

# 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. 氕代溶剂峰
  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*

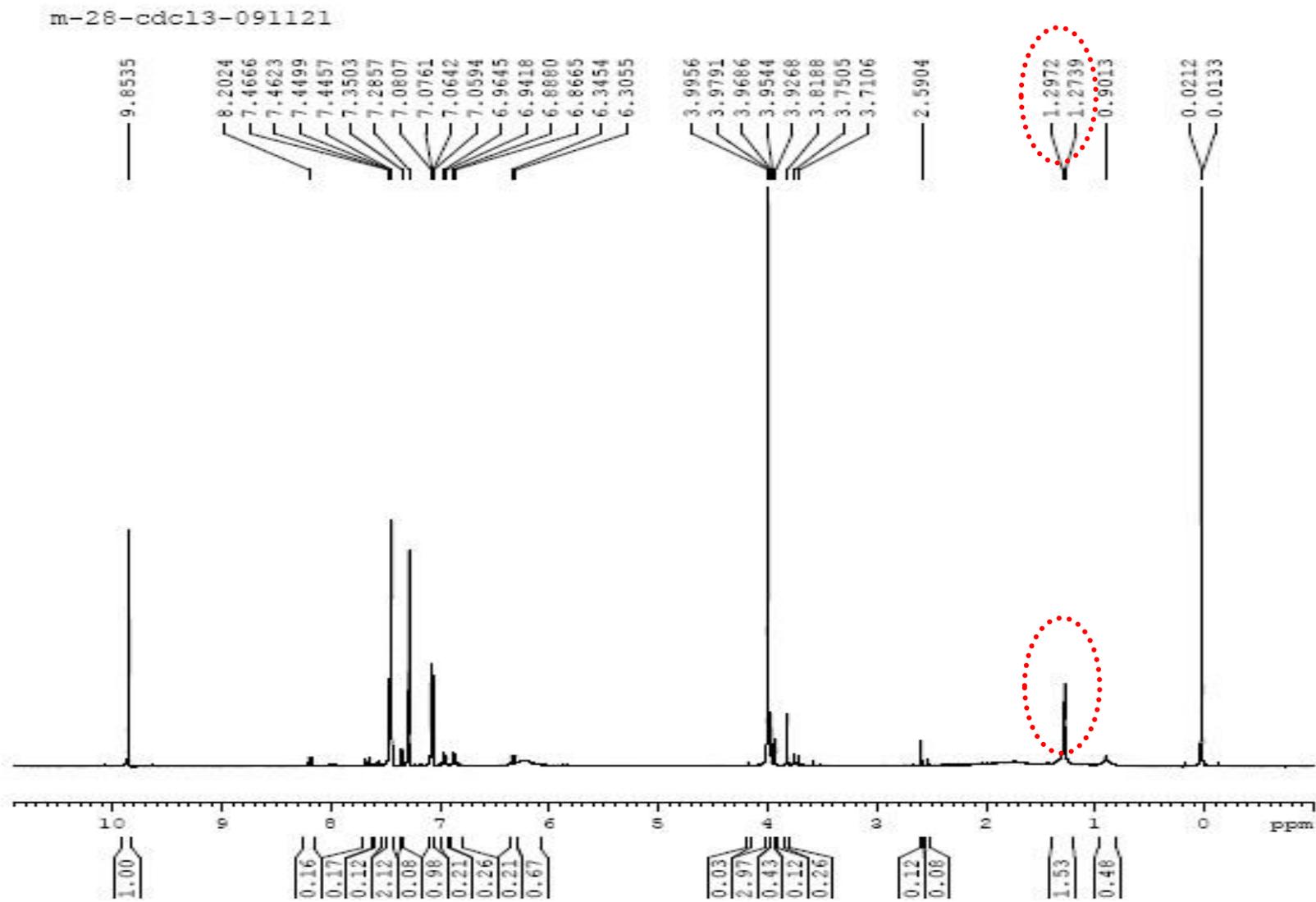
Table 2.  $^{13}\text{C}$  NMR Data<sup>a</sup>

|                                 |                        | $\text{CDCl}_3$  | $(\text{CD}_3)_2\text{CO}$            | $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$ | $\text{C}_6\text{D}_6$ | $\text{CD}_3\text{CN}$               | $\text{CD}_3\text{OD}$ | $\text{D}_2\text{O}$ |
|---------------------------------|------------------------|------------------|---------------------------------------|----------------------------|------------------------|--------------------------------------|------------------------|----------------------|
| solvent signals                 |                        | $77.16 \pm 0.06$ | $29.84 \pm 0.01$<br>$206.26 \pm 0.13$ | $39.52 \pm 0.06$           | $128.06 \pm 0.02$      | $1.32 \pm 0.02$<br>$118.26 \pm 0.02$ | $49.00 \pm 0.01$       |                      |
| 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                |

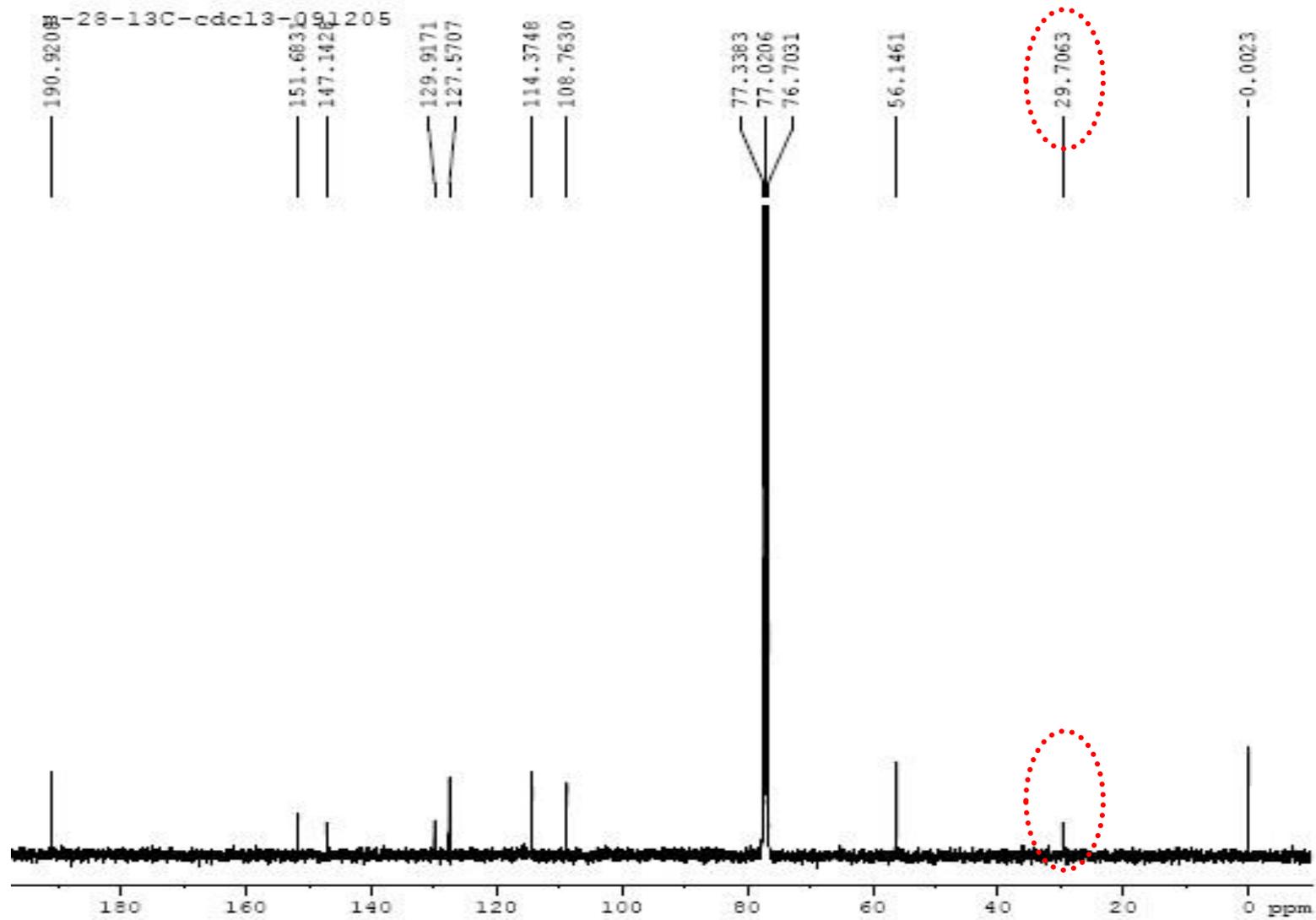
Table 2.  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR Data<sup>a</sup>

|                            | 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**

