

微谱数据使用手册

上海微谱信息技术有限公司

Shanghai Micronmr Infor. Technology Co., Ltd.

上海微谱信息技术有限公司，致力于有机化合物核磁共振碳谱数据库的建设，现已建成世界最大的有机化合物碳谱数据库，为从事中药现代化研究、有机合成和药物开发的研究人员提供信息查询服务，帮助他们快速确定已知化合物和新化合物的结构，节省研究时间和经费，提高科研效率，为医药事业和人类健康做点力所能及的事。

公司在成长的过程中，得到复旦大学以及众多研究人员的支持和帮助，在此表示真挚的感谢！

上海微谱信息技术有限公司

地址：上海市杨浦区国权北路1688弄湾谷科技园69号A6幢10F楼A07室

邮编：200437

电话：021-61736083

E-mail: micronmr@126.com

联系人：刘女士 13482579899

公司网站：<http://www.nmrdata.com>

目 录

微谱数据的特色	1
数据库的登录.....	1
¹³ C-NMR 数据检索.....	2
精确查询.....	2
模糊查询.....	2
深度查询.....	2
基团查询.....	3
不精确库查询.....	3
精确查询举例.....	3
化合物相关信息检索.....	5
化合物名称检索.....	5
作者名称检索.....	5
植物名称检索.....	5
分子式检索.....	5
已收录的期刊.....	7

微谱数据的特色

1. 全球最大的有机化合物碳谱数据库

现收录有机化合物 111 余万个，每周更新。

2. 查询方法多样化

提供五种碳谱数据查询方式：精确查询、模糊查询、深度查询、基团查询、不精确库查询。

提供四种关键词检索：化合物名称、分子式、作者、植物名称(属名或种名)。

3. 贴心的查询算法

特有的查询算法，保证用户通过我们的平台，能得到最相关的结果。

4. 数据准确

多源于国内外公开发表的著名学术期刊论文，且采用先进的数据采集流水线，保证了库中数据的准确性。

5. 查询简单、易于操作

用户只需按照由小至大的顺序，输入碳谱数据，点击查询按钮，即可得出您想要的结果。

数据库的登录

1. 进入 <http://www.nmrdata.com>
2. 高校用户在网站的右上角，会出现 按钮，点击即可进入高校查询界面如下图，或直接进入 <http://www.nmrdata.com/Colleges.aspx>

^{13}C -NMR 数据检索

提供五种碳谱数据查询方式：精确查询、模糊查询、深度查询、基团查询和不精确库查询，查询界面见图 1。

数据输入要求：在数据输入时，需按由小至大的顺序，数字间用英文状态下(半角)的逗号隔开，中间不要有空格。

溶剂选择：您可以选择溶剂，也可以采用系统默认值。

容差选择：容差为假定两个数据相同时，所允许的差值；如当容差为 2 时，系统认为 21.5 和 23.4 是相同的。精确查询中系统默认容差为 0.5，其他四种查询中系统默认容差为 1。您可以采用系统默认值，也可以自行输入容差值，但不要大于 2。当查询结果不理想时，可增大容差值；容差值越大，查询到的化合物数量会越多。



图 1. ^{13}C -NMR 查询界面

精确查询：用于快速确定已知化合物的结构。

模糊查询：用于帮助确定新化合物或已知化合物的结构，可从库中查询出具有相似结构的一系列化合物。

深度查询：用于查找具有相似结构的化合物；与模糊查询比较，用户需输入碳原子的个数。在设计模糊查询时，为了提高查询速度，我们做了一些筛选，可能部分具有相似结构的化合物被剔除了。深度查询可对模糊查询进行补充。

基团查询：针对少量 ^{13}C -NMR 数据进行查询。例如，您在 ^{13}C -NMR 数据中发现了一个 226 的值，想了解该碳原子的化学环境，可以通过查询 226 这个数值，即能得到碳谱中包含 226 的化合物，以及相关的信息。**在基团查询中，输入的数值最多为 6 个。**

不精确库查询：文献中一些化合物的部分碳谱值仅给出一个相对范围，不精确库

是对这些化合物进行查询的；例如，对于长链 CH_2 基团的化合物，大部分文献都没有对这些长链 CH_2 的 ^{13}C -NMR 数值做出精确的归属，而是给出一个范围值。

精确查询举例

由小至大数输入数据：

77.7,80.3,114.2,114.7,115.9,118.1,122.7,123.8,124.9,124.9,125.3,144.4,144.5,144.8,149,151.5,172.2,195.8

然后点击下方的 **13C NMR** 查询按钮(数字间用英文状态下的逗号隔开，见图 1)，出现图 2，可得到化合物的一系列相关信息，如名称，分子式，发表的期刊，论文题目，作者等。



图 2. 精确查询结果

单击图 2 中的 **structure**， **^{13}C NMR**，**碳谱模拟图**，可以得到该化合物的化学结构(图 3)， ^{13}C NMR 原始数据(图 4)及 ^{13}C NMR 的模拟图(图 5)。

