



Doctoral Thesis

**Beitrag zur Automatisierung im organisch-analytischen
Laboratorium
computerunterstützte Dokumentation spektroskopischer Daten**

Author(s):

Meili, Jürg

Publication Date:

1975

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000086416> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss ETH 5521

**Beitrag zur Automatisierung
im organisch-analytischen Laboratorium.
Computerunterstützte Dokumentation
spektroskopischer Daten**

ABHANDLUNG

zur Erlangung
des Titels eines Doktors der technischen Wissenschaften
der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZÜRICH

vorgelegt von

JUERG MEILI
dipl. chem. ETH
geboren am 9. Dezember 1946
von Zürich

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. W. Simon, Referent
P.-D. Dr. J.T. Clerc, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich
1975

9. ZUSAMMENFASSUNG

Ein Konzept für eine Datenbank, die Teil eines spektroskopischen Informationssystems ist, wurde erarbeitet. Für die Datenbasis wurden die Dateien so definiert, dass sie den momentanen und zukünftigen Bedürfnissen des Chemikers genügen. Sie werden einerseits aufgrund ihrer Funktionen (Quellen- und Arbeitsdateien), andererseits aufgrund ihres Inhalts klassiert (Dateien der einzelnen spektroskopischen Methoden, Datei der kombinierten spektroskopischen Methoden). In den Quellen- und den primären Arbeitsdateien werden ausser jenen Daten, die mit grosser Sicherheit irrelevant sind, alle erhältlichen spektralen Daten einer Verbindung gespeichert. Für die Angabe der Struktur einer Verbindung wurden die Nomenklatur, Fragmentcodes, topologische Codes und lineare Notationen auf ihre Eignung in einer spektroskopischen Datenbank überprüft. Für den Zugang zu den spektralen Daten in den Dateien wurden geeignete Indexe ausgewählt.

Die Realisation der Datenbank umfasst die Definition der Quellen- und Arbeitsdateien für die Massenspektroskopie, die ^{13}C -Kernresonanzspektroskopie, die Infrarotspektroskopie und die Spektroskopie mit ultravioletter und sichtbarer Strahlung. Die für den Zugang zu den spektralen Daten der Sammlung benötigten Indexdateien wurden definiert und erstellt. Die Datenbank ist zur Zeit mit Daten aus der Massenspektrometrie und der ^{13}C -Kernresonanzspektroskopie dokumentiert. Die für die Verarbeitung dieser Daten benötigten Computerprogramme sind erstellt und werden regelmässig eingesetzt. Für den Unterhalt der Datenbasis steht ein Programmpaket zur Verfügung, das mit einer einfachen Befehlsstruktur die Korrektur und Erweiterung der Dateien erlaubt. Die Programme für den Benutzer ermöglichen die tabellarische und die graphische Spektrendarstellung. Die Suche nach Referenzspektren aufgrund bekannter spektraler Daten ist möglich.