

### 3.2.23 核磁谱图数据库

**数据库介绍:** 核磁谱图数据库属上海有机所**化学数据库**系统的一部分, 本数据库共收录两种核磁共振波谱的谱图: 标准谱与特征谱。其中标准谱只有碳谱CNMR, 特征谱则包括了氢谱HNMR、碳谱CNMR、氧谱ONMR、氮谱NNMR等多个类别。标准谱原则上包括了化合物的全部谱峰, 特征谱则可能只有化合物的部分谱峰。

用户可通过化合物检索, 也可以通过上传谱图文件, 或者输入谱峰来检索。

#### 检索方式与示例:

1) 化合物检索 由于数据库谱图来源不同, 故所有检索都可以选择“标准谱”和“特征谱”, 两种来源至少选择一种, 可以全选。还可以选择谱图类型, 比如 CNMR、HNMR 或者是任意类型。

特征谱和标准谱的差别: 标准谱原则上包括了所有测量区域的谱峰, 而特征谱可能包括部分或者全部谱峰。

化学数据库:核磁谱图数据库->化合物检索

检索关键字: 化合物英文名称 检索式: Gly%

标准谱  特征谱

选择谱图类型: CNMR

精确检索  模糊检索(检索词中可包含'\*', 匹配任意字符)

提交检索

新用户小贴士:

- 标准谱和观测谱来自不同数据源, 请至少选择一项。每个数据源最多显示100条检索结果, 如检索结果不能满足您的需求, 请调整您的检索条件。
- 模糊检索请用\*表示, 例如 Gly\*。
- 检索结果按srn号码升序排列, srn号码是有机所化合物登录号, 可在化合物库检索获得。

图 3.2.23.1 化合物检索核磁谱图

当前位置:核磁谱图数据库->化合物检索

化合物检索 化合物结构检索 上传谱图文件检索 输入谱峰检索 核磁库首页 返回

共为您找到 100 个标准谱, 41 特征谱。

| 编号 | 化合物名称                                    | 分子式       | cas号码      | SRN号  | 核磁谱图                        |
|----|--|-----------|------------|-------|-----------------------------|
| 1  | GLYCINE                                  | C2H5NO2   |            | 319   | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 2  | Glycine                                  | C2H5NO2   |            | 319   | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 3  | Glycine                                  | C2H5NO2   |            | 319   | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 4  | GLYCEROL                                 | C3H8O3    |            | 600   | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 5  | GLYCEROL                                 | C3H8O3    | 56-81-5    | 600   | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 6  | GLYCEROL                                 | C3H8O3    | 56-81-5    | 600   | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 7  | GLYCEROL                                 | C3H8O3    | 56-81-5    | 600   | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 8  | (2,2-Dimethyl-1,3-dioxolan-4-yl)methanol | C6H12O3   | 100-79-8   | 5937  | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 9  | (2,2-Dimethyl-1,3-dioxolan-4-yl)methanol | C6H12O3   | 100-79-8   | 5937  | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 10 | (2,2-Dimethyl-1,3-dioxolan-4-yl)methanol | C6H12O3   | 100-79-8   | 5937  | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 11 | N-PHENYLGLYCINE                          | C8H9NO2   |            | 7588  | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 12 | DIETHYLENE GLYCOL, BIS(CHLOROFORMATE)    | C6H8Cl2O5 |            | 10622 | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 13 | ETHYLENE GLYCOL                          | C2H6O2    |            | 11026 | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 14 | 1,2-ETHANEDIOL (GLYCOL)                  | C2H6O2    | 25322-68-3 | 11026 | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 15 | 1,2-ETHANEDIOL (GLYCOL)                  | C2H6O2    | 25322-68-3 | 11026 | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 16 | TRIETHYLENE GLYCOL, DIMETHACRYLATE       | C14H22O6  |            | 12740 | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 17 | 1,2-dimethoxyethane                      | C4H10O2   | 110-71-4   | 13988 | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 18 | 1,2-dimethoxyethane                      | C4H10O2   | 110-71-4   | 13988 | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 19 | 1,2-dimethoxyethane                      | C4H10O2   | 110-71-4   | 13988 | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 20 | DIGLYCOLIC ACID                          | C4H6O5    |            | 14235 | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |

