

微谱数据使用手册

上海微谱信息技术有限公司

Shanghai Micronmr Infor. Technology Co., Ltd.

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

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

上海微谱信息技术有限公司

地址：上海市杨浦区邯郸路100号61栋131室（复旦大学科技园）

邮编：200437

电话：021-61736083

E-mail: micronmr@126.com

联系人：刘女士 13482579899

公司网站：<http://www.nmrdata.com>

目 录

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

微谱数据的特色

1. 全球最大的有机化合物碳谱数据库

现收录有机化合物 80 万余个，每周更新。

2. 查询方法多样化

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

提供四种关键词检索：化合物名称、分子式、作者、植物名称(属名或种名)。

3. 贴心的查询算法

特有的查询算法，保证用户通过我们的平台，能得到最相关的结果。

4. 数据准确

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

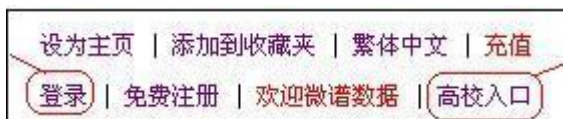
5. 查询简单、易于操作

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

数据库的登录

1. 进入 <http://www.nmrdata.com>

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



^{13}C -NMR 数据检索

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

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

溶剂选择：您可以选择溶剂，也可以采用系统默认值。

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



图 1. ^{13}C -NMR 查询界面

精确查询：用于快速确定已知化合物的结构。

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

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

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

不精确库查询：文献中一些化合物的部分碳谱值仅给出一个相对范围，不精确库是对这些化合物进行查询的；例如，对于长链 CH_2 基团的化合物，大部分文献都没有对这些长链 CH_2 的 ^{13}C -NMR 数值做出精确的归属，而是给出一个范围值。

精确查询举例

由小至大数输入数据：

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

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



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: $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{O}_8$
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 碳谱模拟图](#)

图 2. 精确查询结果

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

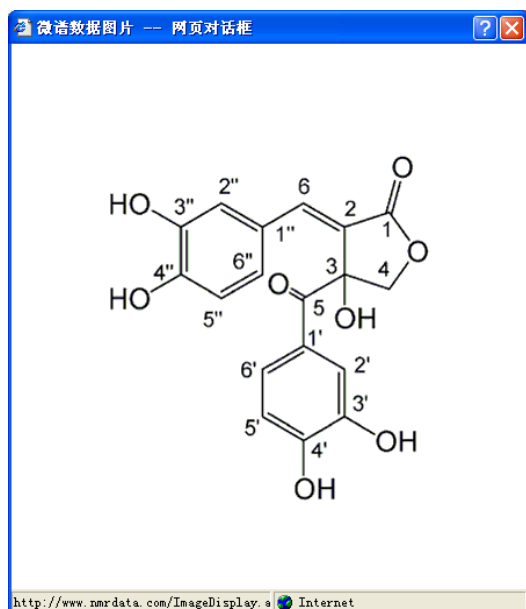
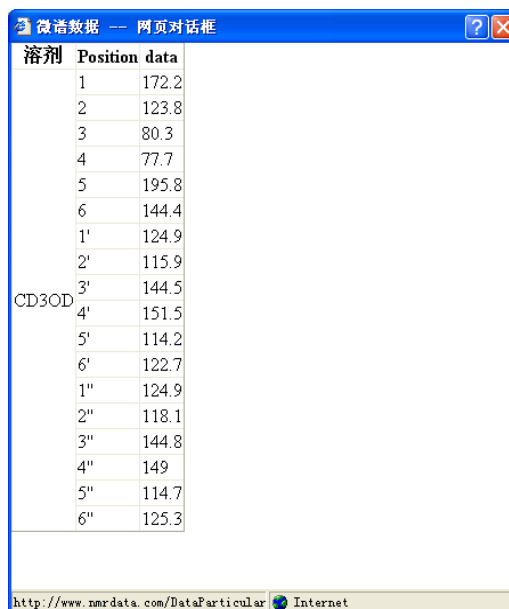


