

Spectral Database for Organic Compounds — SDBS

База данных SDBS содержит более 30 тыс. органических веществ, главным образом из числа тех, которые можно встретить в каталогах реактивов. В базе данных имеются спектры ЯМР (на ядрах ^1H и ^{13}C) для ок. 15 тыс. веществ. Большая доля спектров получена экспериментально и выверена составителями, и только меньшая их часть рассчитана теоретически.

База данных предназначена для решения двух задач:

- обнаружение спектра заданного вещества;
- идентификация вещества по известному спектру.

Для того, чтобы получить доступ к информации, пользователь должен согласиться с правилами работы — нажать кнопку "I agree the disclaimer and use SDBS" на Главной странице.

Поисковый бланк содержит более 20 полей для формулирования запроса.

Почти все поля по умолчанию объединены оператором **AND**.

Исключение составляют поля *CAS Registry No.* и *SDBS No.* — если в одно из этих полей внесен какой-нибудь текст, поиск ведется только по этому полю.

В текстовых графах левой колонки поискового бланка разрешено использование шаблона, причем не только в конце термина, но и в середине, и в начале.

Формат шаблона: % (знак процента) или * (звездочка).

Шаблон заменяет собой любое количество символов, в том числе, нулевое.

SDBS Compounds and Spectral Search

<p>Compound Name: <input type="text" value="cyclohexane"/> <input type="button" value="match full"/> <input type="button" value="v"/></p> <p>Molecular Formula: <input type="text"/></p> <p><small>C, H, then the other elements are alphabetical order, "%", "*" for the wild card</small></p> <p>Molecular Weight: <input type="text"/> to <input type="text"/></p> <p><small>Numbers between left and right columns Up to the first place of a decimal point</small></p> <p>CAS Registry No.: <input type="text"/></p> <p><small>"%", "*" for the wild card.</small></p> <p>SDBS No.: <input type="text"/></p> <p><small>"%", "*" for the wild card.</small></p>	<p>Atoms:</p> <table border="0"><tr><td>C(Carbon)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>H(Hydrogen)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>N(Nitrogen)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>O(Oxygen)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>F(Fluorine)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>Cl(Chlorine)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>Br(Bromine)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>I(Iodine)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>S(Sulfur)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>P(Phosphorus)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr><tr><td>Si(Silicon)</td><td><input type="text"/></td><td>to</td><td><input type="text"/></td></tr></table> <p><small>Numbers between left and right columns.</small></p>	C(Carbon)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	H(Hydrogen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	N(Nitrogen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	O(Oxygen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	F(Fluorine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	Cl(Chlorine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	Br(Bromine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	I(Iodine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	S(Sulfur)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	P(Phosphorus)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	Si(Silicon)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>	<p>Spectrum: Check the spectra of your interest.</p> <p><input type="checkbox"/> MS <input type="checkbox"/> IR <input type="checkbox"/> ^{13}C NMR <input type="checkbox"/> Raman <input type="checkbox"/> ^1H NMR <input type="checkbox"/> ESR</p> <p>IR Peaks(cm^{-1}): Allowance <input type="text"/> \pm <input type="text"/></p> <p><small>"," or space is the separator for multiple peaks. Use "-", to set a range.: eg. 550-750,1650 3000-</small></p> <p>Transmittance < <input type="text"/> %</p> <p>^{13}C NMR Shift(ppm): Allowance <input type="text"/> \pm <input type="text"/></p> <p><small>"," is the separator for multiple shifts, eg. 129.3,18.4,...</small></p> <p>No shift regions: <input type="text"/></p> <p><small>Range defined by two numbers separated by a space, eg. 110 78,...</small></p> <p>^1H NMR Shift(ppm): Allowance <input type="text"/> \pm <input type="text"/></p> <p>No shift regions: <input type="text"/></p> <p>MS Peaks and intensities: <input type="text"/></p> <p><small>Mass and its intensity are a set of data separated by a space, eg. 110 22,...</small></p>
C(Carbon)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
H(Hydrogen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
N(Nitrogen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
O(Oxygen)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
F(Fluorine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
Cl(Chlorine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
Br(Bromine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
I(Iodine)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
S(Sulfur)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
P(Phosphorus)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											
Si(Silicon)	<input type="text"/>	to	<input type="text"/>																																											

Hit: Sort by:

для обнаружения спектра заданного вещества

для идентификация вещества по известному спектру

1. Поиск спектра заданного вещества.