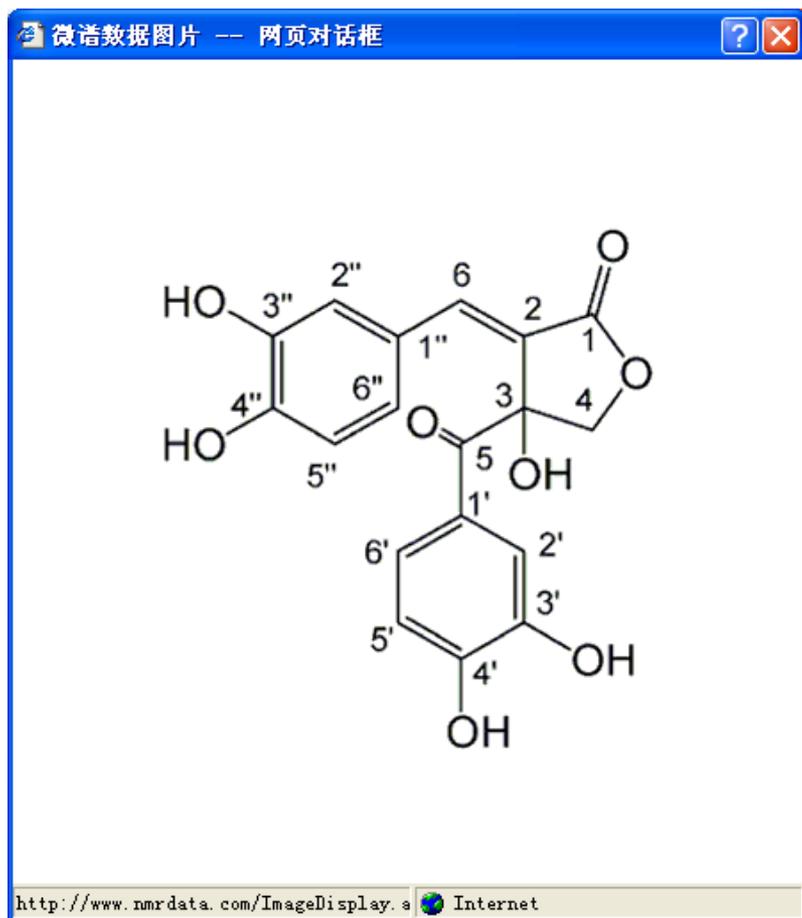
---

**Name:** actaealactone  
**Formula:**  $C_{18}H_{14}O_8$   
**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

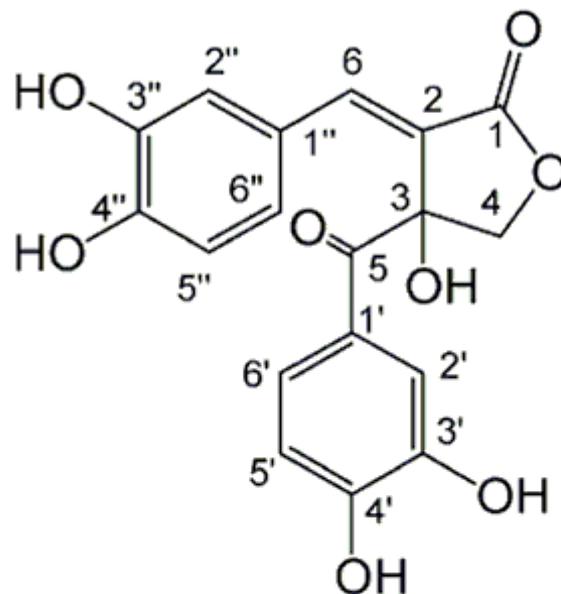
www.nmrdata.com/DataParticular.aspx?id=16225

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

按从小到大的顺序输入, 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)**

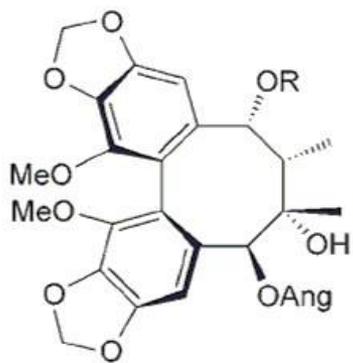
---

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](#)

---

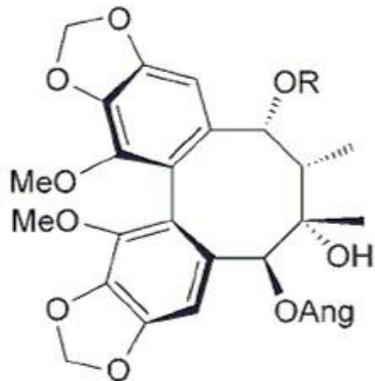
2. kadsurindutin B  
 $C_{27}H_{30}O_{10}$  相似度:86.2%  
Chemistry & Biodiversity 2007 Vol. 4 966  
**Dibenzocyclooctane Lignans from the Stems of Kadsura induta and Their Antiviral Effect on Hepatitis B Virus**  
Wenhui Ma, Xiaolin Ma, Hai Huang, Pei Zhou, and Daofeng Chen  
[Structure](#) [13C NMR](#)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



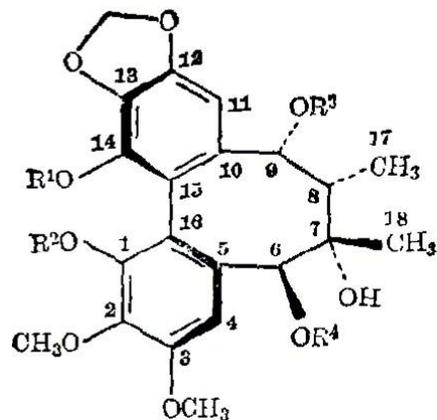
R = Ac

1

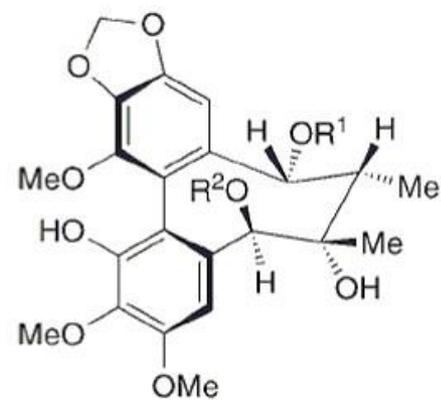


R = H

2

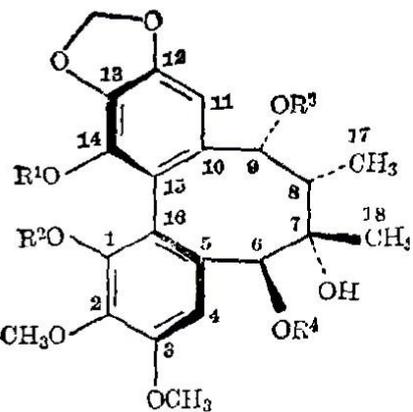


3

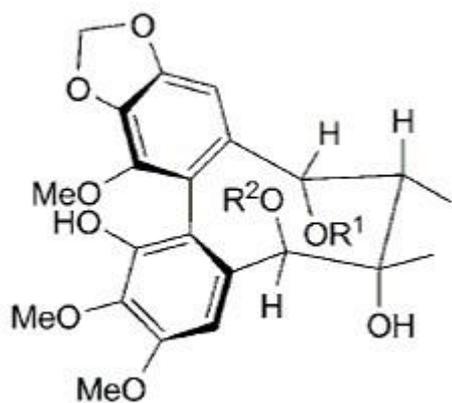


R<sup>1</sup> = Ac, R<sup>2</sup> = Bz

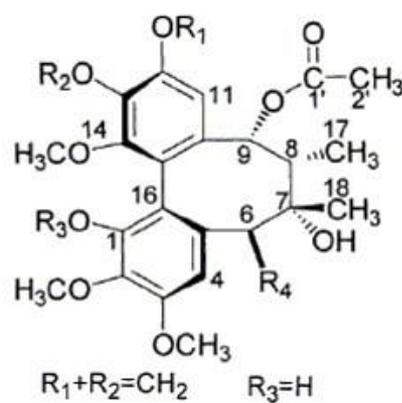
4



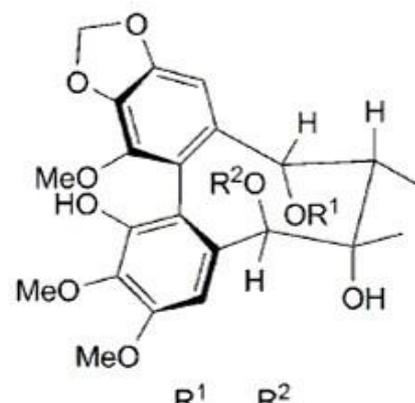
5



6



7



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

Ang Ang

8

# 深度查询

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

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%)

# 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

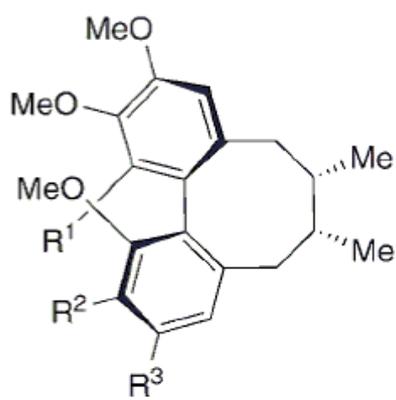
查询结果: 仅列出20个化合物查询结果(查询结果仅供参考)

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](#)

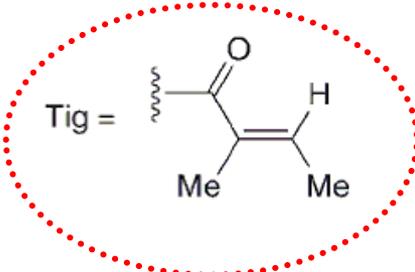
2. tasumatrol T  
C<sub>27</sub>H<sub>34</sub>O<sub>9</sub>  
Helvetica Chimica Acta 2007 Vol. 90 1319  
**Tasumatrols P-T, Five New Taxoids from Taxus sumatrana**  
Ya-Ching Shen, Yun-Sheng Lin, Shaw-Man Hsu, Ashraf Taha Khalil, Shih-Sheng Wang, Ching-Te Chien, Yao-Haur Kuo, and Chang-Hung Chou  
[Structure](#)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

- 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

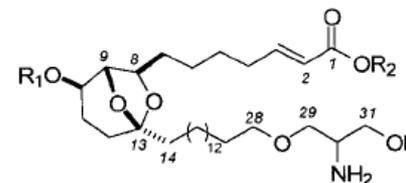
## Didemniserinolipids A–C, Unprecedented Serinolipids from the Tunicate *Didemnum* sp.

