				
12	12 ▾				

Submit assignments
I want to enter coupling constants

(3) Wenn statt  $^{13}\text{C}$ - die  $^1\text{H}$ -chemischen Verschiebungen einer Verbindung eingegeben werden, so sollten zumindest in der letzten Spalte die Multiplizitäten der Signale (d, t, dd, etc.) angegeben werden. Anschließend können, wenn bekannt, die  $J_{\text{HH}}$ -Kopplungen eingegeben werden. Dazu muss der Link „I want to enter coupling constants“ aktiviert werden.

Choose experiment
▶
Enter molecule
▶
Set spectrum type
▶
Add shifts
▶
Doing assignment
▶

Assign shifts to atoms					
Atom No.	New Atom No. <small>?</small>	Atom identifier <small>?</small>	Shift	Predicted shift	Mult. <small>?</small>
1-H <sub>a</sub> (H 18)	1		1.89	1,99	ddt
1-H <sub>b</sub> (H 19)			2.44	1,99	m
2-H <sub>a</sub> (H 20)	2		3.97	3,62	td
2-H <sub>b</sub> (H 21)			3.85	3,62	td
3-H (H 22)	3		5.12	4,28	dd
4	4				
5	5				
6-H (H 23, H 24, H 25)	6		1.15	1,21	s
7-H (H 26, H 27, H 28)	7		1.15	1,21	s
8-H (H 29, H 30, H 31)	8		1.15	1,21	s
9	9				
10	10				
11-H (H 32, H 33, H 34)	11		1.39	1,47	s
12-H (H 35, H 36, H 37)	12		1.39	1,47	s
13-H (H 38, H 39, H 40)	13		1.39	1,47	s
14	14				
15	15				
16	16				
17	17				

Submit assignments
I want to enter coupling constants

Abort this submit



(4) Bei der Eingabe von Kopplungskonstanten kann jede Kopplungskonstante nur einmal eingegeben werden, d.h. z.B. in einem AMX-System, dass die Kopplung  $J_{AX}$  eingegeben werden muss, aber die Kopplung  $J_{XA}$  dadurch bereits automatisch definiert wurde. Wenn bei beiden Spins unterschiedliche Werte für die gemeinsame Kopplung abgelesen werden muss ein Wert gewählt werden. Die Kopplungseingabe ist optional, d.h. es müssen nicht alle möglichen Kopplungen in die Matrix eingesetzt werden.

Choose experiment Enter molecule Set spectrum type Add shifts Doing assignment Add miscellaneous data Add literature data Attach JCAMP-DX/PDF file Final submit

**Assign shifts to atoms**

Atom No.	New Atom No.	Atom identifier	Shift	Predicted shift	Mult.	Coupling constants																			
						1-H <sub>a</sub> (H 18)	1-H <sub>b</sub> (H 19)	2-H <sub>a</sub> (H 20)	2-H <sub>b</sub> (H 21)	3-H (H 22)	4	5	6-H (H 23, H 24, H 25)	7-H (H 26, H 27, H 28)	8-H (H 29, H 30, H 31)	9	10	11-H (H 32, H 33, H 34)	12-H (H 35, H 36, H 37)	13-H (H 38, H 39, H 40)	14	15	16	17	
1-H <sub>a</sub> (H 18)	1		1.89	1,99	dddd	---	10.9	8.4	5.4	9.3	---	---													
1-H <sub>b</sub> (H 19)			2.44	1,99	dddd	---	---	5.4	8.4	5.4	---	---													
2-H <sub>a</sub> (H 20)	2		3.97	3,62	ddd	---	---	---			---	---													
2-H <sub>b</sub> (H 21)			3.85	3,62	ddd	---	---	---			---	---													
3-H (H 22)	3		5.12	4,28	dd	---	---	---			---	---													
4	4																								
5	5																								
6-H (H 23, H 24, H 25)	6		1.15	1,21	s	---	---	---	---	---	---	---													
7-H (H 26, H 27, H 28)	7		1.15	1,21	s	---	---	---	---	---	---	---													
8-H (H 29, H 30, H 31)	8		1.15	1,21	s	---	---	---	---	---	---	---													
9	9																								
10	10																								
11-H (H 32, H 33, H 34)	11		1.39	1,47	s	---	---	---	---	---	---	---													
12-H (H 35, H 36, H 37)	12		1.39	1,47	s	---	---	---	---	---	---	---													
13-H (H 38, H 39, H 40)	13		1.39	1,47	s	---	---	---	---	---	---	---													
14	14																								
15	15																								
16	16																								
17	17																								

