

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天然产物碳谱数据库，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，得到众多天然产物研究人员的支持和帮助，在此表示真挚的感谢！

上海微谱信息技术有限公司

地址：上海市杨浦区国权北路1688弄A6栋10F (复旦大学科技园)

邮编：200437

电话：021-61736083

E-mail: micronmr@126.com

联系人：刘经理

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
查询举例	3
化合物相关信息检索	7
化合物名称检索	7
作者名称检索	7
植物名称检索	7
分子式检索	7

微谱数据的特色

1. 全球最大的天然产物碳谱数据库

现收录有机化合物 138 余万个，包含天然产物库 (Nat) 和合成产物(Syn)库两个子库，其中天然产物约 45 万个，基本包含已有的天然产物，数据库每周更新。

2. 查询方法多样化

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

提供四种关键词检索：化合物名称、分子式、作者、植物名称(属名或种名)。

3. 贴心的查询算法

特有的查询算法(2项授权专利)，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

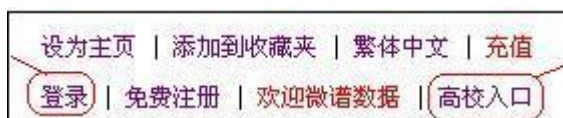
数据源于国内外公开发表的著名学术期刊论文或专利。

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，数字间用英文状态下(半角)的逗号隔开。

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。


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

由小至大数输入以下碳谱数据：

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

设置好参数，然后点击下方的 ^{13}C NMR 检索按钮，结果见图 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。



微谱数据
www.nmrdata.com

^{13}C NMR库查询 | 化合物信息查询 | 当前单位:微谱数据
NMR库化合物总数为: 1033095 个
更新时间: 2018/5/4 14:42:07
返回上一页

查询结果: 共查到1个化合物(查询结果仅供参考)

1. actaealactone
 $\text{C}_{19}\text{H}_{14}\text{O}_8$ 相似度:100%
Journal of Natural Products 2006 69(3) 314-318
Polyphenolic Constituents of Actaea racemosa
Paiboon Nuntanakorn, Bei Jiang, Linda S. Einbond, Hui Yang, Fredi Kronenberg, I. Bernard Weinstein, and Edward J. Kennelly
[Structure](#) [\$^{13}\text{C}\$ NMR](#) [Structure & \$^{13}\text{C}\$ NMR](#) [数据分析](#) [期刊地址](#)

图 2. 精确查询结果

单击图 2 中的 [Structure](#), [\$^{13}\text{C}\$ NMR](#), 可以得到该化合物的化学结构(图 3), ^{13}C NMR 原始数据(图 4), 单击 [Structure & \$^{13}\text{C}\$ NMR](#) 可将结构图和碳谱数据显示在同一个页面, 单击 [数据分析](#) 可得到输入数据和文献数据的详细对比表, 并对相同和不相同的数据作了标注, 单击 [期刊地址](#) 将链接该期刊的网址。

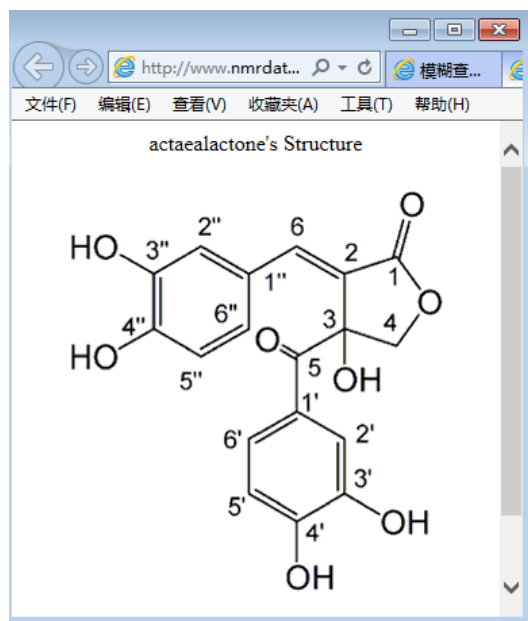


图 3. 化合物的结构

actaealactone的碳谱:

Solvent	Position	¹³ 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

图 4. 化合物的原始 ¹³C-NMR 数据

模糊查询举例

由小至大数输入数据:

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

选择 **Nat**(天然产物库) 库, 设置好参数, 然后点击下方 **¹³C NMR** 查询按钮(数字间用英文状态下的逗号隔开, 共查到 12 个化合物, 结果见图 5。图 6 为相似度排在前三的化合物结构图, 基本结构都一样, 不同的只是局部取代基。如果化合物 1 库中没有, 即为新化合物, 在 2 和 3 的基础上, 很快也能推导出 1 的结构。



微谱数据 www.nmrdata.com 返回上一页

查询结果: 共查到12个化合物(查询结果仅供参考)

- kadsurindutin A
 $C_{26}H_{32}O_{11}$ 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](#) [数据分析](#) [期刊地址](#)
- 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](#) [数据分析](#) [期刊地址](#)
- kadsurarin
 相似度:76.6%
 Acta Chimica Sinica 1988 46 465-471
Studies on the Constituents of Schisandraceae Plants in Shennongjia District III. Isolation and Structures of Schisantherin G, H and I

图 5 模糊查询结果

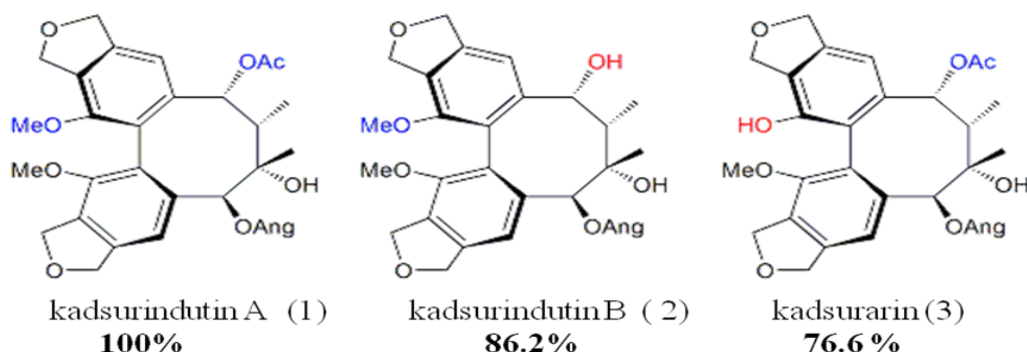
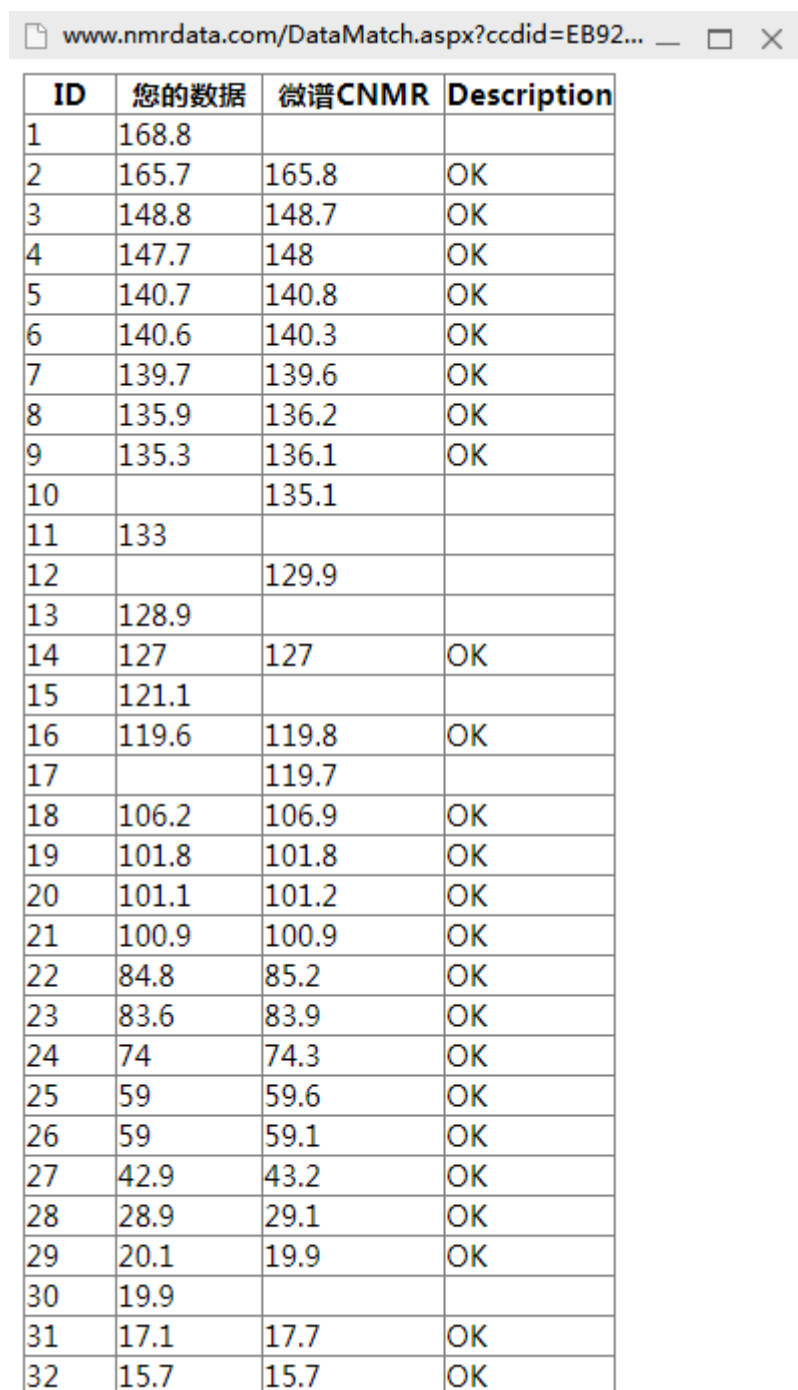


