

ELUCIDAÇÃO ESTRUTURAL DE SUBSTÂNCIAS ORGÂNICAS COM AUXÍLIO DE COMPUTADOR: EVOLUÇÕES RECENTES

Ricardo Stefani e Paulo Gustavo Barboni Dantas Nascimento

Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes, 3900, 14040-901 Ribeirão Preto – SP, Brasil

Fernando Batista Da Costa*

Departamento de Ciências Farmacêuticas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Av. do Café, s/n, 14040-903 Ribeirão Preto – SP, Brasil

SPINUS - WEB

Prediction of full proton NMR spectra - Input Form

Marvin applet - based version

Draw your query structure with the editor,
fill in the form and click *Predict full proton NMR spectrum*.

Group/User name: 8F6BCA2F-1F03-1CD8 Keyword: 061216172852

Predict full proton NMR spectrum

Single/multi structure file

Browse... Submit this file

This Page Is Valid HTML 4.01 Transitional!

Figura 1Sa. SPINUS-WEB. Tela de entrada com uma estrutura 2D cujos deslocamentos químicos de RMN ¹H serão previstos

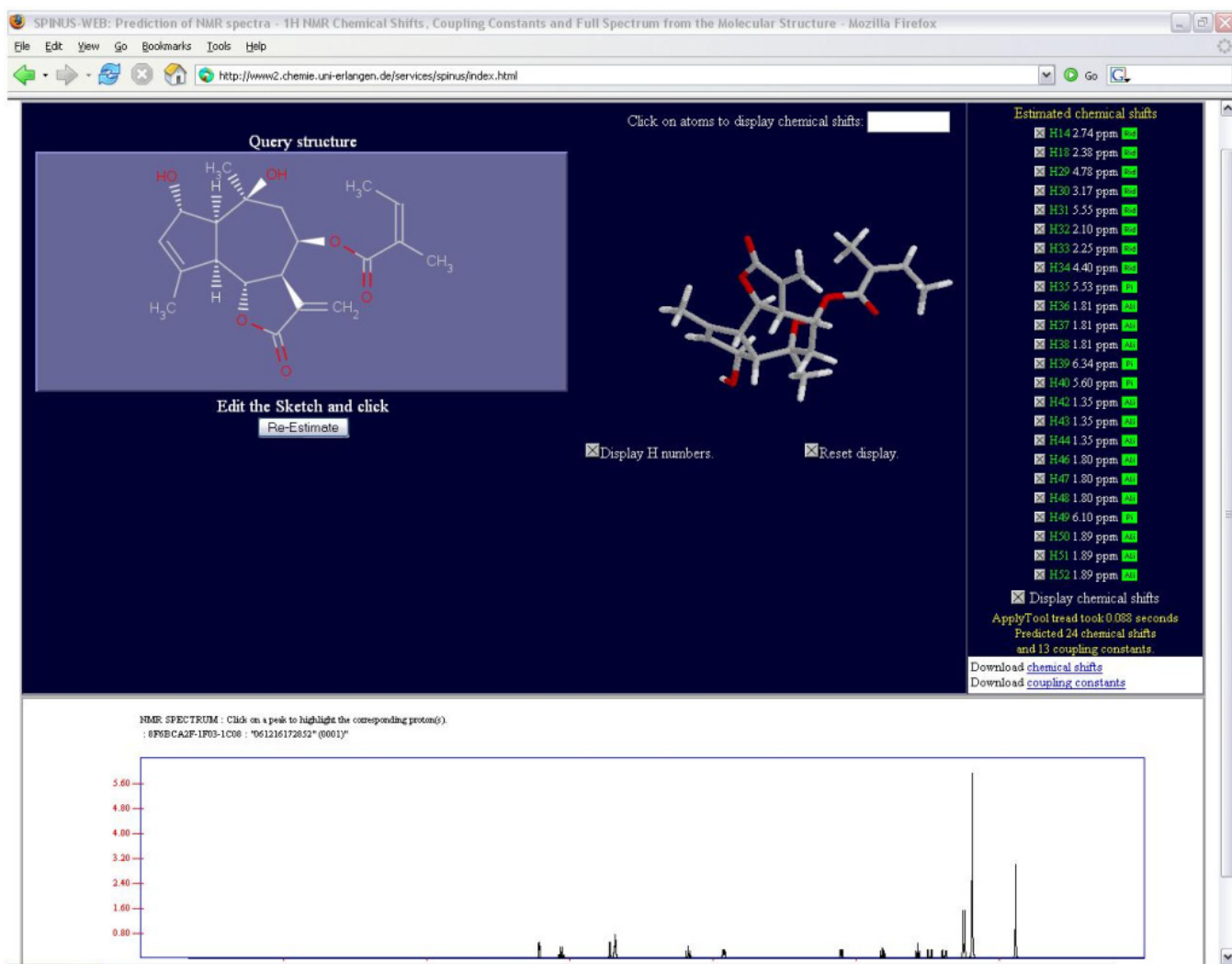


Figura 1Sb. SPINUS-WEB. Tela de entrada com uma estrutura 2D (acima, à esquerda) com deslocamentos químicos de RMN ^1H previstos (tabela à direita) e o respectivo espectro de RMN ^1H simulado (abaixo).

