

天然有機化合物の NMR データベース

「CH-NMR-NP」

天然有機化合物の NMR データベース「**CH-NMR-NP**」について

早水紀久子 (NMRDBTech)

有機天然物は抽出、単離、精製の過程を経て化学構造の決定がなされ、その特有の性質の測定は1回限りの場合が多い。化学的に全合成が試みられ、さらに市販品になるのはごく一部分であって、再び測定できる可能性は限られている。天然物の構造解析には幾つかの手法が組み合わされているが、 ^1H と ^{13}C -NMR は最も頻度よく測定され、ともかくも重要である。単結晶ができる場合には X 線解析による構造決定がなされ、計算化学も動員されることもある。しかし、NMR データを記述していない新規天然物の論文を見かけないのに、化学合成の論文とは異なりスペクトル帰属がなされている。天然有機物のデータベース (DB) は世界でいくつか存在するようである。NMR 中心の DB としては Wolfgang Robien が開発した CSEARCH には膨大な ^{13}C NMR データが収録され、その中に天然物化合物も含まれる。化合物 DB というよりは ^{13}C -シフト DB の性質の方が強いと思われる (<http://nmrpredict.orc.univie.ac.at/>)。

私は市販化合物を中心にした SDBS の構築にかかわり、1997 年からインターネットによる公開作業を行った。SDBS は大型汎用計算機(1999 年 3 月末で終了)に故山本 修博士によってシステム構築された。優れたコンセプトと設計、高い完成度により世界的なシステムになる基礎が築かれた。引き継いでインターネットによる公開、PC による構築システムの作成 (ISIS/Base と Oracle を採用)をやり遂げて 2000 年 3 月定年退職し、その後は収録データの修正を除いて全く関係が断たれている。当時残された問題は大型計算機のデータ、特に化学構造式の PC 化であった。知財部関係の方々からベンチャー(法人)を立ち上げることを勧められ、有限会社 NMRDBTech によって PC 版 SDBS-NMR が完成した(50%の著作権を保有)。

その頃天然物の NMR データベースがほしいという要望があり経験を活かして CH-NMR-NP の構築を始めた(2002 年頃)。天然物化合物の NMR-DB は文献から集めるのが唯一の方法である。CH-NMR-NP では、化学構造を含む文書データは ISIS/Base、化学シフト値は Excel で収録することにした。文献は天然物化学で重要な Journal を選んだ。日本で発行している 2 誌 *J. Antibiotics*、*Chemical and Pharmaceutical Bulletin*、天然物の専門誌 *J. Natural Products*、*Phytochemistry*、*Phytochemistry Letters*、有機化学の専門誌、*Tetrahedron*、*Tetrahedron Letters*、*Organic Letters*、*J. Organic Chemistry*、*European J. Organic Chemistry*、および NMR の専門誌である *Magnetic Resonance in Chemistry* などである。少数ではあるが他の Journal からのデータも含まれている。2000 年発行以降の Journal を収録対象にしたが、*Magn. Reson. Chem.* は 1996 年までさかのぼ

った。市販の天然物由来の化合物の NMR データが見つかったからである。NMR のデータベースであるので、天然物化合物の網羅性はない。立体構造の異なる化合物は注意深く収録したが、例えば Me が Et に代わっただけの化合物は収録していない。データ収録の基準として、 ^{13}C シフトが全ての炭素に与えられていること(大切な原則、ヌケのある場合はコメントに記述)、 ^1H について記述があること、化学構造が明確なこと、および名前が与えられていることである。

化学構造式の作図は ISIS/Draw で行い、分子式と分子量は ISIS の与えるものである。厳密にいうと分子量は産地によって異なるが、文献の分子量は記載していない。帰属は炭素の位置に数字を入れることによって表した。 α 、 β 、 $1'$ 、 $2'$ など全て数字に置き換えた。対称性がある等価な炭素には数字を入れないことを原則とした。炭素の番号付は論文に準拠しているので統一性はない。規定に基づく書き換えの作業はミスを誘発する。数字に対応して ^{13}C と ^1H シフト値が与えられている。付加データとして、論文準拠の名前、溶媒 (pH や温度、記述がない時は常温付近、中性で測定)、 ^1H 測定周波数、シフト基準、化学名(記載のある場合)、化合物の特徴、天然物の抽出の原料(学術名の場合が多い)と抽出物に関するメモ、例えば根、花、木部、藻類、海洋性海綿動物、発酵ブロス等々を論文から引き写した。同一化合物でも溶媒が異なるときに、そのデータも加えてほしいという要望に基づき、数は少ないが重複して同じ化合物を収録した。名前などの α 、 β などのギリシャ文字、 \rightarrow などの特殊記号は全て alphanumeric (英数字) と EBCDIC コードと呼ばれる文字化けしない記号に置き換えた。出典文献は必ず記載した。CAS 登録番号、データベース作成者が書いたコメントのあるデータもある。

