

研究简报

NMR碳谱谱峰检索系统

谢狄霖, 陈 忠, 施伟巧, 许勇波

1. 福建省医学测试重点实验室(福建省医学科学研究所), 福建福州 3 5 0 0 0 1;
2. 厦门大学化学系, 福建厦门 3 6 1 0 0 5;
3. 福建省地质测绘院, 福建福州 3 5 0 0 0 1

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 介绍了核磁共振(NMR)碳谱谱峰检索系统的程序设计原理、系统流程框图、检索比较算法和主要显示界面。系统数据库包含化合物核磁共振碳谱4万多张, 能够根据未知物 $^{13}\text{C}$  NMR波谱的谱峰个数及其化学位移值进行检索。结果得到未知化合物的有关信息及其标准波谱图。系统还允许用户将本专业的一些常用化合物的标准谱的信息以及图谱添加进数据库以供日后查询。

**关键词** [核磁共振](#); [碳谱](#); [谱峰](#); [检索](#)

分类号

**DOI:**

通讯作者:

谢狄霖 [xiedilin@sohu.com](mailto:xiedilin@sohu.com)

作者个人主页: 谢狄霖; 陈 忠; 施伟巧; 许勇波

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF](#) (862KB)
- ▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“核磁共振; 碳谱; 谱峰; 检索”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- ▶ [谢狄霖, 陈 忠, 施伟巧, 许勇波](#)