

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，现已建成全球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	2
不精确库查询	2
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
天然产物 SMILES 查询	9

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 200 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 100 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（两项授权专利），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下方点击“开始使用”即可进入高校查询界面



^{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。



输入碳谱并用英文半角逗号(,)分隔。例如：

38.7,128.1,124.2,29.4,25.6,49.2,140.8,38.72,70.9,43.2,20.8,24.3,115.9,19.4

精确查询 模糊查询 深度查询 基团查询 不精确库

溶剂 容差 碳谱库 Nat Syn

^{13}C NMR 检索

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

输入以下碳谱数据：

38.7,128.1,124.2,29.4,25.6,49.2,140.8,38.72,77.0,9.43,2,20.8,24.3,115.9,19.4

设置好参数，然后点击下方 [\$^{13}\text{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，碳谱峰图，活性等。

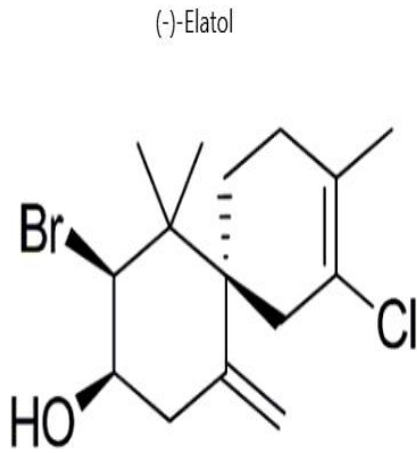


图 2. 精确查询结果

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 [期刊地址](#) 将链接该期刊的网址, 单击 [Match Report](#) 可得到详细的碳谱匹配分析报告, 单击 [碳谱峰图](#) 可得到碳谱数据的模拟峰图 (图 5), 单击 [查看活性](#) 可得到化合物的活性及文献 (图 6)。

(-)-Elatol

×



Solvent	Position	¹³ C NMR
CDCl ₃	CH ₃ -C15	19.4
	CH ₃ -C13	20.7
	CH ₃ -C12	24.2
	CH ₂ -C1	25.6
	CH ₂ -C2	29.3
	CH ₂ -C8	38
	CH ₂ -C5	38.6
	C0-C11	43.1
	C0-C6	49.1
	CH-C9	72.2
	CH-C10	70.8
	CH ₂ -C14	115.9
	C0-C3	128
	C0-C4	124.1
C0-C7	140.8	

图 3. 化合物的结构

图 4. 化合物的原始 ¹³C-NMR 数据

C13 - 19.4,20.7,24.2,25.6,29.3,38.0,38.6,43.1,49.1,72.2,70.8,115.9,128.0,124.1,140.8
溶剂 - CDCl₃

