

欢迎进入微谱数据知识共享平台

尊敬的专家:

您好!

荣幸能为您的研究提供力所能及之事。

每个人的精力是有限的,在您面对 20 余类次生代谢产物,几百种结构类型,约合 20 余万种天然化合物。您也许需要有这么一个数据库来帮助您,快速的确定化合物骨架类型及具体的结构。那就是微谱数据知识平台,她已发展成为世界最大的天然产物核磁共振碳谱数据库,并适时更新。您只需轻轻敲动键盘,便可以轻而易举的获得您需要的信息。精确查询、模糊查询等多种功能尽在您掌握之中。方便快捷的排除您学生在图谱解析中的烦恼,将为您在结构解析中提供最佳的解决办法。

好不好,您试了就知道! 公司网址: <http://www.nmrdata.com>

期待您的使用和合作,并提出宝贵意见,以便我们更好的为您服务!

西南片区: 蒋金和

联系电话: 13577178887

E-mail: jiangjin1982@126.com

天然产物核磁共振碳谱库(nmrdata)的特色

1. 全球最大的天然产物碳谱数据库

微谱数据平台目前已收录天然产物 7 万多个，今年九月份预计达到 9 万个。

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、分子量、作者、植物名称。

3. 先进的查询算法

特有的查询算法，保证用户通过我们的平台，能得到最满意的结果。

4. 数据准确

先进的数据采集流水线，保证库中数据的准确性。

5. 查询简单、易于操作

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

查询功能介绍

1. 精确查询

用以快速确定已知化合物的结构。用户仅需按要求输入化合物的 ^{13}C -NMR 数据,几秒钟内就能得到已知化合物的结构及相关信息,为用户的首选查询方式。

精确查询界面见图 1.1,在数据输入时,需按由小至的顺序,数字间用英文状态下(半角)的逗号隔开。用户可以选择溶剂和自行输入匹配容差,也可以采用系统默认值进行查询。查询结果见图 1.2,用户可以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。

双击图 1.2 中的 structure, ^{13}C NMR, 碳谱模拟链接,可以得到该化合物的化学结构(图 1.3), ^{13}C NMR 原始数据(图 1.4)及 ^{13}C NMR 的模拟图(图 1.5)。