图 3.2.23.2 化合物名称检索核磁谱图的结果

对每一种名称均可进行模糊检索或者精确检索。如图 3.2.23.1，输入“gly%”模糊检索所有名称含有“gly”（例 1），检索结果如图 3.2.23.2。

#### 关于谱图显示的特别提示：

页面的谱图需要使用 java applet 显示，如果页面跳出了窗口显示 java 过期的信息，如图 3.2.23.3 所示，则点击按钮“运行一次”，即可正常显示谱图。



图 3.2.23.3 java 过期的提示(Chrome 浏览器)

如果 java 已经更新到了最新版本，则可能跳出程序运行的安全警告窗口，请在窗口中点击“运行”即可。如图 3.2.23.4 所示。

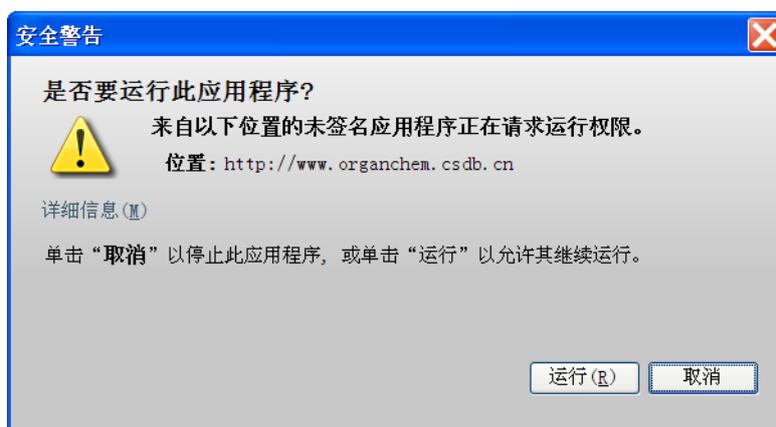


图 3.2.23.4 提示 java 运行的窗口

有些用户在把 java 更新到了 1.7.10 版本以后，出现“您的安全设置已阻止不可信应用程序运行”的提示，如下图：



图 3.2.23.5 java 安全设置里阻止本网站程序运行的窗口

对于这种情况，请用户在 java 控制面板中配置安全设置，该设置需要 java 更新到 Java 7 Update 51。

- 如何打开 Java 控制面板？

#### Windows 8

- 使用搜索来查找控制面板
- 按 Windows 徽标键 + W 以打开搜索框来搜索设置，或者将鼠标指针拖动到屏幕的右下角，然后单击搜索图标。
- 在搜索框中输入 Java 控制面板
- 单击 Java 图标以打开 Java 控制面板。

#### Windows 7、Vista

- 单击开始按钮，然后单击控制面板选项。
- 在控制面板搜索中输入 Java 控制面板。

- 单击 Java 图标以打开 Java 控制面板。

### Windows XP

- 单击开始按钮，然后单击**控制面板**选项。
- 双击 Java 图标以打开 Java 控制面板。

### Mac OS X 10.7.3 和更高版本

- 单击屏幕左上角的 Apple 图标。
- 转到系统偏好设置
- 单击 Java 图标以访问 Java 控制面板。



图 3.2.23.6 java 控制面板的“安全选项卡”