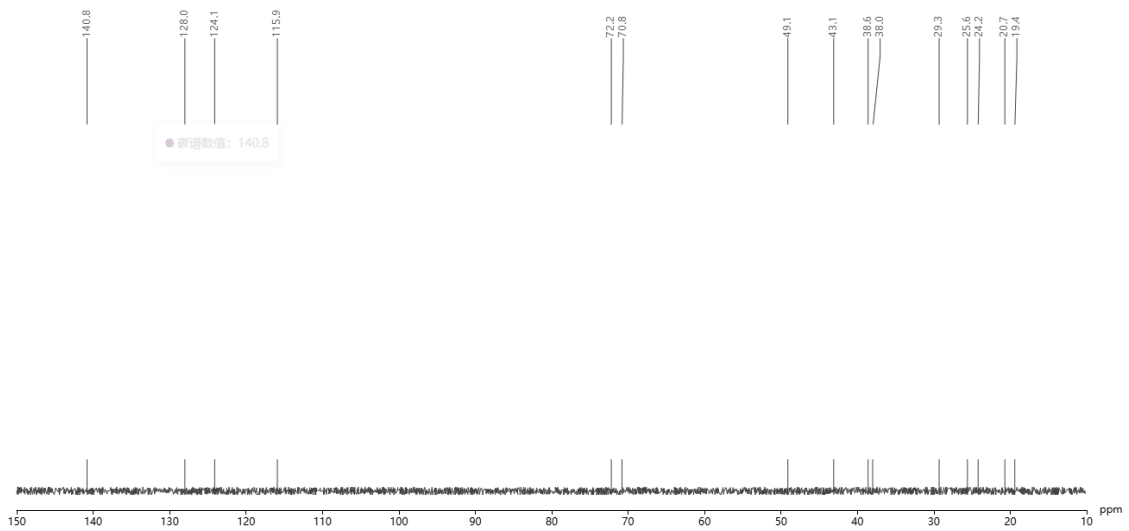


图 5. 碳谱数据模拟峰图

(-)-Elatol

×

【活性】抗利什曼原虫[Leishmania amazonensis前鞭毛体, IC50=(9.7±1.2)μg/mL, 阳性对照Sb III, (0.9±0.2)μg/mL; 无鞭毛体, IC50=(4.5±0.9)μg/mL, 阳性对照Sb III, IC50=(2.7±0.5)μg/mL, 细胞毒, 巨噬细胞, IC50=(112.9±4.5)μg/mL], 阳性对照Sb III, IC50=(6.9±0.7)μg/mL, 淋巴结细胞, IC50=(120.2±8.3)μg/mL, 阳性对照Sb III, IC50=(7.2±0.5)μg/mL

【文献】Machado FLS, et al. Planta Med. 2011, 77:733;

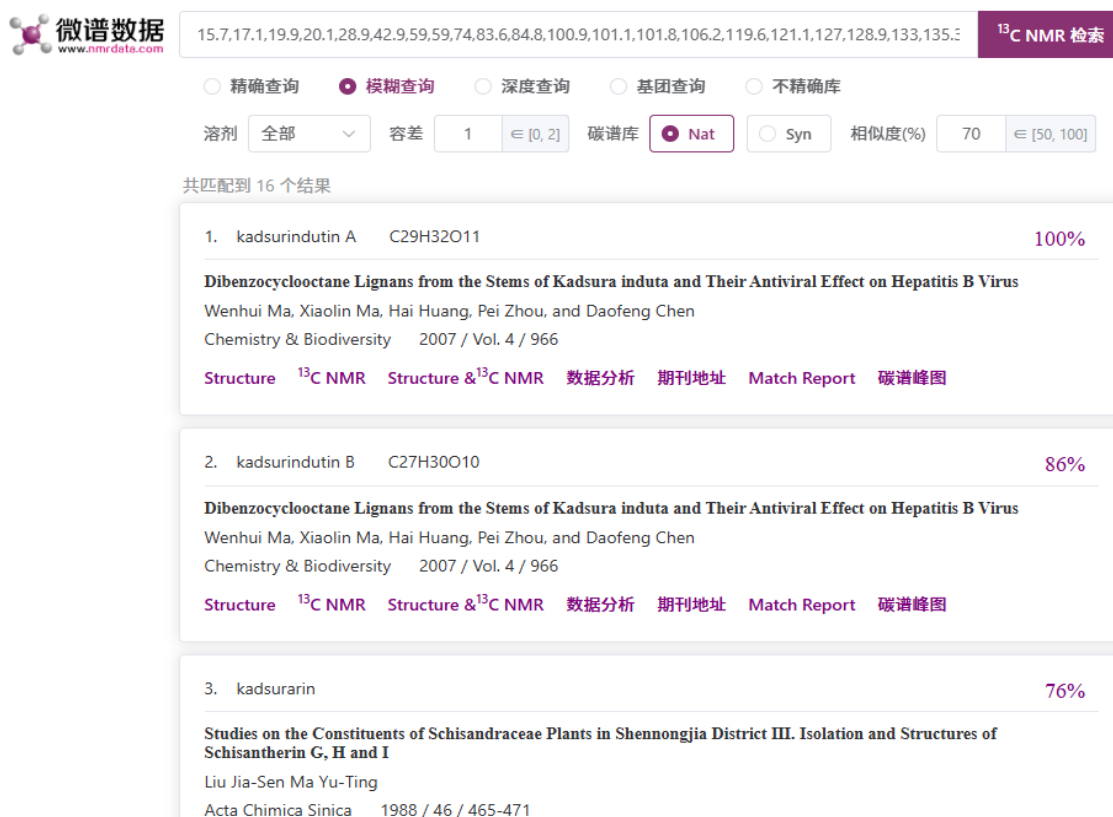
图 6. 活性

模糊查询举例

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, 然后点击下方的 **13C NMR** 查询按钮(数字间用英文状态下的逗号隔开, 共查到 16 个结果, 结果见图 7。图 8 为相似度排在前 3 的化合物结构图, 基本骨架一样, 不同的只是局部取代基。如果化合物 1 为新化合物, 在 2 和 3 的基础上, 很快也能推导出 1 的结构。