データベース構築を継続したのは 10 年あまりであるが、その間に天然化合物の NMR をめぐる環境は大きく変化した。Journal には 2000 年には冊子体で発行されていたが、Online-Journal へと急速に変化した。本文に加えて Supporting Information (SI) に生データを収録できるようになったことは、NMR スペクトルを“愛する”研究者にとっては大きな恩恵である。大切な天然化合物の美しい NMR スペクトルを公開で永久保存できるとは何と素晴らしいことではないか。さらに *J. Natural Products* が生データを SI に付加することを要求し、その結果として本文の NMR に関する Table の質が著しく向上した。化合物の純度も上がっているであろう。

NMR 装置とスペクトルにも大きな変化がみられた。初期のデータには ^1H が 150 MHz の測定データもあったが、磁場が上がるという事情が顕著であった。ただ、800 MHz で測定しても、当然あるべき J -Coupling が記載されていない場合もあり、高価な高磁場で測定しても、測定と解析が不十分ということも見受けられる。400 MHz や 500 MHz の美しい ^1H スペクトルから、詳細な J -Coupling データを獲得している場合も多い。また二次元 NMR

のルーチン化が著しく、データ帰属の精度が上がっている。極く最近では OH とか NH など
で明確な J がみられない場合にも帰属されるのは二次元 NMR のクロスシグナルによるの
であろう。実際多くの Journal の SI には美しい $^1\text{H-NMR}$ と $^{13}\text{C-NMR}$ スペクトルが二次
元スペクトルチャートとともに収録され、 $^1\text{H-NMR}$ の帰属と J 分裂に関する記述が詳しく
なったことで、スペクトルの信頼性、化学構造の確度が上がっていると思われる。初期のこ
ろには ^1H データの記述のない論文や、四級炭素が欠損する論文も収録したが、最近の論文
でシフト値が欠損しているのは稀に見かける程度である。

現在、既知の天然化合物の総数は 25 万件には至らないようである。2014 年春までに発
行された Journal から集めた論文のデータを集めて約 29,500 件、および SDBS-NMR から
天然物に関連すると思われる化合物 6000 件の権利を買い取って、合計約 35,500 件のデ
ータについて総点検を行うことにした。PC 版の SDBS-NMR には実測のスペクトルパター
ンが含まれているので、今回の公開サービスでも見ることができる。CH-NMR-NP のデー
タの約三分の一は SDBS の作業も担当して下さった矢部篤子さんが入力してくださった。
書して謝意を表したい。データベース構築はルーチン作業でレベルが低いといわれるが、誰
でもができる作業ではなく、データの評価を含めて経験と専門性が重要な仕事である。

人間は誰でもミスをする。CH-NMR-NP にもミスは存在する。論文から DB 化するとき
にミスをするも多いが、元論文に間違いがあることもある。元論文の記述が明快の時には
DB 化に伴うミスも少ない。審査を通過している筈なのにどうしたことかと思うような論文も
ある。上述の CSEARCH のホームページにも推算システムで発見する論文中のミスの話が
書いてある。立体構造などの修正が発表された時には、CH-NMR-NP も修正するように心
がけた。また、一目で分かる帰属の間違いは直してあるが見落としもある。天然物デー
タベース Dictionary of Natural Products (DNP) を照合して化学構造式等のミスの修正と
CAS 登録番号の取得を行った。DNP はミスの少ない DB である。

2004 年 6 月から LA システムズ (LAS) から 3,120 件で有償公開を開始した。現在考え
てみると件数も少なく、有償であることにあって多くのユーザーを獲得できなかったのは
残念である。しかしながら、公開システムがあるということは DB の追加更新作業を大いに
力づけるものであった。担当して下さった安田幸二さんに感謝する。今回日本電子株式会
社から無償公開することになった。同社の NMR 装置で測定したスペクトルを upload して、
DB のスペクトルと照合できる機能が付与された。NMR 装置メーカーである日本電子株式
会社のユーザーの利便性が上がると同時に、システムのさらなる発展も期待できる。CH-
NMR-NP が日本発の DB として世界でもユーザー獲得ができることを望むと同時に、日本
電子株式会社のユーザーが世界で広く活躍するようになることを切望する。

