

微谱数据简介与教程

上海微谱信息技术有限公司(Shanghai Micronmr Infor Technology Co., Ltd.), 致力于有机化合物核磁共振碳谱数据库(又称“**微谱数据**”)的建设, 已建成全球最大的核磁共振碳谱数据库, 现收录有机化合物 176 万个, 基本包含已发表的天然产物, 适用于药学、化学、生命科学等学科领域, 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服务, 帮助快速确定已知化合物和新化合物结构, 节省宝贵的时间和资金, 为我国医药事业的发展尽一份力。

一、产品情况

微谱数据 (www.nmrdata.com) 是专门为从事中药现代化研究、有机合成和药物开发等领域研究而设计的工具型数据库。

1. 快速确定化合物结构

该库以研究人员所测化合物的碳谱值为索引, 在库中搜索、比对, 寻找出与之相同或者相似的已经报道化合物, 进而快速确定化合物结构的类型和构型, 也为新化合物或新骨架提供重要参考依据; 同时还设计了科学合理的碳谱模拟图, 便于直观的精细对比。数据输出结果还包含源引的文献, 作者等相关信息, 便于对原数据进行核查。

2. 有效快速查找相关文献信息

现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**, 以及四种关键词检索: **化合物名称**、**分子式**、**作者**、**植物名称 (属名或种名)**, 扩大了检索范围和检索广度, 为多维度搜索提供了方便。

3. 数据库更新

数据库每周更新, 所有数据均来源于国内外公开发表的重要学术期刊杂志论文原文, 这为数据的准确性提供了重要保障。

二、数据库的价值

微谱数据是一个工具型数据库，能够为学生节省实验时间，为老师节省研究经费，方便科研和教学工作，为学校提高 SCI 论文数量和质量，具有重要的使用价值，现已在美国密西西比大学、澳门科技大学、中国药科大学、浙江大学、沈阳药科大学、黑龙江中医药大学、第二军医大学、同济大学、上海交通大学、上海药物研究所、中山大学、厦门大学、西南大学等单位使用。

1. 节约研究时间，提高科研效率

微谱数据能够有效加快研究人员鉴定已知化合物和新化合物结构的速度。对于已知化合物，能够在几秒钟之内直接检索出相应的结构及文献信息；对于新化合物，能够快速查找到与新化合物结构最相似的一个结构(新化合物类似物)，研究人员可以在此基础上进行推导，从而快速、准确地确定新化合物的结构。化合物名称、分子式、作者、植物名称四种查询功能，能够帮助研究人员迅速得到大量的相关信息，节省大量的文献检索时间。

表 1. 鉴定 1 个化合物结构的花费时间

	常规方法	微谱数据
已知化合物	数天至数周时间	几秒钟完成结构鉴定
新化合物	数周至数月时间	几小时内完成结构鉴定

2. 节约研究经费

微谱数据能够帮助研究人员快速确定已知化合物的结构信息，避免不必要的实验，从而节省大量的实验费用。例如，常规鉴定一个化合物的结构，需测试氢谱、碳谱、紫外光谱、红外光谱和质谱等理化特征，如借助微谱数据，对于已知化合物仅需测出氢谱和碳谱即可。

表 2. 鉴定 1 个化合物结构的费用

	常规方法	微谱数据
已知化合物	^1H -NMR, ^{13}C -NMR, DEPT 90, DEPT 135, HSQC, HMBC, ROESY, MS 等	^{13}C -NMR
费用	800 元以上	100 元以内

3. 提高 SCI 论文数量和质量

分离到的 1 个新化合物，可以发表 1 篇 SCI 论文；几个已知化合物结合生物活性数据，也能发表 1 篇 SCI 论文。微谱数据能够帮助研究人员提高确定新化合物和已知化合物结构的速度和概率，帮助学校发表更多的 SCI 论文。研究人员完全可以将确定化合物结构及文献检索的部分繁琐工作交给微谱数据处理，将更多的时间和精力投入于学科的创新和发展方面，从本质上提高科研团队的水平，获得更多的科研成果，提升学科的综合实力。

