

新化合物异二聚细辛醚的质谱学研究

Study on the Mass Spectra from a New Compound of Isobisasaricin

刘布鸣

Liu Buming

(广西中医药研究所 南宁市古城路 20号 530022)

(Guangxi Institute of Traditional Medical and Pharmaceutical Sciences, 20 Guchenglu, Nanning, Guangxi, 530022)

摘要 应用质谱数据, 探讨新化合物异二聚细辛醚的质谱裂解规律, 对其质谱特征离子进行研究, 为该新化合物提供质谱学基础。

关键词 异二聚细辛醚 质谱 裂解规律 特征离子

中图法分类号 O 657.6

Abstract The mass spectra from a new compound of isobisasaricin was studied in this paper. The characteristic ions and fragmentation patterns of isobisasaricin were discussed by data of mass spectra. This paper summarizes the basic of mass spectroscopy of a new compound.

Key words isobisasaricin, mass spectra, fragmentation patterns, characteristic ions

异二聚细辛醚 (isobisasaricin) 是一个木脂素类化合物, 在文献 [1] 我们报道了该化合物为 2, 2', 4, 4', 5, 5' 六甲氧基 7-8' 木脂素, 化学名为 1, 3-二(2, 4, 5-三甲氧基) 苯基-2-甲基 戊烯-1, 化学结构见图 1

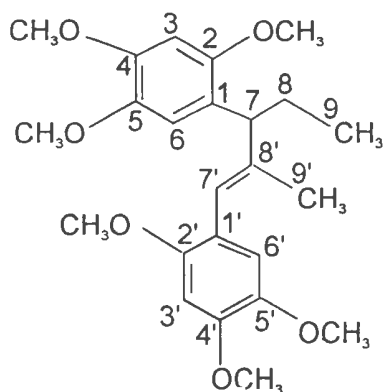


图 1 异二聚细辛醚的化学结构

Fig. 1 The chemical structure of isobisasaricin

文献 [1] 仅报道了异二聚细辛醚的质谱数据与图谱, 以及异二聚细辛醚的光谱和核磁波谱的归属, 尚未对该化合物的质谱进行详细的解析报道, 为此我们对异二聚细辛醚在电子轰击下的质谱进行了研究, 以揭示该化合物质谱裂解途径以及特征离子。

1 实验与数据

质谱数据由美国 Finnigan MAT 311A 型与 HP 5988A 型两台质谱仪测定。实验条件: 电离电压 70 eV; 离子源温度 200°C; 样品采用直接进样。测得质谱数据如下: $M^+ m/e$ 416 (M^+), 387, 386, 385, 372, 357, 356, 341, 325, 310, 295, 249, 234, 222, 221, 220 (100), 209, 181, 168, 161, 151, 121, 91, 69

2 功能基团的裂解

异二聚细辛醚的分子离子 M^+ 失去 $-CH_2CH_3$ 得到 m/e 387 ($M-29$), 指示分子中含有乙基, M^+ 失去 $-OCH_3$ 得到 m/e 385 ($M-31$), 表明分子中甲氧基的存在, 碎片离子再进一步失去一些功能基团, 产生再次碎片离子。图 2 中描述了一些可能的功能基团裂解

3 主要特征离子与裂解方式

异二聚细辛醚的分子离子 M^+ 在电子轰击下, 分别均裂为 $m/e387$, $m/e249$, $m/e209$ 三个碎片离子, 各碎片离子在电子轰击下再次裂解或重排, 产生不同的再次碎片离子。图 3 描述了异二聚细辛醚的质谱主要特征离子与裂解方式。

4 小结

以上研究结果显示, 各功能基团、碎片离子以及化合物的结构, 与文献 [1] 中各光谱推断结论是相符合的, 并参考文献 [2, 3] 木脂素类化合物的结构与裂解规律, 表明所做的质谱学推论是可靠的。

