

**Protokoll des Treffens AG IT-Aspekte in Frankfurt am BMRZ am 28. Oktober 2013**

Sprecher

Prof. Dr. Harald Schwalbe

Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie  
N160 / 3.OG / Raum Nr. 314  
Goethe-University Frankfurt am Main  
Max-von-Laue-Str. 7  
60438 Frankfurt am Main, Germany

Telefon +49 69 798 29130  
Telefax +49 69 798 28515  
E-Mail [schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de](mailto:schwalbe@nmr.uni-frankfurt.de)

[www.g-nmr.de/](http://www.g-nmr.de/)

Datum: 28. Oktober 2013

**Teilnehmer**

Part. #	Name	Institut	E-Mail
A1	Marco Betz Martin Hähnke	BMRZ, Frankfurt	<a href="mailto:betz@nmr.uni-frankfurt.de">betz@nmr.uni-frankfurt.de</a> <a href="mailto:mhaehnke@nmr.uni-frankfurt.de">mhaehnke@nmr.uni-frankfurt.de</a>
A2/ C5	Rainer Haessner Sam Asami	BNMRZ, München/ Helmholtz München	<a href="mailto:rainer.haessner@tum.de">rainer.haessner@tum.de</a> <a href="mailto:sam.asami@tum.de">sam.asami@tum.de</a>
B5 B9	Volker Schmidts Christian Richter Julia Wirmer-Bartoschek	Univ. Darmstadt Univ. Frankfurt	<a href="mailto:vschmidts@thielelab.de">vschmidts@thielelab.de</a> <a href="mailto:ric@nmr.uni-frankfurt.de">ric@nmr.uni-frankfurt.de</a> <a href="mailto:wirmer@nmr.uni-frankfurt.de">wirmer@nmr.uni-frankfurt.de</a>
B11	Thomas Hackl Filipe Furtado Oliver Ohlenschläger Johannes Liermann Stefan Kuhn Jakob Lopez	Univ. Hamburg IPB Halle FLI Leibniz Uni Mainz nmrshiftdb2 Magic-Angle-Solutions	<a href="mailto:hackl@chemie.uni-hamburg.de">hackl@chemie.uni-hamburg.de</a> <a href="mailto:ffurtado@ipb-halle.de">ffurtado@ipb-halle.de</a> <a href="mailto:oliver@fli-leibniz.de">oliver@fli-leibniz.de</a> <a href="mailto:liermann@uni-mainz.de">liermann@uni-mainz.de</a> <a href="mailto:stefhk3@web.de">stefhk3@web.de</a> <a href="mailto:jakobilopez@gmail.com">jakobilopez@gmail.com</a>

**Tagesordnungspunkte**

1. IT-Aspekte im laufenden Betrieb einer NMR-Geräte-Infrastruktur
  - Buchung der Messzeit für interne wie externe Nutzer
  - Transparente Vergabe der Messzeit
  - Gemessene Daten bereitstellen (z.B. FTP)
  - Datensicherung bzw. Speicherung für gewisse Zeit
  - Transparente (automatisierte) Abrechnung der vergebenen Messzeiten
  - Monitoring der Geräteparameter

2. IT-Aspekte für den Nutzer einer NMR-Geräte-Infrastruktur
  - Zuordnung gemessener Daten/Auswertung zum Laborversuch
  - Datensicherung
  - “Gute wissenschaftliche Praxis”: Verknüpfung der Primärdaten mit der Veröffentlichung

### Fazit

Mit großer Übereinstimmung sehen die Teilnehmer den Bedarf, dass NMR-Daten in einem übergeordneten Kontext gespeichert werden sollten.

- **Hinterlegung von Primär-Daten zu ihren Publikationen**
- **Konsequente Nutzung der Primär-Daten in Peer-Review-Verfahren (z. B. automatische Plausibilitätsprüfung der Zuordnungen)**
- aber auch Wiederauffindung von Experimenten, unnötige Wiederholungen vermeiden
- Struktur (wenn möglich mit Zuordnung), Lsm, Feldstärke, Datum inklusive freier Textfelder (Tag-Suche) sollten enthalten sein.
  - Hier auch Sicherheitsaspekt (falls Probenröhrchen zerbrechen)

Vgl. hierzu auch e-Korrespondenz Wolfgang Baumann, 24.10.2013 (im Anhang)

Dies ist nicht Aufgabe der Gerätemanager allein, hier müssen alle Wissenschaftler, die mit NMR in Berührung kommen, angesprochen werden.

