
上海有机所推出含氟试剂数据库

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26688.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

有机氟化合物由于独特的理化和生物性能，在医药、农药、先进材料等领域发挥作用。含氟试剂是发展有机氟化合物合成方法的基础，也是氟化学领域发展的基石。然而，含氟试剂的结构、性质、功能等信息分散于文献中，不便于合成化学家查找和使用。因此，亟需专业平台来全面了解和积累含氟试剂的结构、性质、功能等信息。近日，中国科学院上海有机化学研究所薛小松课题组推出了含氟试剂数据库——FluoBase，可以为科研人员、教育工作者和行业专业人士提供专业、可靠、时新和丰富的含氟化试剂的相关信息。

目前，FluoBase已收录1500多种含氟试剂，涵盖5000多条物化性质如密度、熔点、沸点、溶解度、稳定性、氧化还原电位、亲核性、亲电性、键解离能等，600多个三维结构，120多条晶体信息。该数据库提供了根据试剂类型分类浏览以及根据结构或关键词两种检索模式。在检索预览界面，研究人员可以根据试剂的类型或部分性质进行筛选。

FluoBase包含丰富的试剂信息，并纳入了机器学习模型。该研究收集了3376个不重复的 ^{19}F NMR化学位移，并使用图卷积神经网络实现了 ^{19}F NMR化学位移的精准预测。研究显示，FluoBase中的FNMR预测页面，可以有效地在线预测各种有机氟化合物的 ^{19}F NMR化学位移。

研究工作得到国家自然科学基金委员会、科学技术部、中国科学院和国家智能化学数据中心等的支持。

[含氟试剂数据库访问地址](#)

研究团队单位：上海有机化学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](#)转发