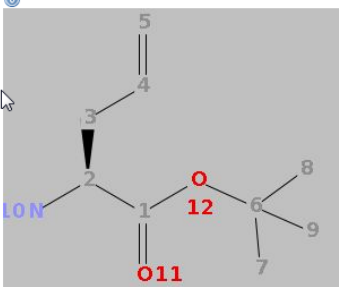
Submit assignments **I want to enter coupling constants**

(5) Die Zuordnung wird durch Klick auf „Submit assignments“ bestätigt. Nun muss auf „Add miscellaneous data“ geklickt werden. Dort wählt man in dem oberen, rechten Kategoriefeld die „chemie koeln“-Angabe an und trägt (obligatorisch) die Aufnahmetemperatur (z.B. 298 K), das Lösungsmittel, die Resonanzfrequenz (bezogen auf  $^1\text{H}$ , also bei einem 400 MHz-Spektrometer auch für  $^{13}\text{C}$ -Daten beispielsweise **400 MHz!**) und die Zuordnungsmethode ein (meistens bestehend aus dem 1D, und/oder die entsprechenden Spektrenkombinationen, je nach Strukturanalyse). Im darunterliegenden Menükasten („additional descriptions...“ können optionale Einträge wie chemische(r) Name(n), keywords, CAS-Nr., weblinks... eingegeben werden.

Submit Data

Enter the additional data and write everything to the database!

Spectrum type:  $^{13}\text{C}$



Chemical name(s):  
Double Bond Specification:  
CAS number:  
Canonical name:  
Additional molecule information:  
Molecule keywords:  
Additional comments:  
Additional spectrum information:  
Spectrum keywords:  
No JCAMP-DX file attached! No PDF file attached!

Atom-No.	Shift	Mult. (coupling const.)	Atom Identifier
1	174.5	T	
2	54.2	D	
3	39.2	D	
4	133.5	S	
5	118.4	S	
6	81.0	Q	
7	28.0	Q	
8	28.0	Q	
9	28.0	T	

Export your submit (does not save or finish the submit):

Get this molecule as  file

Get this spectrum as  file

Get this spectrum and its molecule as  file

Choose experiment
Enter molecule
Set spectrum type
Add shifts
No assignment
Adding miscellaneous data
Add literature items
Attach JCAMP-DX/PDF files
Final submit

\*-required

Additional descriptions of the spectrum

Enter categories for your spectrum here (one per line) or choose some: (to choose multiple categories, hold ctrl)

- none --
- ab initio
- chemie koeln
- dkfz spektren database
- HMDB

---

Conditions (Choose one or enter a new one, if nothing is entered the currently selected one is taken):

Temperature [K] \* :

298

Solvent \* :

Chloroform-D1 (CDCl3)

Spectrometer Frequency for  $^1\text{H}$  [MHz] \* :

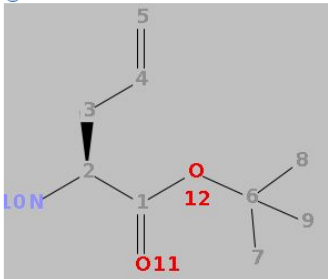
200.13

Assignment Method \* :

1H standard spectrum     1H solvent suppression     13C standard spectrum     13C APT     13C DEPT 135     13C long relaxation delay temperature  
 X{1H}     X{19F}     X w/o dec.  
 H,H COSY     H,H TOCSY     H,H NOESY     H,C HMQC/HSQC     H,C HMBC  
 1H 1D sel. NOE     1H variable temperature     H-X-Correlation     F-X-Correlation

(6) Nach Klick auf „Submit data“ kann bei der Eingabe neuer Verbindungen die Literatureingabe übersprungen werden, fahren Sie direkt mit Punkt (7) fort.

