



NMR pur

Inzwischen gibt es weit mehr als hundert auf NMR bezogene Seiten im Internet. Neben den hier vor einiger Zeit vorgestellten Portalen in der Domain „de“^[1] sticht ein Portal aus dem übrigen Angebot hervor, vor allem durch die absolute Nüchternheit und die rein text-orientierte Aufmachung: Der „NMR Information Server“, früher an der Universität Florida beheimatet, ist jetzt Teil eines kommerziellen Angebots und zu finden unter <http://spincore.com/nmrinfo/>. Hier drehen sich keine Spins, laufen keine Äffchen über das Feld und auch sonst ist die Seite frei von jeglichen Gimmicks, es ist pure Textinformation und eine ausgezeichnete Link-Sammlung zum Thema NMR, die sehr übersichtlich geordnet angeboten wird. Richtig erholsam im Vergleich zu anderen Websites wird man hier auch von kei-

nerlei bunter Werbung erdrückt. Frei von allem graphischen Aufwand werden die Seiten extrem schnell geladen und durch den klaren und übersichtlichen Aufbau kommt man mit Abstand am schnellsten zur gesuchten Information.

Die Hauptseite (Abbildung 1) zeigt auf ihrem Hauptfeld die jeweils neuesten Nachrichten und mit Datum versehenen Informationszugänge und endet mit der Aufforderung „Contribute your News“. Der linke Balken der Hauptseite liefert die weiter verfügbaren Unterthemen NMR, MRI, ESR und NQR, bei denen sich Vorlesungsmanuskripte, Kursmaterial, Tutorials etc. zur Magnetischen Resonanz in Fülle finden lassen. Zugang zu den virtuellen Spektrometern im Netz wird geboten sowie zu Spektrensammlungen und anderem Referenzmaterial wie z. B. NMR-Periodensystemen. Weitere Verweise am linken Rand der Hauptseite führen zu „Archives“, „Facilities“, „Gallery“, „Journals“, „Meetings“, „Organizations“, „Positions“, „Software“, „Vendors“ und „Who is Who“. Um gleich mit dem letzten anzufangen, die Link-Liste „Who is who“ führt direkt zu den NMR-Arbeitsgruppen, naturgemäß mit US-amerikanischen Präferenzen, aber geordnet nach Ländern und innerhalb der Länder alphabetisch. In dieser fehlen allerdings einige wesentliche Arbeitsgruppen und einige geprüfte Links waren tot. Insgesamt hat dieses Portal das gleiche Pro-

blem wie die meisten Web-Portale: Knapp 10% aller angebotenen Verweise waren zum Zeitpunkt dieses Berichts nicht mehr verfügbar. Die Software-Linkliste (Abbildung 2) ist ausgezeichnet und stellt m. E. derzeit mit die beste

Software

NMR Information Server: Software

DATA PROCESSING AND ANALYSIS

- matNMR** - matNMR is a highly flexible processing tool for NMR and EPR spectra under MATLAB (all platforms). It can read in binary EID's from most commercial spectrometers, process any 1D or 2D spectrum and uses all graphical capabilities that MATLAB has to offer. The program is fully GUI and at all times allows the user to profit from MATLAB's numerical powers (courtesy of Jacco van Beek, ETH Zurich).
- NMRPipe** - NMRPipe provides comprehensive facilities for Fourier processing of spectra up to four dimensions, as well as a variety of facilities for spectral display and analysis. It is currently used in over 300 academic and commercial laboratories (courtesy of the Ad Baar group).
- MostReC** - MostReC 2.0 is a program designed to process and plot 1D NMR spectra on PC's running Windows 95/98/NT 4.0. It imports files from most spectrometers and includes a number of useful tools (courtesy P. Javier Sardana, Universidad de Santiago de Compostela, Spain).
- IRAM** - Nuclear Magnetic Resonance (NMR) data processing program for the Macintosh by Philipe C. Rodriguez

Abbildung 2. NMR-Softwareliste.

Sammlung von NMR-Software im Internet dar. Besonders anschauenswert ist die Photogalerie bekannter NMR-Persönlichkeiten mit eindrucksvollen Fotos in guter Qualität. Wichtig für alle, die auf dem Gebiet der NMR experimentell arbeiten, ist der Zugang zu den Archiven der einzelnen Newsgruppen, in denen man nachlesen kann, ob das instrumentelle Problem, mit dem man gerade zu tun hat, schon woanders gelöst ist.

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:
angewandte@wiley-vch.de

Dieses Portal gewinnt keinen Schönheits- oder Aufmachungspreis, es ist für mich jedoch ein sehr effektiver Zugang zu NMR-Informationen.

Stefan Berger
Universität Leipzig

[1] *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 993; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 965

NMR Information Server News

NMR MRI ESR NQR

Archives Facilities Gallery Journals Meetings Organizations Positions Software Vendors Who's Who

Biology Chemistry Physics

Info/Feedback

NMR Information Server

Visit SpinCore Technologies, Inc. - the maker of **PulseBlaster®**

September 7, 2001 - Methods
NMR In Inhomogenous Fields

September 5, 2001 - Software
Have it All™ NMR
 from Bio-Rad

September 4, 2001 - Vendors
Process NMR
Associates, LLC

August 24, 2001- Call For Abstracts
SEMRC

August 8, 2001- Symposium
Biomolecular NMR

Abbildung 1. Absolute Nüchternheit: „NMR Information Server“.

Für weitere Informationen besuchen Sie:
http://spincore.com/nmrinfo/
 oder nehmen Sie Kontakt auf mit
nmrinfo@spincore.com