Hier ist auch eine Übereinstimmung mit den Zielen des DFG-geförderten Projekts RADAR (**R**esearch **D**ata **R**epositorium) zu sehen, das eine Forschungsdateninfrastruktur etablieren möchte.

Mögliche Ansprechpartner hierzu:

- Fachgruppe Magnetresonanz
- Liebig-Vereinigung der Organischen Chemie
- Tagung „Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie, 2014 in Erlangen

### Detailliertes Protokoll (Marco Betz)

Die Betriebskonzepte der NMR-Infrastrukturen teilen sich gemäß der täglichen Probenanzahl in zwei Gruppen:

1. Niedrige Probenanzahl bzw. Langzeit-Messungen sind eher im Bereich der Biologischen NMR zu finden. Bei 3-4 Geräten mit wenigen Nutzergruppen kann die Organisation der Messzeit auch „in Papierform“ erfolgen.
2. Routine-Analytik mit hohem Probendurchsatz (oft 100 pro Tag) z.B. für Organische, Anorganische und Technisch-Makromolekulare Chemie arbeiten vollautomatisiert. Nutzer sind oftmals gut eingewiesen und können dann Experimente selbst eintragen. Häufig wird die Funktionalität der Steuerungs-Software (z.B. BRUKER IconNMR) verwendet.

## Vorstellung einiger Besonderheiten einzelner Betriebskonzepte

- Fritz-Lipmann-Institut/Leibniz-Institut f. Altersforschung - Biologische NMR
  - Hat nur wenige externe, aber mehrere interne Nutzergruppen, daher Papier/Whiteboard zur Einteilung der Messzeit ausreichend.
  - Viele Projekte als Zusammenarbeit mit den umliegenden Arbeitskreisen.
  - Daten durch Back-ups auf Gruppen-eigener Rechnerinfrastruktur gesichert zusätzlich. Magnet-Band Archiv
    - Daten werden nicht gelöscht
    - Datenbestand über MySQL-Datenbank (selbstentwickelte Suchmaske) zugänglich/durchsuchbar
- Universität Köln (OC Analytik) – vollautomatisiertes Proben-NMR
  - Nutzer wählt freien Slot und trägt alles selbst in eine Datenmaske ein (u.a. auch Struktur!). Die Eingabemaske ersetzt IconNMR.
    - Set von vor-definierten Experimenten
  - Spektren inkl. der Probenangaben auf einen Server ⇒ Daten-Retrieval-System
    - Nach Summenformel, Text oder mit Teilstrukturen kann gesucht werden
- TU München (Anorganik, OC) – vollautomatisiertes Proben-NMR
  - Nutzer wählt freien Slot und trägt alles selbst in IconNMR ein → sequentielle Abarbeitung der Messungen
    - Studenten geben Probe+Probenezettel ab, TA arbeitet diese via IconNMR ab.
  - Daten durch Back-ups via Rechenzentrum gesichert
  - Keine Abrechnung der Messzeiten, Reparaturen / Wartung werden einvernehmlich von den beteiligten Arbeitsgruppen übernommen
- TU München (Biologische NMR)
  - Nutzer trägt sich in eine ‚*booking form*‘ ein – der Gerätemanager entscheidet über die Zeiteinteilung
    - [ELOG software](#)
- Uni Frankfurt (AC, OC) – vollautomatisiertes Proben-NMR
  - Nutzer wählt Gerät/freien Slot und trägt alles selbst in IconNMR ein → sequentielle Abarbeitung der Messungen gemäß Zeitbedarf: Kürzere zuerst, längere abends/nachts
    - Arbeitsgruppen-Account
  - Spezielle Fragenstellungen, komplexe Experimente durch den Gerätemanager
  - Bereitstellung der Daten durch Freigabe auf einem Server (Back-up durch den HRZ-Service, Daten werden nicht gelöscht)
  - Abrechnung der Kosten durch Summation der Messzeiten der Arbeitsgruppen-Accounts (von ‚Probe rein‘ bis ‚Probe raus‘)

