

Archivierung von spektroskopischen Daten

Peter Lampen

Leibniz-Institut für Analytische
Wissenschaften – ISAS – e.V.

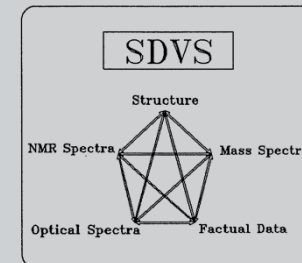
Dortmund

Einleitung



- Chemical Abstracts Service (CAS): **71,9 Mio.** organische bzw. anorganische Verbindungen (Stand 7. Juni 2013)
- Wiley Registry of Mass Spectral Data: **1.01 Mio.** EI-MS-Spektren
- NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library: **243.893** EI-MS-Spektren
- Wiley-VCH SpecInfo: **333.513** ^{13}C -NMR-Spektren
- Bio-Rad HaveltAll IR: **225.000** IR-Spektren

BMFT/BMBF-Projekte

- 1987 – 1989: **Spektrendatenbanken-Verbundsystem**
 - Beteiligt: FIZ Karlsruhe; FIZ Chemie Berlin; MPI für Kohlenforschung, Mülheim; ISAS, Dortmund
 - Ziel: Verknüpfung von chemischen Strukturen mit spektroskopischen und physikalischen Daten
-
- 1990 – 1995: **Informationssystem Spektroskopie**
 - Gründung der Fa. Chemical Concepts GmbH, Weinheim als Tochterfirma des Verlags Chemie
 - Ziel: Wirtschaftlich profitables Unternehmen nach Projektende
 - Seit 1996 gehört Chemical Concepts zusammen mit Wiley-VCH zu John Wiley & Sons Inc.



EU-Projekt Eurospec

- 2002 – 2004: Projekt im Teilprogramm Growth des 5. EU-Rahmenprogramms (FP5)
 - Beteiligt: 7 Projektpartner aus 5 Ländern (CZ, D, F, GB, P)
 - Koordinator: ISAS, Projektleiter: A.N. Davies
 - Ziel: Spektren aus der wissenschaftlichen Literatur online verfügbar zu machen
 - Vereinbarungen mit den Herausgebern wissenschaftlicher Zeitschriften waren angestrebt
- 
- Ergebnis: International Spectroscopic Data Base, www.is-db.org
 - Bestandteile: Ein im ISAS entwickeltes Dateneingabe-System und ein kommerzielles Produkt für die Datenbank-Suche (Q-DIS/Panda)
 - Verantwortlich seit 2005: International Spectroscopic Database e.V., Dortmund
- 

Das JCAMP-DX-Format

- R.S. McDonald and P.A. Wilks, Jr.: *JCAMP-DX: A standard Form for Exchange of Infrared Spectra in Computer Readable Form*, *Appl. Spectrosc.*, **42**, 151-168 (1988)
- Entwickelt im Auftrag des Joint Committee on Atomic and Molecular Physical Data (JCAMP)
- ASCII-Format zur Speicherung von Spektren und Metadaten (Probe, Spektrometer, Messparameter, Datenverarbeitung)
- 1991 – 2004: Ergänzung des Formats zur Speicherung von chemischen Strukturen, NMR-, MS-, IMS- und EMR-Spektren
- Seit 1996 existiert eine Arbeitsgruppe der IUPAC zur Weiterentwicklung des JCAMP-DX-Formats



Weitere Austauschformate

- **Analytical Data Interchange Protocol (ANDI)**
- Von zahlreichen Geräteherstellern unterstütztes Format für MS-Spektren und Chromatogramme
- Entwickelt von D. Stranz et al. im Auftrag der Analytical Instrument Association (AIA)
- Wird heute von ASTM Subcommittee E13.15 (Analytical Data) betreut

- **Analytical Information Markup Language (AnIML)**
- Von ASTM E13.15 entwickeltes XML basiertes Format für analytisch-chemische Daten
- Ermöglicht die Speicherung mehrdimensionaler Datensätze
- Metadaten können integriert werden