- 如何设置 Java 安全选项的例外站点？

1. 在 Java 控制面板中，单击 **Security**（安全）选项卡。
2. 在例外站点列表下方，单击 **编辑站点列表**，打开站点编辑窗口：

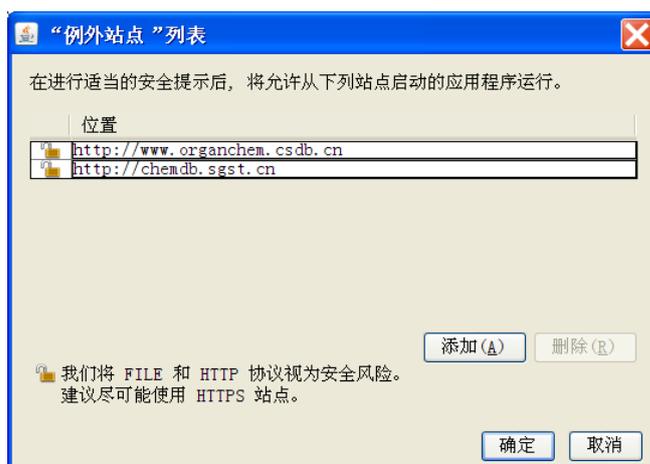


图 3.2.23.7 java 控制面板的“安全选项卡”添加例外站点

3. 单击 **添加** 按钮，逐条输入本网站的网址或者 ip 地址，然后单击确定：

1. http://www.organchem.csdb.cn
2. http://chemdb.sgst.cn
3. http://202.127.145.134

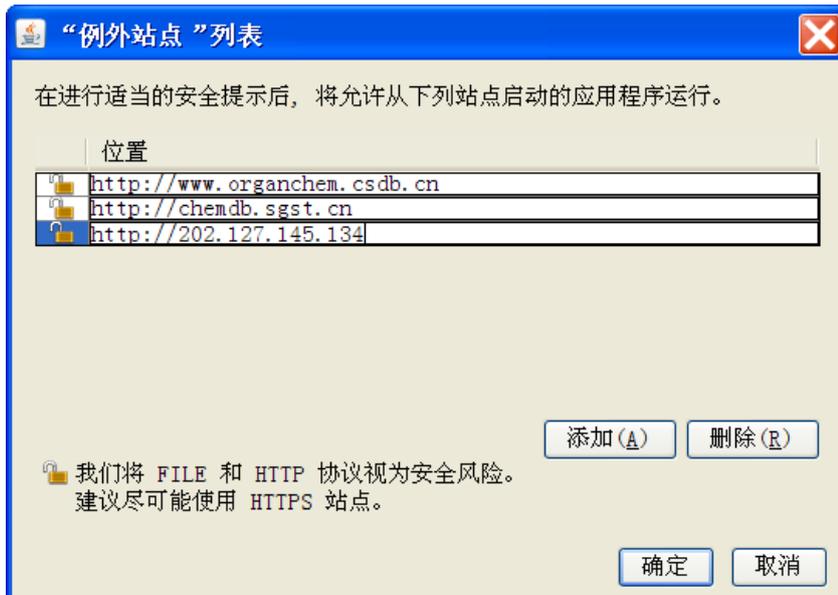


图 3.2.23.8 java 控制面板的“安全选项卡”添加例外站点

4. 然后在跳出来的安全警告窗口点击**继续**：



图 3.2.23.9 java 控制面板的“安全选项卡”确认添加例外站点

5. 在 java 安全选项卡里点击**确定**保存更改。



图 3.2.23.10 java 控制面板的“安全选项卡”确认修改

确认 java 设置妥当后, 就可以正常查看化合物的核磁谱图和结构图了, 如图 3.2.23.11。

物质名: GLYCINE  
 SRN: 319  
 分子式: C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>  
 分子量: 75  
 熔点: 233 °C - 233°C  
 沸点:  
 测试溶剂: D<sub>2</sub>O  
 测试参比: Dioxane

| 原子序号 | 化学位移  | 强度 | 谱峰编号 |
|------|-------|----|------|
| 2    | 42.3  | 91 | A    |
| 3    | 173.3 | 21 | B    |

13C 核磁数据:

化合物结构

对应原子编号

java显示的核磁谱图

位移: 42.3, 强度: 91, 对应碳原子序号: 2

图 3.2.23.11 浏览化合物的核磁谱图

除了化合物名称, 还可以检索 CAS 号码和 SRN 号码, 可以选择谱图“任意类型”, 如图 3.2.23.12。

化学数据库: [核磁谱图数据库](#) -> [化合物检索](#) [化合物检索](#) [化合物结构检索](#) [上传谱图文件检索](#) [输入谱峰检索](#) [核磁库首页](#)