Правила заполнения полей бланка.

Compound Name — Название вещества

- Возможно проведение поиска и по систематическому, и по тривиальному названию вещества.
- Разрешено использование шаблона.
- За пределами шаблона проводится посимвольное сравнение запроса с текстом документа, поэтому, например, задания "benzene" и "benzene" (без пробела и с пробелом) не являются идентичными.

Примеры использования шаблона:

Запрос	Что ищет:
%benzene	benzene, nitrobenzene, o-dichlorobenzene, ...
m%benzene	m-dinitrobenzene, methoxybenzene, m-dichlorobenzene, ...
%ethyl%phthalate	dimethyl phthalate, diethyl phthalate, dimethyl terephthalate, diethyl terephthalate, ...
%ethyl%phthalate (пробел перед ethyl)	oxycarbonylmethyl ethyl phthalate, ...

Molecular Formula — Брутто-формула

- В брутто-формуле элементы должны быть расположены в следующем порядке: углерод С, водород Н, далее остальные элементы по алфавиту.
- Формула может содержать шаблоны.

Примеры:

Запрос	Что ищет
C4H10%S	C4H10S, C4H10N2O4S, C4H10NO3PS, ...
C5H2%	C5H2Cl2N4, C5H2N4, ...
C6H1%NO2%	C6H11NO2, C6H13NO2, C6H13NO2S, ...

Molecular Weight — Молекулярная масса

- Допускается заполнение либо обеих граф (минимальное и максимальное значения молекулярной массы), либо только одной графы.

CAS Registry No.

- Если графа содержит текст, поиск ведется только по этому полю.

SDBS No. — регистрационный номер в базе данных SDBS.

- Если графа содержит текст, поиск ведется только по этому полю.

Atoms — Число атомов элемента в брутто-формуле.

- Допускается заполнение либо обеих граф (минимальное и максимальное значения числа атомов), либо только одной графы.

2. Идентификация вещества по известному ЯМР-спектру.

Правила заполнения полей бланка.

¹³C NMR Shift (ppm)

¹H NMR Shift (ppm)

- Значение химического сдвига (ppm) записывают в графу **NMR Shift**, допустимые отклонения — в графу **Allowance** (по умолчанию здесь установлено значение ± 0.2).
- Для поиска по нескольким сигналам значения химических сдвигов перечисляют через запятую.
- После запятой пробел ставить нельзя.
- Целая и дробная часть числа разделяются точкой.

Примеры.

Запрос	Что ищет
7.27,3.6,1.12	Соединения с ¹ H NMR -спектрами, обязательно содержащими сигналы при 7.27 ppm, 3.6 ppm и 1.12 ppm.
7.27,3.6, 1.12	Соединения с ¹ H NMR -спектрами, обязательно содержащими сигналы при 7.27 ppm и 3.6 ppm. Из-за того, что перед 1.12 есть пробел, поисковая программа проигнорирует это число.

No shift regions

- В этой графе можно указать те части спектра, где не должно быть линий — для этого начало и конец интервала записывают через пробел.
- Если необходимо указать несколько таких интервалов, их перечисляют через запятые.

Примеры.

Запрос	Что ищет
16 7	Вещества с ¹ H NMR-спектрами, которые не имеют пиков в интервале от 16 ppm до 7 ppm.
16 7,5.5 4,0.5 3	Вещества с ¹ H NMR -спектрами, которые не имеют пиков в интервалах: от 16 ppm до 7 ppm, от 5.5 ppm до 4 ppm, от 0.5 ppm до 3 ppm.

Список результатов поиска

В списке результатов поиска приводятся обнаруженные вещества и информация о том, какие спектры каждого из веществ имеются в базе данных.