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

微谱数据 **13C NMR 检索**

精确查询 模糊查询 深度查询 基因查询 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 16 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 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

图 7 模糊查询结果

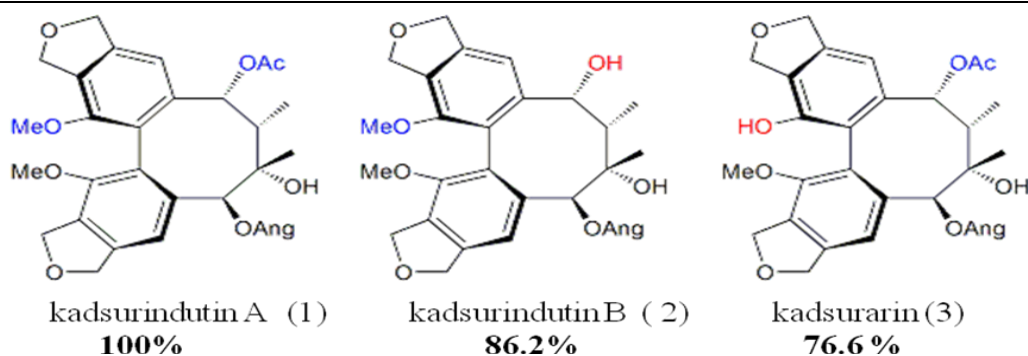


图 8. 相似度排在前 3 的化合物结构

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√标示（图 9）。

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

图 9. 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)，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 *Schisandra* 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。

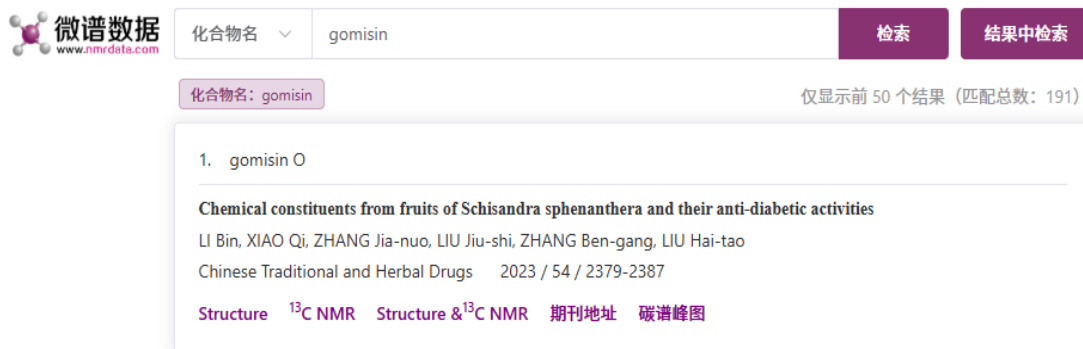


微谱数据
www.nmrdata.com

以英文或拉丁名为主

化合物名 分子式 作者 植物名

图 8. 化合物相关信息检索界面



微谱数据
www.nmrdata.com

化合物名 检索 结果中检索

化合物名: gomisin 仅显示前 50 个结果 (匹配总数: 191)

1. gomisin O

Chemical constituents from fruits of *Schisandra sphenanthera* and their anti-diabetic activities
LI Bin, XIAO Qi, ZHANG Jia-nuo, LIU Jiu-shi, ZHANG Ben-gang, LIU Hai-tao
Chinese Traditional and Herbal Drugs 2023 / 54 / 2379-2387

Structure ¹³C NMR Structure & ¹³C NMR 期刊地址 碳谱峰图

图 9. 以 gomisin 为化合物名称的检索结果

作者 Zheng-tao Wang 检索 结果中检索

作者: Zheng-tao Wang 仅显示前 50 个结果 (匹配总数: 266)

1. Prunellate A C19H14O8

Prunellate A: An Unprecedented Lignan Lactone with a 6/7/6/5- Fused Tetracycle Skeleton by C-2-C-2' and C-7-C-8' Linkage from the Chinese Medicinal Plant Prunella vulgaris Inhibiting the Activation of Hepatic Stellate Cells by Targeting FXR

Xiuqin Zheng, Yi Zhang, Qian Zhang, Jia-ruì Jiang, Zhu-zhen Han, Li-hua Gu, Li-li Ding, Rui Wang, Li Yang, and Zheng-tao Wang

