

# 借助微谱数据快速确定化合物结构

马文辉 博士

# 核磁共振和诺贝尔奖

- 2003 年诺贝尔生理和医学奖:美国化学家**保罗·劳特布尔**和英国物理学家**彼得·曼斯菲尔德**, 核磁共振成像技术领域的突破性成就。
- 2002年度诺贝尔化学奖:瑞士核磁共振波谱学家**维特里然**、日本科学家**田中耕一**和美国科学家**约翰·芬恩**, 发明利用核磁共振技术测定溶液中生物大分子三维结构的方法;
- 1991 年度诺贝尔化学奖:瑞士化学家**恩斯特**, 发明傅立叶变换核磁共振分光法和二维及多维的核磁共振技术;
- 1952 年度诺贝尔物理学奖:美国物理学家**布洛赫**和**珀塞耳**, 发现和发  
展核磁精密测量新方法;
- 1944年度诺贝尔物理学奖:美国物理学家**拉比**, 应用共振方法测定了原子核的磁矩和光谱的超精细结构;
- 1943年度诺贝尔物理学奖:美国物理学家**斯特恩**, 发展分子束的方法和发现质子磁矩。



## 碳谱查询

精确查询

模糊查询

深度查询

基团查询

不精确库

## 信息查询

化合物名称

分子式

作者

植物名称

# 碳谱查询界面

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位: 微谱数据

NMR库化合物总数为: 916981 个  
更新时间: 2017/3/30 09:08:21

 **微谱数据**  
www.nmrdata.com

按**从小到大**顺序输入, 数字间用英文**半角逗号(,)**分隔例如:  
如: 21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2 相似度  % (>=50%)  Nat.  Syn.

13C NMR检索

## 五种碳谱查询简要介绍

- **精确查询**：用以快速确定**已知化合物**的结构。
- **模糊查询**：用以帮助确定**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**：用以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 $^{13}\text{C}$ -NMR数据进行查询。例如，您在 $^{13}\text{C}$ -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 $\text{CH}_2$ 基团的化合物，大部分文献都没有对这些长链 $\text{CH}_2$ 的 $^{13}\text{C}$ -NMR数值做出精确的归属，而是给出一个范围值。

- **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**。可以采用系统默认值，也可以自行输入容差值，**但应小于（或等于）2**。
- 当查询结果不理想时，**可将容差设为2**；容差值越大，查询到的化合物数量会越多。

➤ **溶剂**：溶解样品时所用的氘代试剂，如 CDC13, CD3SOCD3, CD3OD等

➤ **溶剂选择**：

可以从中选择所用的溶剂，也可以采用系统默认值（将对库中所有化合物的值进行比较）

**建议采用系统默认值**，因为部分文献没有给出氘代溶剂名称

- 从小至大，中间用英文(半角)逗号分开（精确到小数点后1位即可）如：  
21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2
- 尽可能去除杂峰
  1. 氘代溶剂峰
  2. 未完全蒸干的残留溶剂峰
  3. 制备板上的杂质峰



# 去除氘代溶剂峰和残留溶剂峰的两篇重要文献

## NMR Chemical Shifts of Common Laboratory Solvents as Trace Impurities

Hugo E. Gottlieb,\* Vadim Kotlyar, and Abraham Nudelman\*

*Department of Chemistry, Bar-Ilan University, Ramat-Gan 52900, Israel*

*Received June 27, 1997*

*J. Org. Chem.* **1997**, *62*, 7512–7515

## NMR Chemical Shifts of Trace Impurities: Common Laboratory Solvents, Organics, and Gases in Deuterated Solvents Relevant to the Organometallic Chemist

Gregory R. Fulmer,<sup>\*,†</sup> Alexander J. M. Miller,<sup>‡</sup> Nathaniel H. Sherden,<sup>‡</sup> Hugo E. Gottlieb,<sup>§</sup> Abraham Nudelman,<sup>§</sup> Brian M. Stoltz,<sup>‡</sup> John E. Bercaw,<sup>‡</sup> and Karen I. Goldberg<sup>†</sup>

*Organometallics* **2010**, *29*, 2176–2179  
DOI: 10.1021/om100106e

<sup>†</sup>*Department of Chemistry, University of Washington, Box 351700, Seattle, Washington 98195-1700,*  
<sup>‡</sup>*Arnold and Mabel Beckman Laboratories of Chemical Synthesis and Caltech Center for Catalysis and Chemical Synthesis, Division of Chemistry and Chemical Engineering, California Institute of Technology, Pasadena, California 91125, and*  
<sup>§</sup>*Department of Chemistry, Bar Ilan University, Ramat Gan 52900, Israel*

*Received February 11, 2010*

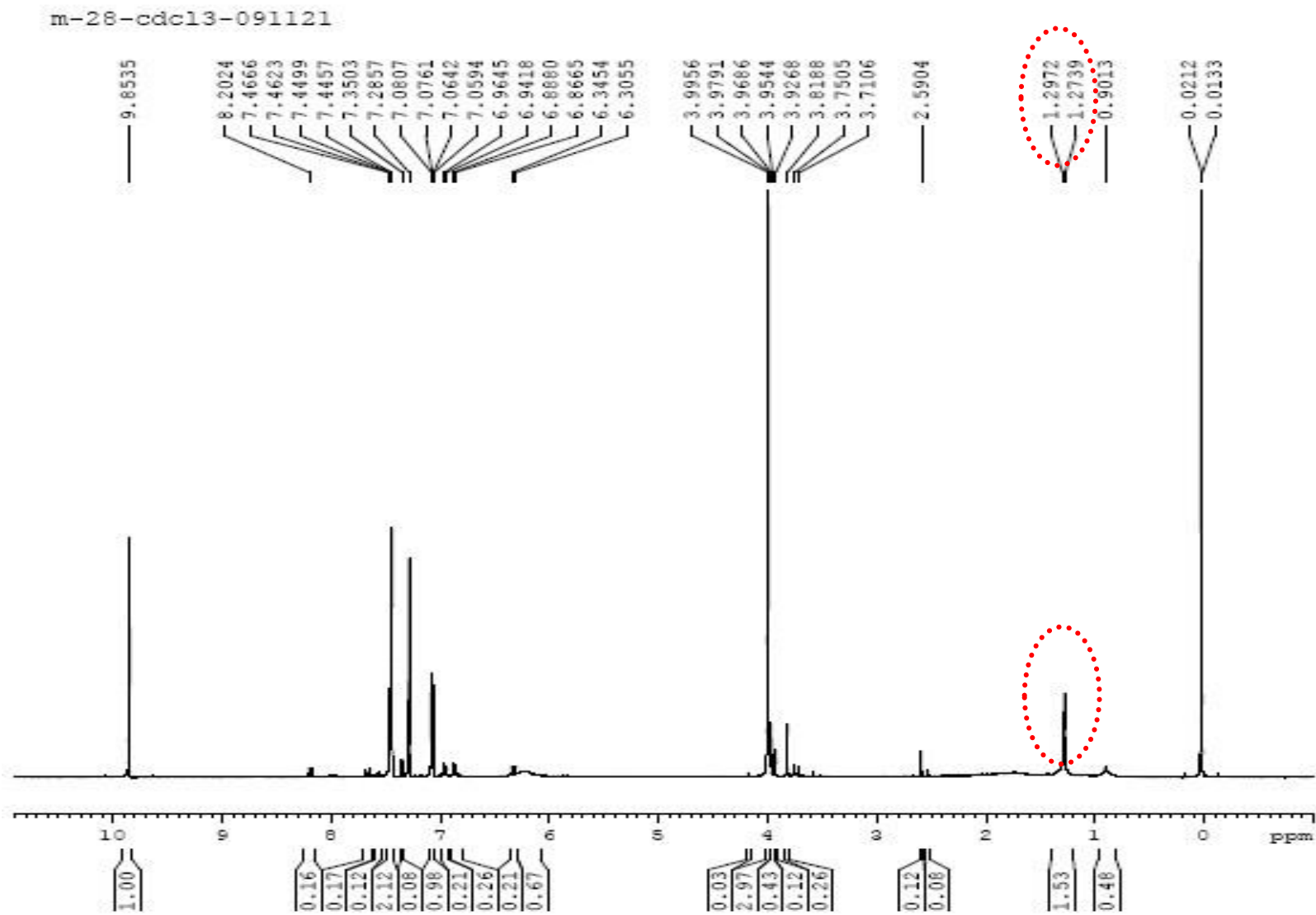
Table 2.  $^{13}\text{C}$  NMR Data<sup>a</sup>

		$\text{CDCl}_3$	$(\text{CD}_3)_2\text{CO}$	$(\text{CD}_3)_2\text{SO}$	$\text{C}_6\text{D}_6$	$\text{CD}_3\text{CN}$	$\text{CD}_3\text{OD}$	$\text{D}_2\text{O}$
solvent signals		$77.16 \pm 0.06$	$29.84 \pm 0.01$ $206.26 \pm 0.13$	$39.52 \pm 0.06$	$128.06 \pm 0.02$	$1.32 \pm 0.02$ $118.26 \pm 0.02$	$49.00 \pm 0.01$	
acetic acid	CO	175.99	172.31	171.93	175.82	173.21	175.11	177.21
	$\text{CH}_3$	20.81	20.51	20.95	20.37	20.73	20.56	21.03
acetone	CO	207.07	205.87	206.31	204.43	207.43	209.67	215.94
	$\text{CH}_3$	30.92	30.60	30.56	30.14	30.91	30.67	30.89
acetonitrile	CN	116.43	117.60	117.91	116.02	118.26	118.06	119.68
	$\text{CH}_3$	1.89	1.12	1.03	0.20	1.79	0.85	1.47
benzene	CH	128.37	129.15	128.30	128.62	129.32	129.34	
<i>tert</i> -butyl alcohol	C	69.15	68.13	66.88	68.19	68.74	69.40	70.36
	$\text{CH}_3$	31.25	30.72	30.38	30.47	30.68	30.91	30.29
<i>tert</i> -butyl methyl ether	$\text{OCH}_3$	49.45	49.35	48.70	49.19	49.52	49.66	49.37
	C	72.87	72.81	72.04	72.40	73.17	74.32	75.62
	$\text{CCH}_3$	26.99	27.24	26.79	27.09	27.28	27.22	26.60
BHT	C(1)	151.55	152.51	151.47	152.05	152.42	152.85	
	C(2)	135.87	138.19	139.12	136.08	138.13	139.09	
	CH(3)	125.55	129.05	127.97	128.52	129.61	129.49	
	C(4)	128.27	126.03	124.85	125.83	126.38	126.11	
	$\text{CH}_3\text{Ar}$	21.20	21.31	20.97	21.40	21.23	21.38	
	$\text{CH}_3\text{C}$	30.33	31.61	31.25	31.34	31.50	31.15	
	C	34.25	35.00	34.33	34.35	35.05	35.36	
chloroform	CH	77.36	79.19	79.16	77.79	79.17	79.44	
cyclohexane	$\text{CH}_2$	26.94	27.51	26.33	27.23	27.63	27.96	
1,2-dichloroethane	$\text{CH}_2$	43.50	45.25	45.02	43.59	45.54	45.11	
dichloromethane	$\text{CH}_2$	53.52	54.95	54.84	53.46	55.32	54.78	
diethyl ether	$\text{CH}_3$	15.20	15.78	15.12	15.46	15.63	15.46	14.77
	$\text{CH}_2$	65.91	66.12	62.05	65.94	66.32	66.88	66.42
diglyme	$\text{CH}_3$	59.01	58.77	57.98	58.66	58.90	59.06	58.67
	$\text{CH}_2$	70.51	71.03	69.54	70.87	70.99	71.33	70.05
	$\text{CH}_2$	71.90	72.63	71.25	72.35	72.63	72.92	71.63
1,2-dimethoxyethane	$\text{CH}_3$	59.08	58.45	58.01	58.68	58.89	59.06	58.67
	$\text{CH}_2$	71.84	72.47	17.07	72.21	72.47	72.72	71.49
dimethylacetamide	$\text{CH}_3$	21.53	21.51	21.29	21.16	21.76	21.32	21.09

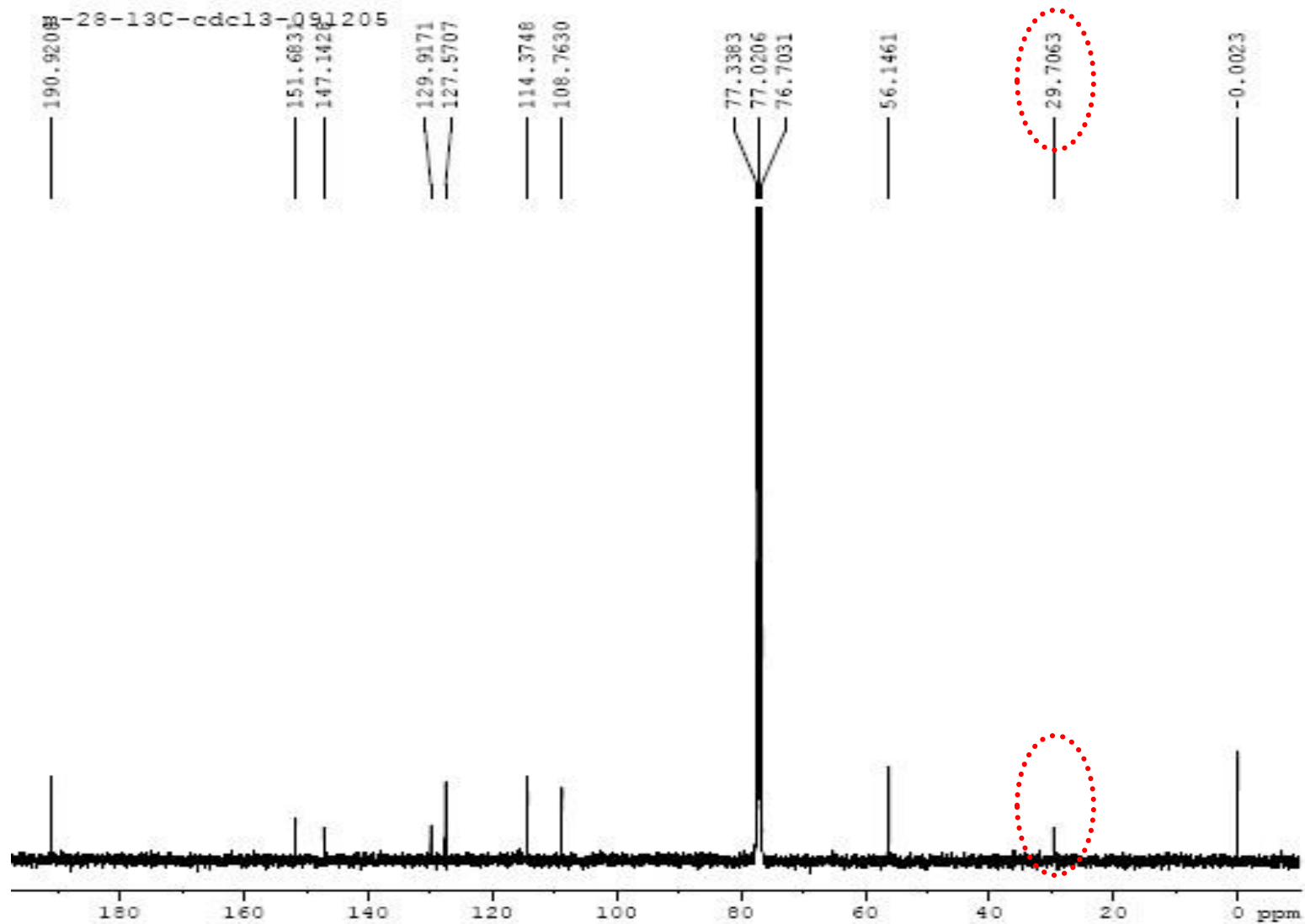
Table 2.  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR Data<sup>a</sup>