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,<br>5.6; 12.6 | 30.1 t          | 1.53 m/1.79 dt,<br>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,<br>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                 |

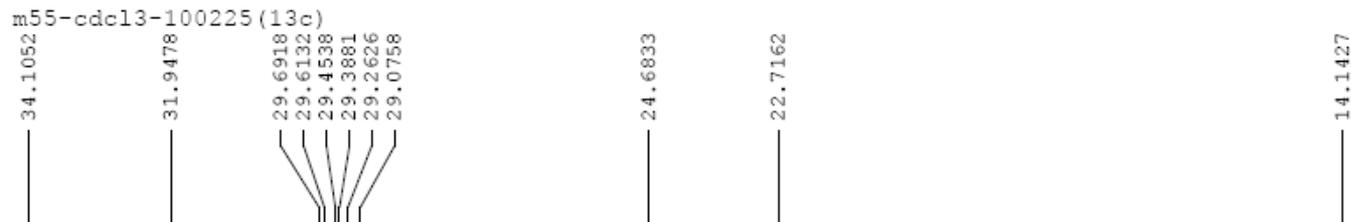
\* Obscured by solvent.

**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.

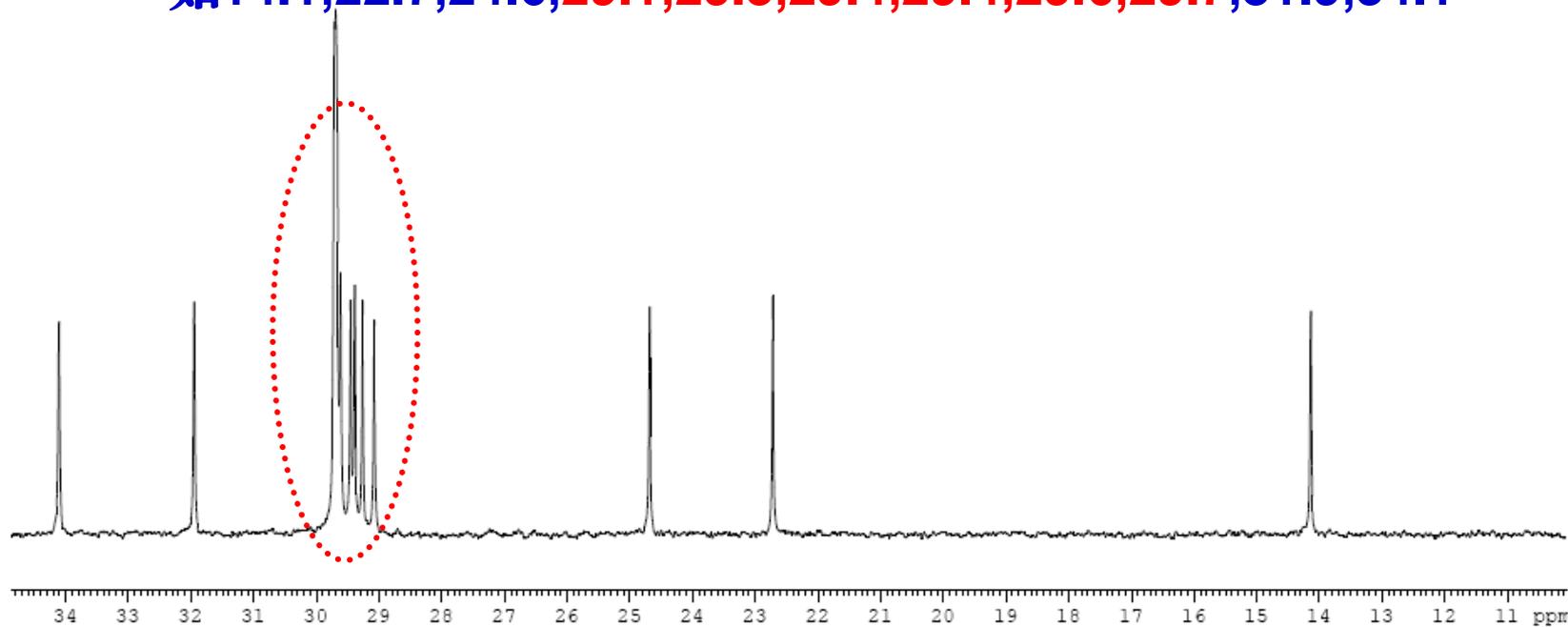


**Dimethyl *N*-acetylaspartate (4):** <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ 6.4 (1 H, br d, *J* = 8.0 Hz, NH), 4.84 (1 H, t, d, *J* = 4.5, 8.0 Hz, αH), 3.75/3.68 (2 × 3 H, s, 2 COOCH<sub>3</sub>), 3.01 (1 H, dd, *J* = 4.5, 17.2 Hz, βH), 2.84 (1 H, dd, *J* = 4.5, 17.2 Hz, βH), 2.01 (3 H, s, NCOCH<sub>3</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](#)

检索

[把微谱设为首页](#)

[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(<sup>13</sup>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--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

gomisin 检索

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

|    |           |                      |  |      |    |             |   |   |
|----|-----------|----------------------|--|------|----|-------------|---|---|
| 1. | 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.<br>FAN Peng | Structure <a href="#"><sup>13</sup>C NMR</a> <a href="#">Structure &amp; <sup>13</sup>C NMR</a> |
| 2. | 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.<br>FAN Peng | Structure <a href="#"><sup>13</sup>C NMR</a> <a href="#">Structure &amp; <sup>13</sup>C NMR</a> |
| 3. | 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. 6β,13α,15β-trihydroxy-16-ene-3α,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-3α,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-15β-acetoxy-3α,20-epoxy-16β,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

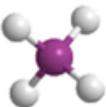
化合物复合查询 - Windows Internet Explorer

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 |
| AND <input type="text"/> | 分子式   |
| AND <input type="text"/> | 作者    |
| AND <input type="text"/> | 植物名   |

年份选择:

所有年份

最近年份  年

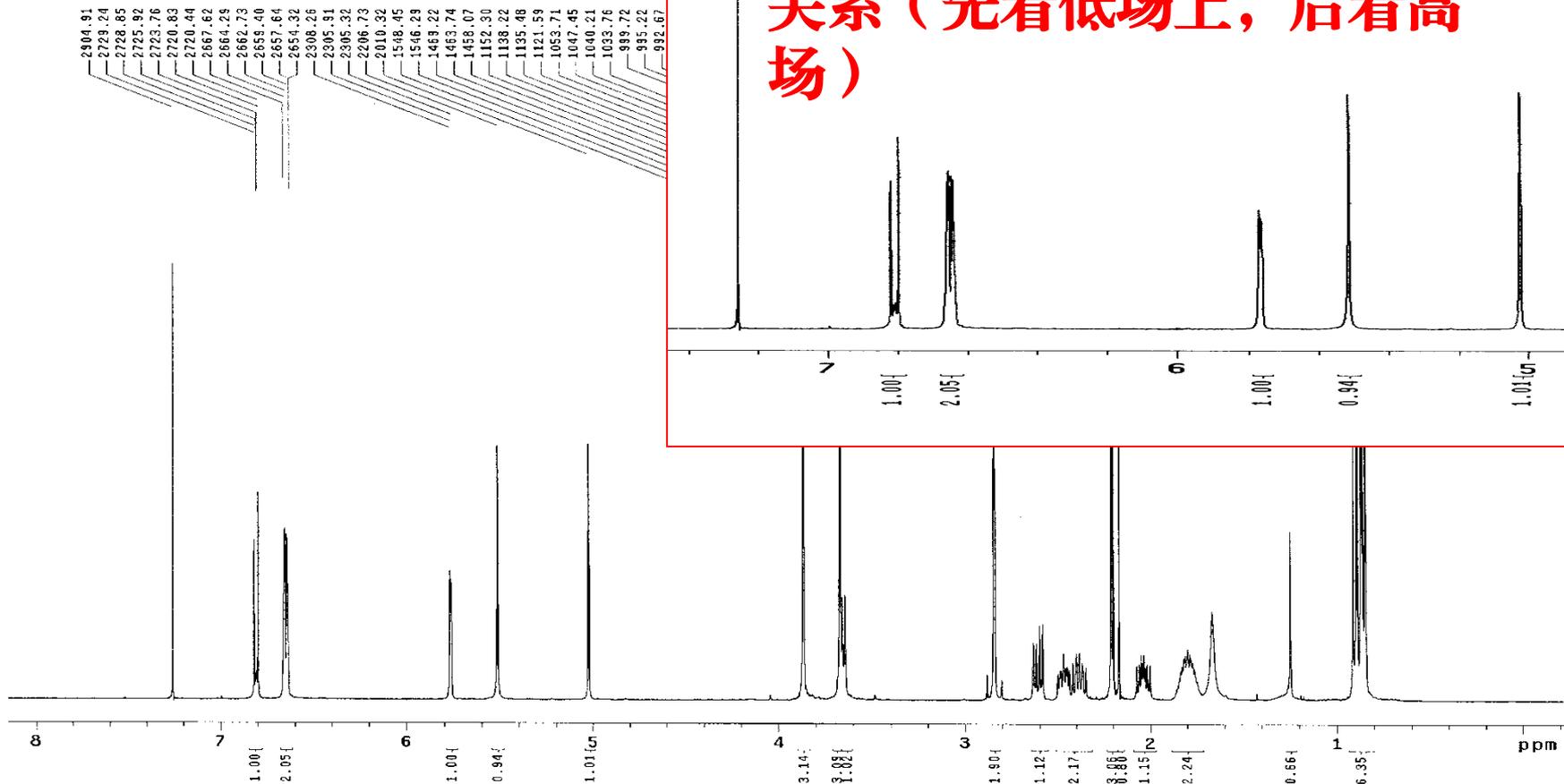
年份之间  年 -  年

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

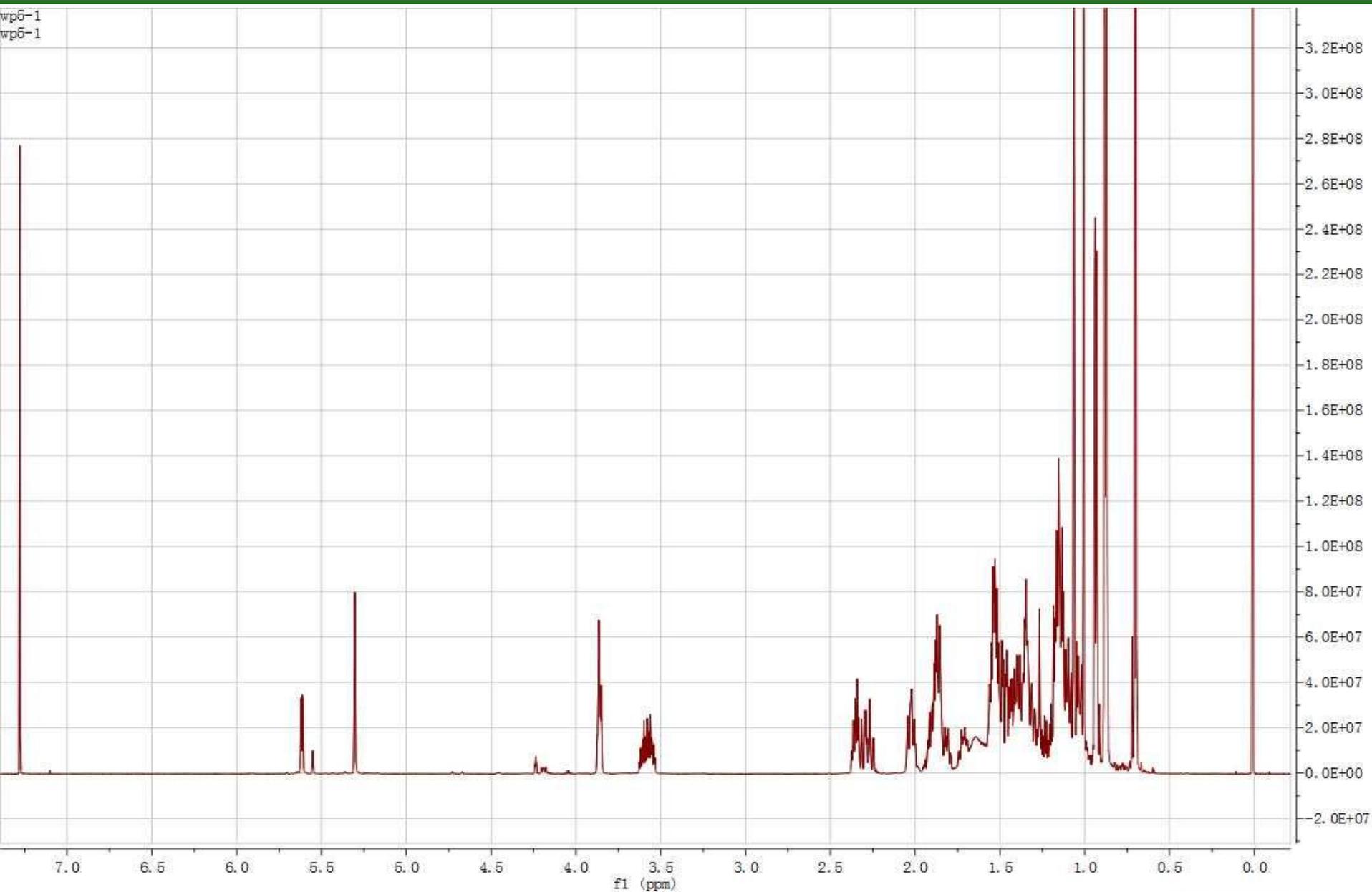
KI1144 CDC13 060905



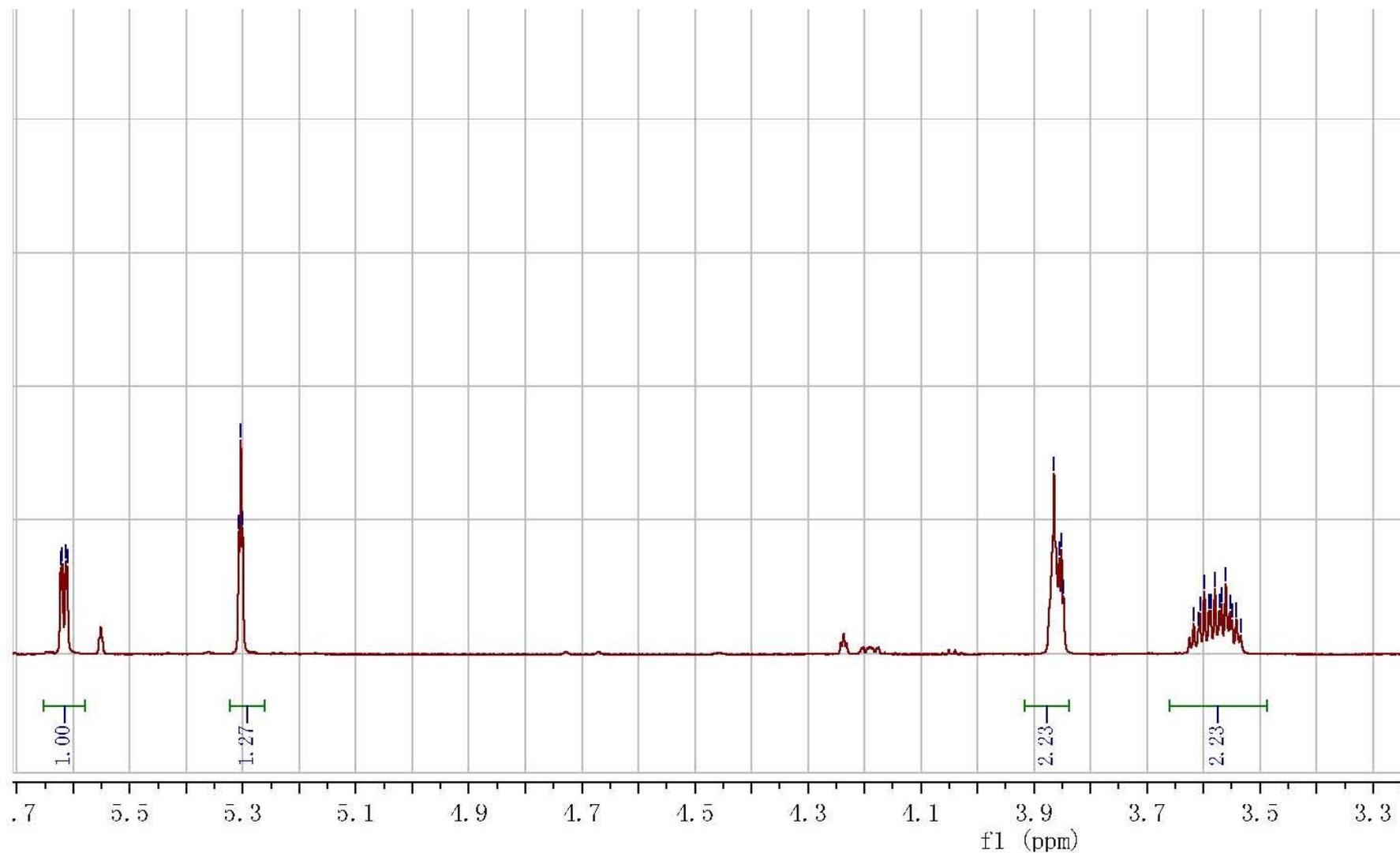
**纯度:** 氢个数是否有整数比例关系 (先看低场上, 后看高场)