**Im Fall der Eingabe von Daten aus der Literatur:** Im sich öffnenden Fenster können die Literaturangaben gemacht werden. Hier müssen **alle Felder mit \*** ausgefüllt werden. Wenn die Literatur bereits einen DOI besitzt genügt dessen Eingabe in das DOI-Feld und die Datenbank füllt die übrigen Felder automatisch aus. Die Literatureingabe wird durch Klick auf das „Submit Literature“-Icon beendet.



Chemical name(s): **(S)-tert-butyl 2-aminopent-4-enoate**  
 Double Bond Specification:  
 CAS number:  
 Canonical name:  
 Additional molecule information:  
 Molecule keywords:  
 - Temperature [K]: 298 - Solvent: Chloroform-D1 (CDCl3) - Field Strength [MHz]:  
 50.032501220703125 - Assignment Method: H,H COSY; H,C HMQC/HSQC; H,C HMBC; 13C APT  
 Additional comments:  
 Additional spectrum information:  
 Spectrum keywords: chemie koeln  
 No JCAMP-DX file attached! No PDF file attached!

Spectrum type: 13C

Atom-No. ↓	Shift	Mult. (coupling const.)	Atom Identifier
1	174.5	T	
2	54.2	D	
3	39.2	D	
4	133.5	S	
5	118.4	S	
6	81.0	Q	
7	28.0	Q	
8	28.0	Q	
9	28.0	T	

Export your submit (does not save or finish the submit):

Get this molecule as  file

Get this spectrum as  file

Get this spectrum and its molecule as  file

Choose experiment
Enter molecule
Set spectrum type
Add shifts
Do assignment
Add miscellaneous data
Adding literature items
Attach JCAMP-DX/PDF file
Final submit

Literature

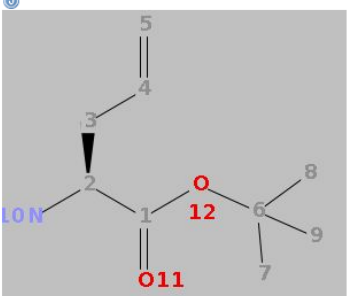
Fill in journal articles where spectrum is published (if any, \* =mandatory)

DOI	<input type="text"/>
Example: 10.1002/jlac.18611180314	<input type="button" value="Fill from DOI"/>
Author(s) separated with , or ; (names separated with blanks)*	<input type="text" value="Bojan Vulovic, Maja Gruden-Pavlovic, Radomir Matovic, Radomir N. Saicic"/>
Example: Gustav Kirchoff, Robert Bunsen	
Title of Publication	<input type="text" value="Substrate Stereocontrol in the Intramolecular Organocatalyzed Tsuji-Trost Reaction: Enantioselective Sy"/>
Example: Chemische Analyse durch Spectralbeobachtungen	
Subtitle of Publication (if any)	<input type="text"/>
Journal title, Subtitle (if any), abbreviation (if known)	<input type="text"/>
Example: "Justus Liebig's Annalen der Chemie" as title, no subtitle, "Liebig's Ann. Chem." as abbreviation	
Or choose journal from box:	<input type="text" value="Organic Letters . (Org. Lett)"/>
Year*, Volume, Issue	<input type="text" value="2014 , 16 , 1"/>
Example: 1861, 118	
Pages	<input type="text" value="34 - 0"/>
Link (if no DOI exists)	<input type="text"/>

(7) Die Eingabe erlaubt (optional) das **Ablegen von Originaldatensätzen** (gepackte Rohdaten der Spektren oder pdf-Dateien) zusammen mit dem Submit. Nun ist die Zuordnung für den endgültigen Submit vorbereitet, der durch Klicken auf „final submit“ erfolgt. Im sich öffnenden Fenster wird nun **entweder** (Submit wird nicht an die Referees der Datenbank weitergegeben) noch die Box nach „I want to keep this submission private“ aktiviert, außerdem muss dann -wenn gewünscht- die Option auf einen Test durch den CSEARCH Robot Referee markiert werden. **Oder** die „private“-Option bleibt deaktiviert, damit gehen die Daten automatisch in die Prüfung durch den Robot Referee.

**Submit Data**

Submit your input. To change data, choose the appropriate item in the timeline!