	carbon	THF- <i>d</i> <sub>8</sub>	CD <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	CDCl <sub>3</sub>	toluene- <i>d</i> <sub>8</sub>	C <sub>6</sub> D <sub>6</sub>	C <sub>6</sub> D <sub>5</sub> Cl	(CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CO	(CD <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> SO	CD <sub>3</sub> CN	TFE- <i>d</i> <sub>3</sub>	CD <sub>3</sub> OD	D <sub>2</sub> O
solvent signals		67.21	53.84	77.16	137.48	128.06	134.19	29.84	39.52	1.32	61.50	49.00	
		25.31			128.87		129.26	206.26		118.26	126.28		
					127.96		128.25						
					125.13		125.96						
					20.43								
acetic acid	CO	171.69	175.85	175.99	175.30	175.82	175.67	172.31	171.93	173.21	177.96	175.11	177.21
	CH <sub>3</sub>	20.13	20.91	20.81	20.27	20.37	20.40	20.51	20.95	20.73	20.91	20.56	21.03
acetone	CO	204.19	206.78	207.07	204.00	204.43	204.83	205.87	206.31	207.43	32.35	209.67	215.94
	CH <sub>3</sub>	30.17	31.00	30.92	30.03	30.14	30.12	30.60	30.56	30.91	214.98	30.67	30.89
acetonitrile	CN	116.79	116.92	116.43	115.76	116.02	115.93	117.60	117.91	118.26	118.95	118.06	119.68
	CH <sub>3</sub>	0.45	2.03	1.89	0.03	0.20	0.63	1.12	1.03	1.79	1.00	0.85	1.47
benzene	CH	128.84	128.68	128.37	128.57	128.62	128.38	129.15	128.30	129.32	129.84	129.34	
<i>tert</i> -butyl alcohol	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	67.50	69.11	69.15	68.12	68.19	68.19	68.13	66.88	68.74	72.35	69.40	70.36
	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	30.57	31.46	31.25	30.49	30.47	31.13	30.72	30.38	30.68	31.07	30.91	30.29
carbon dioxide	CO <sub>2</sub>	125.69	125.26	124.99	124.86	124.76	126.08	125.81	124.21	125.89	126.92	126.31	
carbon disulfide	CS <sub>2</sub>	193.37	192.95	192.83	192.71	192.69	192.49	193.58	192.63	193.60	196.26	193.82	197.25
carbon tetrachloride	CCl <sub>4</sub>	96.89	96.52	96.34	96.57	96.44	96.38	96.65	95.44	96.68	97.74	97.21	96.73
chloroform	CH	79.24	77.99	77.36	77.89	77.79	77.67	79.19	79.16	79.17	78.83	79.44	
18-crown-6	CH <sub>2</sub>	71.34	70.47	70.55	70.86	70.59	70.55	71.25	69.85	71.22	70.80	71.47	70.14
cyclohexane	CH <sub>2</sub>	27.58	27.38	26.94	27.31	27.23	26.99	27.51	26.33	27.63	28.34	27.96	
1,2-dichloroethane	CH <sub>2</sub>	44.64	44.35	43.50	43.40	43.59	43.60	45.25	45.02	45.54	45.28	45.11	
dichloromethane	CH <sub>2</sub>	54.67	54.24	53.52	53.47	53.46	53.54	54.95	54.84	55.32	54.46	54.78	
diethyl ether	CH <sub>3</sub>	15.49	15.44	15.20	15.47	15.46	15.35	15.78	15.12	15.63	15.33	15.46	14.77
	CH <sub>2</sub>	66.14	66.11	65.91	65.94	65.94	65.79	66.12	62.05	66.32	67.55	66.88	66.42
	CH <sub>3</sub>	58.72	58.95	59.01	58.62	58.66	58.42	58.77	57.98	58.90	59.40	59.06	58.67
diglyme	CH <sub>2</sub>	71.17	70.70	70.51	70.92	70.87	70.56	71.03	69.54	70.99	73.05	71.33	70.05
	CH <sub>2</sub>	72.72	72.25	71.90	72.39	72.35	72.07	72.63	71.25	72.63	71.33	72.92	71.63
	CH	161.96	162.57	162.62	161.93	162.13	162.01	162.79	162.29	163.31	166.01	164.73	165.53
dimethylformamide	CH <sub>3</sub>	35.65	36.56	36.50	35.22	35.25	35.45	36.15	35.73	36.57	37.76	36.89	37.54
	CH <sub>3</sub>	30.70	31.39	31.45	30.64	30.72	30.71	31.03	30.73	31.32	30.96	31.61	32.03
	CH <sub>2</sub>	67.65	67.47	67.14	67.17	67.16	66.95	67.60	66.36	67.72	68.52	68.11	67.19
1,4-dioxane	CH <sub>2</sub>	67.65	67.47	67.14	67.17	67.16	66.95	67.60	66.36	67.72	68.52	68.11	67.19
DME	CH <sub>3</sub>	58.72	59.02	59.08	58.63	58.68	58.31	58.45	58.03	58.89	59.52	59.06	58.67
	CH <sub>2</sub>	72.58	72.24	71.84	72.25	72.21	71.81	72.47	71.17	72.47	72.87	72.72	71.49
ethane	CH <sub>3</sub>	6.79	6.91	6.89	6.94	6.96	6.91	6.88	6.61	6.99	7.01	6.98	
ethanol	CH <sub>3</sub>	18.90	18.69	18.41	18.78	18.72	18.55	18.89	18.51	18.80	18.11	18.40	17.47
	CH <sub>2</sub>	57.60	58.57	58.28	57.81	57.86	57.63	57.72	56.07	57.96	59.68	58.26	58.05
ethyl acetate	CH <sub>3</sub> CO	20.45	21.15	21.04	20.46	20.56	20.50	20.83	20.68	21.16	21.18	20.88	21.15
	CO	170.32	171.24	171.36	170.02	170.44	170.20	170.96	170.31	171.68	175.55	172.89	175.26
	CH <sub>2</sub>	60.30	60.63	60.49	60.08	60.21	60.06	60.56	59.74	60.98	62.70	61.50	62.32

# 制备板上的杂质峰



# 制备板上的杂质峰



# 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



碳谱查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/Colleges.aspx

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 碳谱查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据

NMR库化合物总数为: 552248 个  
参与问卷调查

 微谱数据  
www.nmrdata.com

按从小到大顺序输入, 数字间用英文半角逗号(,)分隔例如:  
如: 21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

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

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂 全部 容差 0.5 <=2

13C NMR检索

# 精确查询举例

精确查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/HighSchool/PreciseQuery.aspx?rc=0,5&rj=%e5%85%a8%e9%83%a8

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 精确查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

[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

[返回上一页](#)

---

**参考查询结果**

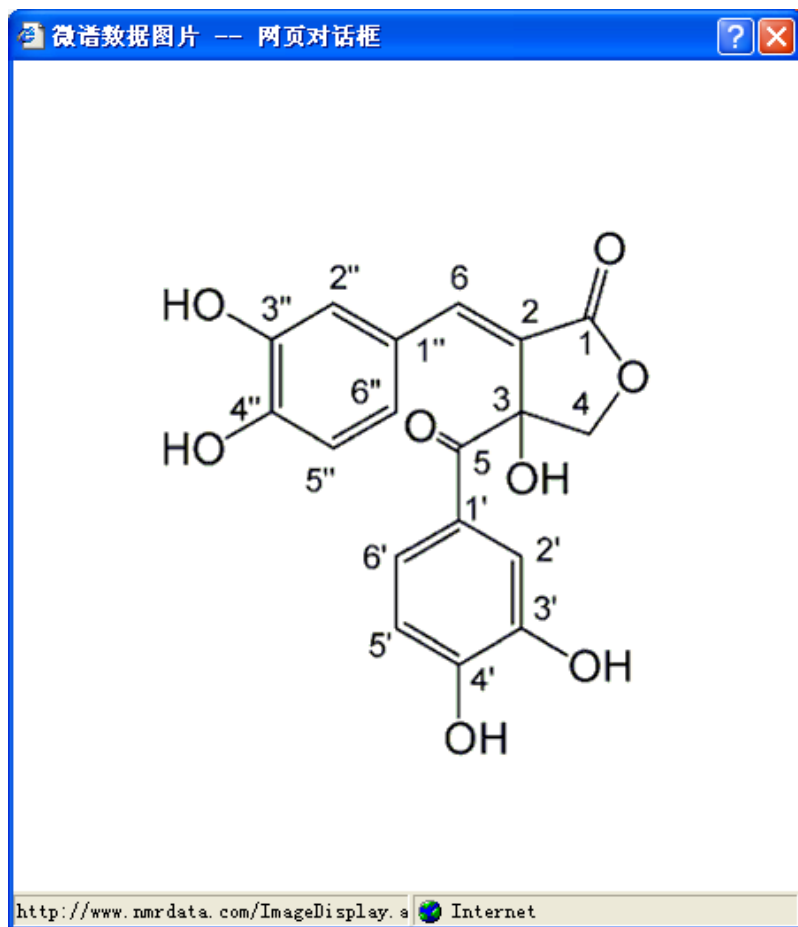
---

**Name:** actaealactone  
**Formula:** C<sub>18</sub>H<sub>14</sub>O<sub>8</sub>  
**Magazine:** Journal of Natural Products  
**Year:** 2006  
**Volume:** 69(3)  
**Page:** 314-318  
**Title:** Polyphenolic Constituents of Actaea racemosa  
**Author:** Paiboon Nuntanakorn, Bei Jiang, Linda S. Einbond, Hui Yang, Fredi Kronenberg, I. Bernard Weinstein, and Edward J. Kennelly

[Structure](#)   [13C NMR](#)   [Structure & 13C NMR](#)   [碳谱模拟图](#)

---

# 精确查询举例



(Structure 结构图)

微谱数据-碳谱数据 - Google Chrome

[www.nmrdata.com/DataParticular.aspx?id=16225](http://www.nmrdata.com/DataParticular.aspx?id=16225)

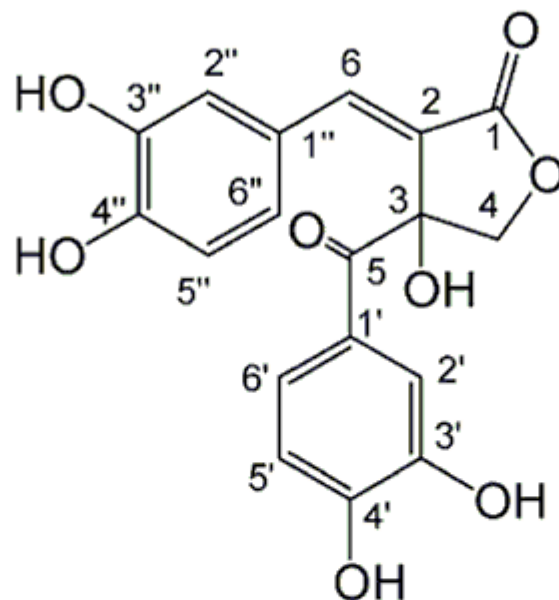
actaealactone的碳谱:

Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
CD3OD	1	172.2
	2	123.8
	3	80.3
	4	77.7
	5	195.8
	6	144.4
	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

(<sup>13</sup>C NMR数据)



actaealactone的结构图和碳谱:



Solvent	Position	$^{13}\text{C}$ NMR
	1	172.2
	2	123.8
	3	80.3
	4	77.7
	5	195.8
	6	144.4
	1'	124.9
	2'	115.9
	3'	144.5

# 模糊查询举例

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位: 微谱数据

NMR库化合物总数为: 916981 个  
更新时间: 2017/3/30 09:08:21

 **微谱数据**  
www.nmrdata.com

按**从小到大**顺序输入, 数字间用英文**半角逗号(,)**分隔例如:  
如: 21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

15.7,17.1,19.9,20.1,28.9,42.9,59,59,74,83.6,84.8,100.9  
,101.1,101.8,106.2,119.6,121.1,127,128.9,133,135.3,135  
.9,139.7,140.6,140.7,147.7,148.8,165.7,168.8

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2 相似度  %(>=50%)  Nat.  Syn.

13C NMR检索

# 模糊查询举例

模糊查询-核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/HighSchool/BlurQuery.aspx?rc=1&percent=0.5&rj=%e5%85%a8%e9%83%a8

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 模糊查询-核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

[13C NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | 当前单位:微谱数据

[返回上一页](#)

查询结果: **共查到111个化合物 (查询结果仅供参考)**

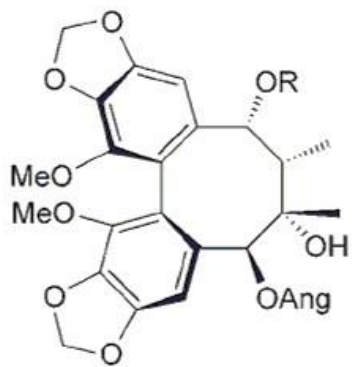
---

1. kadsurindutin A  
 $C_{29}H_{32}O_{11}$  相似度:100%  
Chemistry & Biodiversity 2007 Vol. 4 966  
**Dibenzocyclooctane Lignans from the Stems of Kadsura induta and Their Antiviral Effect on Hepatitis B Virus**  
Wenhui Ma, Xiaolin Ma, Hai Huang, Pei Zhou, and Daofeng Chen  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

---

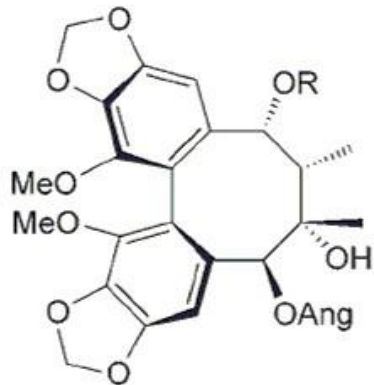
2. kadsurindutin B  
 $C_{27}H_{30}O_{10}$  相似度:86.2%  
Chemistry & Biodiversity 2007 Vol. 4 966  
**Dibenzocyclooctane Lignans from the Stems of Kadsura induta and Their Antiviral Effect on Hepatitis B Virus**  
Wenhui Ma, Xiaolin Ma, Hai Huang, Pei Zhou, and Daofeng Chen  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

# 模糊查询—相似度最高的八个化合物结构



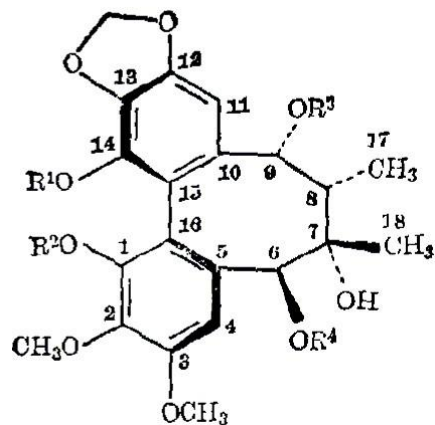
R = Ac

1

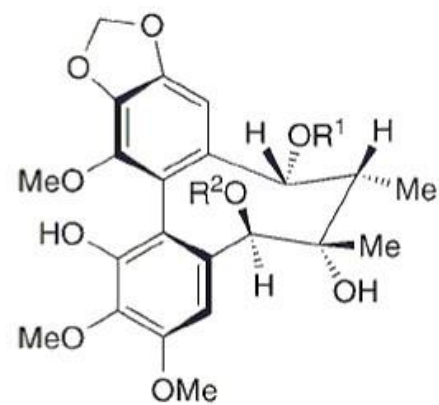


R = H

2

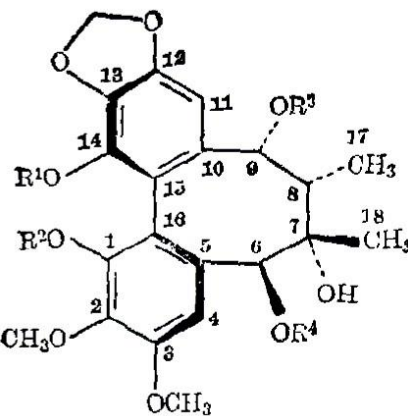


3

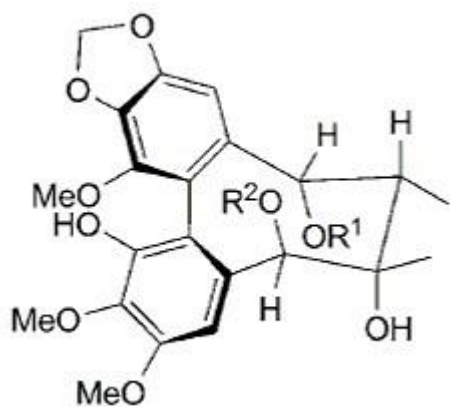


R<sup>1</sup> = Ac, R<sup>2</sup> = Bz

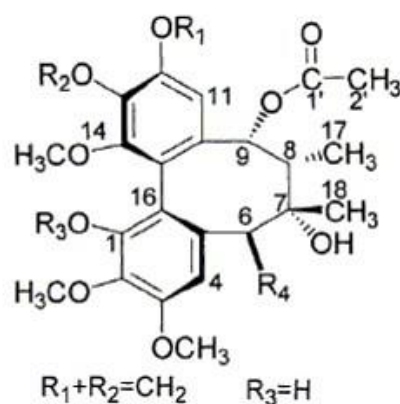
4



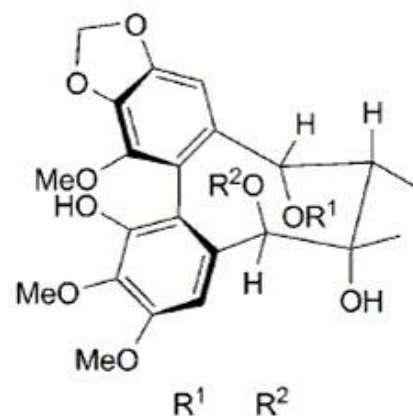
5



6



7



R<sup>1</sup> R<sup>2</sup>

Ang Ang

8

碳谱查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/Colleges.aspx

文件(E) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 碳谱查询--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

[13C NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | [化合物信息复合查询](#) | 当前单位:微谱数据

NMR库化合物总数为: 552248 个  
[参与问卷调查](#)



微谱数据  
www.nmrdata.com

按从小到大顺序输入, 数字间用英文半角逗号(,)分隔例如:  
如: 21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2 碳原子数  相似度  % (>=50%)

13C NMR检索

# 基团查询举例

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据

NMR库化合物总数为: 552248 个  
[参与问卷调查](#)

 微谱数据  
www.nmrdata.com

按从小到大顺序输入，数字间用英文半角逗号(,)分隔例如：  
如：21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

11.5,14.2,127.6,137.7,166.7

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2

13C NMR检索

如输入11.5,14.2,127.6,137.7,166.7，就能得到一些含顺芷酰基(Tig)的化合物

# 基团查询结果

基团查询-微谱数据核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer  
http://www.nmrdata.com/HighSchool/AssemblyQuery.aspx?rc=1&rj=%e5%85%a8%e9%83%a8

收藏夹 基团查询-微谱数据核磁共振碳谱数据库(13C-NM...

