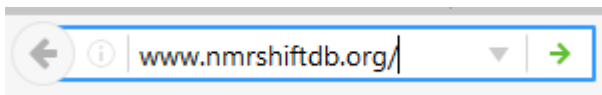


Kurzanleitung Quick Check

1. nmrshiftdb2 aufrufen



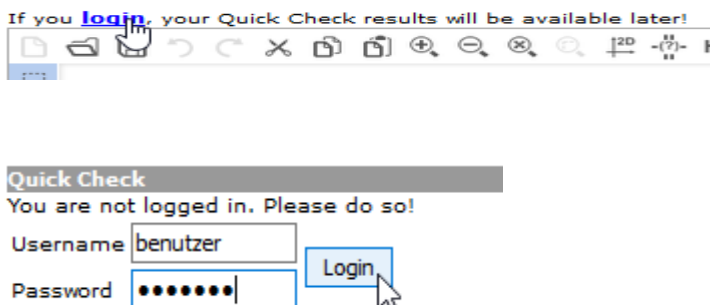
Rufen Sie **nmrshiftdb2** in Ihrem Internetbrowser unter der Adresse <http://www.nmrshiftdb.org> auf.

2. Reiter „Quick Check“ auswählen



Wählen Sie das **QuickCheck-Fenster** über den entsprechenden Reiter aus.

3. Einloggen (optional)

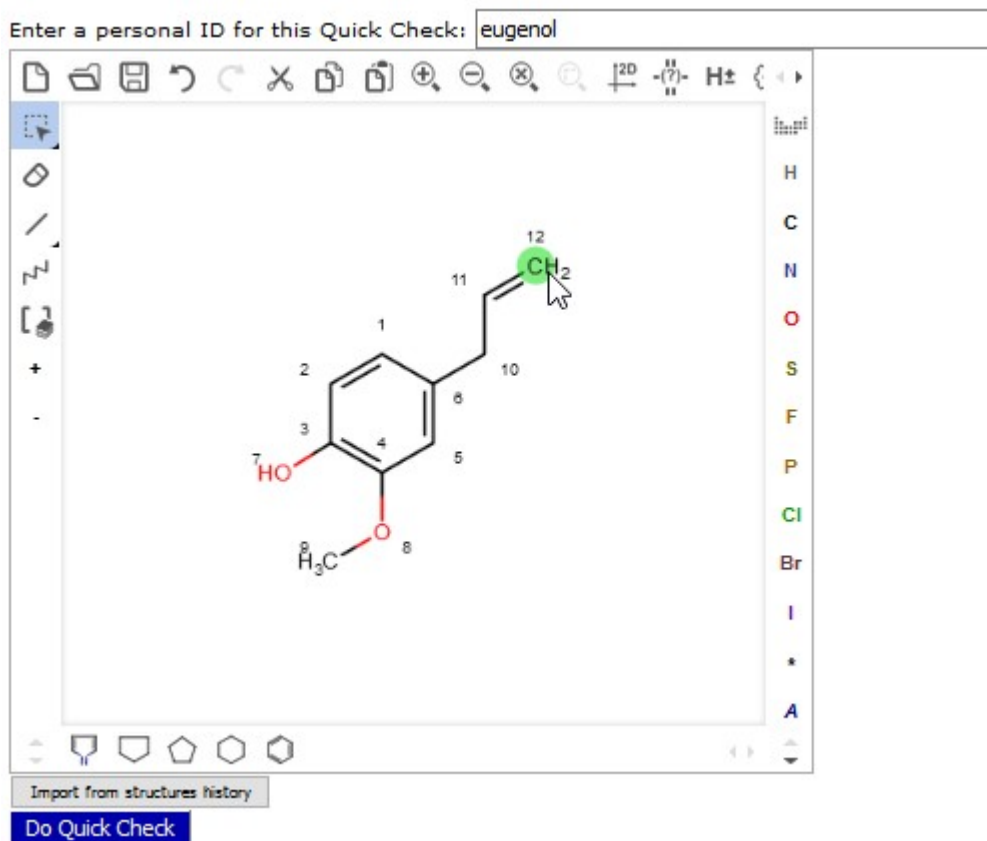


Wenn Sie sich mit Ihrem **Benutzernamen** einloggen, können Sie durchgeführte Quick Checks in Ihrem Account speichern und später wieder aufrufen. Außerdem können Sie den CSEARCH robot referee als zusätzliche Option einsetzen.

[Neue Registrierung](#)
(Only necessary for
contributing data)

Wenn Sie noch keinen Account haben, können Sie über den Link „Neue Registrierung“ einen anlegen.