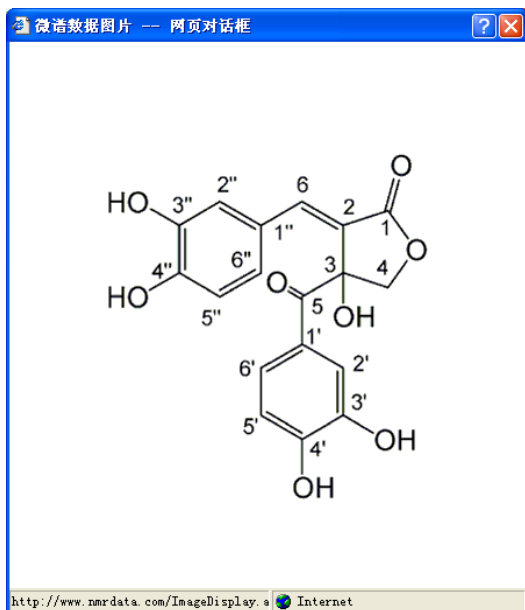


图 3. 化合物的结构

溶剂	Position data
	1 172.2
	2 123.8
	3 80.3
	4 77.7
	5 195.8
	6 144.4
CD3OD	1' 124.9
	2' 115.9
	3' 144.5
	4' 151.5
	5' 114.2
	6' 122.7
	1'' 124.9
	2'' 118.1
	3'' 144.8
	4'' 149
	5'' 114.7
	6'' 125.3

图 4. 化合物的原始 ^{13}C -NMR 数据

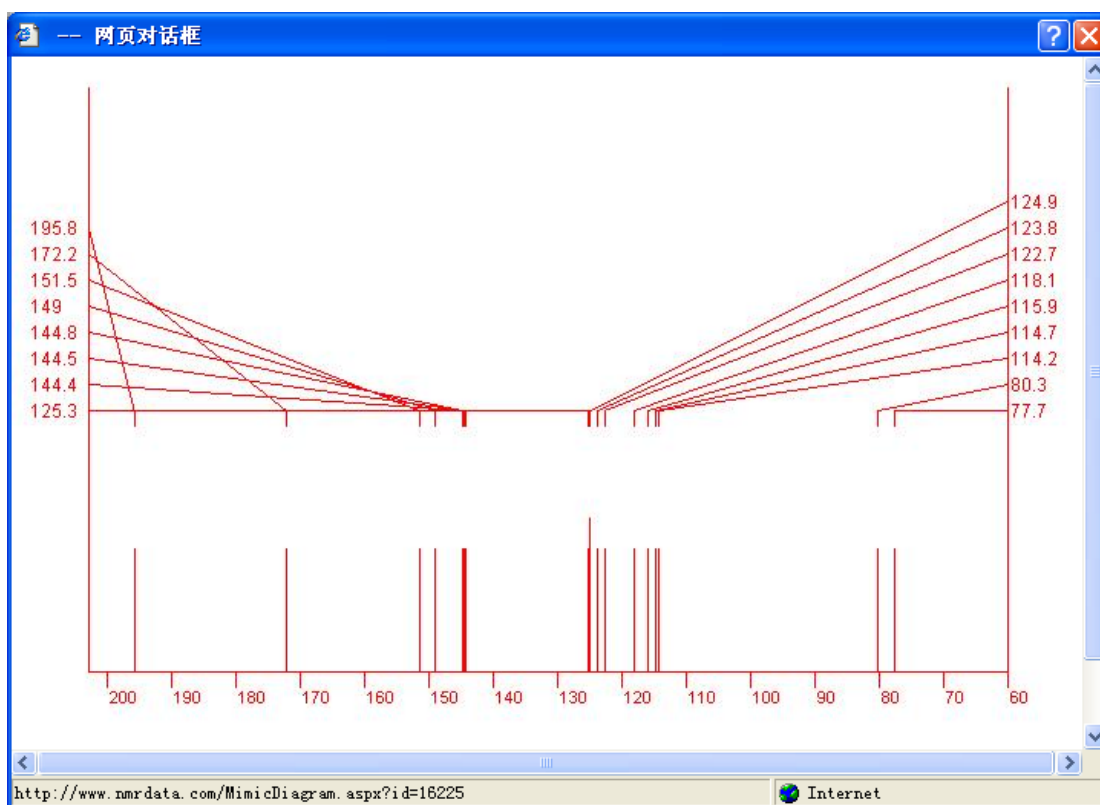


图 5. ^{13}C -NMR 模拟图

化合物相关信息检索

提供以下四种关键词检索：**化合物名称**、**作者**、**植物名称**(属名或种名)和**分子式**，检索界面见图 6。

化合物名称检索：尽量采用英文名称，当存在通俗名时(如，gomisin A)，尽量以通俗名进行检索。图 7 为以 japonicone 作为化合物名称的检索结果。

作者检索：由于各个期刊的作者格式可能不一样，进行检索时，要适当变换形式。图 8 为以我国著名的 Zheng-tao Wang 教授为作者名称的检索结果。

植物名称检索：以植物属名(如，*Kadsura*)，或种名(如，*Kadsura induta*)进行检索，不要加命名人。图 9 为以 *Corydalis* 作为植物属名的检索结果。