- Uni Frankfurt (Biologische NMR)
  - Messzeit-Vergabe mit selbst-programmiertem ‚Booking-Modul‘ (on-line sichtbar) – der Gerätemanager entscheidet letztinstanzlich in regelmäßigen Besprechungen in Anwesenheit der Nutzer
  - Daten sind dann durch Back-ups gesichert, wenn die Nutzer sie auf ihre jeweiligen Server gezogen haben.
  - Keine Back-ups der Konsolen-Computer
  
- Uni Mainz (OC) – vollautomatisiertes Proben-NMR
  - Nutzer wählt selbst Gerät/freien Slot der 2 Routine-Geräte und trägt alles selbst in IconNMR ein → Abarbeitung der Messungen gemäß Zeitbedarf: Kürzere zuerst, längere abends/nachts
  - Spezielle Fragenstellungen, komplexe Experimente auf gesonderten NMR-Geräten durch den Gerätemanager
  - Kostenmodell (Abrechnung der Nutzungszeiten) erlaubt es, Wartung und Reparatur zu begleichen
  - Robocopy-Jobs auf einem Fileserver holen neue Daten in kurzem Takt von den Konsolen-Computern. Der Zugriff durch die Benutzer und die Archivierung erfolgt auf dem Fileserver.
  - Tägliche, inkrementelle Sicherung der Konsolen-Computer. Images werden nach 3 Wochen gelöscht.
  
- Uni Hamburg (OC)
  - An einem Teil der Geräte tragen sich die Nutzer in selbst-programmiertes Web-Form ein.
  - Der restliche Teil der Geräte wird über (Papier-) Messzettel organisiert.
    - Nutzer geben Proben + Probenzettel ab, TA arbeitet diese via IconNMR ab.
    -

#### Leibniz-Institut (Halle): RADAR – eine Forschungsdateninfrastruktur

Das DFG-geförderte Projekt RADAR möchte eine Forschungsdateninfrastruktur etablieren, um das in vielen Disziplinen noch fehlende Forschungsdatenmanagement zu unterstützen

- Mit RADAR soll die Verfügbarkeit und die nachhaltige Bewahrung von Forschungsdaten in der Wissenschaft verbessert werden.
- Eine Forschungsdateninfrastruktur zur Speicherung und Publikation wissenschaftlicher Daten aufgebaut werden
  - Forschungsdaten können als Bestandteil einer klassischen Publikation oder als eigenständige Publikation veröffentlicht und durch die DOI-Registrierung dauerhaft verfügbar gemacht werden.
- Entwicklung eines langfristigen Geschäftsmodells

Partner: Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur (FIZ Karlsruhe), das Steinbuch Centre for Computing (SCC) des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT), die Technische Informationsbibliothek Hannover (TIB) sowie Prof. Bein von der Ludwig-

Maximilians-Universität München und Prof. Wessjohann vom Leibniz-Institut für Pflanzenbiochemie Halle.

### Nächste Aufgaben

1. Nächstes **Treffen im Mai 2014**
2. Die Überlegungen zum Forschungsdaten-Management auf der Tagung [„Praktische Probleme der Kernresonanzspektroskopie, 13. - 14. Januar 2014, in Erlangen](#) präsentieren (z.B. Liermann)
3. Die Überlegungen über MARS-Newsletter an die [FGMR-Community](#) zu verteilen
4. Die [Liebig-Vereinigung für Organische Chemie - GDCh](#) einbeziehen

### Anhänge

1. Powerpoint als Fahrplan während des Meetings



2013-10-28  
Arbeitsgruppen-Treff

2. Korrespondenz Wolfgang Baumann 24.10.2013



Antw\_ [G\_nmr]  
G-NMR Arbeitsgruppe