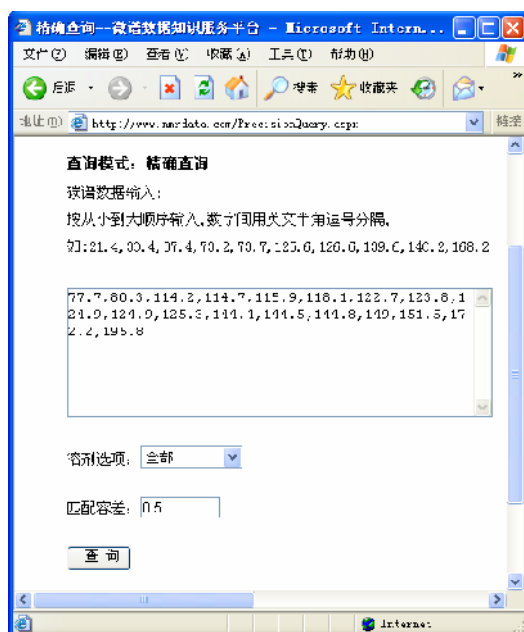


图 1.1 精确查询数据输入界面

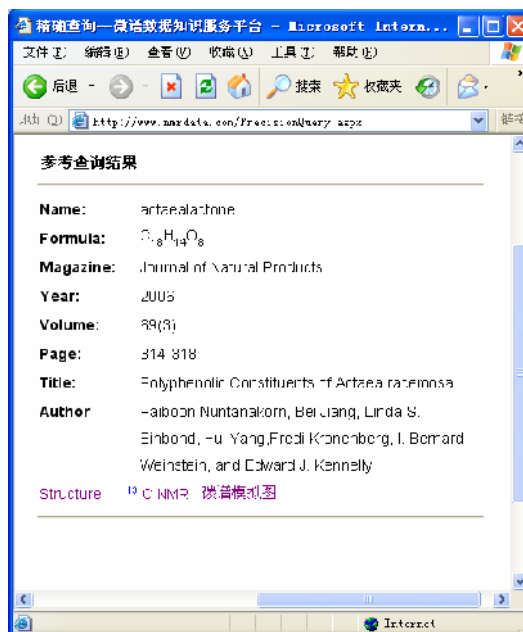


图 1.2 精确查询结果

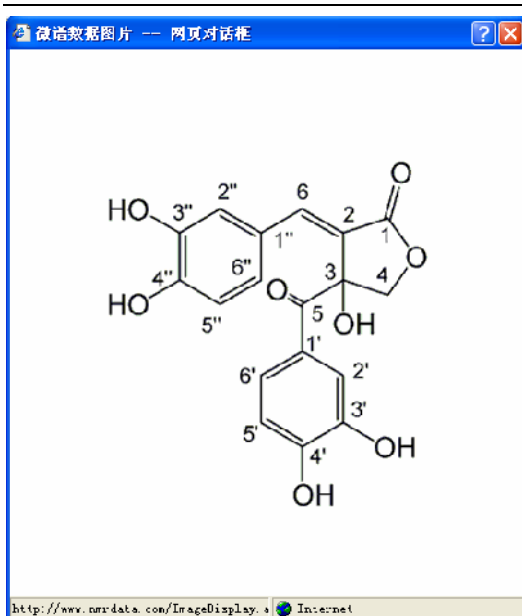
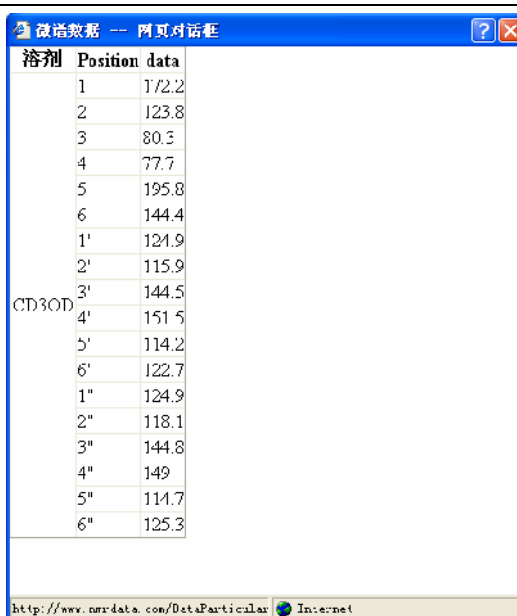


图 1.3 化合物的结构



溶剂	Position	data
	1	172.2
	2	123.8
	3	80.3
	4	77.7
	5	195.8
	6	144.4
	1'	124.9
	2'	115.9
	3'	144.5
CD3OD	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 1.4 化合物的原始 ^{13}C -NMR 数据