Chemical name(s): **(S)-tert-butyl 2-aminopent-4-enoate**  
 Double Bond Specification:  
 CAS number:  
 Canonical name:  
 Additional molecule information:  
 Molecule keywords:  
 - Temperature [K]: 298 - Solvent: Chloroform-D1 (CDCl3) - Field Strength [MHz]:  
 50.032501220703125 - Assignment Method: H,H COSY; H,C HMQC/HSQC; H,C HMBC; 13C APT  
 Literature: Bojan Vulovic, Maja Gruden-Pavlovic, Radomir Matovic, Radomir N. Saicic: Substrate Stereocontrol in the Intramolecular Organocatalyzed Tsuji-Trost Reaction: Enantioselective Synthesis of Allokainates, in: Organic Letters , vol. 16/2014, pp. 34 - ?.  
 Additional comments:  
 Additional spectrum information:  
 Spectrum keywords: chemie koeln  
 No JCAMP-DX file attached! A PDF file has been attached!  
[Remove PDF file](#)

Spectrum type: 13C

Atom-No. ↓	Shift	Mult. (coupling const.)	Atom Identifier
1	174.5	T	
2	54.2	D	
3	39.2	D	
4	133.5	S	
5	118.4	S	
6	81.0	Q	
7	28.0	Q	
8	28.0	Q	
9	28.0	T	

Export your submit (does not save or finish the submit):

Get this molecule as  file

Get this spectrum as  file

Get this spectrum and its molecule as  file


Please note that submissions to nmrshiftdb2 (except private submissions) will be publicly available, as stated in the [info](#).

I want to keep this submission private


I want to submit further spectra for this structure

Durch Klicken auf „Write to Database“ wird die Zuordnung in die Datenbank überführt.

(8) Nach diesem Schritt wird die Qualität der Zuordnung sowohl von nmrshiftdb überprüft als auch zum Quick Check an den Robot Referee aus CSEARCH eingeschickt. Sie erhalten nun nach max. 1h eine automatisch generierte Email, die bestätigt, dass die Zuordnung in den Review-Prozess überwiesen wurde

 **To: nils.schloerer@uni-koeln.de Your input from 2014-01-16 21:37:50.0 (id:40016875) is assigned for review** 01/17/2014 3 KB

ausserdem erhalten Sie eine elektronische Bestätigung, dass die Eingabe erfolgreich war

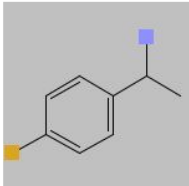
 **To: nils.schloerer@uni-koeln.de Your nmrshiftdb2 submit is saved!** 01/17/2014 2 KB

## C. Robot-Referee und Qualitätskontrolle: Bewertung von Zuordnungen durch die Datenbank

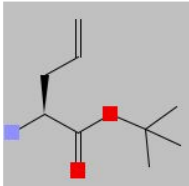
(1) Nach Absenden der Daten gelangt die Bewertung Ihrer Zuordnung durch den Robot Referee des Programms **CSEARCH**<sup>1</sup> innerhalb weniger Minuten auf den Server. Sie können die Qualität Ihrer Zuordnung dann mit Hilfe der CSEARCH-Rückmeldung beurteilen. Dazu müssen Sie sich in Ihrem nmrshiftdb-Account anmelden und auf den Reiter „personal page“ klicken (grauer Balken oben rechts auf der Seite). Sie sehen nun das von Ihnen an die Datenbank überwiesene Molekül links unter der Rubrik „Unreviewed spectra...“ inklusive der Spektren-ID

**Unreviewed spectra you submitted:**

Click entry to view details!