4. 针对性的检索设计，教、学的好工具

通过对碳谱的检索，大量具有相似碳骨架的化合物集中在一起列示，学生能更快的熟悉某一类化合物的特征。

三、已收录的期刊

截至到 2018 年 9 月，数据库正在收录和收录完的国内外期刊达 600 余种（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。

四、使用方式

方式 1. 授权 IP 地址：通过浏览器访问 www.nmrdata.com

方式 2. 购买 VIP 账号：使用账号登录 www.nmrdata.com

附 使用教程

1. 碳谱查询举例：

输入以下碳谱数据，选择模糊查询

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

有机化合物总数: 1769716
更新时间: 2024-05-09 14:42:36



输入碳谱并用英文半角逗号(,)分隔。例如:
141.5,16.3,31.5,20.2,1,21.5,33.3,4.1,121.3,6.7

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 全部 容差 1 ∈ [0, 2] 碳谱库 ☒ Nat ☐ Syn 相似度(%) 70 ∈ [50, 100]

¹³C NMR 检索

Copyright © 2010-2024 沪ICP备10026489号-1 上海微谱信息技术有限公司 (Shanghai Micronmr Infor Technology Co., Ltd.) 上海市杨浦区国权北路1688弄A6栋10层

图 1. 碳谱数据模糊查询界面

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 ¹³C NMR 检索 返回 登录

☐ 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 1 ∈ [0, 2] 碳谱库 ☒ Nat ☐ Syn 相似度(%) 70 ∈ [50, 100]

共匹配到 15 个结果

1. kadsurindutin A C₂₉H₃₂O₁₁ 100%
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
Chemistry & Biodiversity 2007 / Vol. 4 / 966
Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 数据分析 期刊地址 Match Report 碳谱峰图
2. kadsurindutin B C₂₇H₃₀O₁₀ 86%
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
Chemistry & Biodiversity 2007 / Vol. 4 / 966
Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 数据分析 期刊地址 Match Report 碳谱峰图
3. kadsurarin C₃₀H₃₆O₁₁ 76%
Studies on the Constituents of Schisandraceae Plants in Shennongjia District III. Isolation and Structures of Schisantherin G, H and I
Liu Jia-Sen Ma Yu-Ting
Acta Chimica Sinica 1988 / 46 / 465-471
Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 数据分析 期刊地址 Match Report 碳谱峰图
4. kadsurarin C₃₀H₃₆O₁₁ 76%

图 2. 模糊查询结果

点击 Structure, ¹³C NMR 可查看该化合物的结构图及文献中的碳谱数据, 点击期刊地址, 可链接到该文献中地址, 如果学校购买了权限, 可直接下载全文。

15.7,17.1,19.9,20.1,28.9,42.9,59.59,74,83.6,84.8,100.9,101.1,101.8,106.2,119.6,121.1,127,128.9,133,135.1

¹³C NMR 检索

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 1 ∈ [0, 2] 碳谱库 Nat Syn 相似度(%) 70 ∈ [50, 100]

共匹配到 15 个结果

1. kadsurindutin A 100%

Dibenzocyclo...
Wenhui Ma...
Chemistry &...
Structure

2. kadsurindutin A 86%

Dibenzocyclo...
Wenhui Ma...
Chemistry &...
Structure

3. kadsurindutin A 76%

Studies on the Constituents of Schisandraceae Plants in Shennongjia District III. Isolation and Structures of Schisantherin G, H and I
Liu Jia-Sen Ma Yu-Ting
Acta Chimica Sinica 1988 / 46 / 465-471
Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 数据分析 期刊地址 Match Report 碳谱峰图

4. kadsurindutin A 76%

kadsurindutin A

R = Ac

Ang =

图 3. 结构图

15.7,17.1,19.9,20.1,28.9,42.9,59.59,74,83.6,84.8,100.9,101.1,101.8,106.2,119.6,121.1,127,128.9,133,135.1