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微

 **微谱数据**  
www.nmrdata.com

[返回上一页](#)

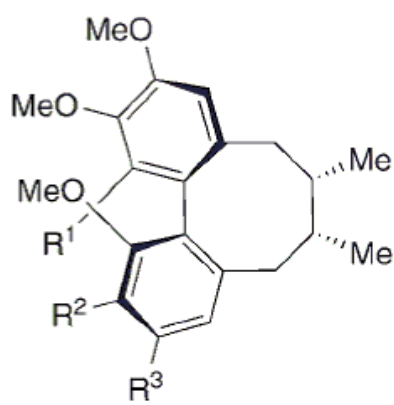
查询结果: 仅列出20个化合物查询结果(查询结果仅供参考)

1. (+)-14-tigloylgomisin K3  
C<sub>28</sub>H<sub>36</sub>O<sub>7</sub>  
Helvetica Chimica Acta 2008 Vol. 91 1053  
**Four New Dibenzocyclooctadiene Lignans from Schisandra rubriflora**  
Hong-Mei Li, Yong-Ming Luo, Jian-Xin Pu, Xiao-Nian Li, Chun Lei, Rui-Rui Wang,  
Yong-Tang Zheng, Han-Dong Sun and Rong-Tao Li  
[Structure](#) [13 C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

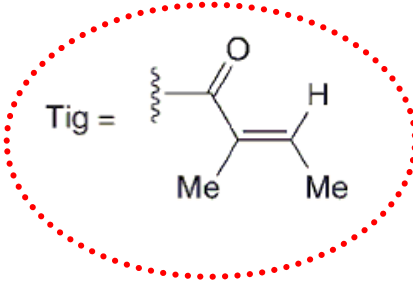
2. tasumatrol T  
C<sub>27</sub>H<sub>34</sub>O<sub>9</sub>  
Helvetica Chimica Acta 2007 Vol. 90 1319  
**Tasumatrols P-T, Five New Taxoids from Taxus sumatrana**  
Ya-Ching Shen, Yun-Sheng Lin, Shaw-Man Hsu, Ashraf Taha Khalil, Shih-Sheng Wang, Ching-Te Chien, Yao-Haur Kuo, and Chang-Hung Chou  
[Structure](#) [13 C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

3. rel-(2R,3S,6R,7S,8S,9S,13R,14S,15S)-(4E,11E)-8,14,15-Triacetoxoy-3-(benzoyloxy)-6,9-epoxy-9-hydroxy-7-(tigloyloxy)jatropa-4,11-diene  
C<sub>38</sub>H<sub>48</sub>O<sub>12</sub>

微谱数据图片 -- 网页对话框  
http://www.nmrdata.com/ImageDisplay.aspx?id=1214



R<sup>1</sup> = TigO, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> = MeO



http://www.nmrdata.com/ImageDisplay.aspx?id=1214 Internet

# 不精确库查询

碳谱查询--核磁共振碳谱数据库( $^{13}\text{C}$ -NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/Colleges.aspx

文件(E) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 碳谱查询--核磁共振碳谱数据库( $^{13}\text{C}$ -NMR库)

$^{13}\text{C}$  NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据

NMR库化合物总数为: 552248 个  
参与问卷调查



微谱数据  
www.nmrdata.com

按从小到大顺序输入，数字间用英文半角逗号(,)分隔例如：  
如：21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2

13C NMR检索



- 不精确库：文献中有些化合物的碳信号不能归属，而只给出一个范围。
  - ◆ 具有长链 $\text{CH}_2$ 的化合物
  - ◆ 具苯环或多苯环的化合物
  - ◆ 具有多个 $\text{COOCH}_3$ 或 $\text{OCOCH}_3$ 的化合物
  - ◆ 碳谱值和溶剂峰有重叠的化合物

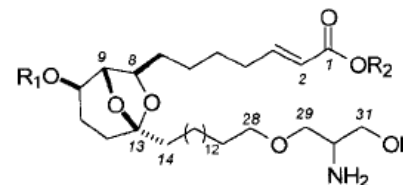
## Didemniserinolipids A–C, Unprecedented Serinolipids from the Tunicate *Didemnum* sp.

Noemí González, Jaime Rodríguez, and Carlos Jiménez\*

Departamento de Química Fundamental e Industrial,  
Facultade de Ciencias, Universidade da Coruña, Campus  
da Zapateira, 15071 A Coruña, Spain

Received March 4, 1999

Marine tunicates belonging to the genus *Didemnum* (Phylum Chordata, class Ascidiacea) have proven to be a particularly rich source of structurally diverse and biologically potent marine metabolites.<sup>1</sup> Most of these metabolites are nitrogen-containing compounds derived from amino acids, which can be classed into two major categories: (1) cyclic and acyclic peptides (2) and aromatic alkaloids. Some representative examples of the first group are the cytotoxic cyclic heptapeptides, such as mollamide<sup>2</sup> and cyclodidemnamide,<sup>3</sup> isolated from *Didemnum molle*, and the first sulfamic acid peptide guanidine derivatives, minalemines D–F, isolated from *Didemnum rodriguezii*.<sup>4</sup> Some recent examples of aromatic alkaloids are the novel predator-deterrent didemnimides A–D,<sup>5</sup> isolated from *Didemnum conchyliatum*, and the  $\beta$ -carbolines, didemnolines A–D.<sup>6</sup> Furthermore, other metabolites with miscellaneous structures have been found, including the HIV-1 protease inhibitor didemnaketals A and B,<sup>7</sup> and a number of enterocin derivatives.<sup>8</sup>



- 1, R<sub>1</sub>=Ac, R<sub>2</sub>=H  
2, R<sub>1</sub>=H R<sub>2</sub>=Et  
3, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=H

graphed on a silica gel flash column and by normal-phase HPLC followed by reversed-phase HPLC to give pheophtetin a and pheophtetin a', previously isolated from the tunicate *Trididemnum solidum*.<sup>10</sup> The CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> partition (150 mg), which exhibited the most potent activity (IC<sub>50</sub> 0.25  $\mu$ g/mL against P388, A549, and HT29 tumor cell lines), was chromatographed on a silica gel flash column and by reversed-phase HPLC to give pure compounds 1–3.

The molecular formula of didemniserinolipid A (1), C<sub>33</sub>H<sub>59</sub>NO<sub>8</sub>, was determined by positive HRFABMS of its pseudomolecular [M + H]<sup>+</sup> ion at *m/z* 598.4326 ( $\Delta$  0.7 mmu) and indicated the presence of five degrees of unsaturation in the molecule. Extensive NMR analysis (<sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, DEPT, <sup>1</sup>H–<sup>1</sup>H COSY, and HMQC) showed that 1 contained three quaternary carbons, six methine carbons (two olefinic, three attached to oxygen, and the last one linked to nitrogen), an indeterminate number of methylene carbons (three of which are attached to oxygen), and one methyl carbon. The presence of an acetate group in the molecule was easily deduced by the carbon and proton chemical shifts of the methyl

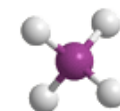


Table 1. NMR Data for Didemniserinols (1–3) in  $\text{Cl}_3\text{CD}$ 

C no.	1		2		3	
	$^{13}\text{C}$	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^1\text{H}$
1	169.0 s		166.7 s			
2	121.4 d	5.77 d, 14.9	121.4 d	5.80 d, 15.2		5.85 d, 15.3
3	150.5 d	6.98 dt, 7.3; 14.9	149.1 d	6.95 dt, 7.4; 15.2		6.89 dt, 7.2; 15.3
4	32.2 t	2.17 m	32.0 t	2.20 c, 7.0	33.0 t	2.17 c, 7.2
5	27.9 t	1.43 m	27.9 t	1.47 m	27.1 t	1.50 m
6	25.2 t	1.27 m	25.3 t	1.26 m	25.9 t	
7	35.1 t	1.41/1.54 m	35.1 t	1.43/1.54 m	36.4 t	1.47/1.54 m
8	77.8 d	3.91 m	77.8 d	3.87 m	79.0 d	3.95 m
9	79.8 d	4.15 br s	82.4 d	4.06 br s	83.8 d	4.06 br s
10	68.4 d	4.68 br s	66.2 d	4.61 br s	66.9 d	3.65 br s
11	37.1 t	1.69/2.06 m	37.5 t	1.69/1.96 m	38.5 t	1.63/2.04 m
12	30.8 t	1.53 m/1.78 dt, 5.6; 12.6	30.1 t	1.53 m/1.79 dt, 5.4; 13.1	31.4 t	1.46 m/1.89 dt, 5.5; 12.9
13	109.4 s		109.5 s		110.6 s	
14	22.5 t	1.40/1.66 m	23.0 t	1.41/1.66 m	23.9 t	1.3–1.6 m
15–25	25.0–29.7 t	1.21/1.36 m	25.0–29.8 t	1.2–1.3	26.4–30.8 t	1.3–1.6 m
26	25.0–29.7 t	1.19 m	25.0–29.8 t	1.2–1.3	26.4–30.8 t	1.3–1.6 m
27	25.0–29.7 t	1.50 m	25.0–29.8 t	1.60 m	26.4–30.8 t	1.63 m
28	71.9 t	3.42 m	72.0 t	3.47 m	72.9 t	3.56 m
29	65.3 t	4.23/4.30 m	65.2 t	4.26/4.34 m	66.2 t	4.17 dd, 6.2, 11.5/4.25 dd, 3.4, 11.5
30	51.2 d	3.82 m	51.6 d	3.81 m	52.3 d	3.67 m
31	67.0 t	3.64 m	66.8 t	3.65 m	68.6 t	3.65/3.70 m
OCOCH <sub>3</sub>	170.9 s					
OCOCH <sub>3</sub>	21.3 c	2.10 s				
OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>			60.1 t	4.18 c, 7.1		
OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>			14.3 c	1.27 t		

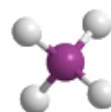


**Table III.**  $^{13}\text{C}$  NMR Data ( $\delta$  in ppm, Multiplicity from ATP<sup>a</sup> or DEPT<sup>b</sup> Spectrum, the Assignments Are Confirmed by C/H-COSY Experiments, for 6 and 7 also by HMBC<sup>c</sup> Spectra)

	100-1 (3) <sup>d</sup>	100-2 (4) <sup>d</sup>	104-2 (6) <sup>e</sup>	124-1 (7) <sup>e</sup>
C-1	196.9 s	202.6 s	197.2 s	197.0 s
C-2	54.2 t	54.7 t	52.9 t	52.8 t
C-3	72.6 s	76.2 s	71.4 s	71.3 s
3-CH <sub>3</sub>	30.1 q	29-30 q*	30.2 q	30.0 q
C-4	44.8 t	44.1 t	37.6 t	37.5 t
C-4a	150.1 s	81.6 s	125.7 s	126.0 s
C-5	134.9 d	146.4 d	160.7 s	160.1 s
C-6	129.5 d	117.3 d	112.1 d	112.0 d
C-6a	134.1 s	137.9 s	133.9 s	133.9 s
C-7	189.1 s	189.7 s	188.0 s	187.9 s
C-7a	115.9 s	115.0 s	114.7 s	114.7 s
C-8	158.9 s	158.2 s	157.1 s	157.1 s
C-9	137.1 s	141.2 s	136.0 s	135.7 s
C-10	134.4 d	134.1 d	133.2 d	133.4 d
C-11	119.5 d	119.9 d	118.3 d	118.3 d
C-11a	137.8 s	131.9 s	134.2 s	134.1 s
C-12	183.4 s	183.4 s	180.8 s	180.8 s
C-12a	135.2 s	139.0 s	138.0 s <sup>f</sup>	138.0 s <sup>g</sup>
C-12b	134.1 s	81.6 s	137.1 s <sup>f</sup>	136.9 s <sup>g</sup>
C-2'	71.8 d	71.9 d	70.5 d	70.2 d
C-3'	37.9 t	40.8 t	40.1 t	38-40 t*
C-4'	79.7 d	77.1 d	71.7 d	74.7 d
C-5'	76.7 d	78.6 d	77.0 d	76.8 d
C-6'	77.2 d	73.3 d	76.1 d	70.4 d
6-CH <sub>3</sub>	18.8 q	18.6 q	18.4 q	18.4 q

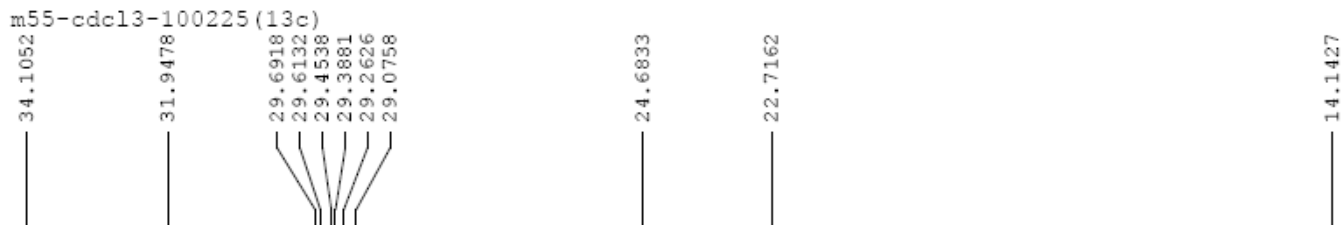
\* Obscured by solvent.

**2,3,4,6-Tetra-*O*-benzyl- $\beta$ -D-glucopyranosyl Fluoride (1b).** The mother liquor from 1a was subjected to flash chromatography (275 g SiO<sub>2</sub>, 5 cm i.d.  $\times$  45 cm) with toluene as the base solvent. Fractions of 100–125 mL were collected. After 200 mL of toluene, the column was eluted with toluene/ethyl acetate/CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (18:1:1). Fractions 14–16 gave a syrup that was crystallized from methylcyclohexane/hexane by cooling (–20 °C) overnight to give a mixture containing 1a and 1b: 1.5 g (15%); mp 42–58 °C. Fractions 12–13 gave a syrup that was crystallized from methylcyclohexane/hexane by cooling (–20 °C) overnight to give 1b: 2.3 g (23%); mp 42–44 °C;  $[\alpha]_D^{20} +35.2^\circ$  [lit.<sup>26c</sup> mp 48–48.5 °C,  $[\alpha]_D^{22} +38^\circ$  ( $c = 0.8$ ); lit.<sup>19d</sup> mp 42–44 °C,  $[\alpha]_D^{22} +31^\circ$  ( $c = 1.03$ )]; TLC  $R_f$  0.63; IR 1455 (CH<sub>2</sub>), 1080 (CF), 690, 740 (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>) cm<sup>-1</sup>; <sup>1</sup>H NMR  $\delta$  5.26 (dd,  $J_{1,F} = 52.5$  Hz,  $J_{1,2} = 6.3$  Hz, H<sup>1</sup>), 3.55 (m, H<sup>2</sup>), 3.99 (t, H<sup>3</sup>), 3.70 (m, H<sup>4</sup>), 3.94 (m, H<sup>5</sup>), 3.70 (m, H<sup>6</sup>), 4.45–4.99 (m, four CH<sub>2</sub>), 7.15, 7.32 (m, four C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>); <sup>13</sup>C NMR  $\delta$  107.15 (C<sup>1</sup>), 79.47 (C<sup>2</sup>), 81.83 (C<sup>3</sup>), 77.73 (C<sup>4</sup>), 75.13 (C<sup>5</sup>), 68.63 (C<sup>6</sup>), 73.54, 73.62, 75.20, 75.83 (four CH<sub>2</sub>), 127.82–128.66 (four C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>). Anal. Calcd for C<sub>34</sub>H<sub>35</sub>O<sub>5</sub>F (542.65): C, 75.26; H, 6.50; F, 3.50. Found: C, 75.27; H, 6.61; F, 3.70.