ID: 40015184



ID: 40016875

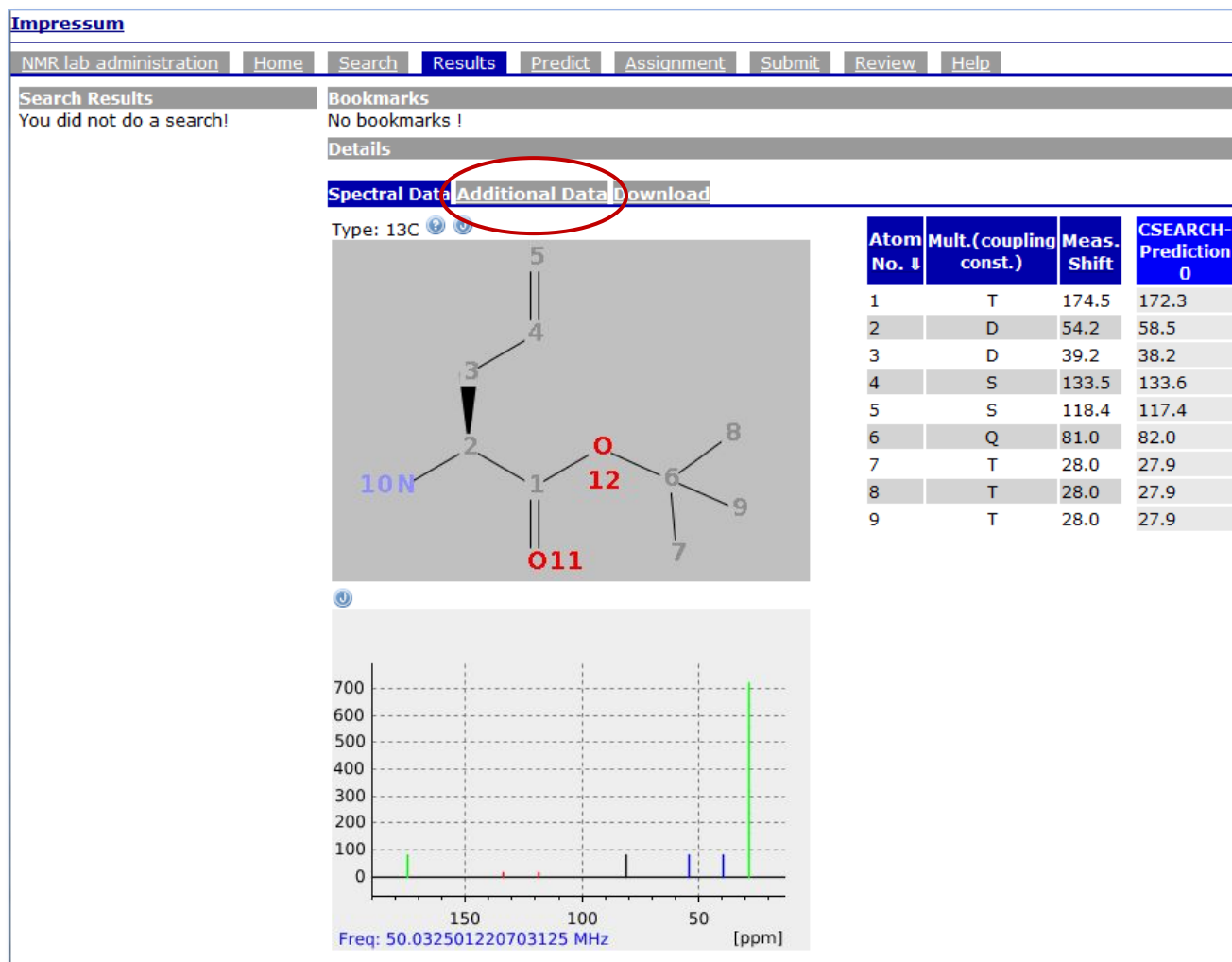
**Edit your account details**  
\*=Field needs to be filled in

Username:*	nes
Old Password	<input type="password"/>
Password:	<input type="password"/>
Password (confirm):	<input type="password"/>
First Name:	Nils
Last Name:	Schloerer
Email:*	nils.schloerer@uni-koeln
Title:	Dr.
Address:	Greinstr.4
City:	Cologne
State:	NRW
ZIP Code:	50939
Country:	Germany
Web Page:	http://www.oc.uni-koeln
Affiliation/institute*:	NMR facility manager
Affiliation/workgroup*:	<input type="text"/>
I want my real name to appear on the Credits page	<input type="checkbox"/>

A valid email address is required!

<sup>1</sup>CSEARCH und der **Robot Referee** werden von Prof. Wolfgang Robien, Universität Wien, entwickelt. Weitere Informationen auf der Homepage, [http://homepage.univie.ac.at/Wolfgang.Robien/csearch\\_main.html](http://homepage.univie.ac.at/Wolfgang.Robien/csearch_main.html).

(2) Wenn Sie nun das Molekülbild anklicken sehen Sie zunächst eine tabellarische Auflistung der chemischen Verschiebungen, die CSEARCH für Ihre Verbindung vorhersagt.