检索关键字: SRN号 检索式: 319

精确检索 
  模糊检索 (检索词中可包含 '\*', 匹配任意字符)

提交检索

图 3.2.23.12 SRN 号码检索

当前位置: [核磁共振数据库](#) -> [化合物检索](#)   [化合物检索](#)   [化合物结构检索](#)   [上传谱图文件检索](#)   [输入谱峰检索](#)   [核磁库首页](#)   [返回](#)

共为您找到 1 个标准谱, 3 特征谱。

| 编号 | 化合物名称   | 分子式     | cas号码 | SRN号 | 核磁谱图                        |
|----|---------|---------|-------|------|-----------------------------|
| 1  | GLYCINE | C2H5NO2 |       | 319  | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  |
| 2  | Glycine | C2H5NO2 |       | 319  | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 3  | Glycine | C2H5NO2 |       | 319  | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> |
| 4  | Glycine | C2H5NO2 |       | 319  | <a href="#">1H NMR特征谱峰</a>  |

图 3.2.23.13 SRN 号码检索的结果

图 3.2.23.13 中, 可以看到 Glycine 有 1 个 CNMR 标准谱、2 个 CNMR 特征谱和一个 HNMR 特征谱。点击 HNMR 特征谱峰的连接, 可以看到特征谱。注意这是特征谱, 而非标准谱。只有一种邻接原子的 H 的数据。

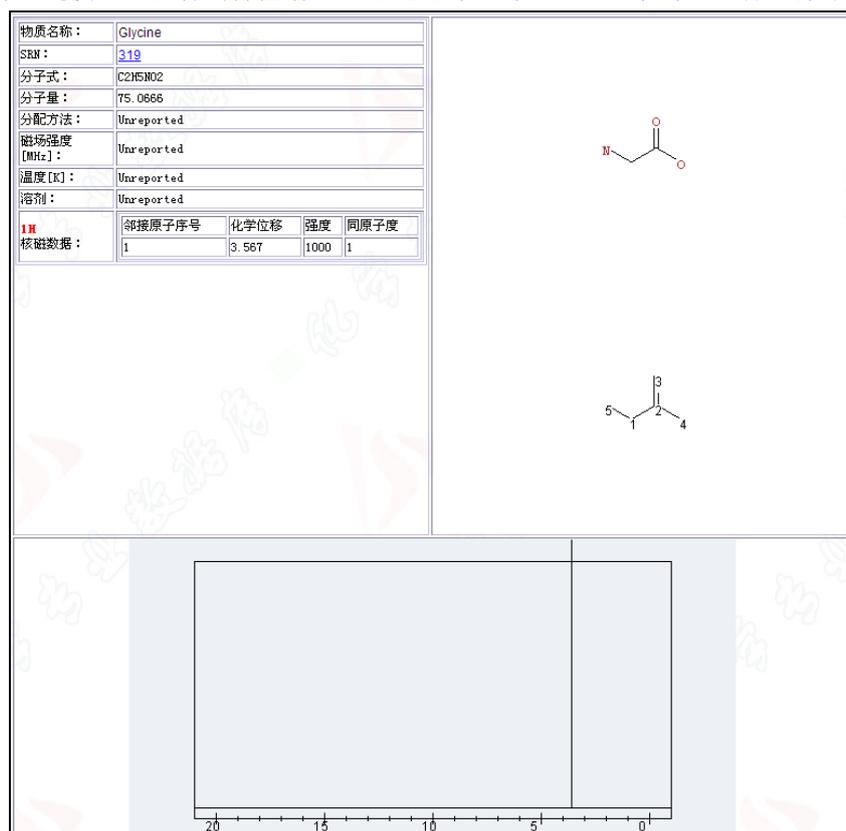


图 3.2.23.14 只含有部分数据的特征谱

化学数据库: [核磁共振数据库](#) -> [全结构检索](#)   [化合物检索](#)   [化合物结构检索](#)   [上传谱图文件检索](#)   [输入谱峰检索](#)   [核磁库首页](#)   [返回](#)