CH-NMR-NP の化合物検索の手引き

文責：日本電子株式会社

CH-NMR-NP は無償でご利用いただくことができます。「CH-NMR-NP」の動作は日本電子株式会社の責任において運用されるものです。ただし、データベースの著作権は早水紀久子先生に帰します。このため、「CH-NMR-NP」に関するお問い合わせに関しては、電話や電子メールなどでお受けすることはできません。ウェブサイト上に設置された専用のお問い合わせフォームをご利用下さい。

日本電子株式会社は、「CH-NMR-NP」に関する、個人情報を含むアクセス情報を公開しません。また、「CH-NMR-NP」のご利用によって生じた有形/無形の損害に関して、日本電子株式会社及び NMRDBTech 社は一切の責任を負いません。

※CH-NMR-NP のご利用にあたっては、動作確認済ウェブブラウザとして、Mozilla Firefox もしくは Apple Safari のご使用を推奨いたします。

化合物検索

以下に Home 画面を示します。

The screenshot shows the JEOL website's search interface for the CH-NMR-NP Natural NMR Database. The browser address bar shows the URL: 172.31.234.188/corporate/nmrdb/. The page title is "CH-NMR-NP 天然物NMRデータベース".

CH-NMR-NPシステムの紹介

天然有機化合物の¹³C/¹H-NMRデータベース「CH-NMR-NP」は、主要な研究論文誌に2000年から2014年春の間の発表された天然有機化合物を中心に編集したものです。すべての炭素に対して¹³C-NMRデータが付与されていることを原則としました。¹H-NMRデータが付記されていることが必要ですが、完全に記述されていない場合もあります。NMRデータベースであるために、天然有機化合物に網羅性はありません。文献から収録した天然有機化合物29,500件と、SDBS-NMRから約6,000件の¹H/¹³Cスペクトルパターンが表示できる有機化合物を加えて、およそ35,500件の化合物の¹H/¹³CNMRスペクトルが収録されています。

©早水紀久子

CH-NMR-NPの概要 | **操作説明書(PDF)** | **お問い合わせ**

CH-NMR-NPの利用によって生じた有形/無形の損害に関して(株)JEOL及びNMRDBTech社は一切の責任を負いません。

NMR データベース検索

基本情報

名称 例: Pseudoanchnazine / Pseudo*zine*

原子数 C H N O 例: C21-23 H18 N4 O5

分子式 例: C15H18BrS2

分子量 例: 545 / 545 - 558

¹³C 化学シフト ± 許容範囲 / ppm ± 例: 40, 41, 71 ± 2 一致度 ≥ 100 %

¹³C 無信号領域 ~ ppm 例: 40 ~ 41 ppm

構造検索 部分構造を検索するには[構造検索]チェックボックスを[On]にして、ページ下部に表示される[分子エディタ]に検索したい部分構造を記入してください。部分構造検索がうまく行かない場合は、[操作説明書](#)の10ページをご参照ください。

NP No. 例: 15 / 30 - 100

CAS登録番号 例: 59392-53-9 / 5932-*

ソート 昇順 降順

詳細検索を有効にする

Copyright © 1996-2023 JEOL Ltd. All Rights Reserved.

検索条件は、名称（化合物名）、原子数および分子式、分子量、¹³C 化学シフト、¹H 化学シフト、無信号領域、部分構造、CH-NMR-NP における分類番号（NP No.）を指定できます。それぞれの項目は AND 検索となっています。詳細検索をクリックすると ¹H 化学シフトを含めた検索が可能になります。

名

称

名称

Pseudo

例: Pseudoanchynazine / Pseudo*zine*

化合物の名前を検索条件とします。化合物名は論文中に記載された名前であり、主に慣用名ですが、化学名 (IUPAC 名等) の場合もあります。検索語は部分一致ですが、「*」または「?」をワイルドカードとして使用することもできます。「*」は文字数を指定しませんが、「?」は1文字の置き換えとなります。ワイルドカードを使用した場合は、完全一致となります。

原子数

原子数

C 21-23 H 18 N 4 O 5

例: C21-23 H18 N4 O5

炭素、水素、窒素、酸素の数を検索条件とします。その他の元素に関しては、分子式フィールドで指定して下さい。原子数は範囲指定が可能です。例えば、Cの指定を「21-23」とした場合、炭素数が21から23までの化合物を検索します。Cの指定を「-21」とした場合は炭素数が21以下の化合物を検索し、「23-」とした場合は炭素数が23以上の化合物を検索します。また、「0」を指定した場合はその元素を含まない化合物を検索します。

分子式

分子式

C15H18BrS2

例: C15H18BrS2

分子式を検索条件とします。大文字・小文字は区別しません。元素の順番にも制限はありません。ここでは原子数の範囲指定はできませんが、「0」を指定した場合はその元素を含まない化合物を検索します。例えば、「C15H18BrS2」は、「BrS2c15h18」としても、同じ化合物がヒットします。