ACS Omega 2025 / 10 / 12425-12431

[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)

图 10. 以 Zheng-tao Wang 为作者名称的检索结果

植物名 Schisandra 检索 结果中检索

植物名: Schisandra 仅显示前 50 个结果 (匹配总数: 1413)

1. schisanchignan A C18H20O5

Minor Lignans with Inhibitory Activity against LPS-Induced NO Production from Schisandra Chinensis

Ping Sun, Xin-Cheng Zhuang, Rui Ao, and Hua Zhang

Chemistry & Biodiversity 2025 / 22 / e202402354

[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)

图 11. 以 *Schisandra* 为植物属名的检索结果

分子式 C15H24O2 检索 结果中检索

分子式: C15H24O2 仅显示前 50 个结果 (匹配总数: 1178)

1. compound 1 C15H24O2

Isolation of Ten New Sesquiterpenes and New Abietane-Type Diterpenoid with Immunosuppressive Activity from Marine Fungus Eutypella sp

Nina Wang, Chunmei Chen, Qin Li, Qiqiang Liang, Yingjie Liu, Zongze Shao, Xiupian Liu and Qun Zhou

Pharmaceuticals 2025 / 18 / 737

[Structure](#) [¹³C NMR](#) [Structure & ¹³C NMR](#) [期刊地址](#) [碳谱峰图](#)

图 12. 以 C₁₅H₂₄O₂ 为分子式的检索结果

天然产物 SMILES 查询

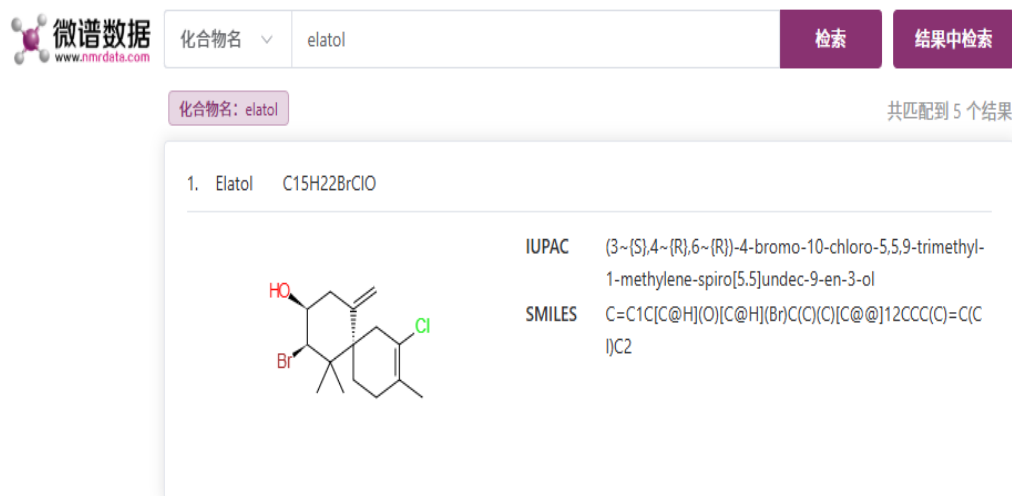
提供以下三种关键词检索：化合物名、分子式和 SMILES，检索界面见图 13。点击查询可检索出化合物的 SMILES 数值及结构，图 14 为以 elatol 作为化合物名称的检索结果。



The screenshot shows the search interface with the following elements:

- Logo: 微谱数据 www.nmrdata.com
- Search input field: elatol
- Search button: 搜索
- Radio buttons for search criteria:
 - 化合物名
 - 分子式
 - SMILES

图 13. 化合物相关信息检索界面



The screenshot shows the search results for elatol with the following details:

- Search criteria: 化合物名 elatol
- Buttons: 检索, 结果中检索
- Result summary: 化合物名: elatol, 共匹配到 5 个结果
- Result 1:

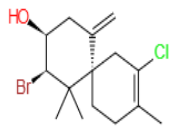
1. Elatol	C ₁₅ H ₂₂ BrClO
	<p>IUPAC (3~{S},4~{R},6~{R})-4-bromo-10-chloro-5,5,9-trimethyl-1-methylene-spiro[5.5]undec-9-en-3-ol</p> <p>SMILES <chem>C=C1[C@H](O)[C@H](Br)C(C)(C)[C@@]12CCCC(C)=C(C)C2</chem></p>

图 14. 以 elatol 为化合物名称的 SMILES 检索结果