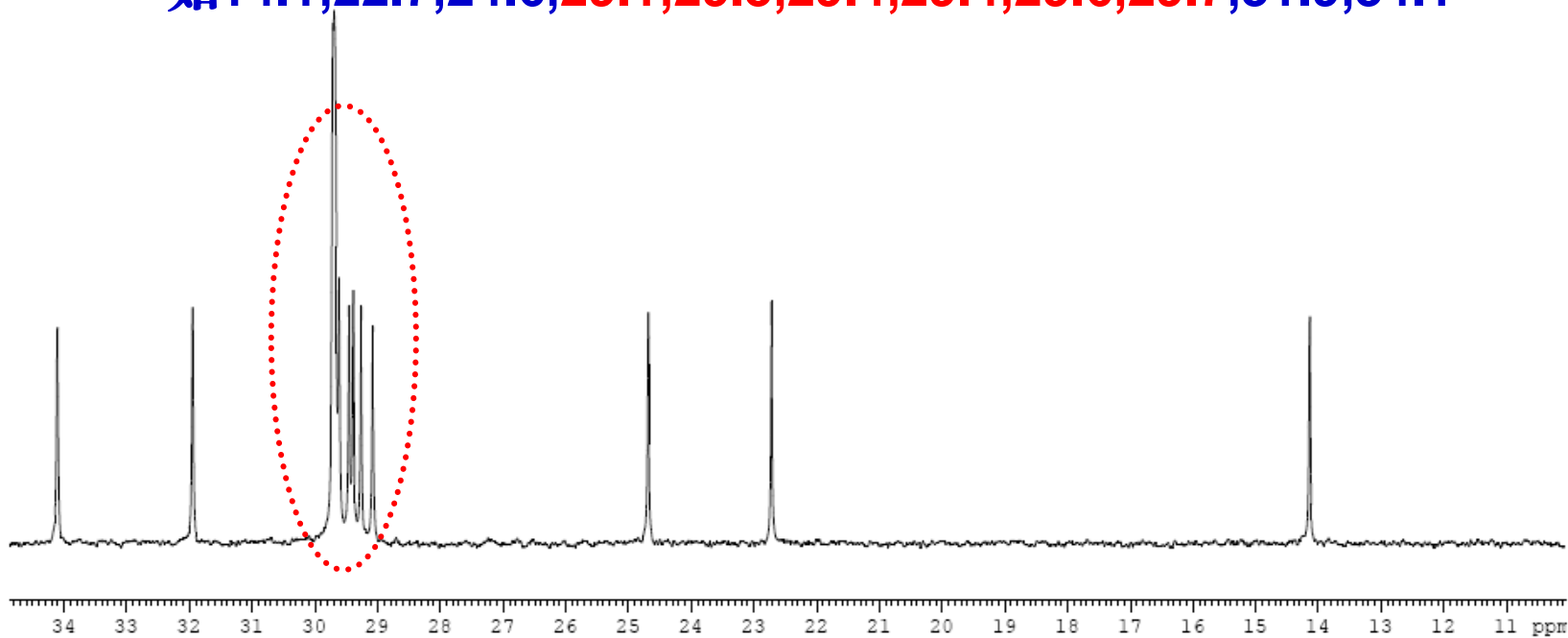


**Dimethyl *N*-acetylaspartate (4):** <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 6.4 (1 H, br d, *J* = 8.0 Hz, NH), 4.84 (1 H, t, d, *J* = 4.5, 8.0 Hz, αH), 3.75/3.68 (2 × 3 H, s, 2 COOCH<sub>3</sub>), 3.01 (1 H, dd, *J* = 4.5, 17.2 Hz, βH), 2.84 (1 H, dd, *J* = 4.5, 17.2 Hz, βH), 2.01 (3 H, s, NCOCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 52.8–51.6 (2 q, COOCH<sub>3</sub>), 48.6 (d, αC), 36.2 (t, βC), 23.1 (q, NCOCH<sub>3</sub>), 171.6, 171.2, 169.8 (3 s, 2 COOCH<sub>3</sub>/NCOCH<sub>3</sub>); HRCIMS (isobutane) *m/z* 218.1047, Δ 2.5 mmu for C<sub>9</sub>H<sub>16</sub>NO<sub>5</sub> (M + H)<sup>+</sup>; LREIMS *m/z* (% relative intensity) 144 (14.0), 129 (33.0), 112 (13.5), 102 (23.6), 70 (22.1).

# 不精确库查询--碳谱的输入



不管重叠的碳数目，仅需依次将仪器能分辨到的碳谱数据输入即可：  
如14.1,22.7,24.6,29.1,29.3,29.4,29.4,29.6,29.7,31.9,34.1



# 化合物信息查询

化合物信息查询--核磁共振碳谱数据库( $^{13}\text{C}$ -NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalSearch.aspx

文件(E) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 化合物信息查询--核磁共振碳谱数据库( $^{13}\text{C}$ -NMR库)

[\$^{13}\text{C}\$  NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | [化合物信息复合查询](#) | 当前单位:微谱数据

NMR库化合物总数为: 552248 个

 **微谱数据**  
www.nmrdata.com

[化合物名称](#) | [作者](#) | [植物名称](#) | [分子式](#)

[把微谱设为主页](#)

[商务合作](#) | [进入公司主页](#) | [新手上路](#)



## ✓ 化合物名称检索：

1. 尽量采用英文名称，当存在通俗名和系统名时，以通俗名进行检索。如查找化合物**Kadsurindutin C** ( $=$ (5S,6S,7R)-5,6,7,8-Tetrahydro-4-methoxy-5-(7-methoxy-1,3-benzodioxol-5-yl)-6,7-dimethylnaphtho[2,3-d][1,3]dioxole)，此时用**Kadsurindutin C检索**。注：逗号及“-”前后不要留空格

2. 旋光特征尽量不要输入名称中，(+) -, (-) -, ( $\pm$ ) -

化合物名称查询时，待查的字符与查询结果属于一种绝对包含关系，仅将核心字符输入，能得到更多的有用信息，且能够有效去除由于各种文献名称不统一造成的干扰。

- ✓ **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。如 Dao-Feng Chen; Daofeng Chen; Chen, Daofen; Chen, Dao-fen
- ✓ **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**。
- ✓ **分子式检索**：查询时，请按**C、H、O、杂原子**的顺序，如  $C_{24}H_{32}O_7N_2$ 。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。

# 以 gomisin 作为化合物名称的检索结果

化合物信息--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalSearch.aspx

文件(E) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

收藏夹 化合物信息--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

[13C NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | [化合物信息复合查询](#) | 当前单位:微谱数据



化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

gomisin

查询结果: 搜索 gomisin 获得约 113 条结果

[首页](#) [上一页](#) [下一页](#) [尾页](#) 当前页: 1/5

- gomisin D  $C_{28}H_{34}O_{10}$   
Journal of Anhui Agricultural Sciences 2012 40 10847-10848  
**Study on Chemical Constituents in the Rattan and Stem of Schisandra wilsoniana A. C. Smith.**  
FAN Peng  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
- gomisin N  $C_{23}H_{28}O_6$   
Journal of Anhui Agricultural Sciences 2012 40 10847-10848  
**Study on Chemical Constituents in the Rattan and Stem of Schisandra wilsoniana A. C. Smith.**  
FAN Peng  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
- gomisin A

# 以 Han-Dong Sun 院士为作者名称的检索结果

化合物信息--核磁共振碳谱数据库(<sup>13</sup>C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalDetail.aspx

文件(E) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 化合物信息--核磁共振碳谱数据库(<sup>13</sup>C-NMR库)

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | | 当前单位:微谱数据



化合物名称 | **作者** | 植物名称 | 分子式

han-dong sun

查询结果: 搜索 han-dong sun 获得约 1301 条结果

[首页](#) [上一页](#) [下一页](#) [尾页](#) 当前页: 1/53

1. sculponin U  $C_{20}H_{28}O_5$   
Fitoterapia 2014 93 142-149  
**Diterpenoids from Isodon sculponeatus**  
Hua-Yi Jiang, Wei-Guang Wang, Min Zhou, Hai-Yan Wu, Rui Zhan, Xiao-Nian Li, Xue Du, Yan Li, Jian-Xin Pu, Han-Dong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

---

2. sculponin V  $C_{20}H_{28}O_6$   
Fitoterapia 2014 93 142-149  
**Diterpenoids from Isodon sculponeatus**  
Hua-Yi Jiang, Wei-Guang Wang, Min Zhou, Hai-Yan Wu, Rui Zhan, Xiao-Nian Li, Xue Du, Yan Li, Jian-Xin Pu, Han-Dong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

# 以 Handong Sun 院士为作者名称的检索结果

化合物信息--核磁共振碳谱数据库(<sup>13</sup>C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalDetail.aspx

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

收藏夹 化合物信息--核磁共振碳谱数据库(<sup>13</sup>C-NMR库)

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据



化合物名称 | **作者** | 植物名称 | 分子式

handong sun

查询结果: 搜索 handong sun 获得约 179 条结果

[首页](#) [上一页](#) [下一页](#) [尾页](#) 当前页: 1/8

1. 6 $\beta$ ,13 $\alpha$ ,15 $\beta$ -trihydroxy-16-ene-3 $\alpha$ ,20-epoxy-ent-kaur-1,7-dione  $C_{20}H_{26}O_6$   
Chinese Journal of Chemistry 2012 30 1226-1230  
**ent-Kaurane Diterpenoids from Isodon eriocalyx var. laxiflora**  
Weiguang Wang, Haiyan Wu, Xue Du, Juming Yan, Yan Li, Jianxin Pu and Handong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

---

2. 6-hydroxy-3 $\alpha$ ,20-epoxy-5(6)-ene-ent-kaur-1,7,15-trione  $C_{20}H_{24}O_5$   
Chinese Journal of Chemistry 2012 30 1226-1230  
**ent-Kaurane Diterpenoids from Isodon eriocalyx var. laxiflora**  
Weiguang Wang, Haiyan Wu, Xue Du, Juming Yan, Yan Li, Jianxin Pu and Handong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

---

3. 6-hydroxy-15 $\beta$ -acetox-3 $\alpha$ ,20-epoxy-16 $\beta$ ,17-epoxy-5(6)-ene-ent-kaur-1,7-dione

# 以 *Kadsura* 作为植物属名的检索结果

化合物信息--核磁共振数据库(<sup>13</sup>C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalDetail.aspx

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

收藏夹 化合物信息--核磁共振数据库(<sup>13</sup>C-NMR库)

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据



化合物名称 | 作者 | **植物名称** | 分子式

查询结果: 搜索 **kadsura** 获得约 463 条结果

[首页](#) [上一页](#) [下一页](#) [尾页](#) 当前页: 1/19

1. Kadcotrione A  $C_{30}H_{44}O_6$   
Journal of Natural Products 2013 76 2350-2354  
**Kadcotriones A-C: Tricyclic Triterpenoids from *Kadsura coccinea***  
Cheng-Qin Liang, Yi-Ming Shi, Xing-Yao Li, Rong-Hua Luo, Yan Li, Yong-Tang Zheng, Hong-Bin Zhang, Wei-Lie Xiao, and Han-Dong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

---

2. Kadcotrione A  $C_{30}H_{44}O_6$   
Journal of Natural Products 2013 76 2350-2354  
**Kadcotriones A-C: Tricyclic Triterpenoids from *Kadsura coccinea***  
Cheng-Qin Liang, Yi-Ming Shi, Xing-Yao Li, Rong-Hua Luo, Yan Li, Yong-Tang Zheng, Hong-Bin Zhang, Wei-Lie Xiao, and Han-Dong Sun  
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#)

# 以 $C_{15}H_{24}O_2$ 为分子式检索

化合物信息--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库) - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/ChemicalDetail.aspx

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

收藏夹 化合物信息--核磁共振碳谱数据库(13C-NMR库)

[13C NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | [化合物信息复合查询](#) | 当前单位:微谱数据



化合物名称 | 作者 | 植物名称 | **分子式**

查询结果: **搜索 C15H24O2 获得约 501 条结果**

[首页](#) [上一页](#) [下一页](#) [尾页](#) 当前页: 1/21

1. (4R,5R)-muurol-1(6),10(14)-diene-4,5-diol  $C_{15}H_{24}O_2$   
Magnetic Resonance in Chemistry 2014 52 51-56  
**Muurolane-type sesquiterpenes from marine sponge Dysidea cinerea**  
Phan Van Kiem, Chau Van Minh, Nguyen Xuan Nhiem, Nguyen Thi Cuc, Ngo Van Quang, Hoang Le Tuan Anh, Bui Huu Tai, Pham Hai Yen, Nguyen Thi Hoai, Kim Young Ho, Nanyoung Kim, SeonJu Park and Seung Hyun Kim  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)

---

2. {2-[(2-ethylhexyl)oxy]phenyl}methanol  $C_{15}H_{24}O_2$   
Helvetica Chimica Acta 2013 96 2020-2032  
**Synthesis of Highly Substituted Hexahelicenes**  
Manfred Schwertel, Sabine Hillmann and Herbert Meier  
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)

# 化合物信息高级检索

化合物复合查询 - Windows Internet Explorer

http://www.nmrdata.com/HighSchool/SearchChemicalAll.aspx

文件(F) 编辑(E) 查看(V) 收藏夹(A) 工具(T) 帮助(H)

★ 收藏夹 化合物复合查询

<sup>13</sup>C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 化合物信息复合查询 | 当前单位:微谱数据

 **微谱数据**  
www.nmrdata.com

查询条件:

<input type="text"/>	化合物名称 <input type="text"/>
AND <input type="text"/>	分子式 <input type="text"/>
AND <input type="text"/>	作者 <input type="text"/>
AND <input type="text"/>	植物名 <input type="text"/>

年份选择:

所有年份

最近年份  年

年份之间  年 -  年

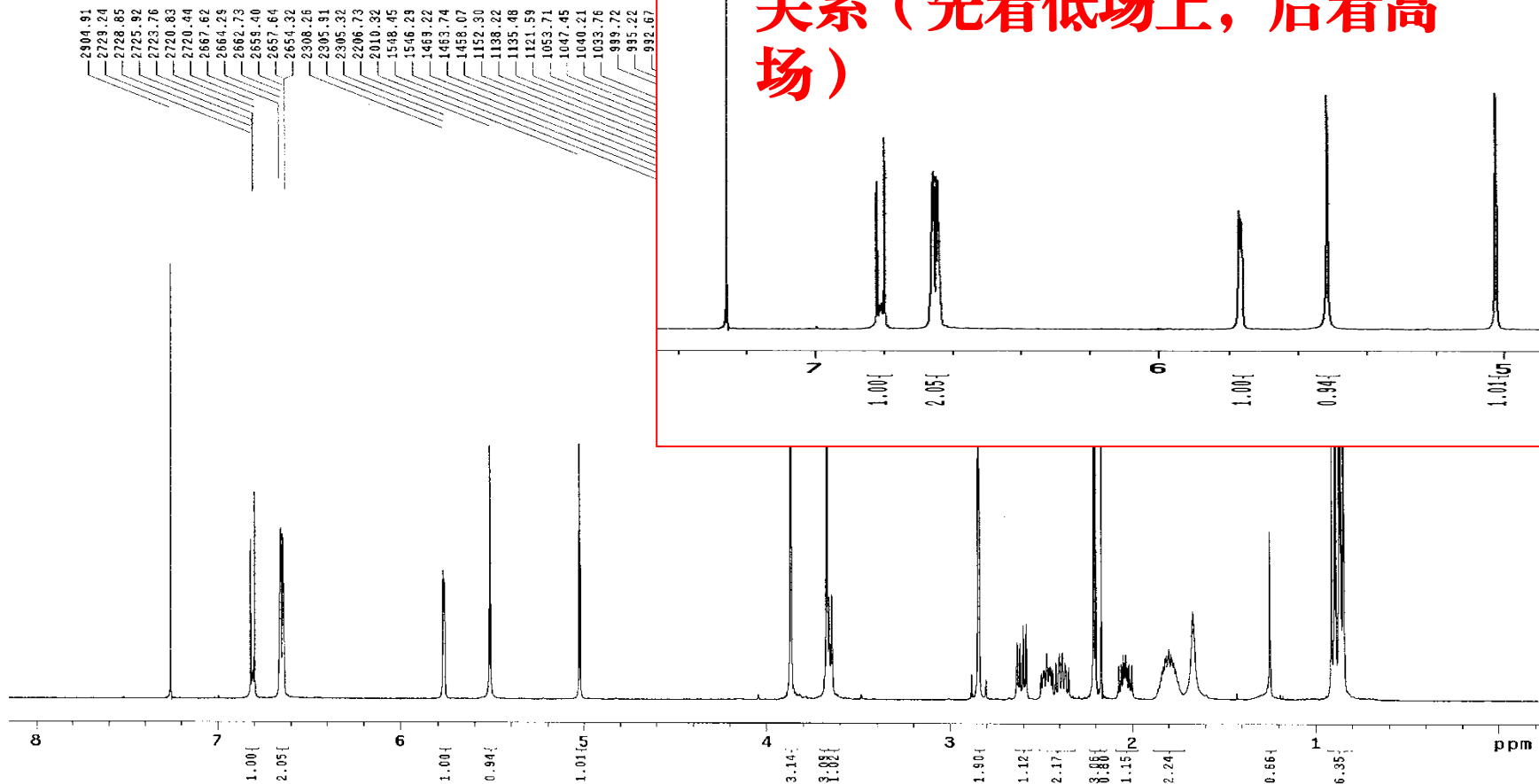


正在收录和收录完的国内外期刊达560种，重点为天然产物方面的期刊，如

***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2018年最新一期。

# 如何从氢谱上对化合物的纯度和量进行判断

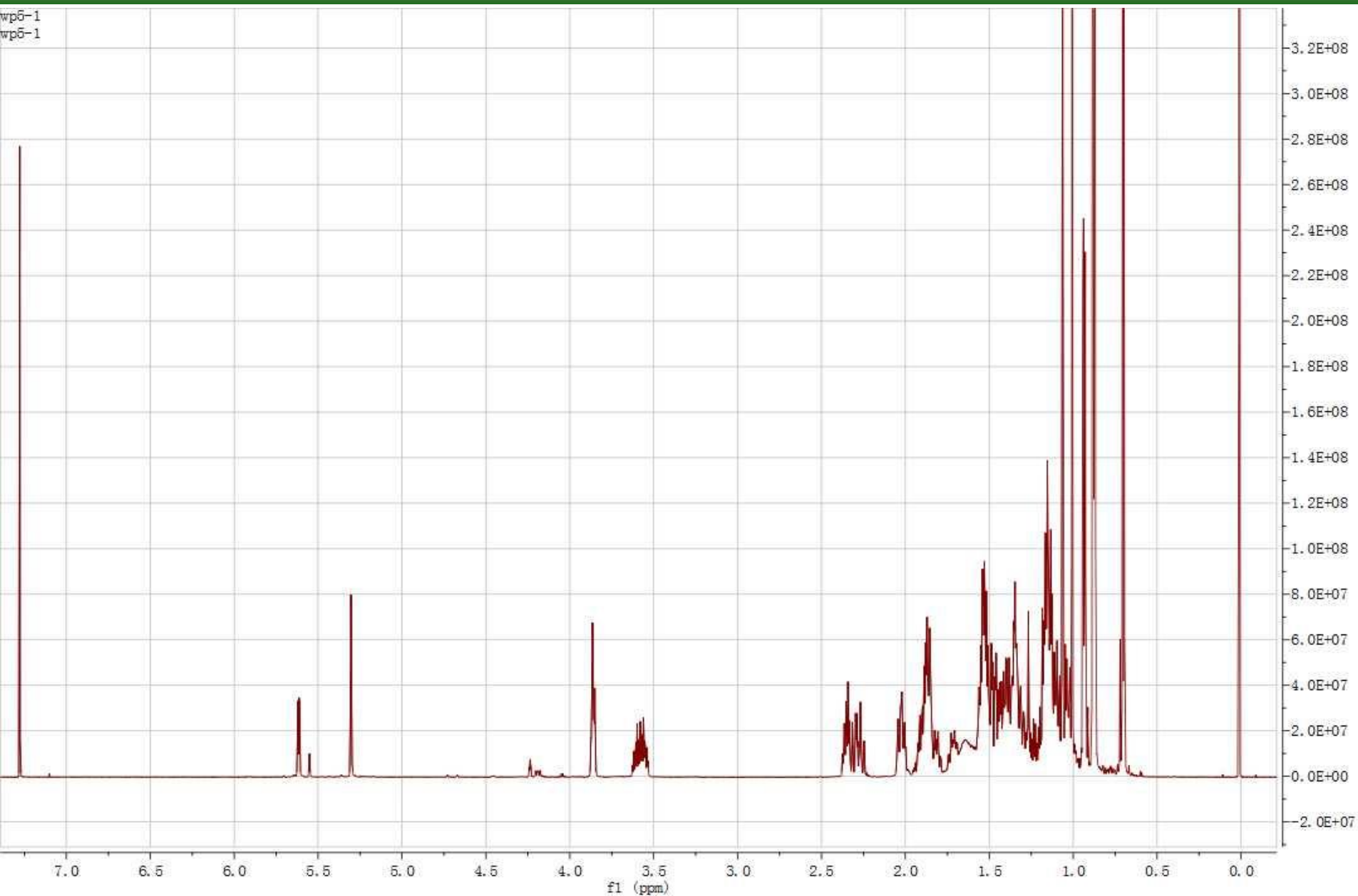
KI1144 CDC13 060905



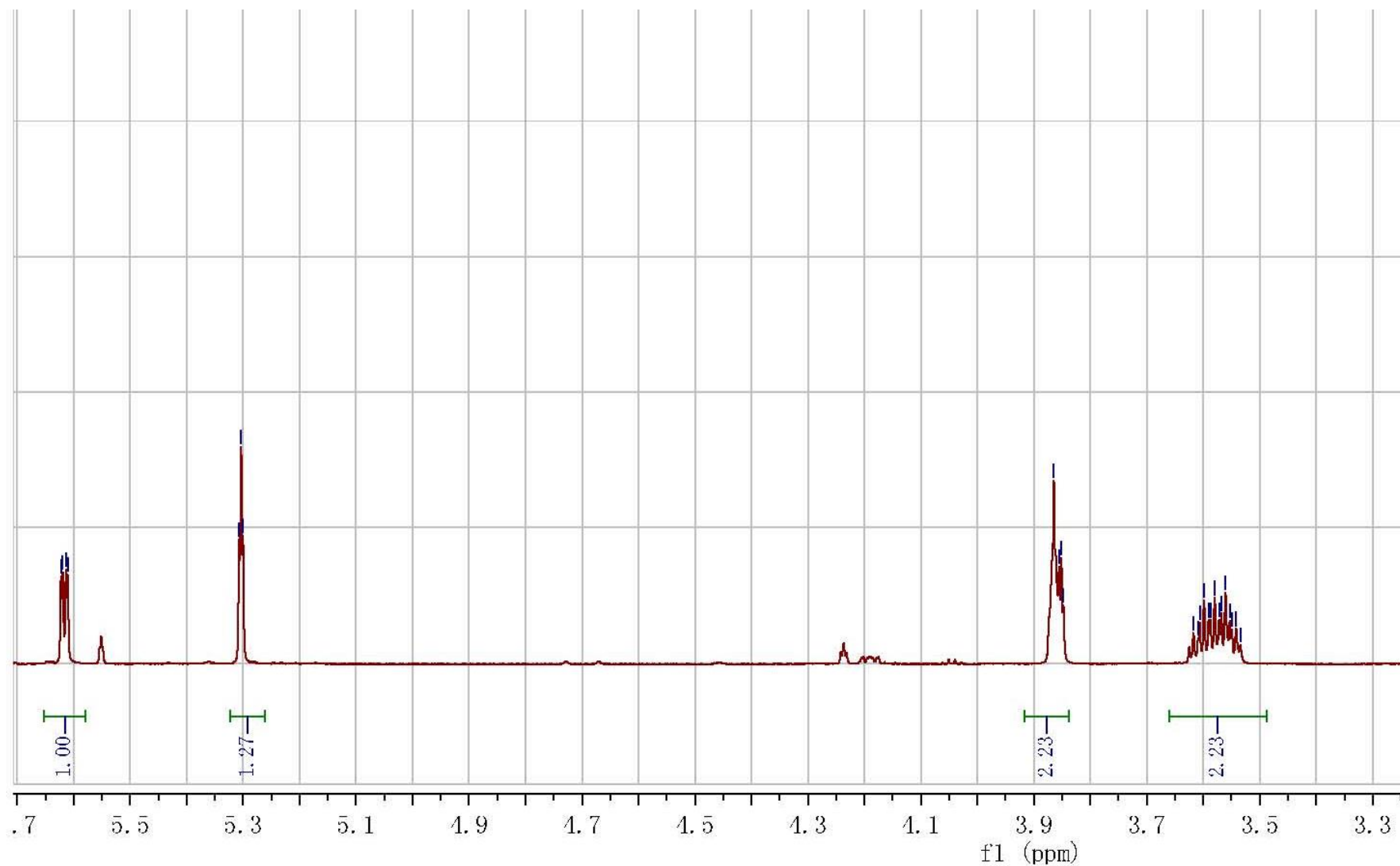
**纯度:** 氢个数是否有整数比例关系 (先看低场上, 后看高场)