图 6. 相似度排在前三的化合物结构

点击第 2 个化合物 kadsurindutin B 的数据分析，可以直观地看到，哪些数据匹配成功，哪些数据存在差异，匹配成功的数据后面用 OK 标示（图 7）。



ID	您的数据	微谱CNMR	Description
1	168.8		
2	165.7	165.8	OK
3	148.8	148.7	OK
4	147.7	148	OK
5	140.7	140.8	OK
6	140.6	140.3	OK
7	139.7	139.6	OK
8	135.9	136.2	OK
9	135.3	136.1	OK
10		135.1	
11	133		
12		129.9	
13	128.9		
14	127	127	OK
15	121.1		
16	119.6	119.8	OK
17		119.7	
18	106.2	106.9	OK
19	101.8	101.8	OK
20	101.1	101.2	OK
21	100.9	100.9	OK
22	84.8	85.2	OK
23	83.6	83.9	OK
24	74	74.3	OK
25	59	59.6	OK
26	59	59.1	OK
27	42.9	43.2	OK
28	28.9	29.1	OK
29	20.1	19.9	OK
30	19.9		
31	17.1	17.7	OK
32	15.7	15.7	OK

图 7. kadsurindutin B 的数据分析表

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 8。

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 9 为以 gomisin 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 10 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 11 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 $C_{15}H_{24}O_2$ ，图 12。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：英文输入时不区分大小写。