图 3. 化合物的结构



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

图 4. 化合物的原始 ^{13}C -NMR 数据

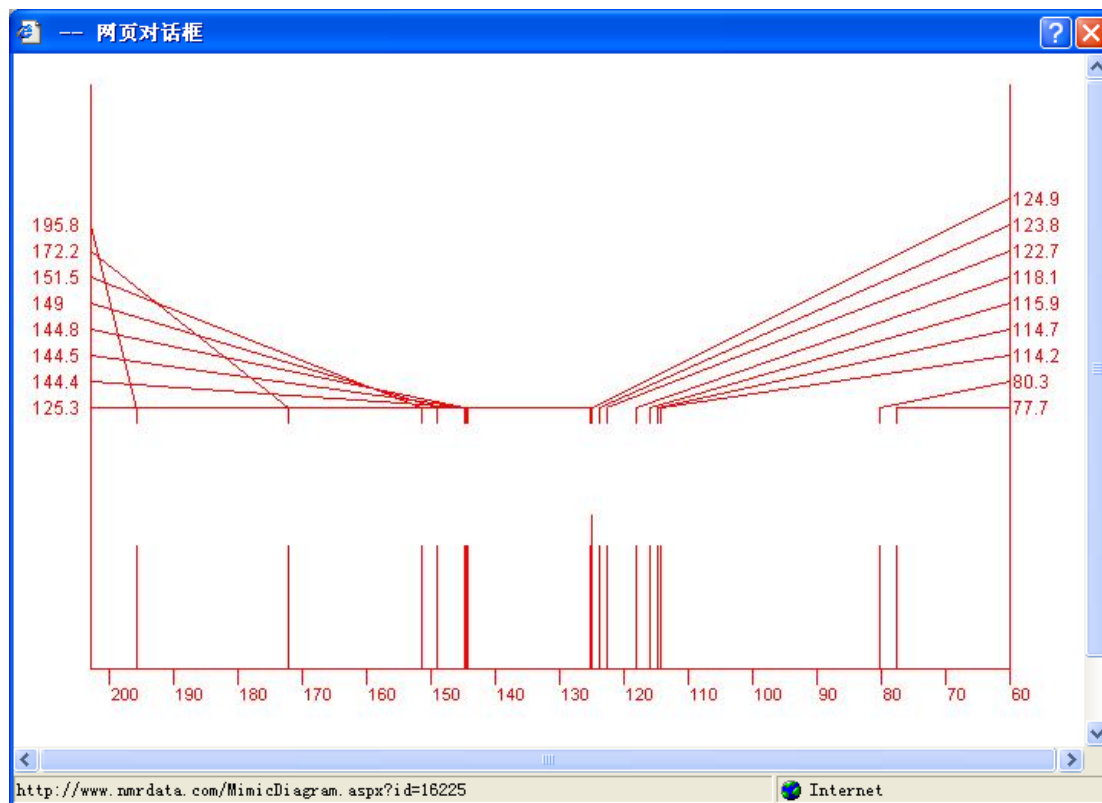


图 5. ^{13}C -NMR 模拟图

化合物相关信息检索

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

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

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

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

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

注：以上查询尽量不要采用中文名称进行检索，英文输入时不区分大小写。



图 6. 化合物相关信息检索界面



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

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

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微谱数据

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

clinopodiside

查询结果: 搜索 **clinopodiside** 获得约 10 条结果

Clinopodiside A $C_{48}H_{78}O_{19}$
Acta Pharmaceutica Sinica 1992 27 207-212
STUDIES ON THE TRITERPENOID SAPONIN OF CLINOPODIUM CHINENSE(BENTH)O.KUNTZE
SR Xue, JQ Liu, G Wang, JQ Shi, QJ Wu, SZ Hu
[Structure](#) [13C NMR](#)