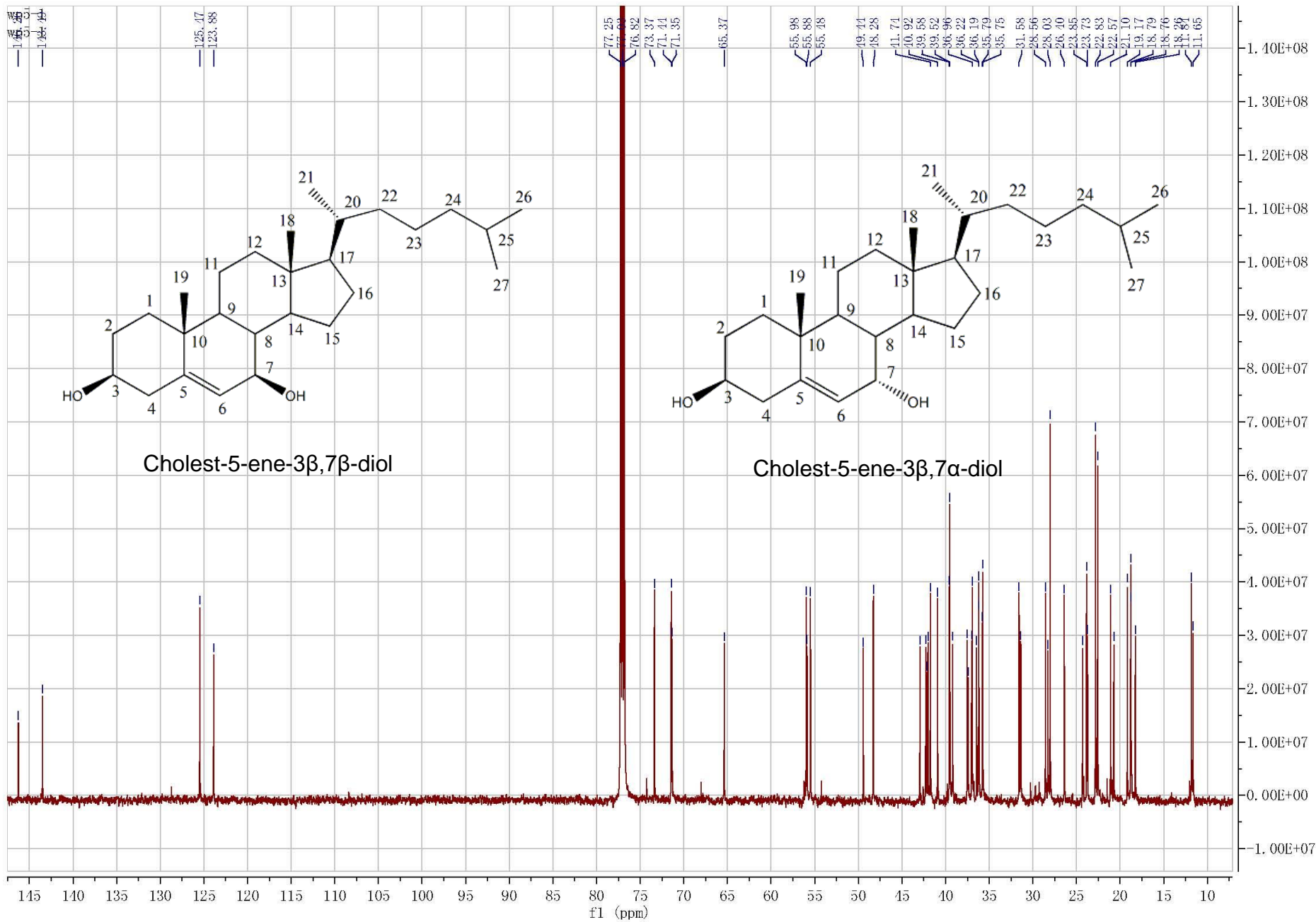
**量:** 比较溶剂峰和单个氢的高度

# 如何从氢谱上对混合物进行判断

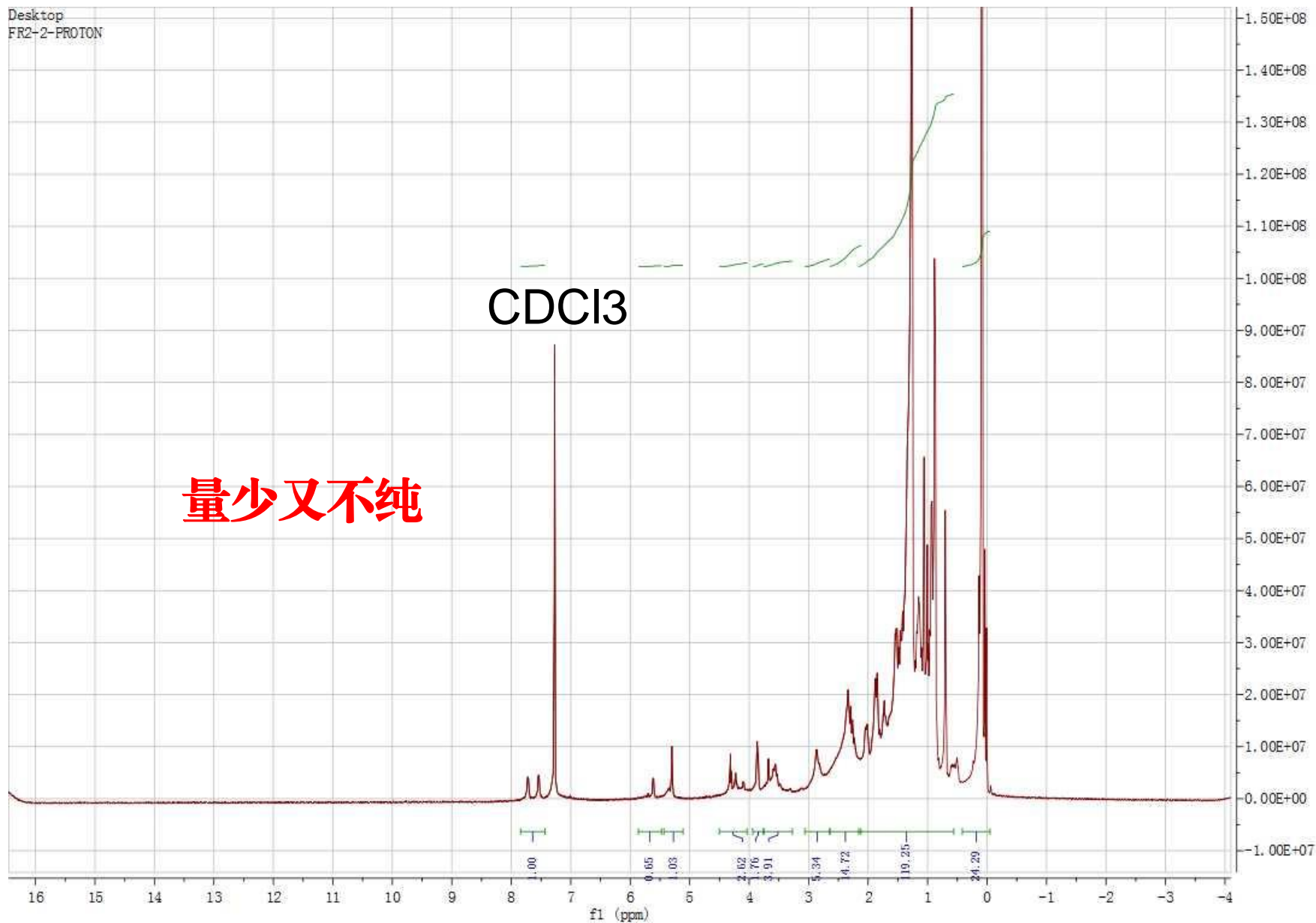


# 如何从氢谱上对混合物进行判断

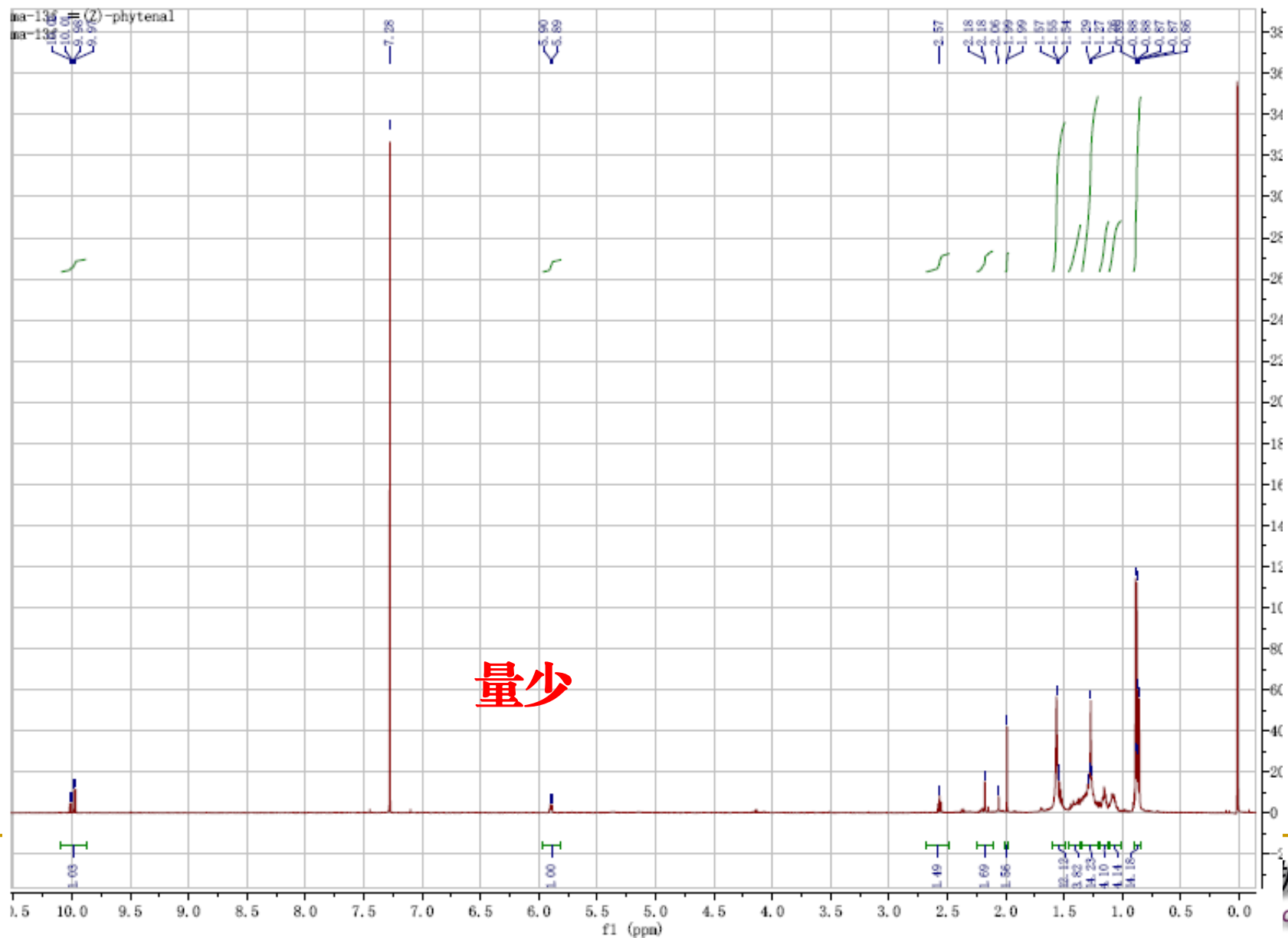




# 如何从氢谱上对化合物的纯度和量进行判断



# 如何从氢谱上对化合物的纯度和量进行判断



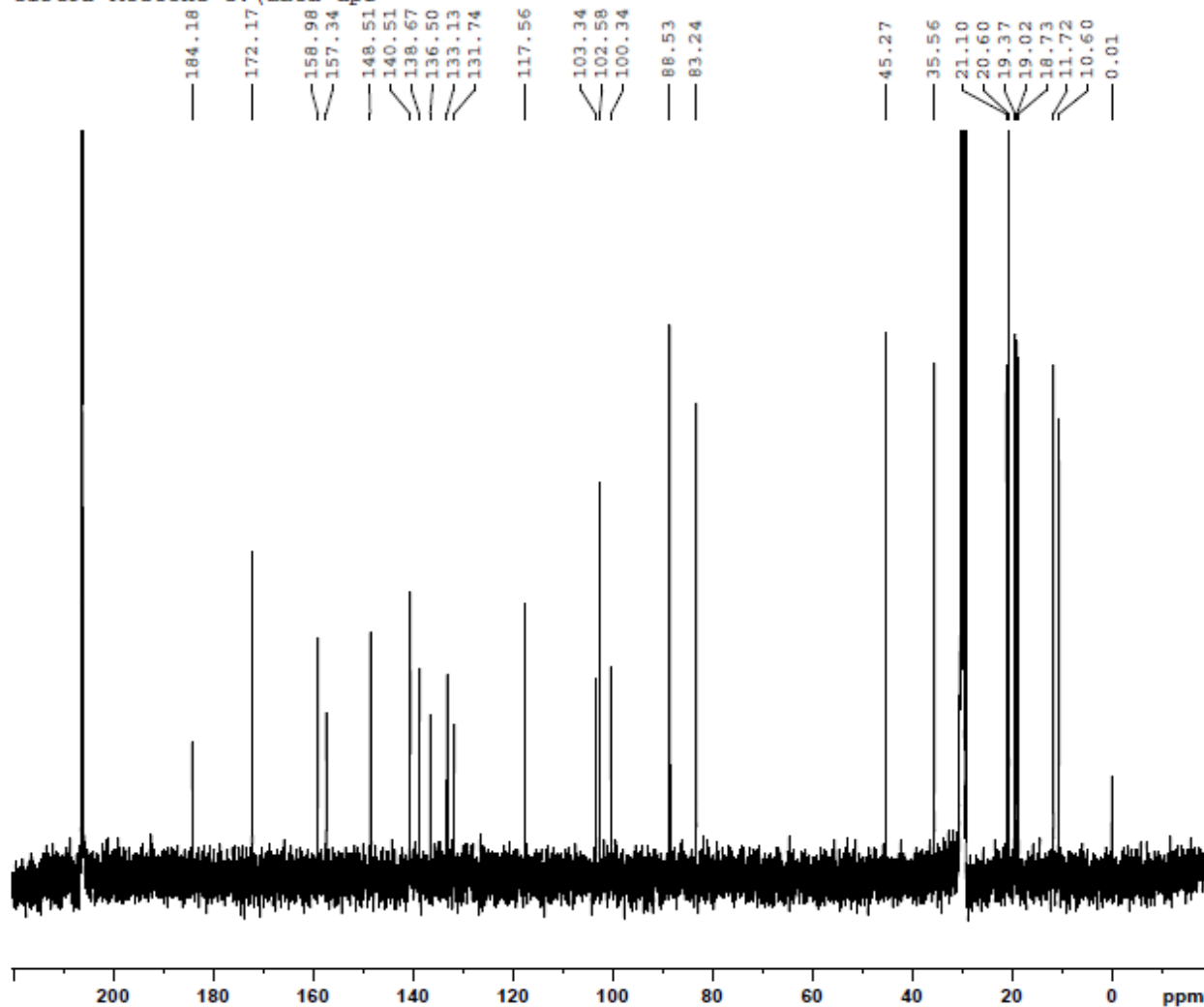
# 碳谱查询顺序

1. 精确查询
2. 模糊查询 (Nat)
3. 模糊查询 (Syn)
4. 不精确库查询



# 解新化合物方法举例

C13CPD Acetone C:\data dpf



Current Data Parameters  
NAME D-1-1  
EXPNO 2  
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters  
Date\_ 20140507  
Time\_ 15.18  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zgpg30  
TD 65536  
SOLVENT Acetone  
NS 1024  
DS 4  
SWH 24038.461 Hz  
FIDRES 0.366798 Hz  
AQ 1.3631988 sec  
RG 2050  
DW 20.800 usec  
DE 6.50 usec  
TE 297.3 K  
D1 2.00000000 sec  
D11 0.03000000 sec

----- CHANNEL f1 -----  
NUC1 13C  
P1 8.16 usec  
PLW1 63.00000000 W  
SFO1 100.6404326 MHz

----- CHANNEL f2 -----  
CPDPRG2 waltz16  
NUC2 1H  
PCPD2 90.00 usec  
PLW2 30.00000000 W  
PLW12 0.33919999 W  
PLW13 0.27474999 W  
SFO2 400.2016008 MHz

F2 - Processing parameters  
SI 32768  
SF 100.6302794 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 1.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40



按**从小到大**顺序输入，数字间用英文**半角逗号(,)**分隔例如：

如：21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

9.7, 10.8, 17.8, 18.1, 18.5, 19.7, 20.2, 34.7, 44.4, 82, 87.6, 99.4, 101.7, 102.4, 116.7, 130.8, 132, 135.6, 137.8, 139.6, 147.6, 156.4, 158, 171.3, 183.3

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差  <=2 相似度  % (>=50%)

13C NMR检索

NMR库化合物总数为: 566564 个

更新时间: 2014-5-7 8:03:19

[返回上一页](#)

查询结果: **共查到6个化合物 (查询结果仅供参考)**

1. penicitrinone A

$C_{23}H_{24}O_5$  相似度: 92%

Journal of Natural Medicines 2006 60 279-284

**New citrinin derivatives isolated from *Penicillium citrinum***

Daigo Wakana, Tomoo Hosoe, Takeshi Itabashi, Kaoru Okada and Galba Maria de Campos Takaki, et al.

[Structure](#)  [\$^{13}C\$  NMR](#) [Structure &  \$^{13}C\$  NMR](#) [碳谱模拟图](#)

2. pennicitrinone A

$C_{23}H_{24}O_5$  相似度: 92%

The Journal of Antibiotics 2009 62 225-227

**Pennicitrinone D, a new citrinin dimer from the halotolerant fungus *Penicillium notatum* B-52**

Zhi-Hong Xin, Wen-Liang Wang, Ya-Peng Zhang, Hua Xie, Qian-Qun Gu and Wei-Ming Zhu

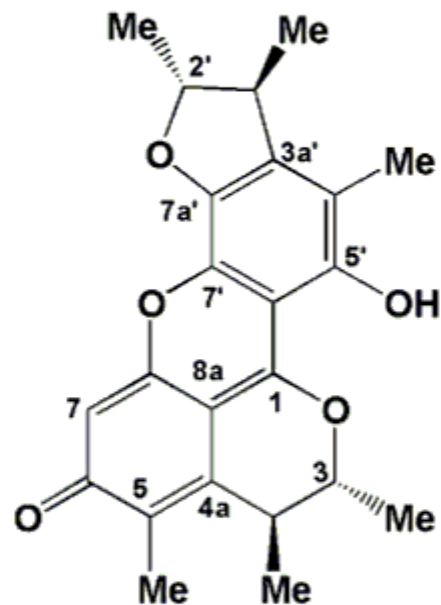
[Structure](#)  [\$^{13}C\$  NMR](#) [Structure &  \$^{13}C\$  NMR](#) [碳谱模拟图](#)

3. pennicitrinone D

$C_{23}H_{24}O_6$  相似度: 84%

正在等待 www.nmrdata.com 的响应...

penicitrinone A的结构图和碳谱:



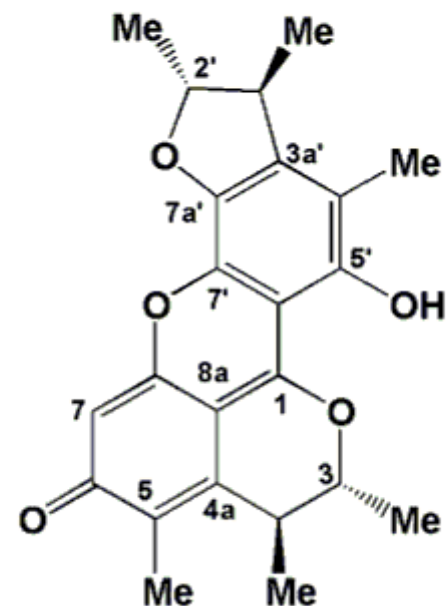
Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
	1	155.5
	3	82.3
	3-Me	21
	4	35
	4-Me	18.9
	4a	130.8

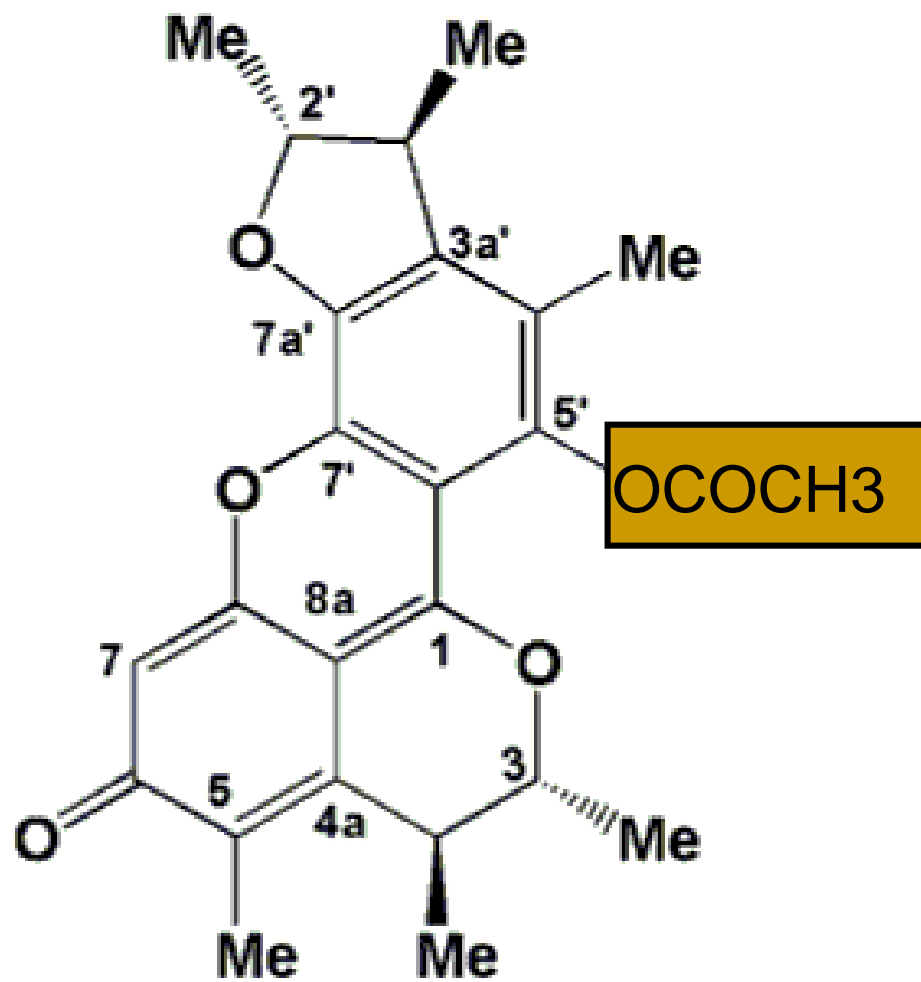
Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
CDCl <sub>3</sub>	1	155.5
	3	82.3
	3-Me	21
	4	35
	4-Me	18.9
	4a	130.8
	5	131.9
	5-Me	10.8
	6	184.4
	7	103.3
	8	158
	8a	100.1
	2'	88
	2'-Me	18.8
	3'	44.7
	3'-Me	19.1
	3a'	139.3
4'	116.5	
4'-Me	11.5	
5'	147.4	
6'	102.3	
7'	135.8	
7a'	137.9	

566564 个  
5-7 8:03:19

5-Me	10.8	9.7
4'-Me	11.5	10.8
2'-Me	18.8	17.8
4-Me	18.9	18.1
3'-Me	19.1	18.5
3-Me	21	19.7
		20.2
4	35	34.7
3'	44.7	44.4
3	82.3	82
2'	88	87.6
8a	100.1	99.4
6'	102.3	101.7
7	103.3	102.4
4'	116.5	116.7
4a	130.8	130.8
5	131.9	132
7'	135.8	135.6
7a'	137.9	137.8
3a'	139.3	139.6
5'	147.4	147.6
1	155.5	156.4
8	158	158
		171.3
6	184.4	183.3
	CDCl3	CD3COCD3
penicitrinone A		待解化合物

penicitrinone A的结构图和碳谱:

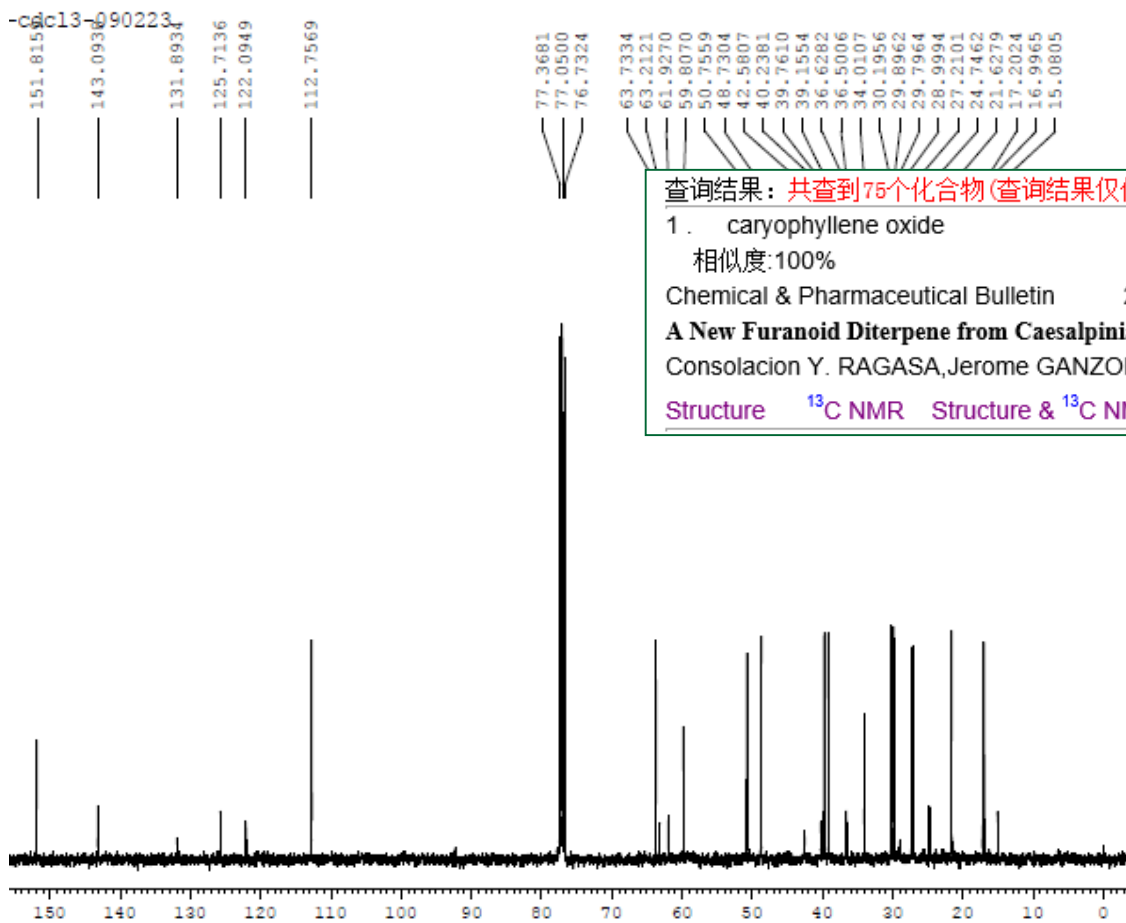




# 混合物的查询方法一

两种混合物，如果浓度相差较大，可将较高峰和较矮峰分成两组，分别查询较高峰

16.9,21.6,27.2,29.7,29.9,30.2,34,39.2,39.8,48.7,50.7,59.8,63.7,112.7,151.8



查询结果：共查到75个化合物(查询结果仅供参考)