- 分子量

分子量
例: 545 / 545 - 558

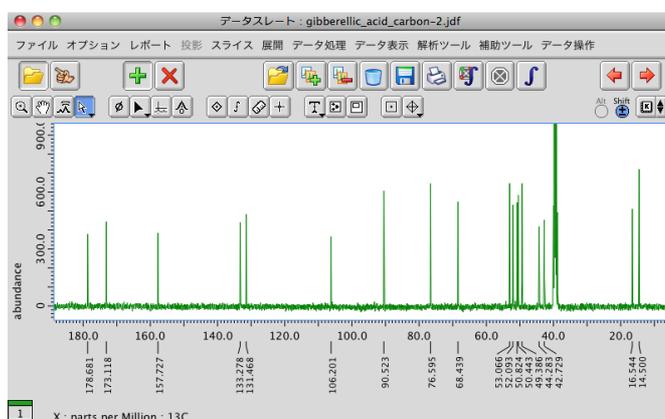
分子量を検索条件とします。小数点以下は四捨五入してあります。例えば、「545-558」とした場合、分子量が545から558までの化合物を検索します。「-545」とした場合は分子量が545以下の化合物を検索し、「558-」とした場合は分子量が558以上の化合物を検索します。

- ¹³C 化学シフト

¹³C 化学シフト ± 許容範囲 ±
/ ppm 例: 40, 41, 71 ± 2 一致度 ≥ %

¹³C 化学シフト (ppm 単位) を検索条件とします。カンマ区切りにより複数の化学シフトを検索条件に指定できます。許容範囲はすべての化学シフトに適用されます。すべての ¹³C 化学シフトは AND 検索となりますが、一致度の指定により条件の緩和が可能となります。例えば、3つの化学シフトが検索条件に指定されている場合に一致度に70%を指定すると、3つの内2つの化学シフトが一致していればヒットします。

化学シフトリストの指定には「ファイルから」ボタンを使用することができます。NMR 解析用ソフトウェア Delta で ¹³C のピークピッキングをしたスペクトルデータを読み込ませると、¹³C の化学シフトが読み込まれます。溶媒の信号が検索対象になってしまうことを防ぐため、溶媒ピークのピークマーカーを取り除いておくことをお勧めします。



Delta でピークピッキングした ¹³C スペクトル

<input checked="" type="checkbox"/> ¹³ C 化学シフト ± 許容範囲	40	±	2	ファイルから
/ ppm	例: 40, 41, 71 ± 2		一致度 ≥	80 %
	結合している ¹ H 原子の数:		3	
	<input checked="" type="checkbox"/> 結合している ¹ H 化学シフトを検索する			

<input checked="" type="checkbox"/> ¹ H 化学シフト ± 許容範囲	2.6	±	0.1	ファイルから
/ ppm	例: 2.6, 3.1, 5.2 ± 0.1		一致度 ≥	100 %

「詳細検索を有効」にした場合、「結合している ¹H 原子の数」を指定することができます。検索対象の ¹³C 化学シフトの信号が CH₃ である場合、ここに「3」を入力しておきます。複数の ¹³C 信号に対して指定する場合は、カンマ区切りで設定します。級数が不明の ¹³C 信号が混在する場合は、それらを後ろに配置し、前方一致となるように設定して下さい。例えば、¹³C 信号の化学シフトが「40,41,71」で、それぞれが CH₃,CH₂,不明の場合、「3,2」とします。また、「結合している ¹H 化学シフトを検索する」にチェックを入れた場合、指定した ¹³C 化学シフトの炭素が、¹H 化学シフト検索で指定した化学シフトの水素原子と結合している化合物を検索します。配列に関しては「結合している ¹H 原子の数」と同様ですが、非等価な ¹H を持つ CH₂ の場合には、同一の ¹³C 化学シフトを2つ設定します。つまり、72ppm の ¹³C に結合した ¹H が 3.9ppm と 4.4ppm である化合物を検索する場合、¹³C 化学シフトに「72,72」とした上で、¹H 化学シフトに「7.9,4.4」を設定します。但し、データベースの中には ¹H 化学シフト情報が十分でない数多く化合物がありますので、このような場合は化合物が検索されない可能性があります。