分子式检索：查询时，请按 C、H、O、N 的顺序，如 C₂₄H₃₂O₇N₂。文献一些化合物没有给出分子式，我们暂时还没对这些化合物的分子式进行补充，因此该检索功能仅能查找到文献中明确给出分子式的那些化合物。

注：以上查询尽量不要采用**中文名称**进行检索，英文输入时不区分大小写。



图 6. 化合物相关信息检索界面



图 7. 以 clinopodiside 为化合物名称的检索结果

化合物详细-核磁共振波谱数据库(13C-NMR库) - Microsoft Internet Explorer

地址(D) http://www.nmrdata.com/ChemicalSearch.aspx

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微谱数据

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

zheng-tao wang 检索

查询结果: 搜索 zheng-tao wang 获得约 107 条结果

(1a,2β,3β,4R*,5α,6α)-3,6,9-tris[(angeloyl)oxy]bisabol-10(15)-ene-2,4,5,7,11-pentol C₃₀H₄₈O₁₁
Helvetica Chimica Acta 2007 Vol. 90 101
Two New Sesquiterpenes from Ligularia lankongensis
Ai-Min Tan, Hong-Ping He, Mian Zhang, Zheng-Tao Wang, and Xiao-Jiang Hao
Structure 13C NMR

(3α,7β)-3,7,29-trihydroxymultiflor-8-ene-3,29-diyl dibenzoate C₄₄H₆₈O₅
Helvetica Chimica Acta 2005 Vol. 88 2617
Multiflorane Triterpene Esters from the Seeds of Trichosanthes kirilowii
Tao Wu, Xue-Mei Cheng, S.W. Annie Bligh, Gui-Xin Chou, Zheng-Tao Wang, Alan Bashall, and Chris Branford-White
Structure 13C NMR

(3α)-3,29-dihydroxy-7-oxomultiflor-8-ene-3,29-diyl dibenzoate C₄₄H₆₆O₅
Helvetica Chimica Acta 2005 Vol. 88 2617
Multiflorane Triterpene Esters from the Seeds of Trichosanthes kirilowii
Tao Wu, Xue-Mei Cheng, S.W. Annie Bligh, Gui-Xin Chou, Zheng-Tao Wang, Alan Bashall, and Chris Branford-White
Structure 13C NMR

图 8. 以 Zheng-tao Wang 为作者名称的检索结果

化合物详细-核磁共振波谱数据库(13C-NMR库) - Microsoft Internet Explorer

地址(D) http://www.nmrdata.com/ChemicalSearch.aspx

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微谱数据

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

corydalis 检索

查询结果: 搜索 corydalis 获得约 128 条结果

dehydroisoapocavidine C₂₀H₁₉NO₅
Chemistry & Biodiversity 2008 Vol. 5 777
Alkaloids from Corydalis saxicola and Their Anti-Hepatitis B Virus Activity
Hui-Liang Li, Ting Han, Run-Hui Liu, Chuan Zhang, Hai-Sheng Chen, and Wei-Dong Zhang
Structure 13C NMR

1-formyl-5-methoxy-6-methylindoline C₁₁H₁₃NO₂
Chemistry & Biodiversity 2008 Vol. 5 777
Alkaloids from Corydalis saxicola and Their Anti-Hepatitis B Virus Activity
Hui-Liang Li, Ting Han, Run-Hui Liu, Chuan Zhang, Hai-Sheng Chen, and Wei-Dong Zhang
Structure 13C NMR

1-formyl-2-hydroxy-5-methoxy-6-methylindoline C₁₁H₁₃NO₃
Chemistry & Biodiversity 2008 Vol. 5 777
Alkaloids from Corydalis saxicola and Their Anti-Hepatitis B Virus Activity
Hui-Liang Li, Ting Han, Run-Hui Liu, Chuan Zhang, Hai-Sheng Chen, and Wei-Dong Zhang
Structure 13C NMR

图 9. 以 Corydalis 为植物属名的检索结果

收录的期刊

正在收录和收录完的国内外期刊达 600 余种，重点为天然产物方面的期刊，如 Journal of Natural Products, Phytochemistry, Planta Medica, Chemistry of Natural Compounds, Journal of Asian Natural Products Research, Natural Product Communications, Natural Product Research, Phytochemistry Letters, Records of Natural Products, Chemical & Pharmaceutical Bulletin 等都已从创刊起收录至最新一期。