Пример:

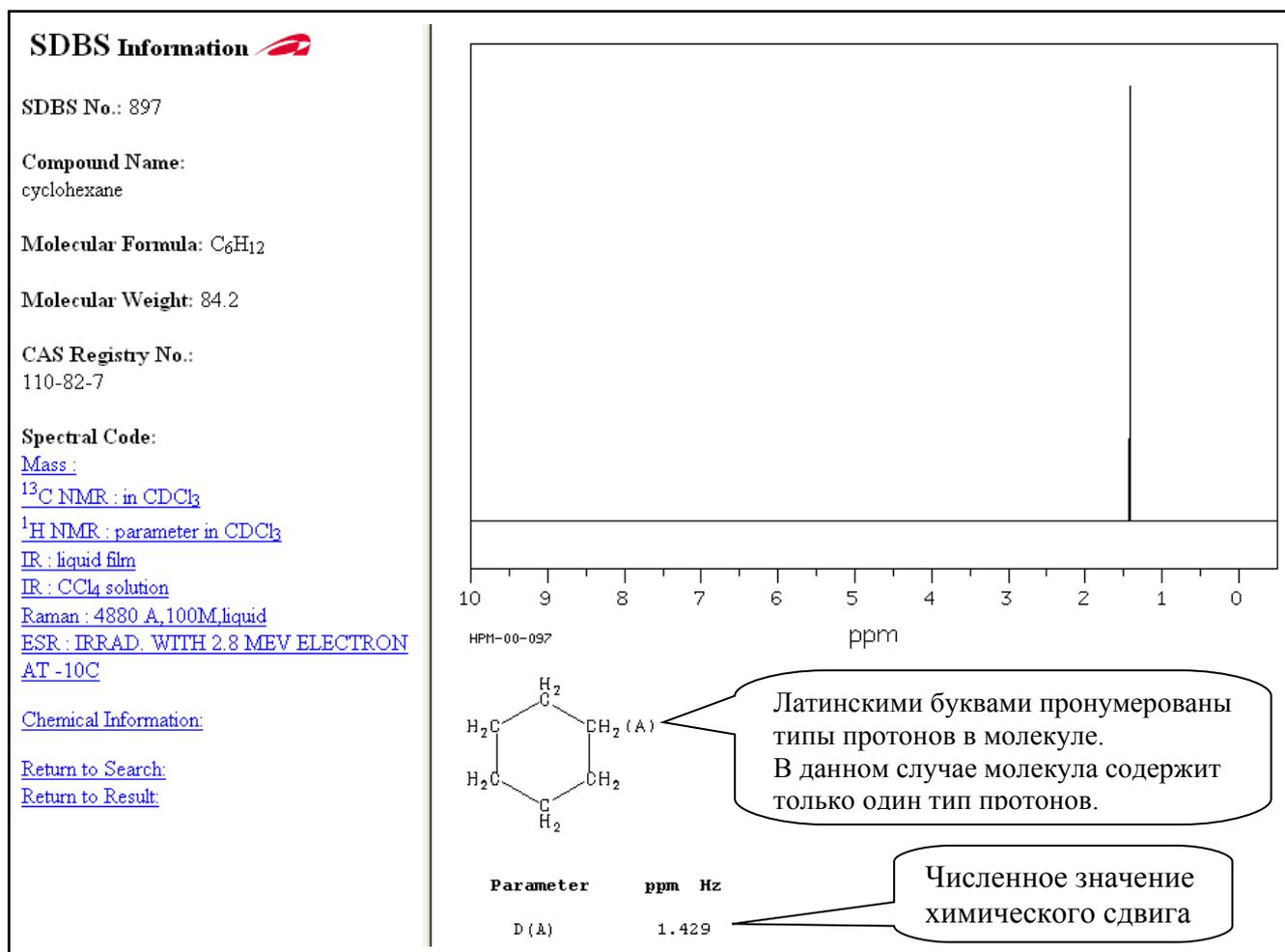
SDBS Search Results: 1 - 1 out of 1 hits										
Sort by: Molecular Weight Ascending Order Search										
SDBS No	Molecular Formula	Molecular Weight	MS	CNMR	HNMR	IR	Raman	ESR	Compound Name	
897	C6H12	84.2	Y	Y	Y	Y	Y	Y	cyclohexane	

Y (Yes) — спектр этого типа имеется в базе данных; N (No) — спектр отсутствует.

Тренировочное упражнение

Найдите ^1H -ЯМР спектр циклогексана.

Результат поиска для самопроверки:



Дополнительная информация.

На странице результатов поиска может присутствовать кнопка **peak data** — она выводит на экран спектр в табличной форме, с указанием интенсивности сигнала (в условных единицах) при различных значениях δ .