1. caryophyllene oxide

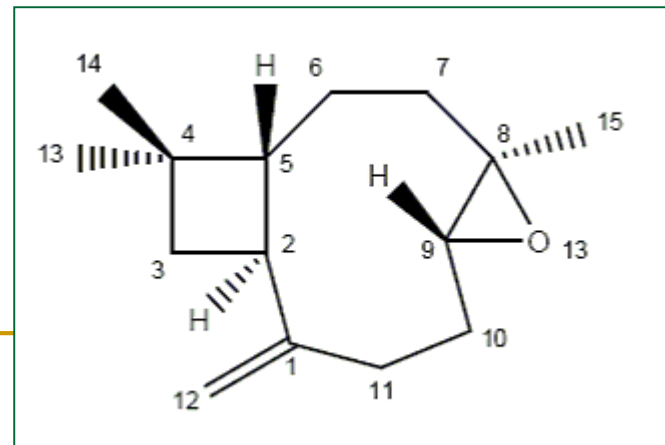
相似度:100%

Chemical & Pharmaceutical Bulletin 2003 51(10) 1208-1210

**A New Furanoid Diterpene from *Caesalpinia pulcherrima***

Consolacion Y. RAGASA, Jerome GANZON, Joy HOFILEÑA, Benjie TAMBOONG, and John A. RIDEOUT

[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)





较矮峰 15.1,17.2,24.7,28.9,36.5,36.6,40.2,42.5,61.9,63.2,122.1,125.7,131.9,143.1

查询结果: 共查到13个化合物(查询结果仅供参考)

1. humulene epoxide II

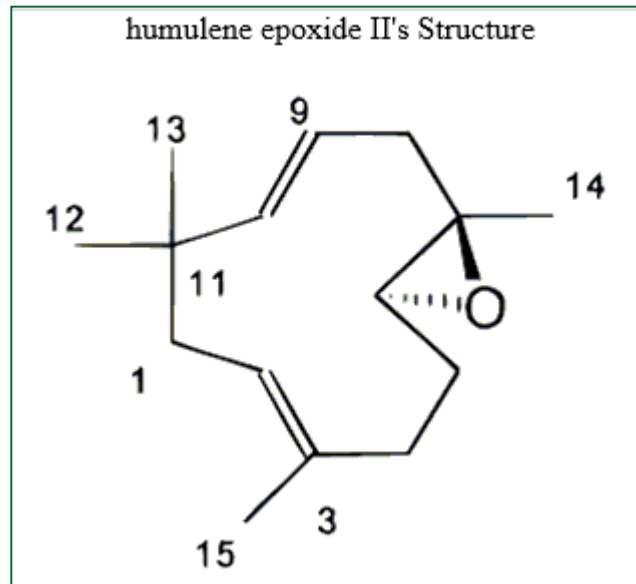
C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>O 相似度:93.3%

Journal of Natural Products 1996 59 1084-1086

Sesquiterpenes from *Baekkea frutescens*

Wing-Yan Tsui and Geoffrey D. Brown

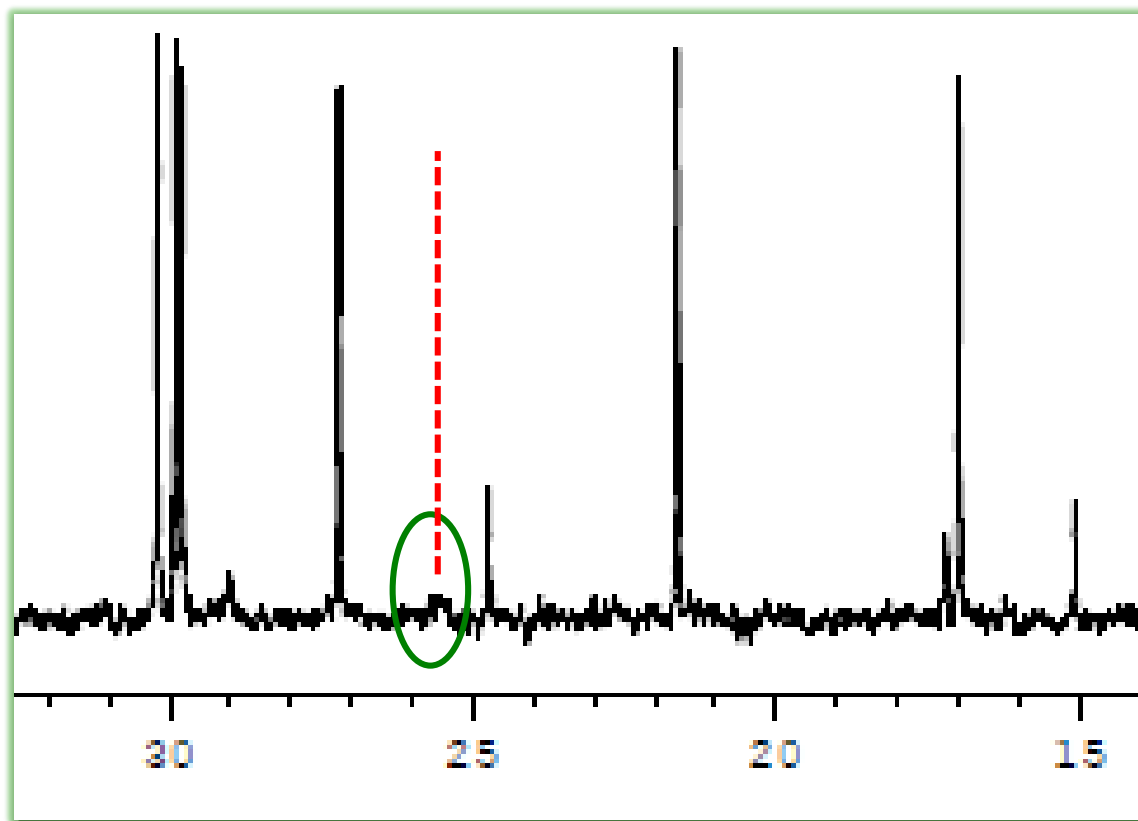
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)



humulene epoxide II的碳谱:

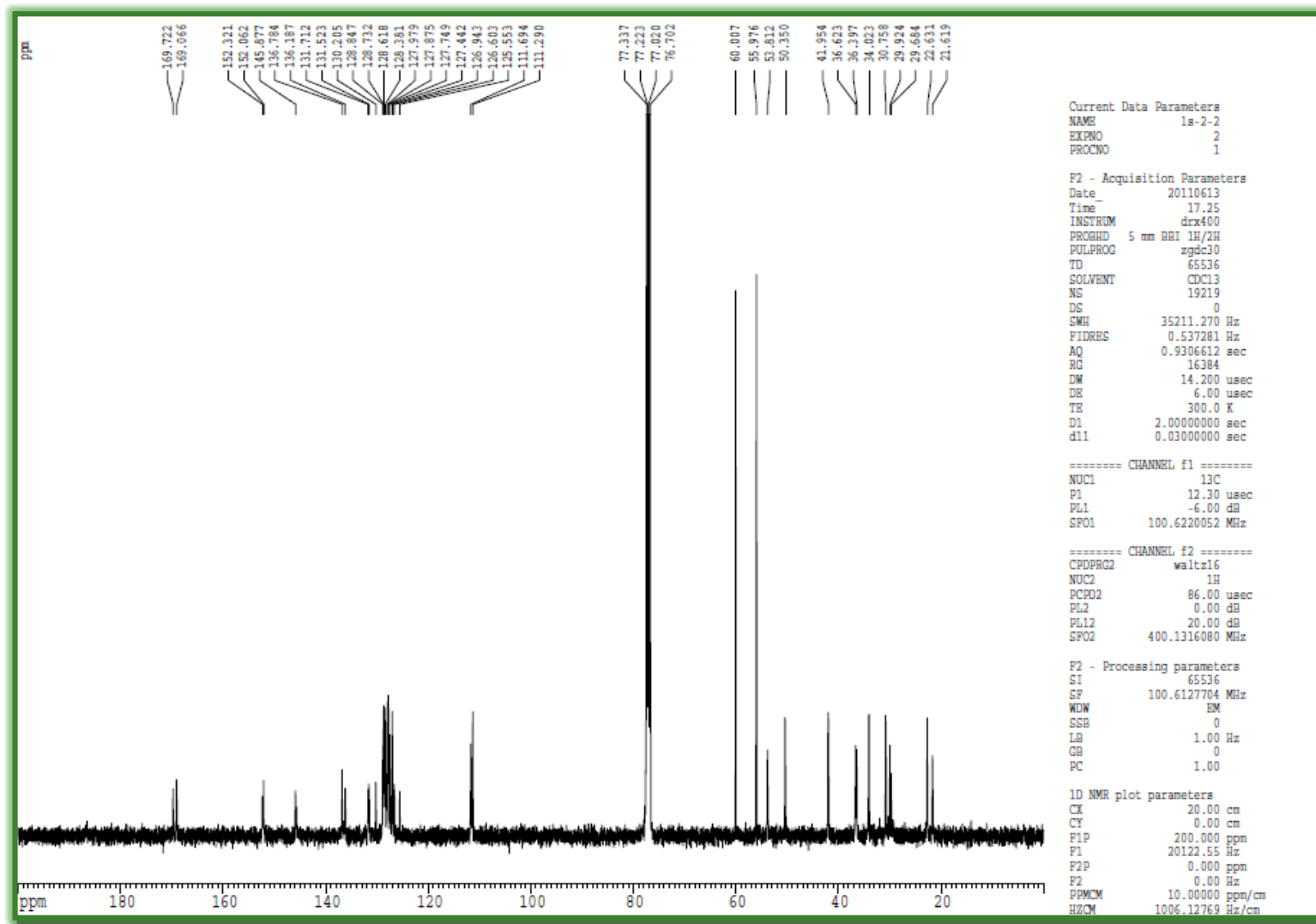
Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
CDCl <sub>3</sub>	1	40.2
	2	125.7
	3	131.9
	4	36.6
	5	24.8
	6	62
	7	63.2
	8	42.5
	9	122.1
	10	143.1
	11	36.5
	12	29
	13	25.6
	14	17.2
	15	15.1

经比较, 待查数据比文献中的碳谱数据少了个25.6



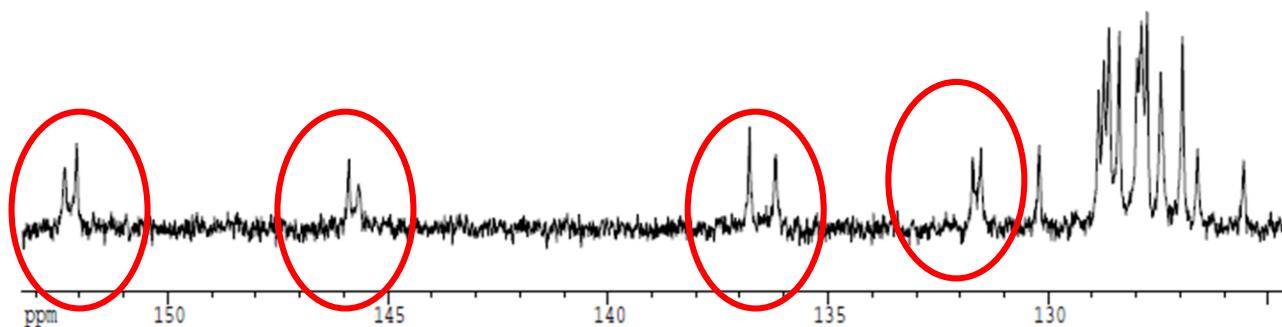
再一步核对图谱，发现25.6附近有一小峰，但未标出，  
确定两化合物为同一化合物

# 混合物的查询方法二：异构体的解析





## 局部放大图，峰成对出现



Current Data Parameters  
 NAME 1s-2-2  
 EXPNO 2  
 PROCNO 1

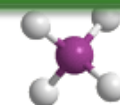
F2 - Acquisition Parameters  
 Date\_ 20110613  
 Time 17.25  
 INSTRUM drx400  
 PROBHD 5 mm BBI 1H/2H  
 PULPROG zgdc30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 19219  
 DS 0  
 SMH 35211.270 Hz  
 FIDRES 0.537281 Hz  
 AQ 0.9306612 sec  
 RG 16384  
 DW 14.200 usec  
 DE 6.00 usec  
 TE 300.0 K  
 D1 2.00000000 sec  
 d11 0.03000000 sec

===== CHANNEL f1 =====  
 NUC1 13C  
 P1 12.30 usec  
 PL1 -6.00 dB  
 SFO1 100.6220052 MHz

===== CHANNEL f2 =====  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 86.00 usec  
 PL2 0.00 dB  
 PL12 20.00 dB  
 SFO2 400.1316080 MHz

F2 - Processing parameters  
 SI 65536  
 SF 100.6127704 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

1D NMR plot parameters  
 CX 20.00 cm  
 CY 0.00 cm  
 FIP 153.293 ppm  
 F1 15423.20 Hz  
 F2P 124.540 ppm  
 F2 12530.28 Hz  
 PPMCM 1.43765 ppm/cm  
 HZCM 144.64552 Hz/cm



微谱数据

www.nmrdata.com

## 数据分析：将数据粗步分为两组，分别进行模糊查询

21.6, 22.6, 29.7, 29.9, 30.7, 34, 36.4, 36.6, 41.9,  
50.3, 53.8, 55.9, 60, 111.3, 111.7, 125.5, 126.6,  
126.9, 127.4, 127.7, 127.8, 127.9, 128.4, 128.6,  
128.7, 128.8, 130.2, 131.5, 131.7, 136.2, 136.7,  
145.6, 145.8, 152.1, 152.3, 169.1, 169.7



22.6, 29.9, 30.7, 34, 36.6, 41.9, 53.8, 60, 111.7,  
125.5, 126.9, 127.7, 127.9, 128.6, 128.8, 130.2,  
131.7, 136.7, 145.8, 152.3, 169.7



按**从小到大**顺序输入，数字间用英文**半角逗号(,)**分隔例如：

如：21.4,30.4,37.4,73.2,73.7,125.6,126.6,139.6,140.2,168.2

22.6, 29.9, 30.7, 34, 36.6, 41.9, 53.8, 60, 111.7, 125.5, 126.9, 127.7, 127.9  
, 128.6, 128.8, 130.2, 131.7, 136.7, 145.8, 152.3, 169.7

精确查询  模糊查询  深度查询  基团查询  不精确库

溶剂  容差   $\leq 2$  相似度  % ( $\geq 50\%$ )

13C NMR检索

查询结果: 共查到99个化合物(查询结果仅供参考)

1. N-acetyl-nornuciferin(Z)

C<sub>20</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>3</sub> 相似度:85.7%

Planta Medica 1992 58 184-187

Zur NMR-Spektroskopie von N-Acylaporphin-Alkaloiden aus *Tinospora crispa*

NMR-Assignments of N-Acylaporphine Alkaloids from *Tinospora crispa*

[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

2. N-acetyl-nornuciferin(E)

C<sub>20</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>3</sub> 相似度:85.7%

Planta Medica 1992 58 184-187

Zur NMR-Spektroskopie von N-Acylaporphin-Alkaloiden aus *Tinospora crispa*

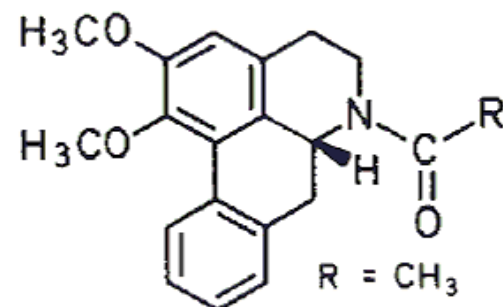
NMR-Assignments of N-Acylaporphine Alkaloids from *Tinospora crispa*

[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

经仔细比对, 待查化合物即为上述文献中的两个化合物

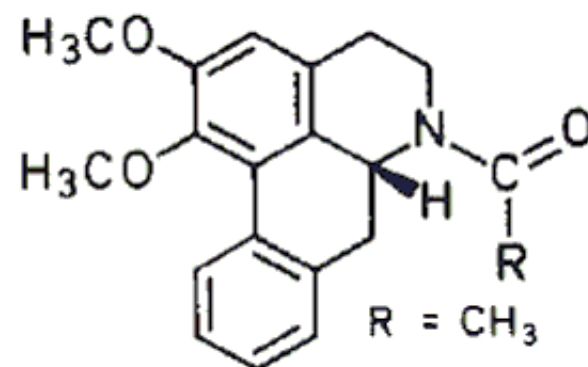
没有100%相似, 是因为部分数据在分组时出现人为错误

N-acetyl-nornuciferin(Z)的结构图和碳谱:



Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
	C-1	145.8
	C-2	152
	C-3	111.2

N-acetyl-nornuciferin(E)的结构图和碳谱:



Solvent	Position	<sup>13</sup> C NMR
	C-1	145.6
	C-2	152.3
	C-3	111.6

# 混合物的查询方法三

**问题：2个或2个以上的化合物，分组存在困难，量少，不方便继续纯化，或极性相似，不易分开**

**解决方法：借助混合物查询功能（新功能，还未对外开放）**

[micronmr@126.com](mailto:micronmr@126.com)