上传MOL文件检索   输入分子结构检索   [看不到结构绘画软件请点击这里](#)   [不会用这个软件请点击这里](#)

图 3.2.23.15 通过化合物结构检索核磁

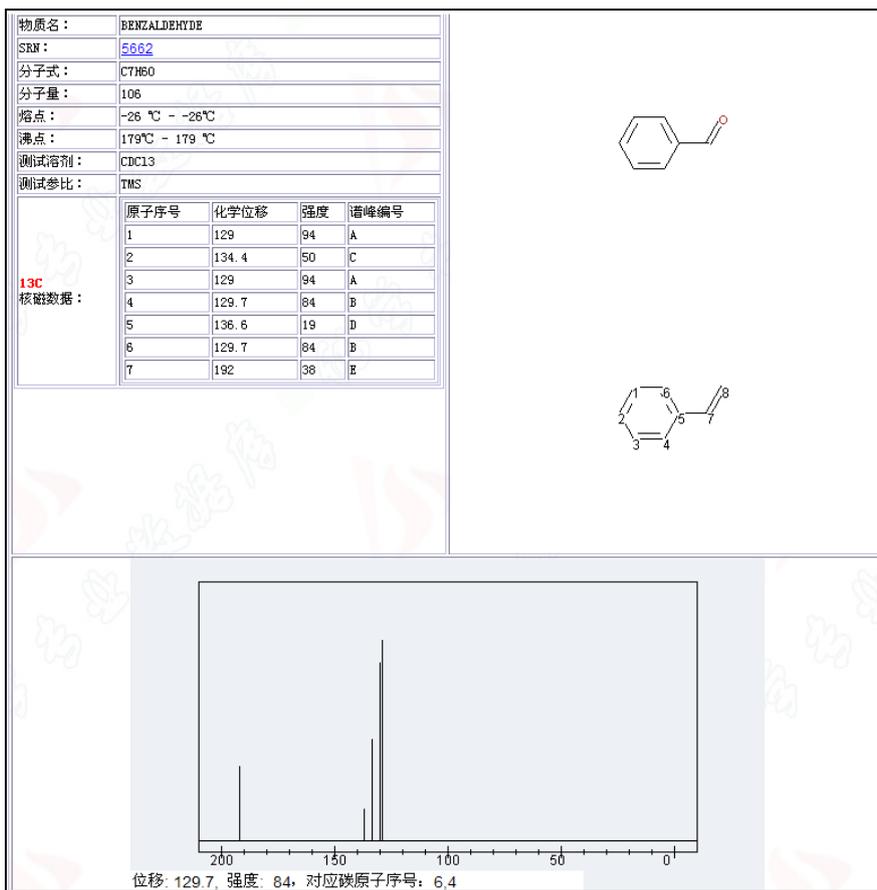


图 3.2.23.16 苯甲醛的标准 CNMR 谱图

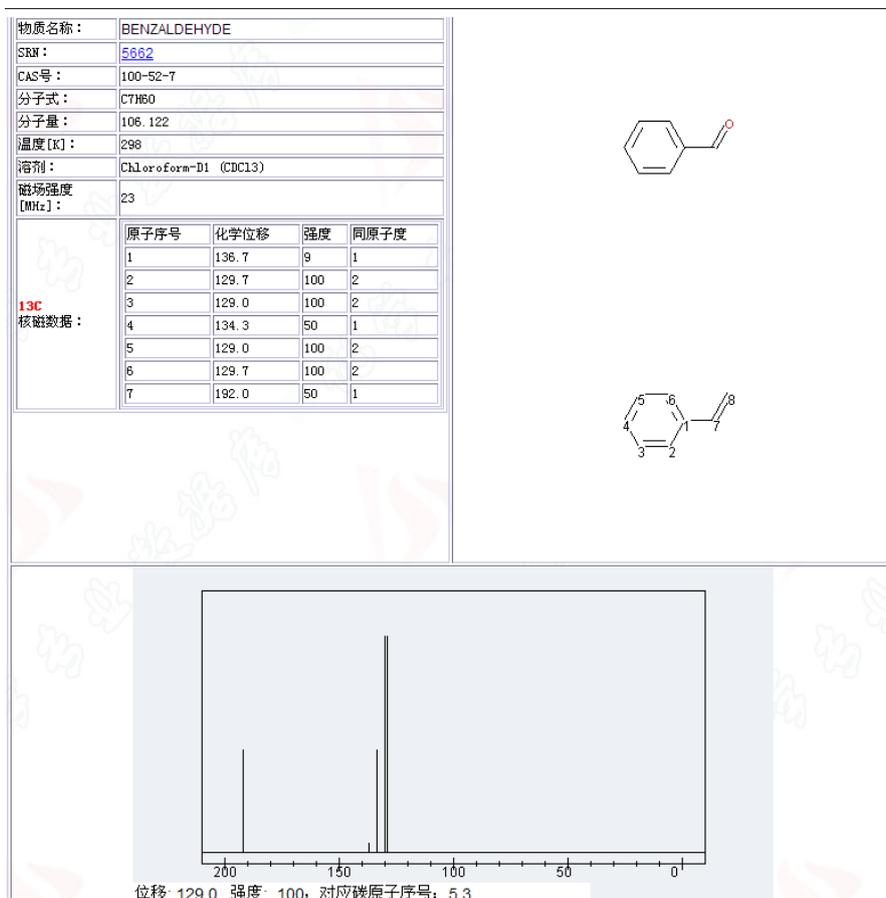


图 3.2.23.17 苯甲醛的特征 CNMR 谱图

2) 化合物结构检索 可在打开的 **jme** 界面中输入化合物结构, 如图 3.2.23.15, 输入苯甲醛。

化合物结构检索的过程: 首先检索结构, 获取化合物信息, 然后查找化合物的全部核磁谱图, 包括标准谱和特征谱。结构检索没有模糊匹配。

苯甲醛的标准 CNMR 谱和特征 CNMR 谱分别如图 3.2.23.16 和 3.2.23.17。从数据中可以看到, 不同的测试条件下实验数据会略有差别。

3) 上传谱图文件检索 可以上传文本格式的谱图数据文件, 然后设置容许误差和峰的匹配方式。

注意: 用于检索的核磁数据只需要化学位移值, 每一行一个化学位移值, 文件中除了数据外无其他字符。

谱图数据格式如图 3.2.23.18 所示, 检索参数如图 3.2.23.19。

42.3

173.3