- ¹³C 無信号領域**

<input checked="" type="checkbox"/> ¹³ C 無信号領域	150	~		ppm
	例: 40 ~ 41 ppm			

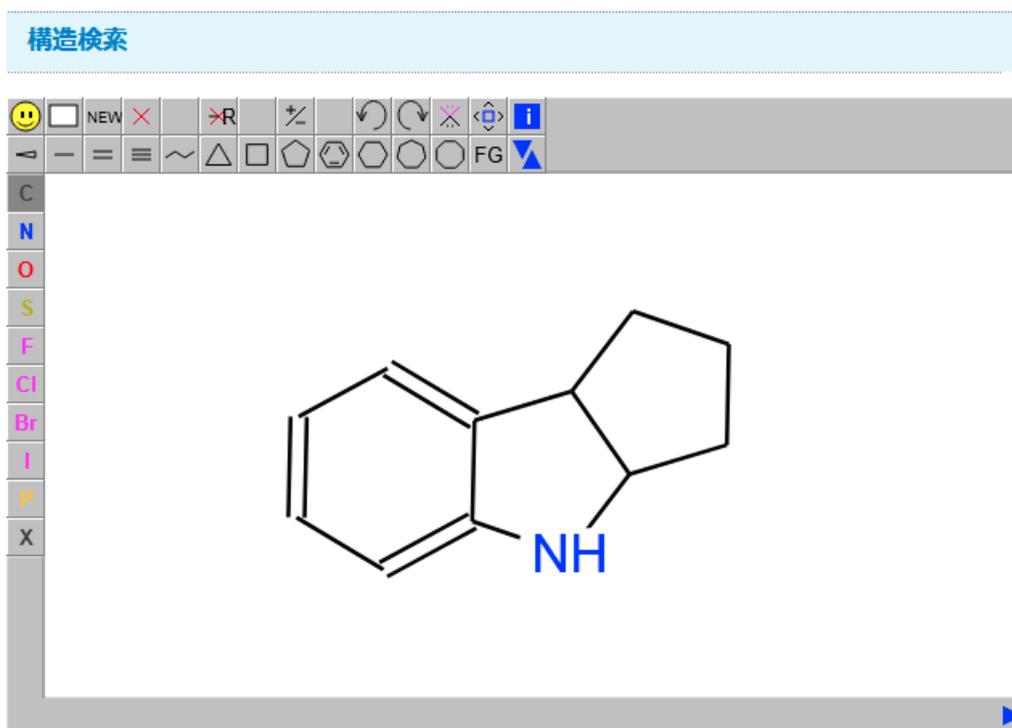
¹³C の信号が無い領域を指定することができます。

化学構造検索

構造検索

部分構造を検索するには[構造検索]チェックボックスを[On]にして、ページ下部に表示される[分子エディタ]に検索したい部分構造を記入してください。部分構造検索がうまく行かない場合は、[操作説明書](#)の10ページをご参照ください。

構造検索



部分構造を検索条件にします。部分構造検索のための構造描画には、JavaScriptのJSME Molecular Editorを、構造検索にはRDKit cartridgeを使用しています。

- **NP No.**

NP No.

例: 15 / 30 - 100

CH-NMR-NPにおける分類番号を検索条件にします。NP No.は範囲指定が可能です。例えば、NP No.の指定を「30-100」とした場合、NP No.が30から100までの化合物を検索します。NP No.の指定を「-30」とした場合はNP No.が30以下の化合物を検索し、「100-」とした場合はNP No.が100以上の化合物を検索します。

• **¹H 化学シフト** (詳細検索を有効にした場合)

¹H 化学シフト ± 許容範囲 ±
/ ppm 例: 2.6, 3.1, 5.2 ± 0.1 一致度 ≥ %

¹H 化学シフト (ppm 単位) を検索条件とします。カンマ区切りにより複数の化学シフトを検索条件に指定できます。許容範囲はすべての化学シフトに適用されます。すべての ¹H 化学シフトは AND 検索となりますが、一致度の指定により条件の緩和が可能となります。例えば、3 つの化学シフトが検索条件に指定されている場合に一致度に 70% を指定すると、3 つの内 2 つの化学シフトが一致していればヒットします。

化学シフトリストの指定には「ファイルから」ボタンを使用することができます。Delta ソフトウェアで ¹H のピークピッキングをしたスペクトルデータを読み込ませると、¹H の化学シフトが読み込まれます。

※ ¹H の化学シフトに関しては、記載のない化合物が多数あります。

• **¹H 無信号領域** (詳細検索を有効にした場合)