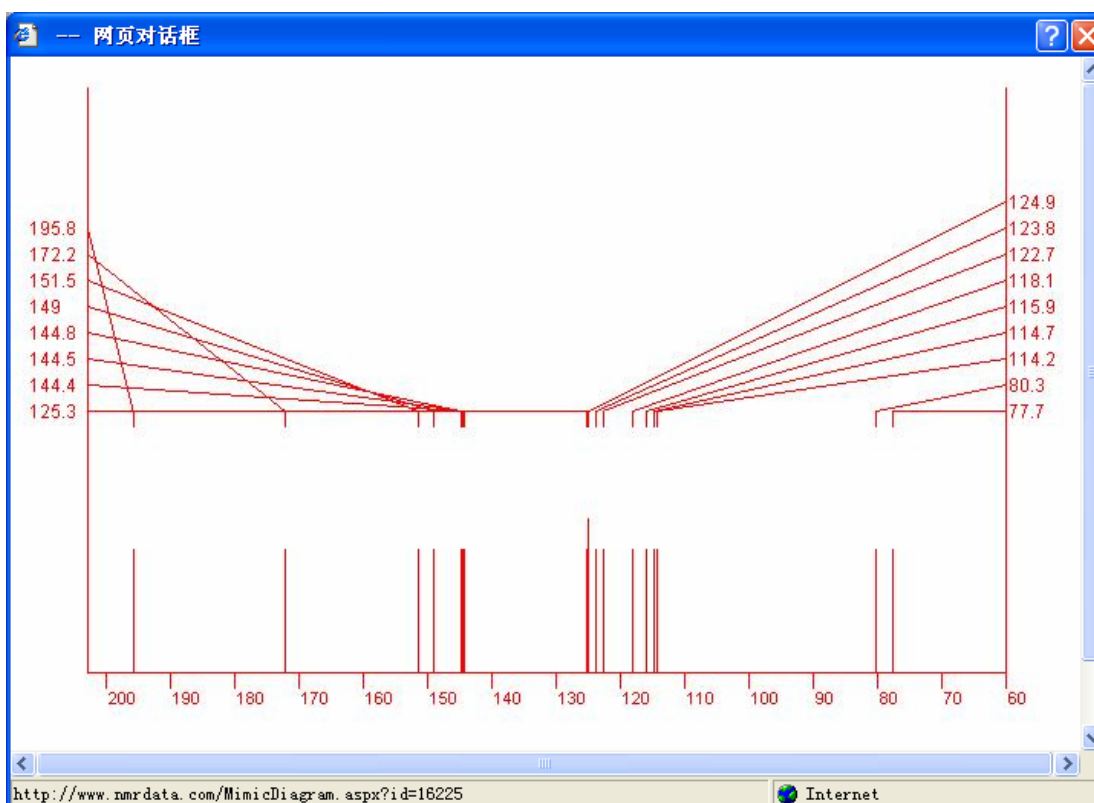


图 1.5 ^{13}C -NMR 模拟图

2. 模糊查询

用以帮助用户快速确定新化合物的结构。通过模糊查询，用户可以从库中查询出具有相似结构的一系列化合物，同时得到这些化合物的结构及与 $^{13}\text{C-NMR}$ 数据。在相似结构的基础上，用户便能迅速确定新化合物的结构。

模糊查询的界面见图 2.1，用户需按求输入 $^{13}\text{C-NMR}$ 数据，对于溶剂选项、匹配容差和相似度，用户可自行设定，也可采用系统默认值。

例如，输入以下 $^{13}\text{C-NMR}$ 数据：11.5,14.3,18.7, 19.2,37.1,42.7,55.8,59.2,60.6, 60.8,60.9,75.8,85.9,109.8,110.3, 121.6,121.7,127.4, 131.4, 137.1,137.7, 138.5, 141.8, 148.8,149.4,151.8,152.1,166.7，通过模糊查询，共得到 129 个相似度大于或等于 50% 的化合物。对这 129 个化合物的结构进行比较，发现均为联苯环辛二烯类木脂素化合物，而待查化合物也为具有该结构的一个新化合物。

如果没有查到理想的结构，可以增加容差值，但建议不要大于 3。

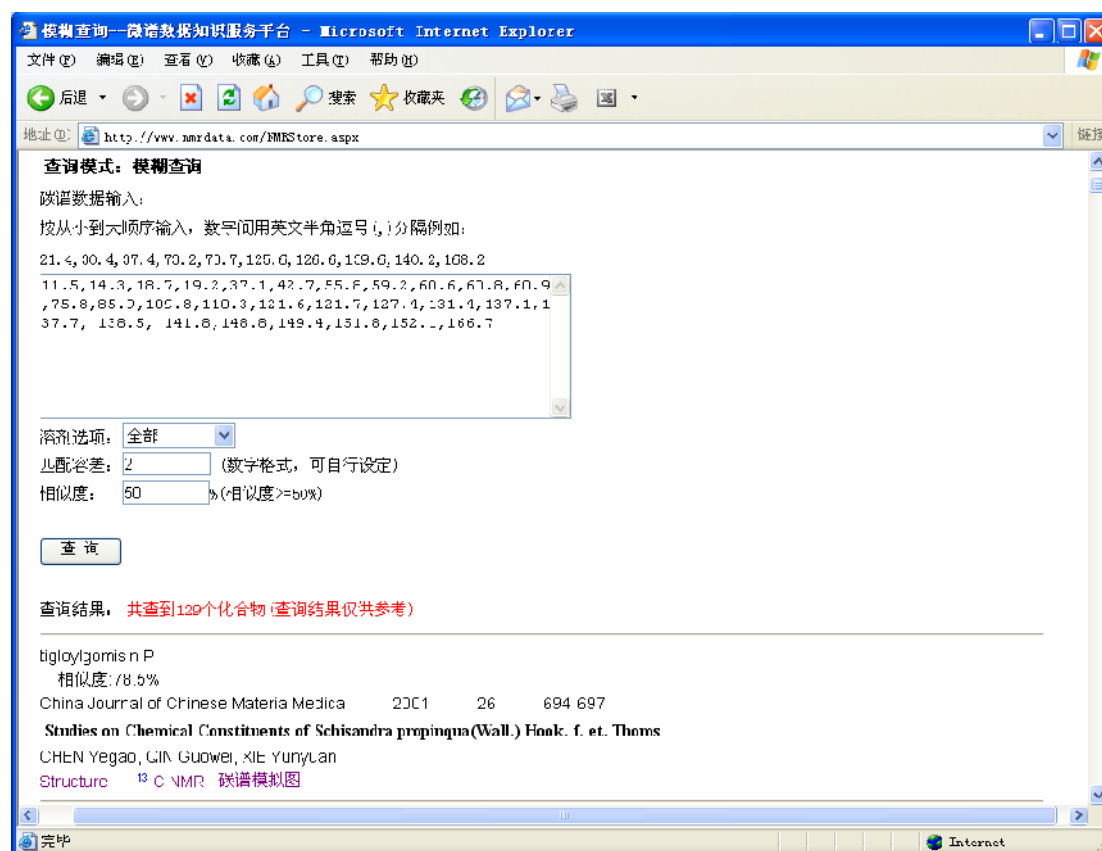


图 2.1 模糊查询的界面及查询结果

上海微谱信息技术有限公司

Shanghai Micronmr Infor Technology Co., Ltd.