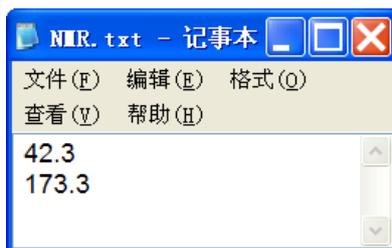


图 3.2.23.18 用于检索的谱图文件与数据格式



图 3.2.23.19 上传谱图文件检索核磁

#### 检索参数:

- 容许误差包括了正负误差, 一个样本谱峰的化学位移与目标谱峰的误差在容许误差范围内, 则此谱峰匹配成功。
  - ◇ 容许误差, 最小 $\pm 0.01$ (含), 最大 $\pm 2$ (含)。共有 7 个量级可供选择。
- 峰的匹配方式包括两种, 被检索的目标谱峰的数目可以多于用户提交的样本谱峰的数目, 或者完全一致。
  - ◇ 匹配峰的数目, 是以用户提交的样本谱作为计算基数的。如果目标谱有  $n$  ( $n > 1$ ) 个原子的谱峰与 1 个样本谱匹配, 则视为这  $n$  个谱峰都匹配成功, 此时样本匹配谱峰数+1, 而不是+ $n$ 。
  - ◇ 一次成功的谱峰检索要求样本谱的所有谱峰都匹配成功。如目标谱没有其他未匹配成功的谱峰, 即“目标谱峰与样本谱峰一致”, 否则就是“目标谱峰多于样本谱峰”。
  - ◇ 如图 3.2.23.22 所示, 2 号和 4 号原子与 173.3 的样本谱匹配, 则认为样本谱中 173.3 的匹配成功。同时, 目标谱的 42.8 与样本谱的 42.3 误差=0.5, 也认为匹配成功。