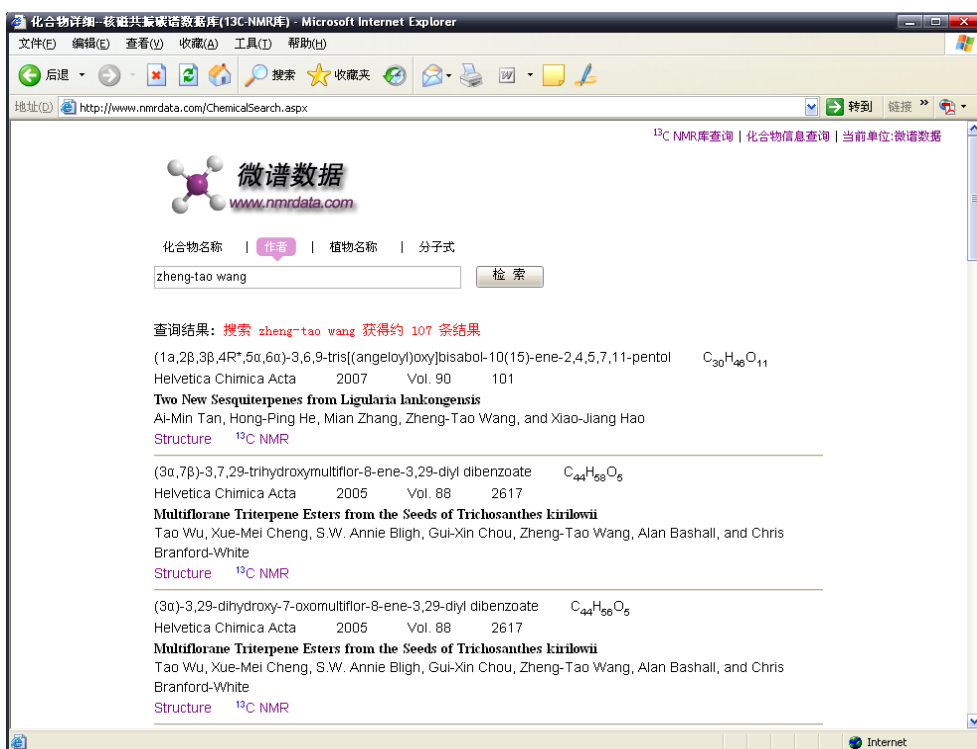
clinopodiside D $C_{48}H_{78}O_{19}$
Natural Product Research 1995 6 157-161
Two Triterpenoid Saponins from Clinopodium chinensis
Zimin Liu, Du Li, Noel L. Owen, David M. Grant, Rex G. Cates, Zhongjian Jia
[Structure](#) [13C NMR](#)

clinopodiside E $C_{49}H_{80}O_{19}$
Natural Product Research 1995 6 157-161
Two Triterpenoid Saponins from Clinopodium chinensis
Zimin Liu, Du Li, Noel L. Owen, David M. Grant, Rex G. Cates, Zhongjian Jia
[Structure](#) [13C NMR](#)

clinopodiside B $C_{50}H_{90}O_{23}$
Journal of Natural Products 1995 Vol 58

完毕

图 7. 以 clinopodiside 为化合物名称的检索结果



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

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

13C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微谱数据

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

zheng-tao wang

查询结果: 搜索 **zheng-tao wang** 获得约 107 条结果

(1a,2β,3β,4R*,5α,6α)-3,6,9-tris[(angeloyl)oxy]bisabol-10(15)-ene-2,4,5,7,11-pentol $C_{30}H_{46}O_{11}$
Helvetica Chimica Acta 2007 Vol. 90 101
Two New Sesquiterpenes from Ligularia lankongensis
Ai-Min Tan, Hong-Ping He, Mian Zhang, Zheng-Tao Wang, and Xiao-Jiang Hao
[Structure](#) [13C NMR](#)

(3α,7β)-3,7,29-trihydroxymultiflor-8-ene-3,29-diyl dibenzoate $C_{44}H_{58}O_5$
Helvetica Chimica Acta 2005 Vol. 88 2617
Multiflorane Triterpene Esters from the Seeds of Trichosanthes kirilowii
Tao Wu, Xue-Mei Cheng, S.W. Annie Bligh, Gui-Xin Chou, Zheng-Tao Wang, Alan Bashall, and Chris Branford-White
[Structure](#) [13C NMR](#)

(3α)-3,29-dihydroxy-7-oxomultiflor-8-ene-3,29-diyl dibenzoate $C_{44}H_{56}O_5$
Helvetica Chimica Acta 2005 Vol. 88 2617
Multiflorane Triterpene Esters from the Seeds of Trichosanthes kirilowii
Tao Wu, Xue-Mei Cheng, S.W. Annie Bligh, Gui-Xin Chou, Zheng-Tao Wang, Alan Bashall, and Chris Branford-White
[Structure](#) [13C NMR](#)

Internet

图 8. 以 Zheng-tao Wang 为作者名称的检索结果



图 9. 以 *Corydalis* 为植物属名的检索结果

收录的期刊

正在收录和收录完的国内外期刊达 530 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 2016 年最新一期。