¹H 無信号領域 ~ ppm
例: 2.6 ~ 3.1 ppm

¹H の信号が無い領域を指定することができます。

検索結果のソート

ソート
 昇順
 降順

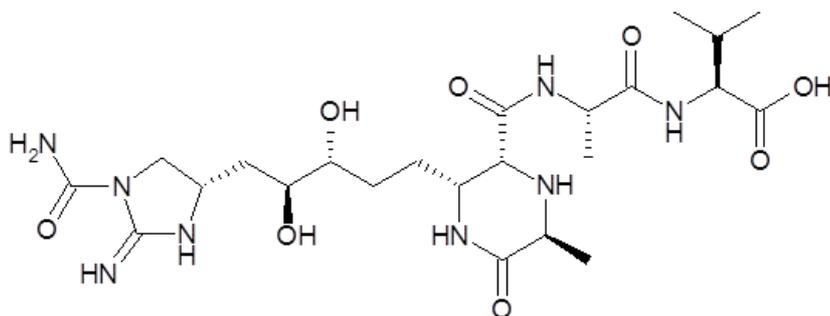
検索結果は、デフォルトでは炭素数の大きい物から降順で表示されます。炭素数が同じ化合物の場合、水素数、窒素数、酸素数の順に降順で表示されます。その他のソート条件として、NP No.、名称 (アルファベット順)、原子数 (CHNO の選択)、分子量、一致度を、降順もしくは昇順として選択することができます。

検索結果の表示

検索結果

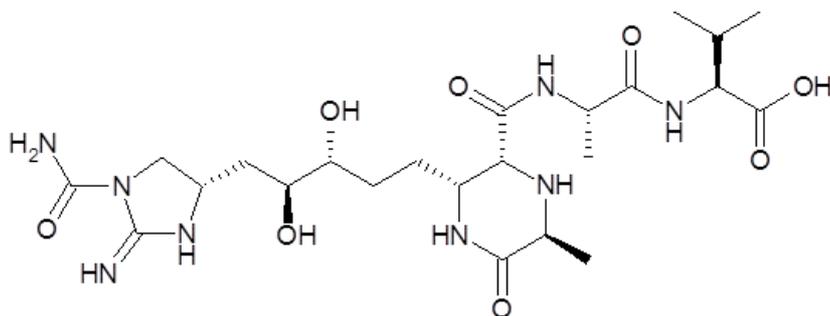
18件見つかりました。 [検索画面にもどる](#)

1/18 guadinomine C1



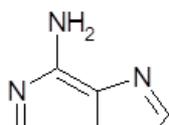
NP No. : 21142, 分子式 : $C_{23}H_{40}N_8O_8$, 溶媒 : D_2O

2/18 guadinomine C2



NP No. : 21142, 分子式 : $C_{23}H_{40}N_8O_8$, 溶媒 : D_2O

3/18 sinefungin VA



検索結果リストには、化合物名、構造式、NP No.、分子式、溶媒がそれぞれ表示されます。化合物名もしくは構造式をクリックすると、詳細データを新しいウィンドウに表示します。

詳細データの表示

guadinomine C1

化学構造

化学シフト帰属

No.	¹³ C シフト /ppm	炭素タイプ	¹ H シフト /ppm	¹ H パターン	
1	158.4	C			
2	56.0	CH	4.43	d 3,4	
3	53.8	CH	3.97	m	
4	30.3	CH ₂	1.71	m	
				1.57	m
5	29.6	CH ₂	1.76	m	
				1.44	m
6	76.7	CH	3.48	m	
7	74.1	CH	3.61	m	
8	38.8	CH ₂	1.93	ddd 14 5.6 2.1	
			1.77	m	
11	158.9	C			
12	158.9	C			
14	54.0	CH	4.23	m	
15	53.1	CH ₂	4.23	dd 8.4 8.4	
			3.79	dd 8.5 5.6	
16	53.3	CH	4.17	q 7.0	
17	172.1	C			
18	17.0	CH ₃	1.55	d 6.9	
21	176.6	C			
22	52.2	CH	4.44	q 7.0	
23	19.2	CH ₃	1.39	d 7.0	
31	179.0	C			
32	62.4	CH	4.07	d 7.0	
33	32.6	CH	2.11	dsep 6.9 6.5	
34	20.1	CH ₃	0.92	d 6.9	
35	21.1	CH ₃	0.92	d 6.9	

化合物データ

化合物名: guadinomine C1
 分子式: C₂₃H₄₀N₆O₈ 分子量: 556.6
 NP No.: 21142 スペクトルキー: 21-142
 抽出の原料物: Streptomyces sp. K01-0509
 抽出物に関するメモ: fermentation
 CAS登録番号: 1033827-71-2
 溶媒: D₂O
¹H 周波数: 600 MHz
 出典: Iwatsuki, M., et al. J. Antibiotics, 61, 230 (2008)
 コメント: stereoisomer at C16

¹³C NMR スペクトルの表示

¹³C NMR スペクトル

表示範囲: 240 ~ -10 ppm リセット Delta形式で¹³C NMRデータをダウンロード

C CH CH₂ CH₃ APT ¹H NMR シフトの表示

¹H NMR シフト

表示範囲: 15 ~ -5 ppm リセット Delta形式で¹H NMRデータをダウンロード

1 2 3 ... 10 ... 18

印刷レイアウト

印刷レイアウト表示

ページ送り

Copyright © 1996-2023 JEOL Ltd. All Rights Reserved.