联系地址：上海市杨浦区邯郸路 100 号 61 栋 131 室 邮编：200437

5

3. 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。

为此我们设计了深度查询，对模糊查询的缺陷进行弥补，查询界面见图 3.1。



图 3.1 深度查询的界面

4. 基团查询

针对少量 ^{13}C -NMR 数据进行查询。例如，用户在 ^{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。

基团查询能对 1 至 6 个碳原子的 ^{13}C -NMR 数值进行查询。

5. 不精确库查询

对于一些具有长链 CH₂ 基团的化合物，大部分文献都没有对这些长链 CH₂ 的 ¹³C-NMR 数值做出精确的归属，而是给出一个范围值。为此，我们特建立了不精确 ¹³C-NMR 库，以便对这些化合物进行查询，其查询界面见图 5.1。



图 5.1 不精确库的查询界面

6. 化合物相关信息查询

微谱数据平台提供与化合物相关的多种查询方法，用户可以对**化合物名称**、**分子式**、**作者**进行查询，也可以**植物名称**(属名或种名)为对象进行检索。下图是以 Kadsura(南五味子属)为检索对象进行查询，共获得 195 条结果，皆为南五味子属中分离到的化合物。

点击相关的链接，即可得到该化合物的结构图及文献中的原始 ^{13}C -NMR 数据。

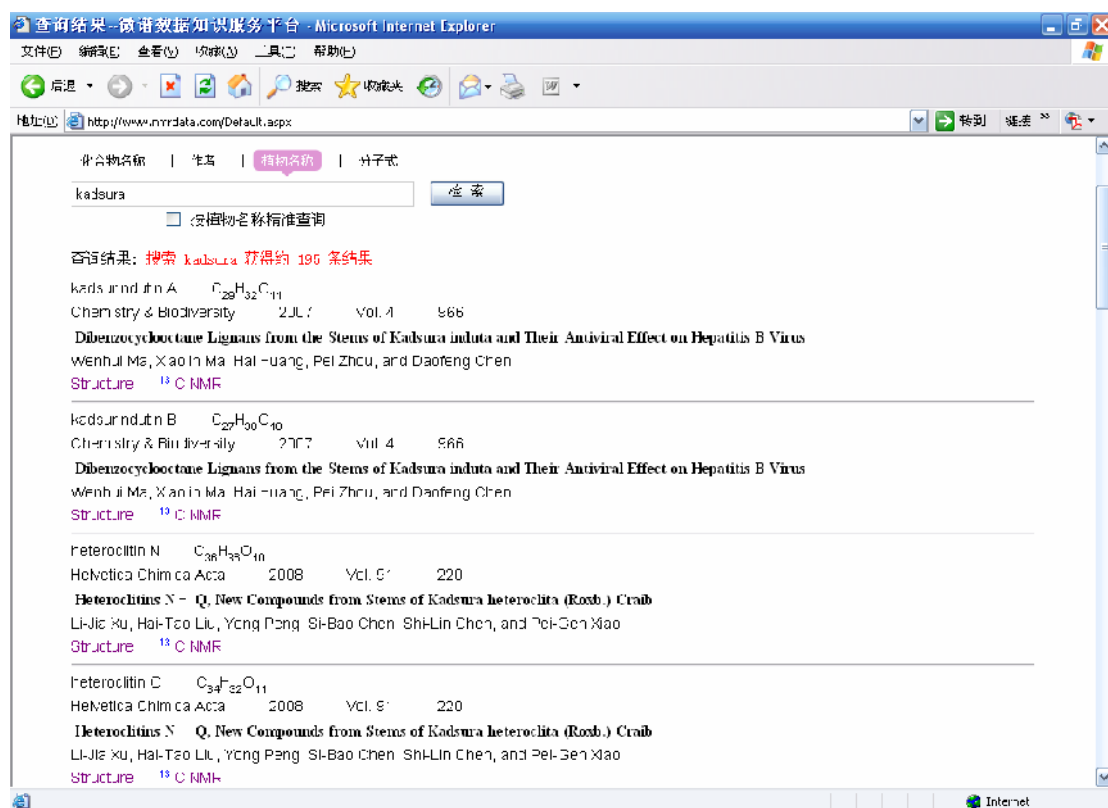


图 6.1 植物名称查询界面