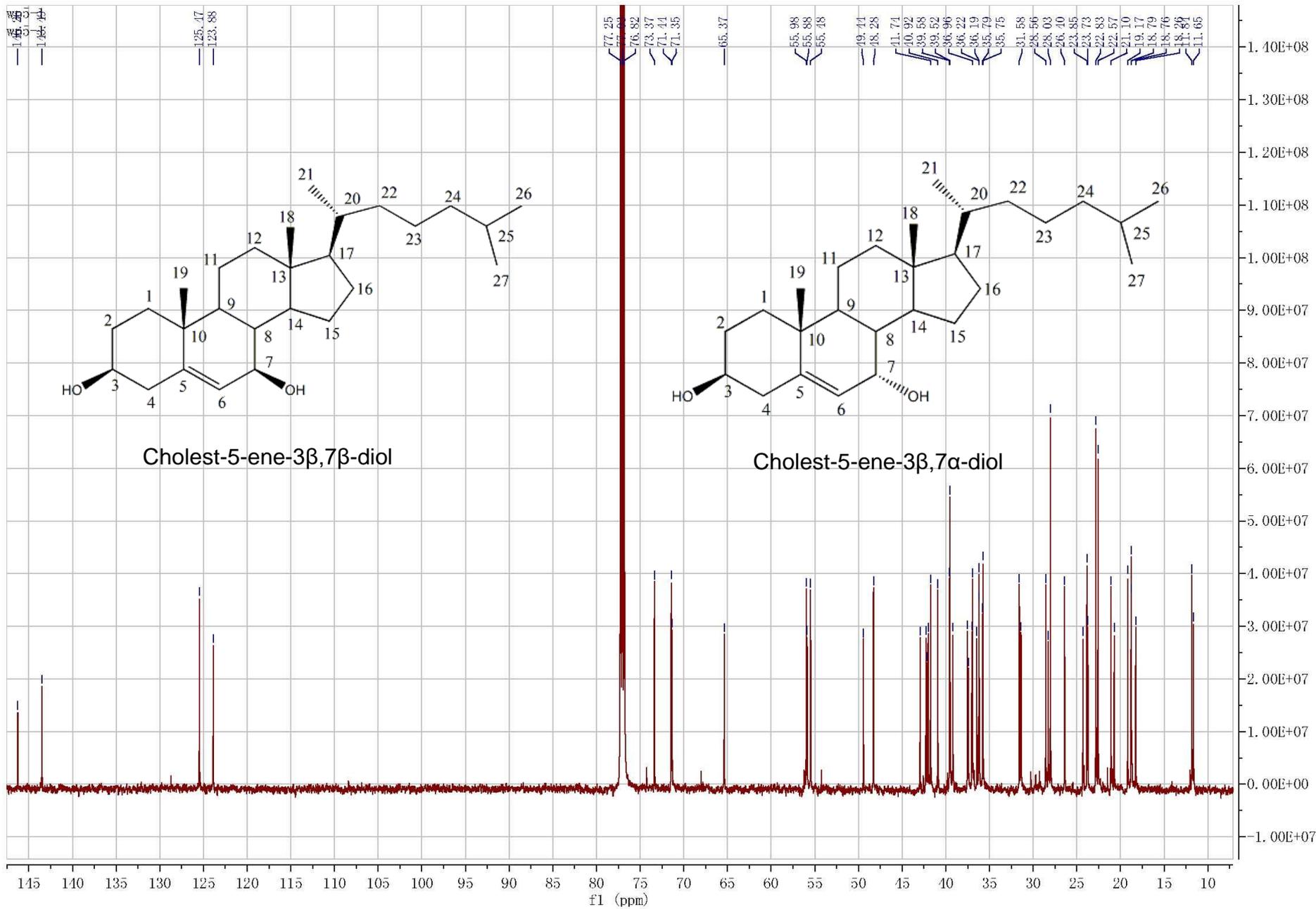
**量:** 比较溶剂峰和单个氢的高度

# 如何从氢谱上对混合物进行判断

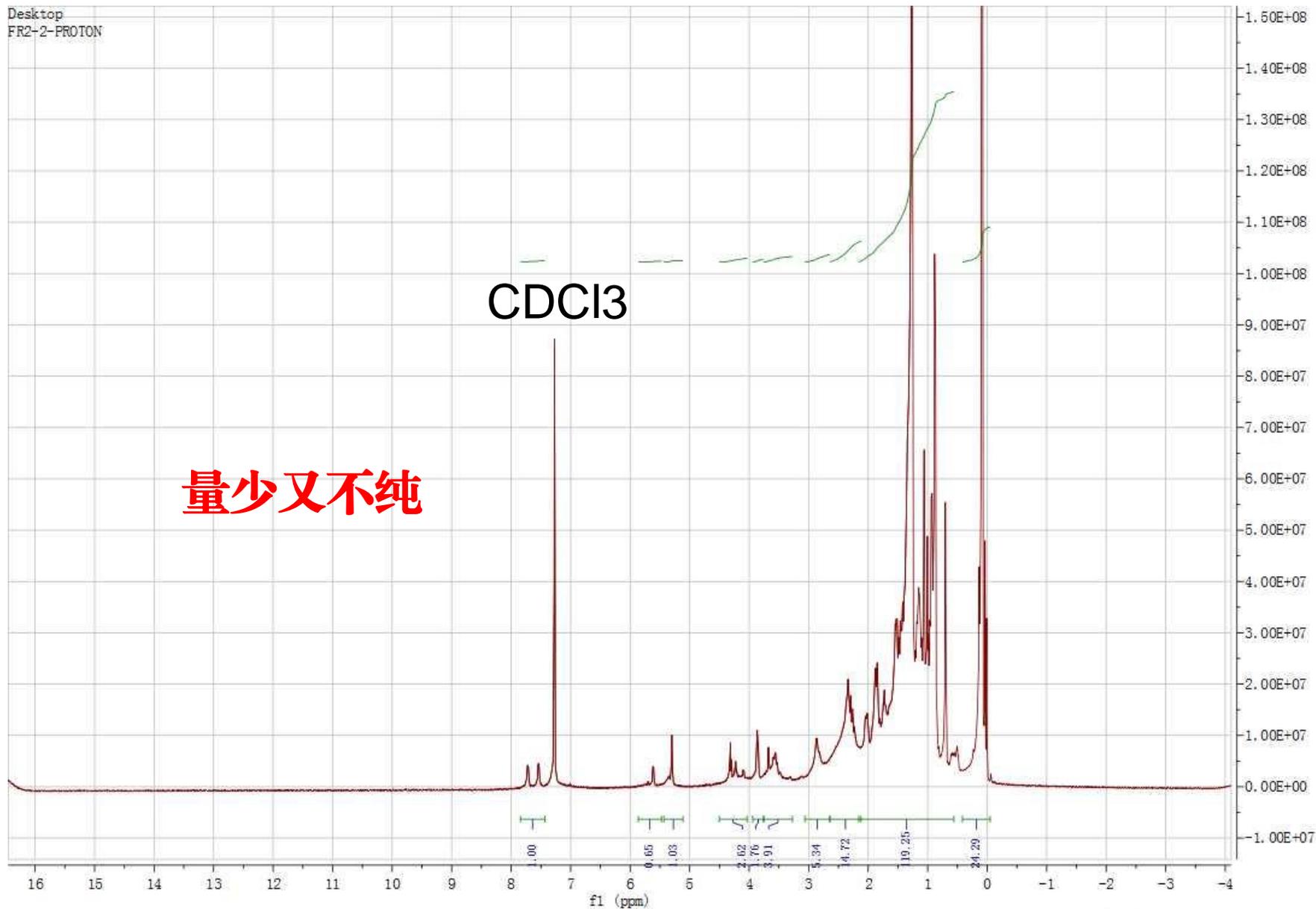


# 如何从氢谱上对混合物进行判断

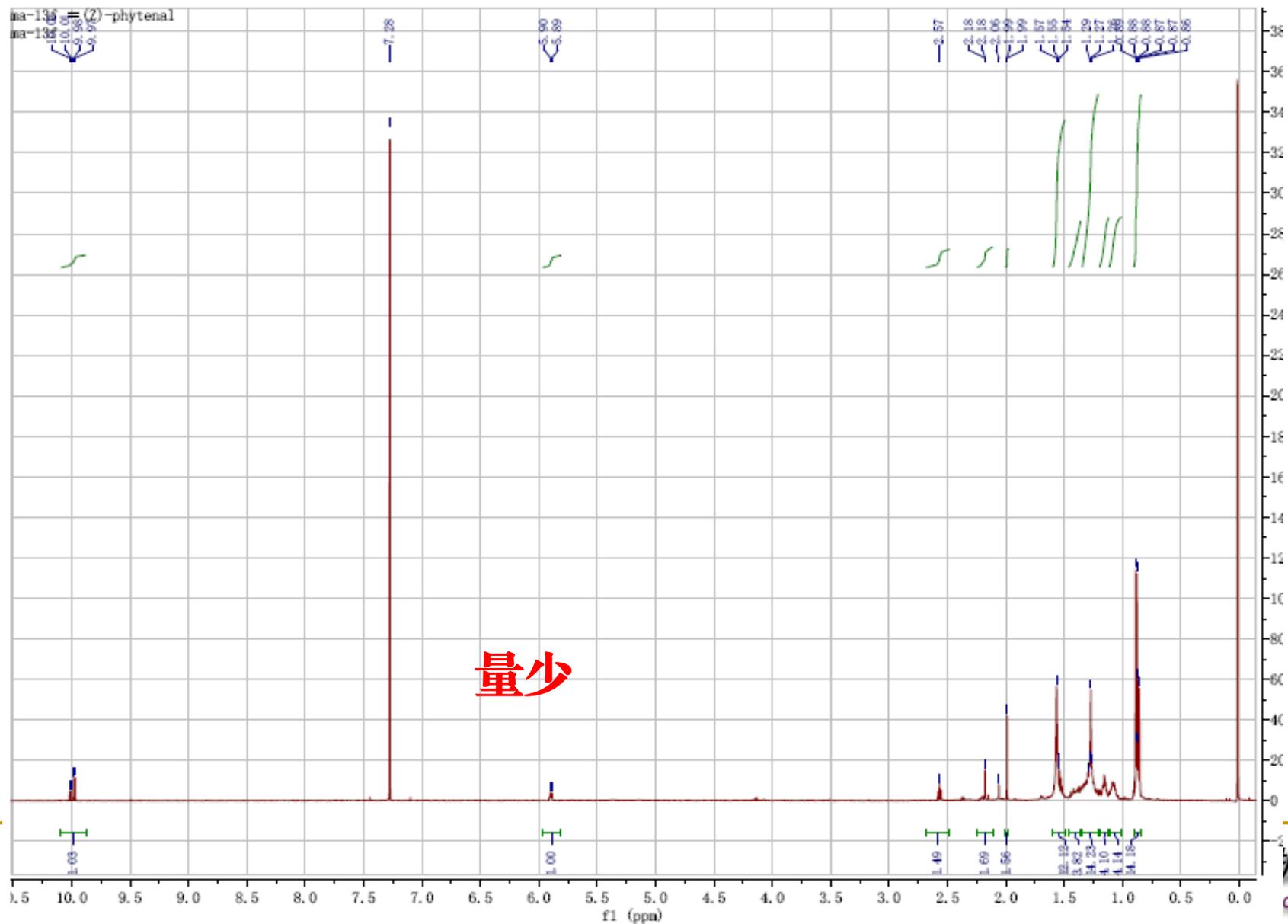




# 如何从氢谱上对化合物的纯度和量进行判断



# 如何从氢谱中对化合物的纯度和量进行判断

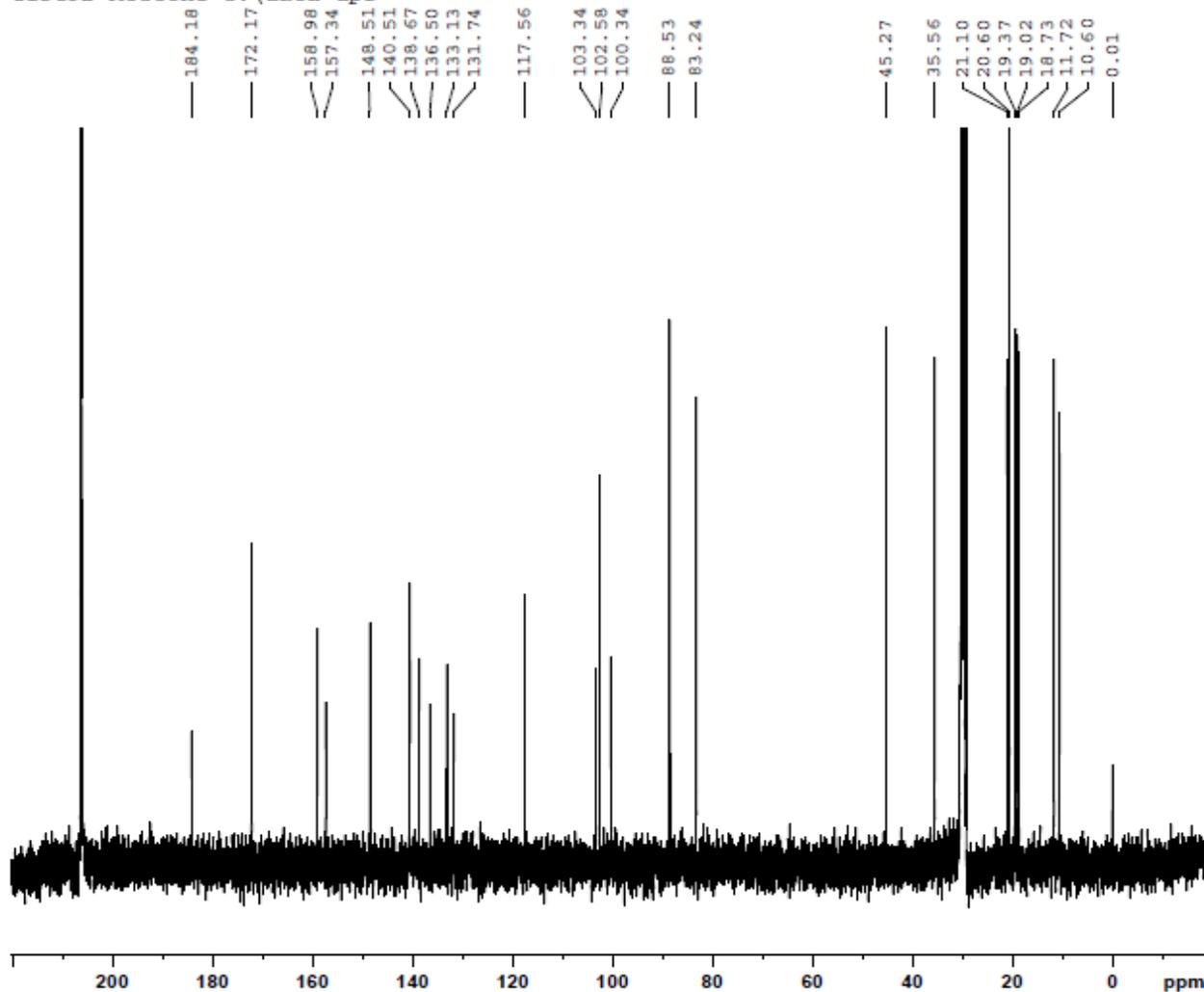


# 碳谱查询顺序

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

NMR库化合物总数为: 566564 个

更新时间: 2014-5-7 8:03:19

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%)

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<sub>23</sub>H<sub>24</sub>O<sub>5</sub> 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](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

2. pennicitrinone A

C<sub>23</sub>H<sub>24</sub>O<sub>5</sub> 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

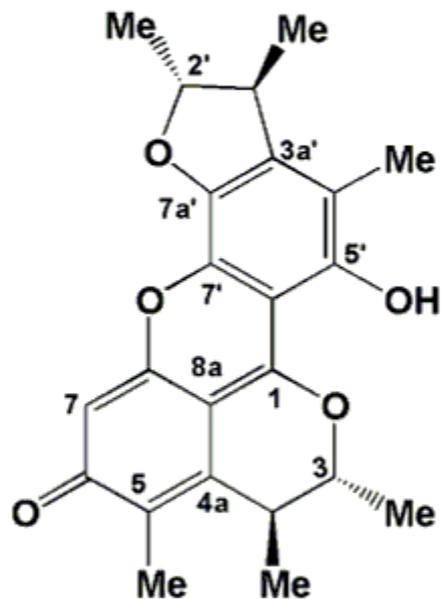
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)

3. pennicitrinone D

C<sub>23</sub>H<sub>24</sub>O<sub>6</sub> 相似度:84%

正在等待 www.nmrdata.com 的响应...

penicitrinone A的结构图和碳谱:



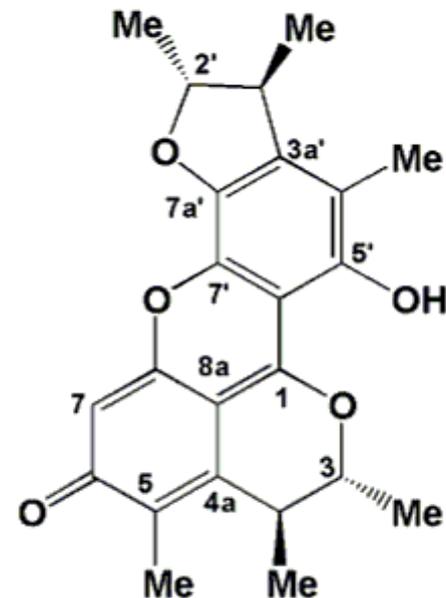
| Solvent | Position | <sup>13</sup> C NMR |
|---------|----------|---------------------|
|         | 1        | 155.5               |
|         | 3        | 82.3                |
|         | 3-Me     | 21                  |
|         | 4        | 35                  |
|         | 4-Me     | 18.9   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

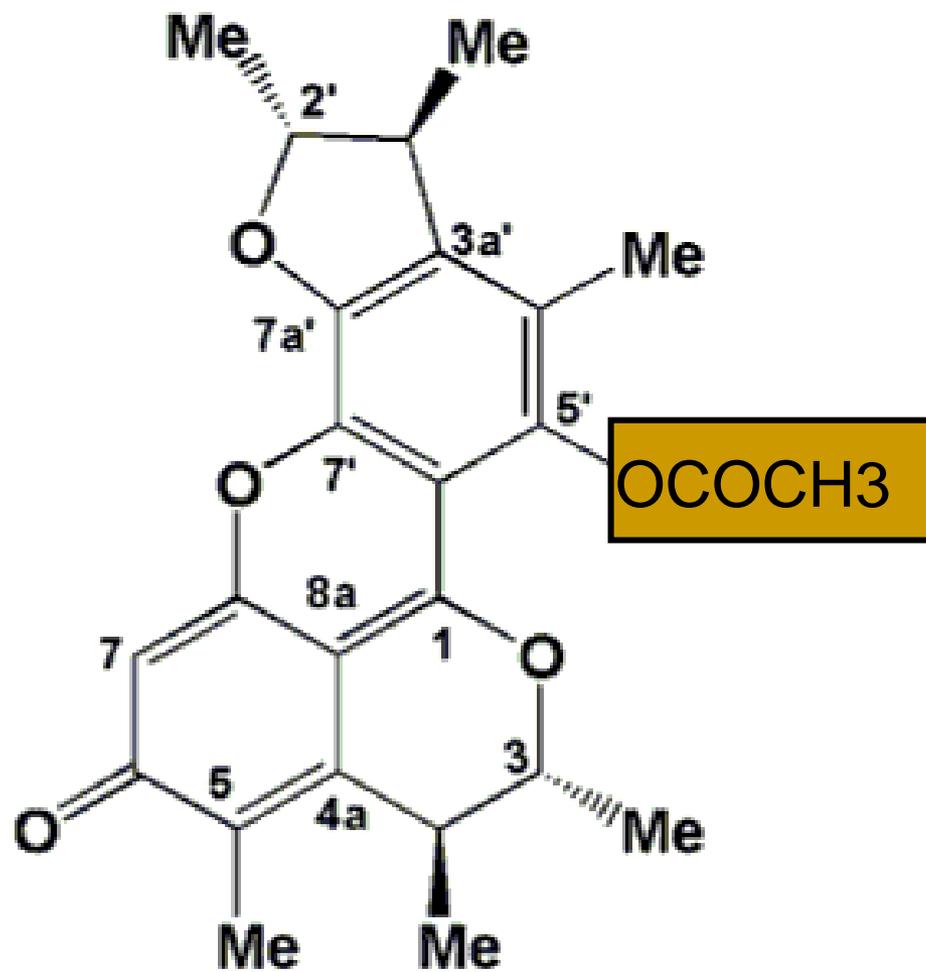
| Solvent           | Position | <sup>13</sup> C NMR |
|-------------------|----------|---------------------|
| CDCl <sub>3</sub> | 1        | 155.5               |
|                   | 3        | 82.3                |
|                   | 3-Me     | 21                  |
|                   | 4        | 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                             |
|       | CDCl <sub>3</sub> | CD <sub>3</sub> COCD <sub>3</sub> |
|       | penicitrinone A   | 待解化合物                             |

penicitrinone A的结构图和碳谱:

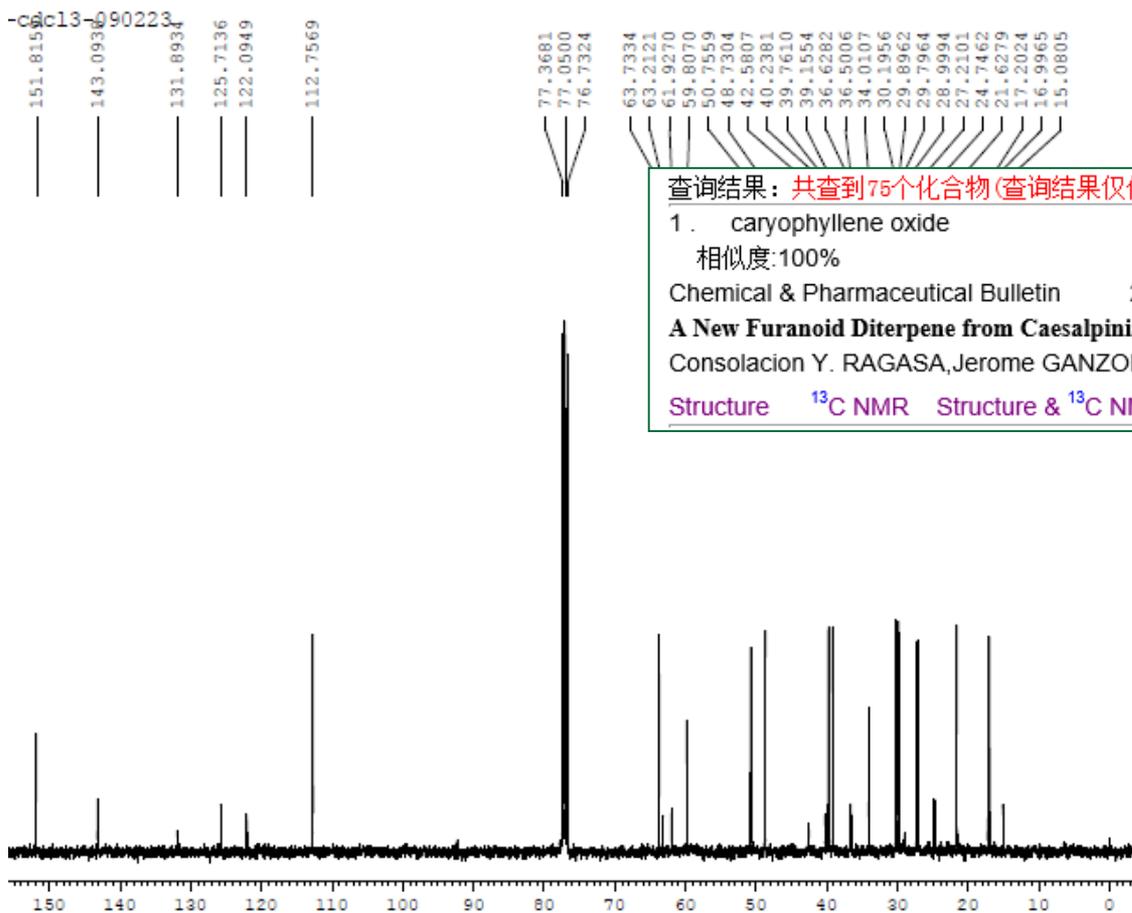




# 混合物的查询方法一

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

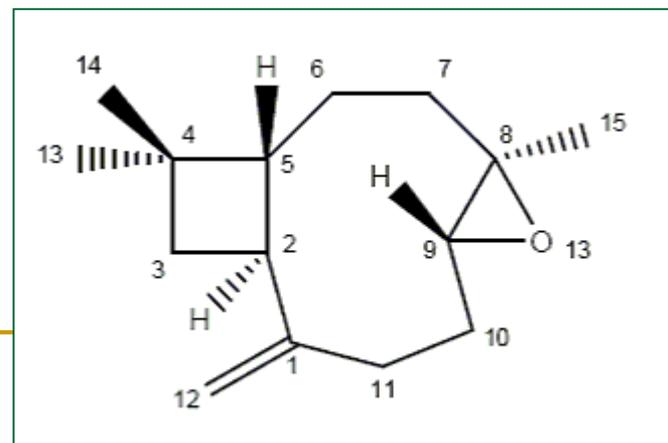
相似度:100%

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

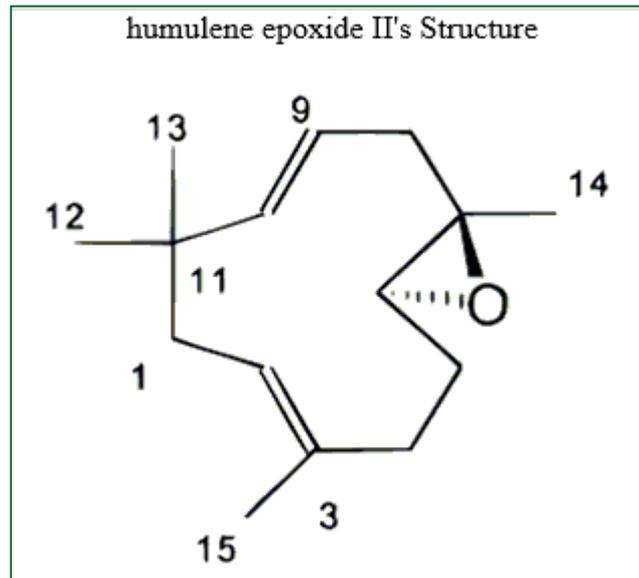
C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>O 相似度:93.3%

Journal of Natural Products 1996 59 1084-1086

Sesquiterpenes from *Baekkea frutescens*

Wing-Yan Tsui and Geoffrey D. Brown

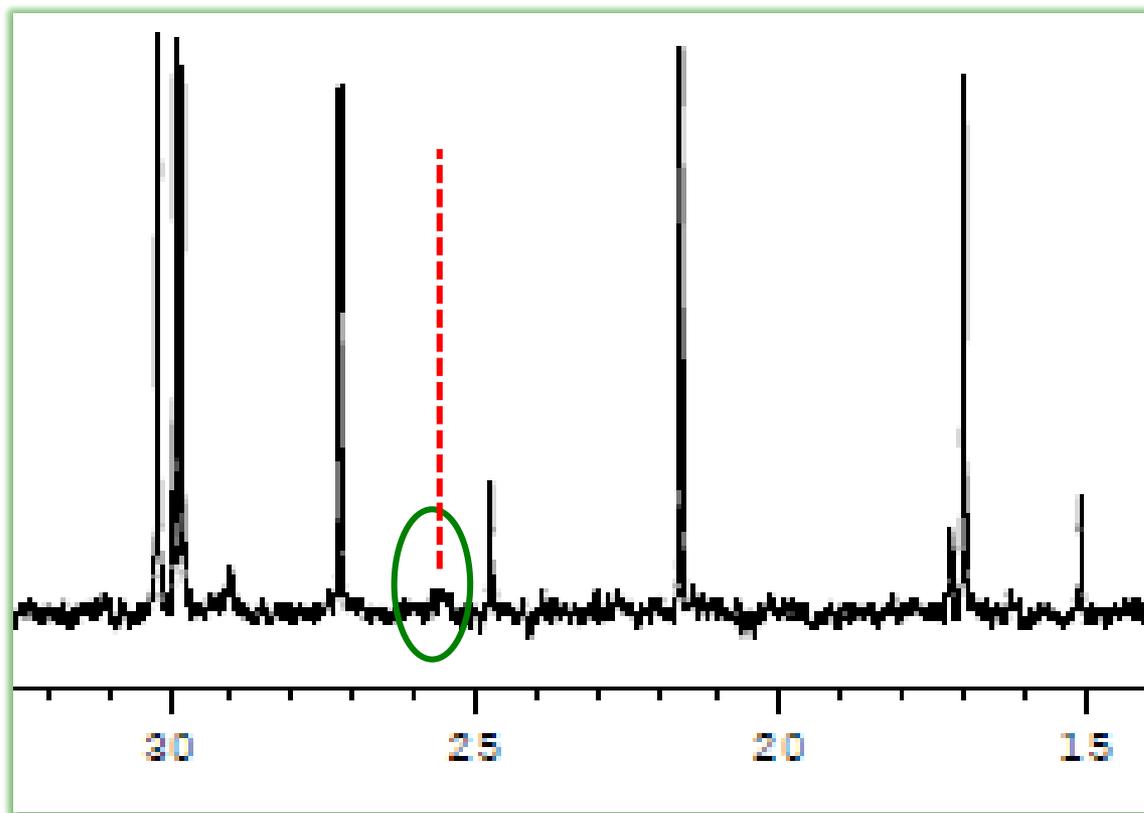
[Structure](#) [<sup>13</sup>C NMR](#) [Structure & <sup>13</sup>C NMR](#) [碳谱模拟图](#)



humulene epoxide II的碳谱:

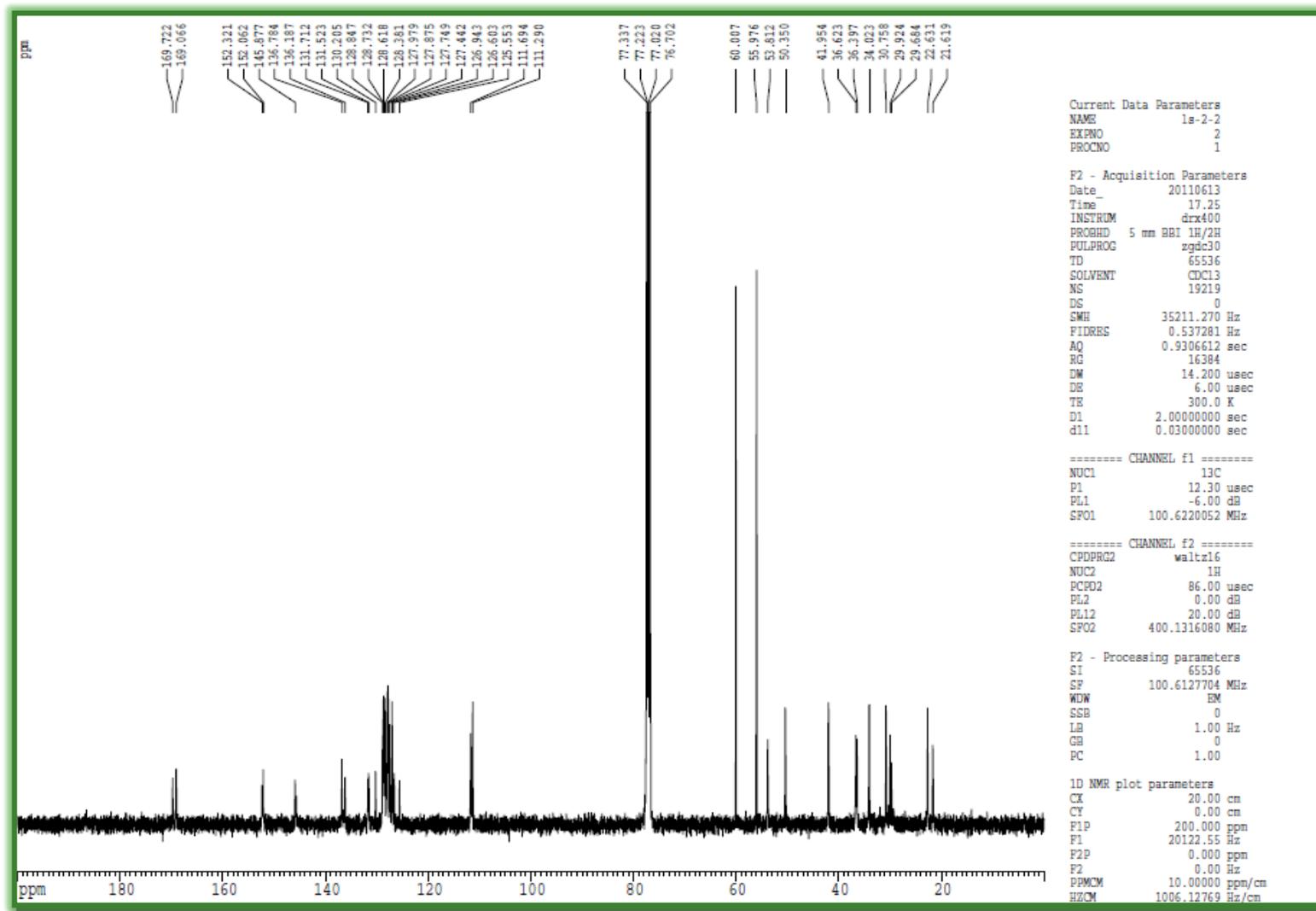
| Solvent           | Position | <sup>13</sup> C NMR |
|-------------------|----------|---------------------|
| CDCl <sub>3</sub> | 1        | 40.2                |
|                   | 2        | 125.7               |
|                   | 3        | 131.9               |
|                   | 4        | 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



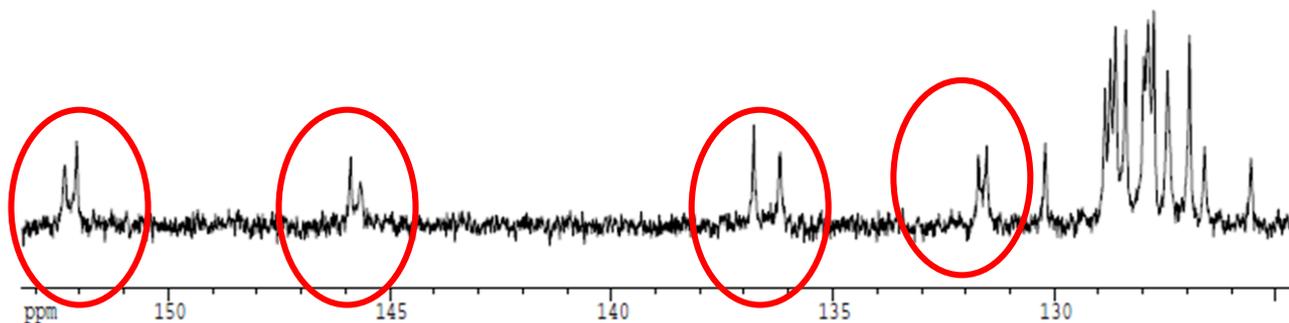
再一步核对图谱，发现25.6附近有一小峰，但未标出，  
确定两化合物为同一化合物

# 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*

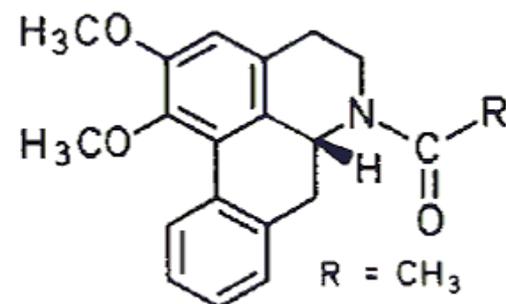
NMR-Assignments of N-Acylaporphine Alkaloids from *Tinospora crispa*

[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

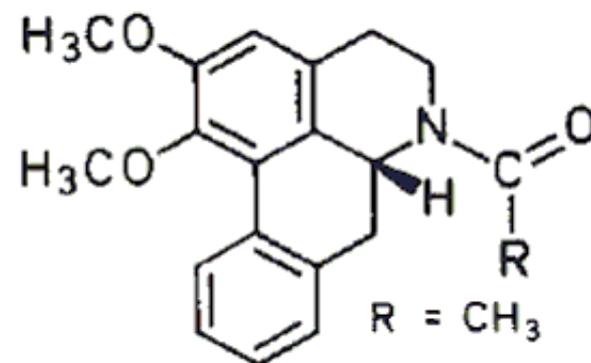
没有100%相似, 是因为部分数据在分组时出现人为错误

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

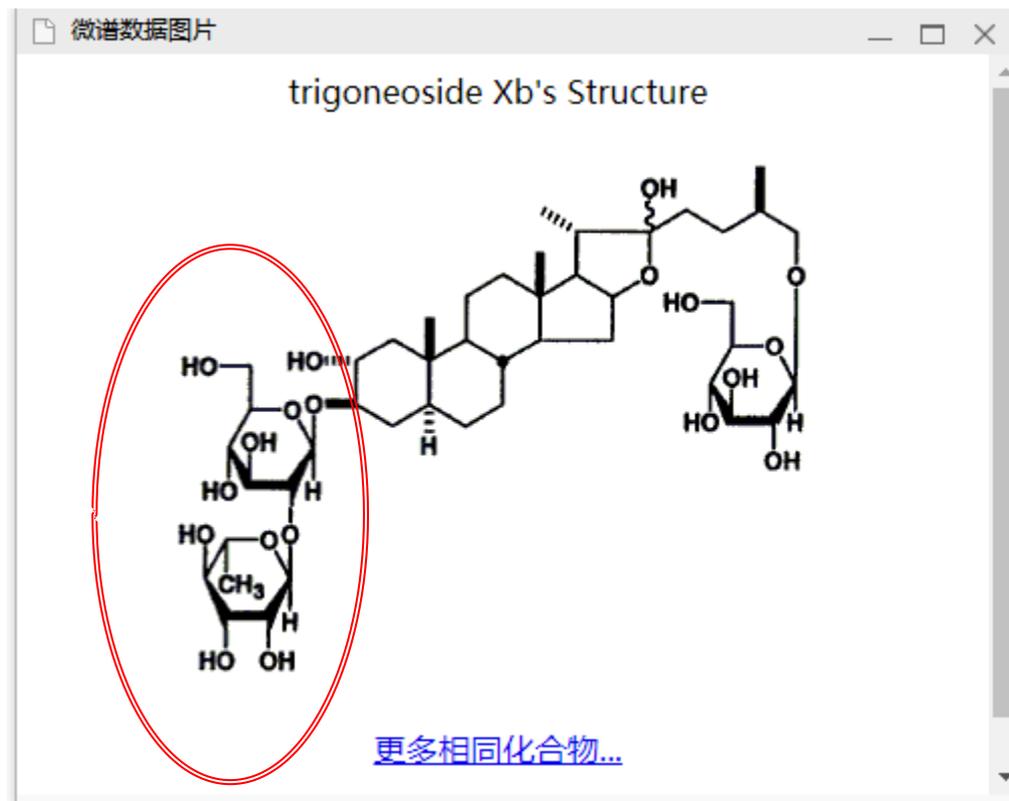
微微查

## 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