(3) Wenn Sie auf den Reiter „Additional Data“ klicken sehen Sie ausserdem die Bewertung („Rating“) der Zuordnung durch NMRshiftDB und CSEARCH. Der farblich hervorgehobene Balken (grün, gelb oder rot) gibt die Einschätzung der Zuordnung durch den Robot Referee wieder.

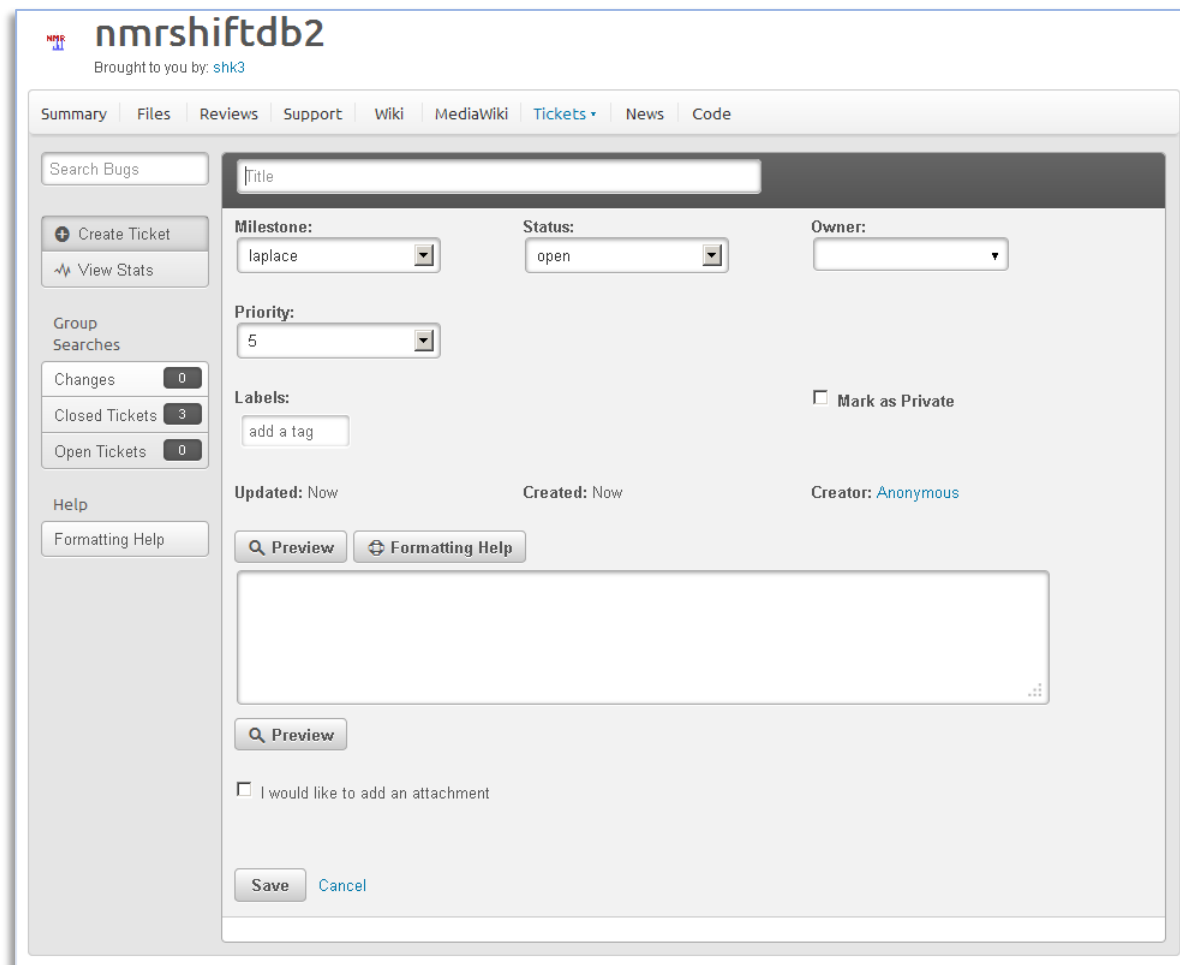
Spectral Data		Additional Data	Download
<b>Molecule</b>	<b>40124363</b>		
Chemical name(s)	(S)-tert-butyl 2-aminopent-4-enoate		
Chemical formula	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>		
Molecular weight	171.237		
Number of double bond equivalents (DBEs)	2.0		
Number of all rings, size of smallest set of smallest rings	0, 0		
Canonical name(s)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• O=C(OC(C)(C)C)C(N)CC=C (SMILES)</li> <li>• <b>[H]C([H])=C([H])C([H])([H])C@... (truncated)</b> (chiral SMILES)</li> <li>• <b>InChI=1S/C9H17NO2/c1-5-6-7(10)... (truncated)</b> (INChI)</li> <li>• FFDXLHMGNXXAG-ZETCQYMHSA-N (InChI Key)</li> </ul>		
CAS-Number			
Additional information			
Molecule keywords			
<b>Spectrum</b>	<b>40016875 , submitted by N. Schloerer at 2014-01-16 21:37:50.0.</b> <b>Rating: 10 (10:</b> <b>CSEARCH quality check: Accept</b> <b>(admin))</b>		
Type	13C		
Measurement conditions			
Temperature [K]	298		
Solvent	Chloroform-D1 (CDCl3)		
Field Strength [MHz]	50.032501220703125		
Assignment Method	H,H COSY; H,C HMQC/HSQC; H,C HMBC; 13C APT		
Literature	Bojan Vulovic; Maja Gruden-Pavlovic; Radomir Matovic; Radomir N. Saicic: Substrate Stereocontrol in the Intramolecular Organocatalyzed Tsuji-Trost Reaction: Enantioselective Synthesis of Allokainates, in: Organic Letters , vol. 16/2014, pp. 34 - ?.		
Additional comments			
Additional information			
Spectrum categories	chemie koeln		
Edit structure	<input type="button" value="Edit that spectrum"/>		
Mark (1-10):	<input type="text"/>	comment:	<input type="text"/> <input type="button" value="Mark this spectrum"/>
<input type="text" value="http://nmr-sdbtest.nmr.uni-koeln.de/"/>		<input type="button" value="Publish this spectrum"/>	