¹³C NMR 检索

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 1 ∈ [0, 2] 碳谱库 Nat Syn 相似度(%) 70 ∈ [50, 100]

共匹配到 15 个结果

1. kadsurindutin A 100%

Dibenzocyclo...
Wenhui Ma...
Chemistry &...
Structure

2. kadsurindutin A 86%

Dibenzocyclo...
Wenhui Ma...
Chemistry &...
Structure

3. kadsurindutin A 76%

Studies on the Constituents of Schisandraceae Plants in Shennongjia District III. Isolation and Structures of Schisantherin G, H and I
Liu Jia-Sen Ma Yu-Ting
Acta Chimica Sinica 1988 / 46 / 465-471
Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 数据分析 期刊地址 Match Report 碳谱峰图

4. kadsurindutin A 76%

kadsurindutin A

Solvent	Position	¹³ C NMR
CDCl ₃	Ang-4'	15.7
	7-Me	17.1
	Ang-5'	19.9
	AcO	20.1
	6-Me	28.9
	7	42.9
	MeO-1	59
	MeO-12	59
	6	74
	8	83.6
	5	84.8
	10,11-CH ₂ O	100.9
	2,3-CH ₂ O	101.1
	9	101.8
	4	106.2
	12a	119.6
	12b	121.1
	Ang-2'	127
	4a	128.9
	8a	133
	11	135
	2	135.1
	Ang-3'	139.7
	1	140.6
	12	140.7
	3	147.7
	10	148.8
	Ang-1'	165.7

图 4. 原始碳谱数据

2. 化合物信息查询举例

输入 schisandra 选择化合物名称进行查询

有机化合物总数: 1769716
更新时间: 2024-05-09 14:42:36



schisandra



☒ 化合物名 ☐ 作者 ☐ 分子式 ☐ 植物名

Copyright © 2010-2024 沪ICP备10026489号-1 上海微谱信息技术有限公司 (Shanghai Micronmr Infor Technology Co., Ltd.) 上海市杨浦区国权北路1688弄A6栋10层

图 5. 化合物信息查询界面

微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名 检索 结果中检索 返回 登录

化合物名: schisandra 共匹配到 15 个结果

1. schisandracaurin A C31H38O11
Dimethylbutyrylated Dibenzocyclooctadiene Lignans from the Fruits of Schisandra cauliflora Inhibit NO Production in LPS-Activated RAW264.7 Cells
Pham Hai Yen, Nguyen Huy Hoang, Nguyen Xuan Nhiem, Phan Thi Thanh Huong, Duong Thi Dung, Nguyen Thi Cuc, Nguyen The Cuong, Bui Van Thanh, Bui Huu Tai, and Phan Van Kiem
Chemistry & Biodiversity 2023 / 20 / e202300372
[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)
2. schisandracaurin B C32H40O11
Dimethylbutyrylated Dibenzocyclooctadiene Lignans from the Fruits of Schisandra cauliflora Inhibit NO Production in LPS-Activated RAW264.7 Cells
Pham Hai Yen, Nguyen Huy Hoang, Nguyen Xuan Nhiem, Phan Thi Thanh Huong, Duong Thi Dung, Nguyen Thi Cuc, Nguyen The Cuong, Bui Van Thanh, Bui Huu Tai, and Phan Van Kiem
Chemistry & Biodiversity 2023 / 20 / e202300372
[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)
3. schisandracaurin D C30H36O11
Dimethylbutyrylated Dibenzocyclooctadiene Lignans from the Fruits of Schisandra cauliflora Inhibit NO Production in LPS-Activated RAW264.7 Cells
Pham Hai Yen, Nguyen Huy Hoang, Nguyen Xuan Nhiem, Phan Thi Thanh Huong, Duong Thi Dung, Nguyen Thi Cuc, Nguyen The Cuong, Bui Van Thanh, Bui Huu Tai, and Phan Van Kiem
Chemistry & Biodiversity 2023 / 20 / e202300372
[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)

图 6. 以五味子属 schisandra 作为关键词的查询结果