CSEARCH main page - Mozilla Firefox
 http://homepage.univie.ac.at/wolfgang.robien/csearch_main.html

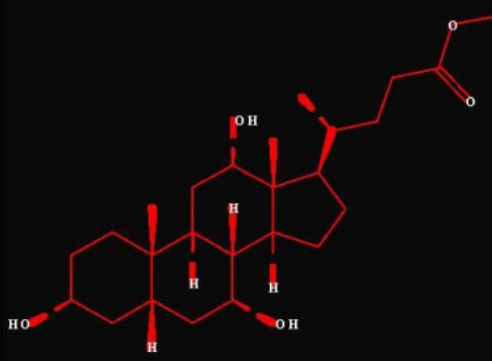
Carbon NMR
Spectral database
Environment
 Sophisticated **A**lgorithms
Reliable Results
Clever implementation
Highly interactive

CSEARCH-NMR Database Description

C-13 NMR DATABASE: A#-22883 UNIV-120 12/10/2000 11:22:18

METHYL-3-ALPHA-7-ALPHA-12-ALPHA-TRIHIDROXY-5-BETA-CHOLAN-24-OATE

ORG. MAGN. RES., 9, 439 (1977)
 $C_{25}H_{42}O_5$ MW = 422.6
 CH_2Cl_2



c - 1:	46.80S	c -21:	30.90T
c - 2:	26.70D	c -22:	72.20D
c - 3:	35.10S	c -23:	22.80Q
c - 4:	42.00D	c -24:	17.60Q
c - 5:	39.90D	c -25:	51.80Q
c - 6:	73.40D		
c - 7:	42.00D		
c - 8:	28.50T		
c - 9:	68.90D		
c -10:	47.40D		
c -11:	35.10T		
c -12:	23.50T		
c -13:	35.70T		
c -14:	28.00T		
c -15:	175.30S		
c -16:	39.90T		
c -17:	35.70D		
c -18:	31.30T		
c -19:	31.20T		
c -20:	12.80Q		

Figura 2S. CSEARCH. Página da internet do programa com acesso on-line

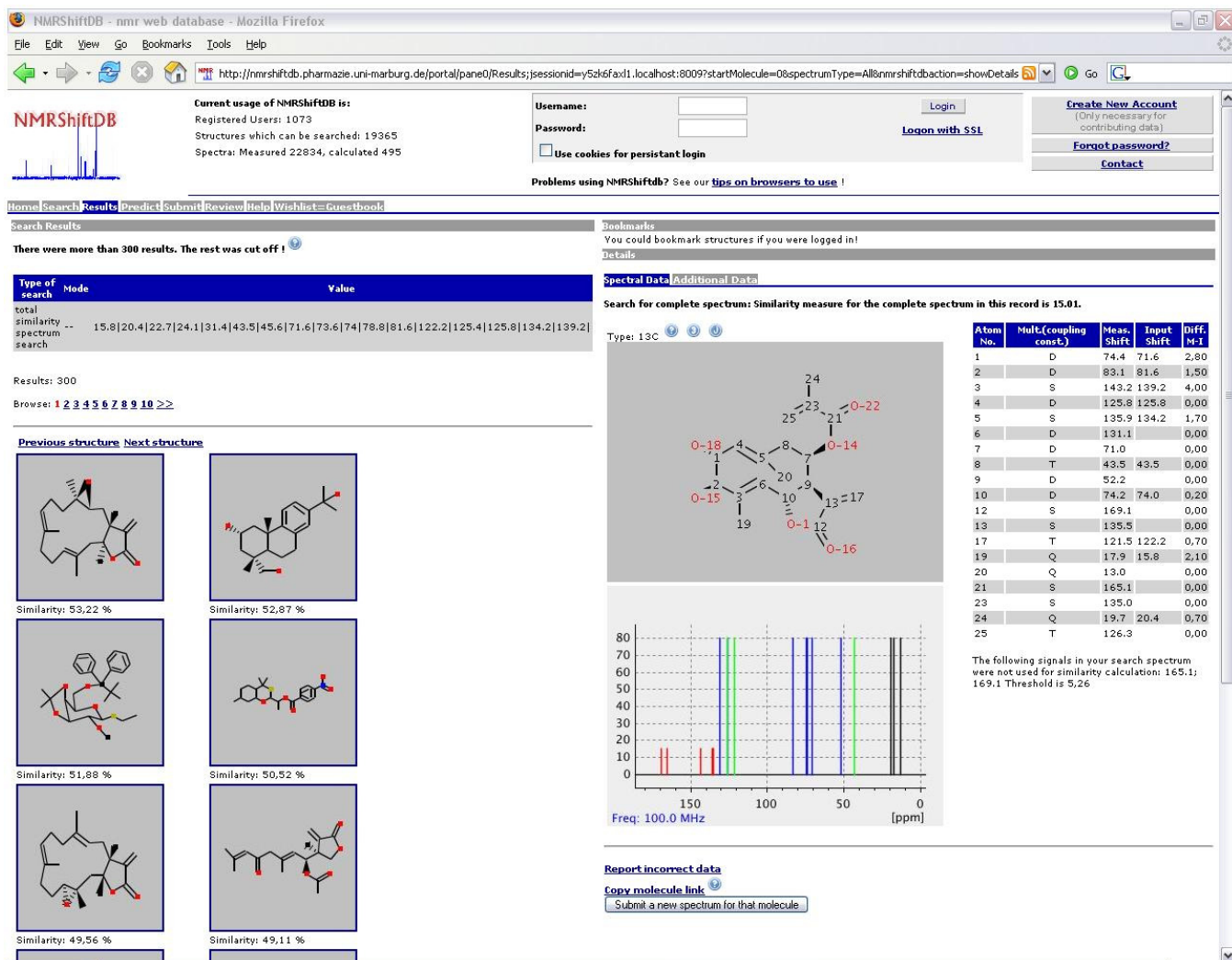


Figura 3S. NMRShiftdb. Página da internet ilustrando o processo de elucidação estrutural de uma substância natural e os deslocamentos químicos de RMN ^{13}C na tabela de similaridade com os resultados (à direita)