デフォルトで表示されるのは化学構造（ナンバリング付き）、化合物データ、化学シフト帰属リスト、¹³C NMR スペクトルです。ページの下部には、検索ページに表示された検索結果のソート順でページ送りする機能があります。

・ 化学構造

化学構造式は文献に対応していますが、 スペクトル帰属と対応させるために、全ての炭素に番号をつけて描かれています。Acetyl, Benzyl, Glu などとされている部分構造も全て描き下されています。炭素番号は文献準拠ですが、データベース化する時に alpha、beta、1'、1" などが使用できない都合上、数字に置き換えられています。化学シフト値と 1 : 1 の対応を付けるために、重複した数値は使われていません。また等価な炭素に対しては数字表記されていません。

・ 化合物データ

- **化合物名** (論文での化合物名、慣用名あるいは化学名)
ギリシャ文字や特殊文字は通常の英数字に置き換えられています。
また化学名の中の上付き、矢印なども適時置き換えられています。[SEP]
長い正式な化学名のみが記載されている場合にはその化学名が化合物名に記述されています。
- **分子式**
化学構造式から作成された分子式です。
- **分子量**
化学構造式から作成された分子量です。文献記載の分子量と小数点 1 桁目で不一致のことがあります。これは産地における元素の天然存在比の多様性に由来すると説明されています。
- **NP No.**
化合物に与えられている番号です。
- **スペクトルキー**
スペクトル (^{13}C NMR と ^1H NMR) に 1:1 で対応します。
- **抽出の原料物**
天然物の由来物質、抽出原料です。多くの場合、学術名で与えられています。
- **抽出物に関するメモ**
抽出原料についての植物、魚介類、菌類など簡単なコメントです。
- **化合物特徴**
著者が記述している化合物の特徴づけです。

- **化学名**
正式な化合物名です。文献に記述がある場合には記載されています。
- **CAS 登録番号**
- **溶媒**
溶媒と測定条件（温度、pH など）が記述してあります。温度を特記していない場合は大多数が 25-35℃の範囲で測定してあると想定しています。
- **¹H 周波数**
¹H NMR の観測周波数です。個々のデータについて記載がない場合には Experimental に書いてある最大の周波数を入力してあります。
- **シフト基準**
化学シフトの基準値です。溶媒のシグナルを用いている場合で文献に記述がある場合には データベースにも記述しています。例えば溶媒が CDCl₃ の場合、7.25 / 77.0 とあれば、¹H NMR の CHCl₃ のシグナルを 7.25 ppm、¹³C NMR では CDCl₃ のシフト値を 77.0 ppm としたと著者が言っていることを意味します。
- **出典**
データの出典です。筆頭者のみの記述になっています。リンク先は Google Scholar 検索の結果です。なお、出典が SDBS-NMR の化合物 6,000 件に関しては、SDBS の登録番号を出典欄に記載しています。
- **コメント**
データベース作成者のコメントです。

・ 化学シフト帰属

¹³C の帰属番号、¹³C の化学シフト、結合している ¹H の数(CH₃, CH₂, CH, C)、結合している ¹H の化学シフト、¹H の分裂情報などのコメントがそれぞれ記載されています。

化合物検索で ¹³C 化学シフト検索を用いた場合、一致した ¹³C 化学シフトがハイライト表示されます。

¹³C の帰属番号の無い行に記載された ¹H の化学シフトは、¹³C に結合する ¹H が非等価の場合の 2 つ目の ¹H の化学シフトを意味するか、もしくは OH や NH などを表します。OH や NH などの場合、コメント欄に明記さ

れます。

- **^{13}C NMR スペクトルの表示** (チェックボックス)

ON の場合に ^{13}C のスペクトルを表示します。デフォルトは ON になっていますが、印刷レイアウトにスペクトルが不要な場合は OFF にしておきます。

- **^{13}C NMR スペクトル**

^{13}C の帰属番号を付した仮想 NMR スペクトルを表示します。化学シフト帰属テーブルと同様、化合物検索で ^{13}C 化学シフト検索を用いた場合、一致した ^{13}C 化学シフトが赤でハイライト表示されます。各ピークの強度は炭素数に対応します。スペクトルの表示範囲は、マウスマウスカーソルによるドラッグ&ドロップ操作と数値入力のいずれの方法でも拡大が可能です。表示範囲をリセットするには、リセットボタンをクリックして下さい。