当前位置:核磁共振波谱数据库->检索结果列表

检索共耗时间 8秒, 共为您找到 2 个标准谱, 2 特征谱。

| 编号 | 化合物名称      | 分子式       | cas号码 | SRN号      | 核磁谱图                        | 匹配峰数  |
|----|------------|-----------|-------|-----------|-----------------------------|-------|
| 1  | GLYCINE    | C2H5NO2   | 0     | 319       | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  | 2 / 2 |
| 2  | MALONAMIDE | C3H5DN2O2 | 0     | 275523653 | <a href="#">13C NMR标准谱</a>  | 2 / 2 |
| 3  | Glycine    | C2H5NO2   |       | 319       | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> | 2 / 2 |
| 4  | Glycine    | C2H5NO2   |       | 319       | <a href="#">13C NMR特征谱峰</a> | 2 / 2 |

图 3.2.23.20 上传谱图文件检索核磁的结果

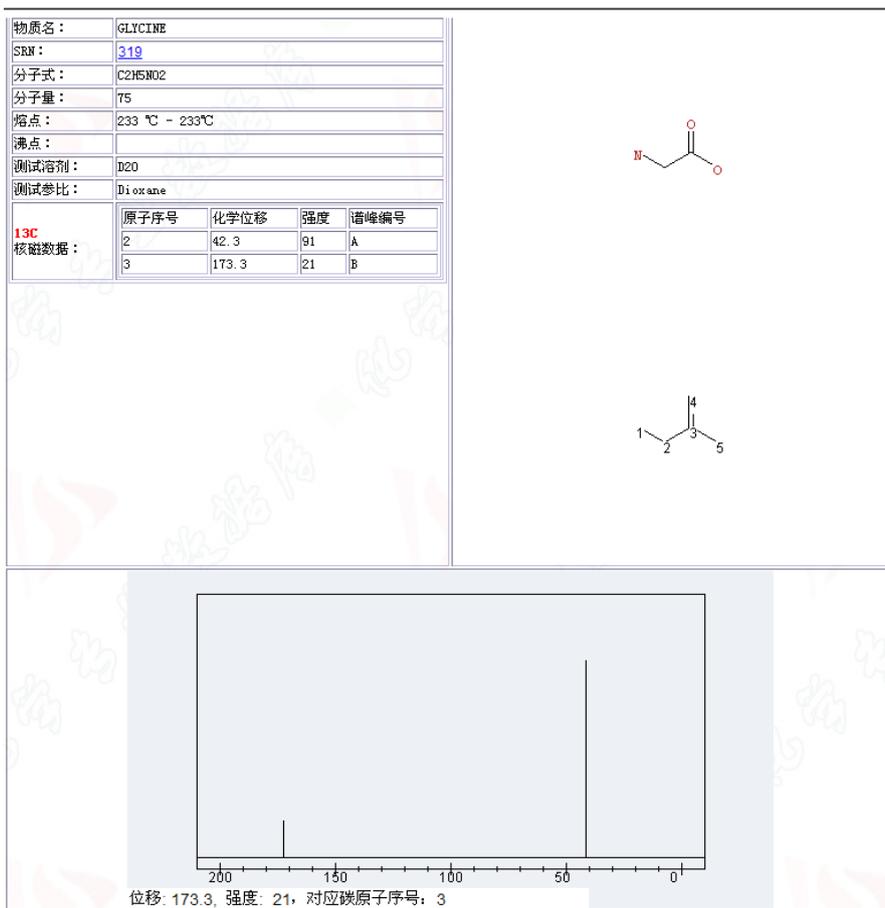


图 3.2.23.21 上传谱图文件检索核磁的结果