# 表1 收录的部分SCI期刊

编号	期刊名称	中文名	影响因子
1	Angewandte Chemie International Edition	德国应用化学（国际版）	12.102
2	Journal of the American Chemical Society	美国化学会志	14.357
3	Chemical Communications	化学通讯	6.290
4	Chemistry – A European Journal	化学: 欧洲杂志	5.160
5	Organic Letters	有机快报	6.492
6	Journal of Medicinal Chemistry	医药化学杂志	6.253
7	Scientific Reports	科学报告	4.122
8	Journal of Chromatography A	色谱杂志 A	3.716
9	Chemistry – An Asian Journal	化学: 亚洲杂志	3.692
10	The Journal of Organic Chemistry	有机化学杂志	4.805
11	British Journal of Pharmacology	英国药理学杂志	5.259
12	Antiviral Research	抗病毒研究	4.909
13	Pharmaceutical Research	药学研究	3.26
14	ChemBioChem	生物化学	3.944
15	Marine Drugs	海洋药物	4.379
16	Chemical Research in Toxicology	毒物学领域的化学研究	3.779
17	Analytical and Bioanalytical Chemistry	分析和生物分析化学	3.778
18	Organic & Biomolecular Chemistry	有机及生物分子化学	3.696
19	Toxicology	毒理学	3.681
20	Food Chemistry	食品化学	4.946

21	FEBS Letters	欧洲生物化学学会联合会快报	3.169
22	Marine Biotechnology	海洋生物工程	3.269
23	Applied Microbiology and Biotechnology	应用微生物学与生物技术	3.337
24	Phytochemistry	植物化学	3.186
25	European Journal of Medicinal Chemistry	欧洲医药化学杂志	3.902
26	European Journal of Organic Chemistry	欧洲有机化学杂志	2.882
27	Cancer Science	癌科学	3.523
28	Chemistry Central Journal	化学核心期刊	2.552
29	Phytomedicine	植物医学	2.937
30	Journal of Natural Products	天然产物杂志	3.885
31	Journal of Pharmaceutical Sciences	药物科学杂志	2.590
32	Tetrahedron	四面体	2.377
33	Journal of Ethnopharmacology	民族药理学杂志	3.115
34	Food and Chemical Toxicology	食品化学毒物学	2.895
35	Plant Science	植物科学	3.607
36	Archives of Biochemistry and Biophysics	生物化学与生物物理学集刊	3.017
37	Bioorganic & Medicinal Chemistry	生物有机化学与医药化学	2.923
38	Chemico-Biological Interactions	化学生物相互作用	2.577
39	Steroids	甾体	2.513
40	Plos One (Public Library of Science, ONE)		2.766
40	Journal of Agricultural and Food Chemistry	农业与食品化学杂志	2.912

43	Research in Microbiology	微生物学研究	2.705
44	Journal of Industrial Microbiology & Biotechnology	工业微生物学与生物技术杂志	2.439
45	Journal of Separation Science	分离科学	2.737
46	<b>Tetrahedron Letters</b>	<b>四面体快报</b>	2.347
47	Journal of Chemical Ecology	化学生态学杂志	2.747
48	Phytochemical Analysis	植物化学成分分析	2.341
49	<b>New Journal of Chemistry</b>	<b>新化学杂志</b>	3.277
50	International Journal of Molecular Sciences	国际分子科学杂志	2.862
51	<b>Bioorganic &amp; Medicinal Chemistry Letters</b>	<b>生物有机化学与医药化学快报</b>	2.486
52	<b>Journal of Integrative Plant Biology</b>	<b>中国植物学报 (英文版)</b>	3.670
53	Microbial Biotechnology	微生物技术	3.081
54	Life Sciences	生命科学	2.702
55	European Journal of Pharmacology	欧洲药理学杂志	2.532
56	Toxicon	毒素	2.492
57	Biochemical and Biophysical Research Communications	生物化学与生物物理学研究通讯	2.297
58	Industrial Crops and Products	工业原料作物与制品	2.837
59	Journal of Functional Foods	功能性食品杂志	3.574
60	Journal of Biomedicine and Biotechnology	生物医学与生物技术杂志	3.169

61	Journal of Applied Phycology	应用藻类学杂志	2.411
62	Molecules	分子	3.098
63	Chirality	手性	2.350
64	Australian Journal of Chemistry	澳大利亚化学杂志	1.427
65	Journal of Applied Microbiology	应用微生物学杂志	2.337
66	Carbohydrate Research	碳水化合物研究	2.332
67	Microbiological Research	微生物学研究	2.308
68	Chemical Biology & Drug Design	化学生物学和药物设计	2.282
69	Naturwissenschaften	自然科学期刊	2.278
70	Plant Cell Reports	植物细胞报告	2.274
71	Pest Management Science	害虫防治科学	2.251
72	BMC Complementary and Alternative Medicine	BMC补充与替代医学	2.241
73	Journal of Pharmacy and Pharmacology	药学与药理学杂志	2.175
74	Planta Medica	药用植物	2.494
75	Parasitology Research	寄生虫学研究	2.149
76	Lipids	类脂	2.129
77	Spectrochimica Acta Part A	光谱化学学报A	2.098
78	Antonie van Leeuwenhoek	国际普通生物学和分子生物学杂志	2.091
79	Phytotherapy Research	植物疗法研究	2.086
80	International Biodeterioration & Biodegradation	国际生物腐败和生物降解	2.074

81	FEMS Microbiology Letters	欧洲微生物学会联合会微生物学快报	2.044
82	Applied Biochemistry and Biotechnology	应用生物化学与生物技术	1.943
83	Fitoterapia	植物疗法	2.408
84	Chemistry & Biodiversity	化学与生物多样性	1.444
85	Journal of the American Oil Chemists' Society	美国油类化学家学会期刊	1.773
86	Inflammopharmacology	炎症药理学	1.747
87	Forest Pathology	森林病理学	1.740
88	Archiv der Pharmazie	制药文献	2.043
89	Journal of the Iranian Chemical Society	伊朗化学学会杂志	1.3
90	Biotechnology Letters	生物技术快报	1.683
91	Mycological Progress	菌物学进展	1.663
92	Journal of Food Science	食品科学	1.658
93	Biological and Pharmaceutical Bulletin	生物学与药学通报	1.657
94	The Journal of Antibiotics	抗菌素杂志	2.173
95	Journal of Biosciences	生物科学杂志	1.648
96	Journal of Molecular Structure	分子结构杂志	1.634
97	Letters in Applied Microbiology	应用微生物学快报	1.622
98	Archives of Pharmacal Research	药物研究文献	2.49
99	Chemical & Pharmaceutical Bulletin	化学与药学通报	1.228
100	Chemistry Letters	化学快报	1.55

101	European Food Research and Technology	欧洲食品研究与技术	1.566
102	Mycological Progress	菌物学进展	1.554
103	Monatshefte für Chemie	化学月报	1.131
104	World Journal of Microbiology and Biotechnology	世界微生物学与生物技术杂志	1.532
105	Records of Natural Products	天然产物记录	0.765
106	Helvetica Chimica Acta	瑞士化学学报	1.087
107	Magnetic Resonance in Chemistry	化学中的磁共振	1.437
108	Bulletin of the Chemical Society of Japan	日本化学会通报	1.436
109	Journal of the Science of Food and Agriculture	食品与农业科学杂志	1.436
110	Journal of the Brazilian Chemical Society	巴西化学会志	1.096
111	Flavour and Fragrance Journal	香料与香味杂志	1.424
112	Journal of Oleo Science	油科学杂志	1.417
113	European Journal of Plant Pathology	欧洲植物病理学杂志	1.413
114	Journal of Natural Medicines	生药学杂志	1.67
115	Arabian Journal of Chemistry	阿拉伯化学杂志	3.613
116	Journal of Applied Entomology	应用昆虫学杂志	1.311
117	Biotechnology and Bioprocess Engineering	生物技术和生物处理工程	1.278
118	Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry	生物科学、生物技术与生物化学	1.276
119	Medicinal Chemistry Research	药物化学研究	1.271
120	Journal of Basic Microbiology	基础微生物学杂志	1.266

121	Canadian Journal of Chemistry	加拿大化学杂志	1.003
122	Natural Product Communications	天然产物通讯	0.884
123	Phytochemistry Letters	植物化学快报	1.575
124	Journal of Heterocyclic Chemistry	杂环化学杂志	1.220
125	Mycoscience	日本真菌学会会报	1.212
126	Bioorganic Chemistry	生物有机化学	1.211
127	Cytotechnology	细胞工程	1.207
128	Chromatographia	色谱学	1.195
129	Journal of Chemical Sciences	化学科学杂志	1.177
130	Chemical Papers	化学论文	1.326
131	The Journal of Microbiology	微生物学杂志	1.095
132	Chemistry of Natural Compounds	天然产物化学	0.473
133	Science China Chemistry	中国科学 化学(英文版)	2.429
134	Natural Product Research	天然产物研究	1.057
135	Die Pharmazie	药理学	1.264
136	Central European Journal of Biology	中欧生物杂志	1.000
137	Heterocycles	杂环	1.107
138	Chinese Chemical Letters	中国化学快报	1.947
139	Journal of Wood Science	木材科学杂志	0.958
140	Journal of Asian Natural Products Research	亚洲天然产物研究	1.009

141	Turkish Journal of Chemistry	土耳其化学杂志	1.098
142	Chinese Journal of Analytical Chemistry	分析化学	0.941
143	Fisheries Science	水产科学	0.937
144	Biochemical Systematics and Ecology	生化分类学与生态学	0.988
145	Bulletin of the Korean Chemical Society	韩国化学会通报	0.793
146	Journal of the Serbian Chemical Society	塞尔维亚化学会志	0.970
147	Pharmaceutical Biology	药用生物学	0.878
148	Zeitschrift für Naturforschung B	自然研究杂志 B	0.686
149	African Journal of Pharmacy and Pharmacology	非洲药物学与药理学期刊	0.839
150	Letters in Organic Chemistry	有机化学快报	0.756
151	Tropical Journal of Pharmaceutical Research	热带药学研究杂志	0.820
152	Zeitschrift für Naturforschung C	自然研究杂志 C	0.709
153	Química Nova	新化学	0.617
154	Chinese Journal of Chemistry	中国化学 (英文版)	0.755
155	Journal of Food Safety	食品安全杂志	0.720
156	Annals of Microbiology	微生物学纪事	0.689
157	Journal of the Chinese Chemical Society	中国化学会志	0.678
158	Indian Journal of Chemistry Section B	印度化学杂志	0.648
159	Russian Journal of Organic Chemistry	俄罗斯有机化学杂志	0.648
160	Russian Journal of Bioorganic Chemistry	俄罗斯生物有机化学杂志	0.636



161	Journal of Pesticide Science	农药科学杂志	0.722
162	Journal of Chemical Research	化学研究杂志	0.633
163	Chemical Journal of Chinese Universities	高等学校化学学报	0.791
164	Chinese Journal of Organic Chemistry	有机化学	1.309
165	Journal of Chemical Crystallography	化学结晶学杂志	0.503
166	Acta Chimica Sinica	化学学报	1.843
167	Acta Crystallographica Section C	晶体学报 C	0.326
168	Chinese Journal of Oceanology and Limnology	中国海洋湖沼学报	0.657
169	Food Science and Biotechnology	食品科学与食品生物技术	0.653
170	Yakugaku Zasshi	日本药学杂志	0.161
171	Chemical Research in Chinese Universities	高等学校化学研究	1.086
172	Russian Chemical Bulletin	俄罗斯化学通报	0.579
173	Pharmaceutical Chemistry Journal	药物化学杂志	0.452
174	Journal of the Korean Society for Applied Biological Chemistry	韩国应用生物化学杂志	0.690
175	Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences	巴西药学杂志	0.264
176	Asian Journal of Chemistry	亚洲化学	
177	Heterocyclic Communications	杂环通讯	0.593
178	Chinese Journal of Natural Medicines	中国天然药物	1.382
179	Natural Products and Bioprospecting	应用天然产物	

# 新功能介绍1. 模糊查询中的数据分析



微谱数据

[www.nmrdata.com](http://www.nmrdata.com)

---

查询结果: 共查到2个化合物(查询结果仅供参考)

1. stagonolide E

$C_{10}H_{14}O_3$  相似度:90%

Journal of Natural Products 2008 71(1) 31-34

**Stagonolides B-F, Nonenolides Produced by Stagonospora cirsii, a Potential Mycoherbicide of Cirsium arvense**

Antonio Evidente, Alessio Cimmino, Alexander Berestetskiy, Galina Mitina, Anna Andolfi, and Andrea Motta

[Structure](#)  [\$^{13}C\$  NMR](#) [Structure &  \$^{13}C\$  NMR](#) [数据分析](#) [期刊地址](#)

---

2. Stagonolide E

相似度:90%

Archives of Pharmacal Research 2011 Vol 34, No 5 709-714

**Modiolide and Pyrone Derivatives from the Sea Fan-derived Fungus Curvularia sp. PSU-F22**

Kongkiat Trisuwan, Vatcharin Rukachaisirikul, Souwalak Phongpaichit, Sita Preedanon, and Jariya Sakayaroj

[Structure](#)  [\$^{13}C\$  NMR](#) [Structure &  \$^{13}C\$  NMR](#) [数据分析](#) [期刊地址](#)

---



微谱数据

[www.nmrdata.com](http://www.nmrdata.com)

www.nmrdata.com/DataMatch.aspx?ccid=2E62... \_ □ ×

ID	您的数据	微谱CNMR	Description
1	168.2	168.2	OK
2	139.6	140.2	OK
3		139.6	
4	126.6	126.6	OK
5	125.6	125.6	OK
6	73.7	73.7	OK
7	73.2	73.2	OK
8	37.4	37.4	OK
9	35.1		
10	30.4	30.4	OK
11	21.4	21.4	OK

## 新功能介绍2. 微微查

[<sup>13</sup>C NMR库查询](#) | [化合物信息查询](#) | [化合物信息复合查询](#) | 当前单位：微谱数据

NMR库化合物总数为：1084705 个

更新时间：2018-10-22 12:31:25

新! [微谱-微微查全网公测入口](#)

# 新功能介绍2. 微微查

第 417 楼

39.174.135.95 :

比如一个化合物是新结构，但是是由A+B组成的骨架，A、B是已经的，能不能上线这个功能

发布时间：[2018-10-23 17:19:37]

比如一个化合物是新结构，但是是由A+B组成的骨架，A、B是已知的，能不能上线这个功能，给出化合物的内部可能的组成。

## 微谱数据-微微查询

**tip**此处不用输入化合物所有碳谱,针对亚结构或基团的一种碳谱数据查询,不限定碳原子的个数,比基团查询更完善,准确度更高

溶剂：全部 ▾ 容差：1

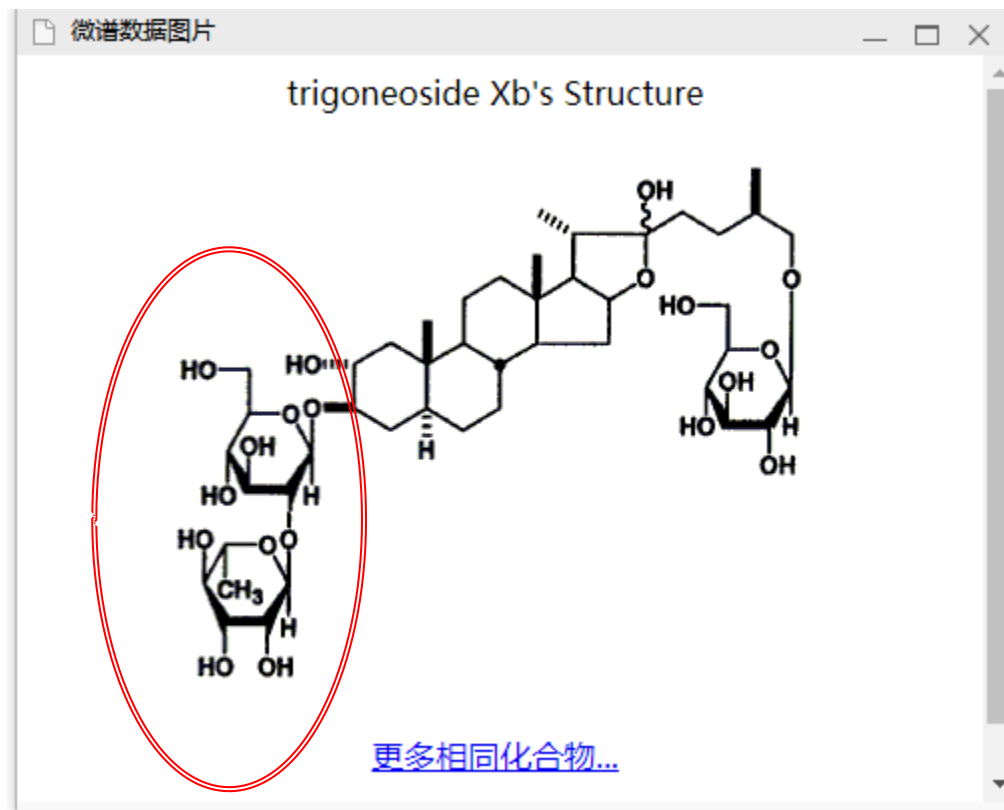
微微查

## 新功能介绍2. 微微查

102.9, 76.0, 77.1, 78.7, 77.6, 61.9, 103.1, 73.1, 73.2, 74.4, 70.8, 19.0

微谱数据-碳谱

C-25	34.7
C-26	75.2
C-27	17.4
C-1'	101.4
C-2'	78.1
C-3'	78.2
C-4'	72
C-5'	79.5
C-6'	62.6
C-1''	102.1
C-2''	72.4
C-3''	72.8
C-4''	74.1
C-5''	69.4
C-6''	18.8
C-1'''	104.9
C-2'''	75.2
C-3'''	78.5
C-4'''	71.8
C-5'''	78.2
C-6'''	62.9



# THANKS

[mawh08@126.com](mailto:mawh08@126.com)

QQ 20158844

13524236720