Сведения об интенсивности сигнала полезно использовать в информационном поиске.

Если возникает необходимость идентификации вещества по известному спектру, содержащему много пиков, то в запрос целесообразно включать сигналы большей интенсивности.

Контрольное упражнение 1

Сколько бромзамещенных этана имеется в базе данных?

Для какого числа этих соединений в базе данных имеются спектры ^1H -ЯМР?

Для какого числа этих соединений в базе данных имеются спектры ^{13}C -ЯМР?

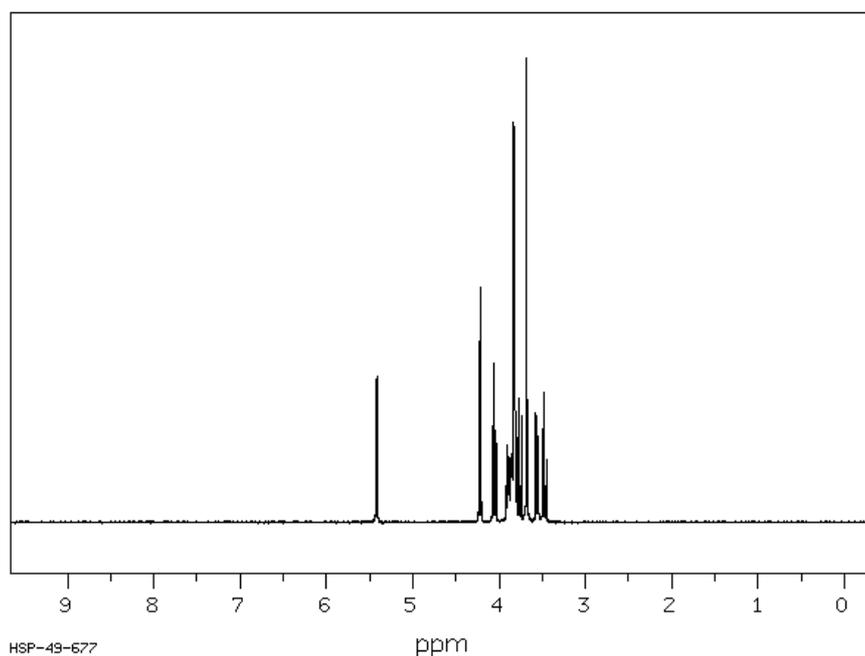
Извлеките ^{13}C -ЯМР-спектр того из бромзамещенных этана, для которого в базе данных отсутствует ^1H -ЯМР-спектр.

Определите значения химических сдвигов для ядер ^{13}C в этом веществе.

Контрольное упражнение 2

Служба безопасности департамента X во входящей корреспонденции обнаружила конверт со следами белого порошка. Был снят ^1H ЯМР-спектр подозрительного вещества.

Идентифицируйте это вещество по следующим спектральным данным:



Assign.	Shift (ppm)
A	5.418
B	4.219
C	4.055
D	3.89
E	3.86
F	3.826
G	3.817
J	3.762
K	3.679
L	3.563
M	3.476

Вспомогательная информация: интенсивность сигнала:

Hz	ppm	Int.	Hz	ppm	Int.
2167.24	5.423	308	1537.60	3.848	99
2163.45	5.414	314	1537.11	3.847	99
1691.28	4.232	391	1536.50	3.845	98
1682.50	4.210	506	1530.40	3.830	862
1628.91	4.076	207	1527.83	3.823	854
1620.48	4.055	344	1524.41	3.815	550
1611.82	4.034	198	1518.07	3.799	55
1565.80	3.918	80	1514.04	3.789	181
1561.89	3.909	96	1504.15	3.764	267
1559.69	3.903	166	1494.87	3.741	231
1557.37	3.897	84	1470.34	3.680	1000
1555.79	3.893	140	1430.42	3.580	235
1553.83	3.888	97	1426.51	3.570	228
1551.27	3.882	135	1420.41	3.555	183
1547.49	3.873	138	1416.50	3.545	187
1542.85	3.861	149	1397.58	3.498	200
1539.92	3.854	140	1388.31	3.474	279
			1378.78	3.450	136

(Int. — интенсивность сигнала, в условных единицах)