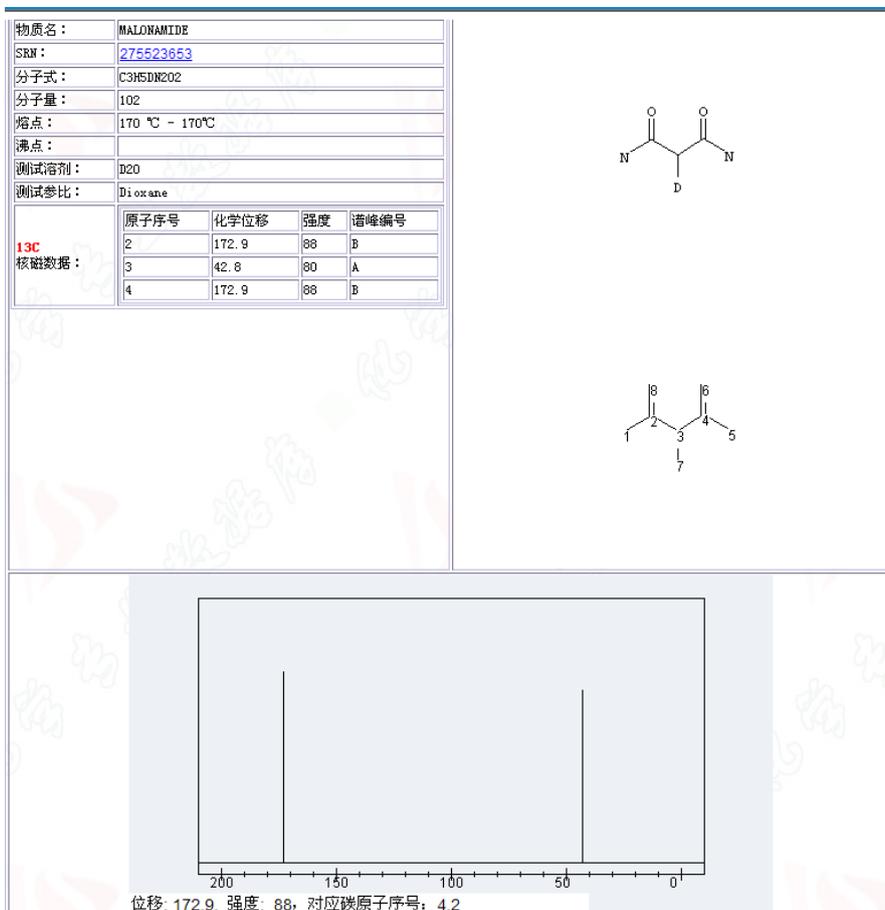


图 3.2.23.22 上传谱图文件检索核磁的结果

4)输入谱峰检索 输入谱峰数据,是指输入化学位移值。参数的意义与设置同上节。如图 3.2.23.23. 本例中选择只检索标准谱。其检索速度比同时检索两种谱要快。

请设置误差:

化学位移容许误差(绝对值)

峰的匹配

请在下框中输入待匹配的样本谱的核磁共振谱数据,每个数据只占一行:

42.8  
173.3

标准谱  特征谱

图 3.2.23.23 输入谱峰检索核磁

当前位置:核磁共振波谱数据库——>谱峰检索结果列表 [上传谱图文件检索](#) [化合物检索](#) [返回](#)

检索共耗费时间 1秒,共为您找到 2 个标准谱,0 特征谱。

| 编号 | 化合物名称      | 分子式       | cas号码 | SRN号      | 核磁谱图                       | 匹配峰数  |
|----|------------|-----------|-------|-----------|----------------------------|-------|
| 1  | GLYCINE    | C2H5NO2   | 0     | 319       | <a href="#">13C NMR标准谱</a> | 2 / 2 |
| 2  | MALONAMIDE | C3H5DN2O2 | 0     | 275523653 | <a href="#">13C NMR标准谱</a> | 2 / 2 |

图 3.2.23.24 输入谱峰检索核磁的结果