

当前位置: 科技频道首页 >> 军民两用 >> 计算机与网络 >> 基于二维核磁共振数据的结构解析系统

请输入查询关键词

科技频道

搜索

## 基于二维核磁共振数据的结构解析系统

关键词: [二维核磁共振](#) [核磁共振](#) [分析软件](#) [程序系统](#)

所属年份: 2005

成果类型: 应用技术

所处阶段:

成果体现形式:

知识产权形式:

项目合作方式:

成果完成单位: 中国科学院上海有机化学研究所

成果摘要:

该工作已实现了从未知复杂天然产物的一维和二维NMR的各种相关谱(1D1H和13C; DEPT, COSY, HETCOR, COLOC, HMQC, HMBC, INADEQUATE, NOESY等谱)所提供的丰富而又零碎的结构信息结合分子式推断未知物的结构。为了完成这一项目,他们开展了一系列基础性研究工作。特别在有歧义的二维相关信息(包括由未知物分子对称性引起的谱别固有的和谱图缺陷引起的歧义性)和能灵活施加约束条件避免“组合爆炸”的高效结构生成器的实现等关键点上做了许多开创性工作,并取得了突破。Alborixin结构解析的成功令人信服地表明了,该系统已能真正地帮助化学家解决实际难度的结构解析问题。Alborixin是迄今为止所报道的能被子结构解析系统所成功解析的最复杂结构。该系统需在VAX/VMS操作系统下工作,在MICROVAX3300或更高档次的计算机上都能运行。输出最好有VT125或VT330图形终端,一般终端图形无法输出,但系统仍能正常工作。系统既可用后台方式作业,也可用交互方式。凡需测定未知物,特别是复杂化合物的分子结构的场合都有广阔的应用前景。如在新药创制,探索生命过程中重大化学总是的研究,中草药资源的综合利用,产品剖析,新精细化工产品的开发等方面能缩短测定未知化合物结构的时间,大大提高工作效率。其效益有2方面,一方面是可直接帮助药物化学家提高测定未知化合物的效率,特别是在测定有生物活性的复杂天然产物的结构时更为将近;另一方面,可进一步开发成商品软件向国内外市场推销。该所拟从改进软件的用户界面着手,使其成为一个能在多种计算机平台上运行的有竞争力的商品化软件。同时,积极寻找国外化学应用软件公司作为合作伙伴,将该所的软件成为其中一个独立模块出售,保持该所自己的版权(royalty)收取版权税,以创长远经济效益。最近,收到了美国“ComputationalMolecularDynamics, Inc”总裁R.Rotomdo的来信希望能把这一系统装入他们的系统中。不管这个合作计划商谈的最终结果如何,该设想是可行的。

成果完成人: 袁身刚;彭琛

[完整信息](#)

### 行业资讯

新疆综合信息服务平台  
 准噶尔盆地天然气勘探目标评价  
 维哈柯俄多文种操作系统FOR ...  
 社会保险信息管理系统  
 塔里木石油勘探开发指挥部广...  
 四合一多功能信息管理卡MISA...  
 数字键盘中文输入技术的研究  
 软开关高效无声计算机电源  
 邮政报刊发行订销业务计算机...  
 新疆主要农作物与牧草生长发...

### 成果交流

### 推荐成果

- [液压负载模拟器](#) 04-23
- [新一代空中交通服务平台、关...](#) 04-23
- [Adhoc网络中的QoS保证\(Wirel...](#) 04-23
- [电信增值网业务创意的构思与开发](#) 04-23
- [飞腾V基本图形库的研究与开发...](#) 04-23
- [ChinaNet国际\(国内\)互联的策...](#) 04-23
- [电信企业客户关系管理\(CRM\)系...](#) 04-23
- [“易点通”餐饮管理系统YDT2003](#) 04-23

Google提供的广告

>> 信息发布

[版权声明](#) | [关于我们](#) | [客户服务](#) | [联系我们](#) | [加盟合作](#) | [友情链接](#) | [站内导航](#) | [常见问题](#)  
国家科技成果网

京ICP备07013945号