图 8. 化合物相关信息检索界面



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

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

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

gomisin

查询结果: 搜索 gomisin 获得约 145 条结果

首页 上一页 下一页 尾页 当前页: 1/6

1. gomisin A $C_{23}H_{28}O_7$
Chemistry of Natural Compounds 2017 53 1140-1143
CHEMICAL CONSTITUENTS OF THE FRUIT OF *Schisandra sphenanthera*
Bing-Yang Zhang, Fei Cao, Ping He, Xiao-Long Yang, and Hua-Jie Zhu
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
2. gomisin N
Archives of Pharmacal Research 2017 40 807-817
Anti-melanogenic effect of gomisin N from *Schisandra chinensis* (Turcz.) Baillon (Schisandraceae) in melanoma cells
JungNo Lee, Hwa Sun Ryu, Jae-Moon Kim, Tae-Hwa Jung, Sung-Min Park, Yong-Moon Lee
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)

图 9. 以 gomisin 为化合物名称的检索结果



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

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

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 218 条结果

首页 上一页 下一页 尾页 当前页: 1/9

1. (12E)-Heptadec-12-en-8,10-diyonic acid $C_{18}H_{26}O_2$
Journal of Natural Medicines 2018 72 433-438
Anti-oral common pathogenic bacterial active acetylenic acids from *Thesium chinense* Turcz
Chang Liu, Xiao-Tian Li, Rong-Rong Cheng, Zhu-Zhen Han, Li Yang, Zhong-Chen Song, Zheng-Tao Wang
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
2. dodec-9,11-diyonic acid $C_{12}H_{18}O_2$
Journal of Natural Medicines 2018 72 433-438
Anti-oral common pathogenic bacterial active acetylenic acids from *Thesium chinense* Turcz
Chang Liu, Xiao-Tian Li, Rong-Rong Cheng, Zhu-Zhen Han, Li Yang, Zhong-Chen Song, Zheng-Tao Wang

图 10. 以 Zheng-tao Wang 为作者名称的检索结果



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

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

schisandra [检索] [在结果中检索]

查询结果: 搜索 schisandra 获得约 872 条结果

首页 上一页 下一页 尾页 当前页: 1/35

- schibitubin A C₂₀H₂₄O₅
Journal of Natural Products 2017 80 1117-1124
Neuroprotective Lignans from the Fruits of Schisandra bicolor var. tuberculata
Ye Liu, Heng-Yi Yu, Yan-Mei Wang, Tian Tian, Wen-Ming Wu, Ming Zhou, Xiang-Gao Meng, and Han-Li Ruan
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
- schibitubin B C₂₀H₂₆O₅
Journal of Natural Products 2017 80 1117-1124
Neuroprotective Lignans from the Fruits of Schisandra bicolor var. tuberculata
Ye Liu, Heng-Yi Yu, Yan-Mei Wang, Tian Tian, Wen-Ming Wu, Ming Zhou, Xiang-Gao Meng, and Han-Li Ruan
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
- schibitubin C C₂₀H₂₄O₅

图 11. 以 *Schisandra* 为植物属名的检索结果



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

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名称 | 作者 | 植物名称 | 分子式

C15H24O2 [检索] [在结果中检索]

查询结果: 搜索 C15H24O2 获得约 711 条结果

首页 上一页 下一页 尾页 当前页: 1/30

- (3R)-2-((1R,5R)-5-hydroxy-4-methylcyclohex-3-en-1-yl)-6-methylhepta-1,5-dien-3-ol C₁₅H₂₄O₂
The Journal of Organic Chemistry 2018 83 703-715
Total Synthesis of Highly Oxygenated Bisabolane Sesquiterpene Isolated from Ligularia lankongensis: Relative and Absolute Configurations of the Natural Product
Kenichi Kobayashi, Risako Kunitamura, Hirokazu Takagi, Misaki Hirai, Hiroshi Kogen, Hiroshi Hirota, and Chiaki Kuroda
[Structure](#) [13C NMR](#) [Structure & 13C NMR](#)
- mitchellene F C₁₅H₂₄O₂
Journal of Natural Products 2018 81 405-409

图 12. 以 C₁₅H₂₄O₂ 为分子式的检索结果