4. Geben Sie die Struktur des Moleküls ein.



Zeichnen Sie die **Struktur** im Struktureditor. Alternativ können Sie auch SMILES- oder InChI-Codes über den Ordner-Button importieren. Sie können dem Quick Check im Textfeld an dieser Stelle einen Namen („personal ID“) geben.

5. Klicken Sie auf „Do Quick Check“ (optional)

Do Quick Check

Dadurch werden alle **Shift-Felder** entfernt, die für die Struktur nicht benötigt werden. Wenn Sie eingeloggt sind und eine „personal ID“ eingegeben haben, wird die **Struktur gespeichert**.

6. Geben Sie die chemischen Verschiebungen zu der Struktur ein

Atom No.	^{13}C Shift	Auto reassign
1	121.14	<input type="checkbox"/>
2	114.21	<input type="checkbox"/>
3		<input type="checkbox"/>

Geben Sie ^1H - und ^{13}C -Shifts in die jeweiligen Felder ein. Für CH_2 -Gruppen stehen Ihnen zwei Felder zur Verfügung. Wenn Sie das zweite Feld leer lassen, wird für beide Protonen der erste Shift angenommen.

ODER

Input list: [Input format](#)

```

146.39
143.85
137.81
131.91
121.14
115.53
114.21
111.05
55.84
39.90
  
```

Geben Sie eine **Shift-Liste** in das große Textfeld ein. Das Quick Check-Tool wird eine automatische Zuordnung vorschlagen.

7. Klicken Sie auf „Do Quick Check“

[Do Quick Check](#)

Das Quick Check-Tool vergleicht Ihre Eingaben mit der Vorhersage und **bewertet** Ihre Zuordnungen anhand eines Ampelschemas.

Atom No.	^{13}C Shift	Auto reassign
1	114.21	<input type="checkbox"/>
2	121.14	<input type="checkbox"/>
3	143.85	<input type="checkbox"/>
4	111.05	<input type="checkbox"/>
5	146.39	<input type="checkbox"/>
6	131.91	<input type="checkbox"/>
7		
8		
9	55.84	<input type="checkbox"/>
10	39.9	<input type="checkbox"/>
11	137.81	<input type="checkbox"/>
12	115.53	<input type="checkbox"/>

Wegen der schlechten Vorhersagbarkeit werden Heteroatom-gebundene Protonen nicht bewertet. Ihre Zuordnung kann aber der Vollständigkeit halber eingegeben werden.

¹ H Shift		Auto reassign 2 nd shift for diastereotopic atoms
6.7	●●● 6.83, diff: 0.13	<input type="checkbox"/>
6.86	●●● 6.65, diff: 0.21	<input type="checkbox"/>
6.69	●●● 6.66, diff: 0.03	<input type="checkbox"/>
5.52		<input type="checkbox"/>
3.88	●●● 3.87, diff: 0.01	<input type="checkbox"/>
3.33	●●● 3.33, diff: 0.00	<input type="checkbox"/>
5.96	●●● 5.93, diff: 0.03	<input type="checkbox"/>
5.06	●●● 5.06, diff: 0.03	<input type="checkbox"/>
		5.09

8. Korrigieren Sie einzelne Zuordnungen

Geben Sie hierfür die **korrigierten Shifts** in die entsprechenden Felder ein und klicken Sie erneut auf „Do Quick Check“.

ODER

4	<input type="text" value="111.05"/>	●●● 146.65, diff: 35.60	<input checked="" type="checkbox"/>
5	<input type="text" value="146.39"/>	●●● 111.30, diff: 35.09	<input checked="" type="checkbox"/>
6	<input type="text" value="131.91"/>	●●● 131.95, diff: 0.04	<input type="checkbox"/>

Input list: [Input format](#)

```
111.05
146.39|
```

Geben Sie die neu zuzuordnenden Shifts in das große Textfenster ein und wählen Sie „**Auto reassign**“ bei den Positionen, die von Quick Check neu zugeordnet werden sollen. Klicken Sie erneut auf „Do Quick Check“.

9. Rufen Sie gespeicherte Quick Checks auf

IDNMR | Kurzanleitung Quick Check

2016-05-02 17:04:17.0 [eugenol](#)
2016-04-28 17:37:02.0 [3-Ferbenzaldehyd](#)
2016-05-02 14:29:22.0 [indol](#)

Wenn Sie eingeloggt waren und Ihre Quick Checks durch Eingabe einer „personal ID“ **gespeichert** haben, werden die gespeicherten Datensätze unter dem Struktureditor angezeigt. Klicken Sie auf den Namen, um einen Datensatz aufzurufen.

Wenn ein CSEARCH report angefordert wurde, der zwischenzeitlich eingetroffen ist, kann dieser nach dem Aufruf des gespeicherten Eintrags abgerufen werden.