下部のチェックボックス (C, CH, CH₂, CH₃) で、それぞれのピークの表示/非表示を切り替えることができます。また APT を ON にした場合、CH₃ と CH が上向き、CH₂ と C が下向きに表示されます。 ^1H NMR 化学シフトの表示を ON にすると、 ^1H の化学シフトグラフを表示します。

- 「[Delta 形式で \$^{13}\text{C}\$ NMR データをダウンロード](#)」

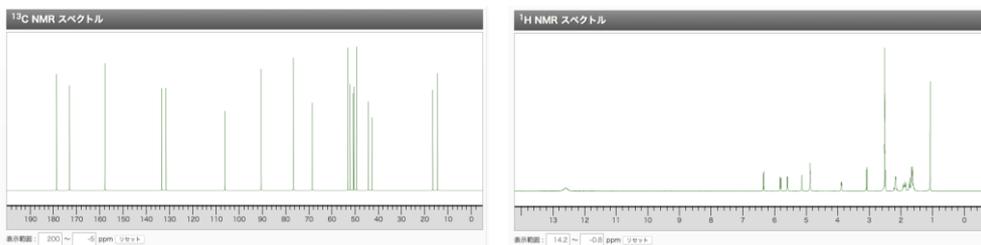
リンクをクリックすると、 ^{13}C NMR スペクトルが Delta 形式のデータとしてダウンロードできます。ダウンロードされたデータは Delta ソフトウェアで開くことができ、実測スペクトルとの重ね書きや比較表示などが容易です。

- **^1H NMR シフト**

^1H の化学シフトグラフを表示します。分裂パターンなどは反映されません。操作は ^{13}C NMR スペクトルと同様です。

- 実測の NMR スペクトルの表示

出典が SDBS-NMR の 6,000 件の化合物のデータに関しては、実測スペクトルを表示できます。



- 印刷レイアウトの表示

リンクやヘッダ/フッタ、各種ボタンなど、不要な情報を除いた印刷レイアウトを新しいウインドウに表示します。スペクトルの ON/OFF は印刷レイアウトに反映されます。

gibberellic acid

No.	¹³ C シフト /ppm	炭素タイプ	¹ H シフト /ppm	¹ H パターン情報 /Hz
1	131.37	CH	6.334	
2	133.18	CH	5.800	
3	68.35	CH	3.874	
			5.58	OH
4	52.97	C		
5	50.37	CH	2.30	
6	50.72	CH	3.075	
7	178.55	C	12.6	OH
8	49.29	C		
9	52.00	CH	1.6	
10	90.43	C		
11	16.47	CH ₂	1.6	
			1.91	
12		CH ₂	1.6	
			1.86	
13	76.50	C	4.87	OH
14	44.18	CH ₂	1.72	
			1.63	
15	42.66	CH ₂	2.15	
			2.18	
16	157.65	C		
17	106.08	CH ₂	5.127	
			4.85	
18	14.42	CH ₃	1.071	
19	173.00	C		

化合物名: gibberellic acid
 分子式: C₁₉H₂₂O₆ 分子量: 346.4
 NP No.: 9089 スペクトルキー: 09-089
 CAS登録番号: 77-06-5
 溶媒: DMSO-d₆
¹H 周波数: 400 MHz(H) / 50.32 MHz(C) シフト基準: TMS
 SDBS No.: 10779
 コメント: CNMR of C12; overlapped with solvent signals.

CH-NMR-NP (¹³C and ¹H NMR Database of Natural Products)
 The CH-NMR-NP System is powered by JEOL Ltd.

- ページ送り

検索結果が複数に渡る場合、検索ページに表示された検索結果のソート順に従って、詳細データページをページ送りすることができます。参照したいページ番号をクリックして下さい。

※ Mozilla、Firefox は Mozilla Foundation の登録商標です。

※ Apple、Safari、Mac は、米国およびその他の国々で登録された Apple Inc. の登録商標です。

※ Java は、Oracle Corporation 及びその子会社、関連会社の米国及びその他の国における登録商標です。

※ Google Scholar は Google Inc.の商標です。

本ウェブサイトでは、"JSME Molecular Editor"を使用しております。

Copyright (c) 2023, Novartis Institutes for BioMedical Research Inc and Bruno Bienfait
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without modification, are permitted provided that the following conditions are met:

- * **Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer.**
- * **Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution.**
- * **Neither the name of the Novartis Institutes for BioMedical Research nor the names of the authors may be used to endorse or promote products derived from this software without specific prior written permission.**