(4) Wenn Sie **Daten im „private“-Modus eingegeben** haben können Sie Ihre Zuordnung zwar nicht wie unter (1) angegeben sofort nach dem Klick auf die „personal page“ sehen, aber wenn Sie auf den Link „Show all my contributions“ klicken (siehe Screenshot bei (1)), wird eine Liste aller Ihrer Eingaben sichtbar. Nach Auswahl der gewünschten Struktur sehen Sie dann ebenfalls die CSEARCH-Evaluierung der Zuordnung.

## Kontakt bei Fragen, Anregungen und Problemen:

Bitte immer eine Rückmeldung per Email (an [nils.schloerer@uni-koeln.de](mailto:nils.schloerer@uni-koeln.de) und [stefhk3@web.de](mailto:stefhk3@web.de)) wenn es „klemmt“. Außerdem den **bugtracker** benutzen (damit kann Stefan Kuhn direkt das spezifische Problem lokalisieren). Er ist im Falle eines Fehlers direkt per Klick aktivierbar oder kann per link erreicht werden: <https://sourceforge.net/p/nmrshiftdb2/bugs/> und dort durch Klick auf „Create Ticket“ eine neue Fehlermeldung öffnen.



The screenshot shows the 'nmrshiftdb2' bug tracker interface. The page title is 'nmrshiftdb2' with the subtitle 'Brought to you by: shk3'. The navigation menu includes 'Summary', 'Files', 'Reviews', 'Support', 'Wiki', 'MediaWiki', 'Tickets', 'News', and 'Code'. The main content area is the 'Create Ticket' form, which includes a search bar, a 'Create Ticket' button, and a 'View Stats' button. The form fields are: 'Title' (text input), 'Milestone' (dropdown menu with 'laplace' selected), 'Status' (dropdown menu with 'open' selected), 'Owner' (dropdown menu), 'Priority' (dropdown menu with '5' selected), 'Labels' (text input with 'add a tag' button), 'Mark as Private' (checkbox), 'Updated: Now', 'Created: Now', and 'Creator: Anonymous'. There are 'Preview' and 'Formatting Help' buttons. At the bottom, there is a 'Save' button and a 'Cancel' link. A checkbox for 'I would like to add an attachment' is also present.