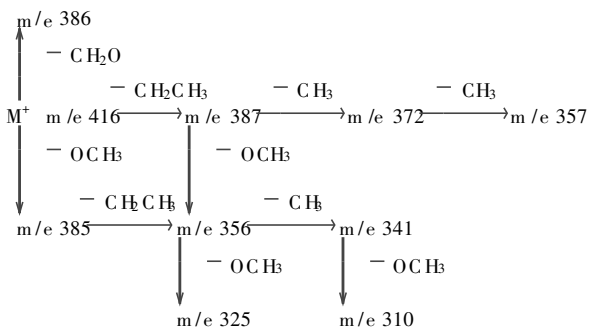


图 2 质谱功能团裂解

Fig. 2 The fragmentations of functional group in M S

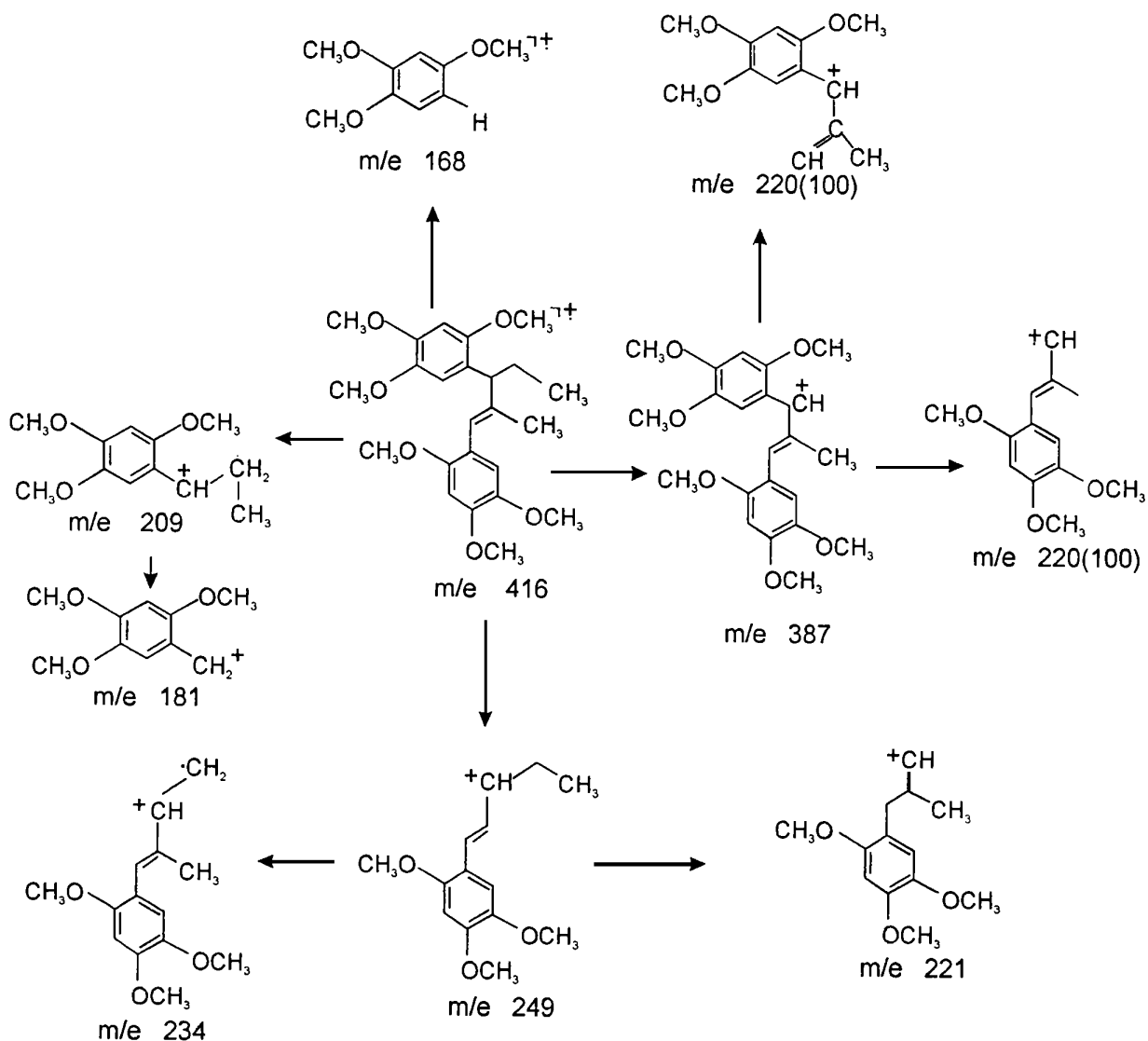
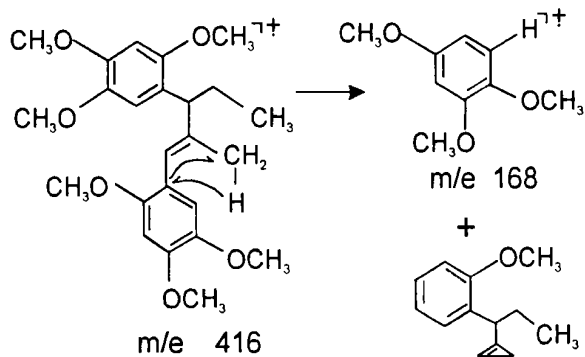


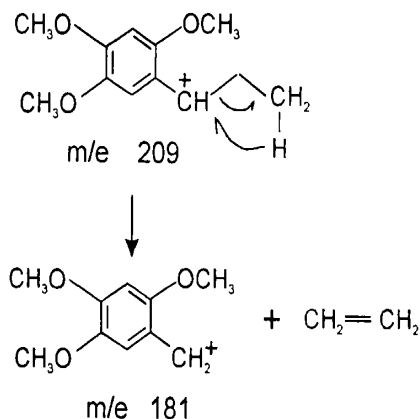
图 3 质谱主要特征离子与裂解方式

Fig. 3 The characteristic ions and fragmentation patterns in M S

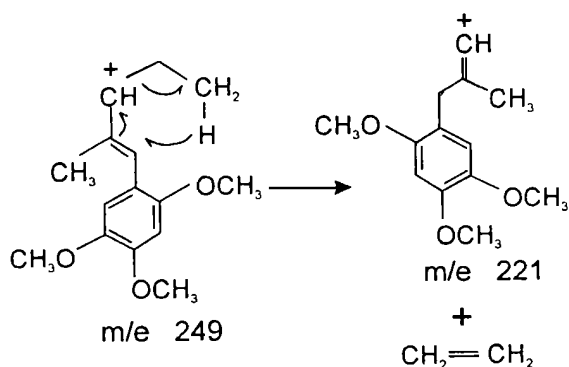
m/e 168则为:



m/e 209离子经过重排成 m/e 181 离子,



m/e 249离子经过 McLafferty 重排成 m/e 221离子,



致谢

广西中医药研究所蔡全玲实验师, 广西化工研究院李少燕工程师测 MS, 特此致谢

参考文献

- 1 刘布鸣, 叶超, 姜惟恒. 异二聚细辛醚的化学结构研究. 分析化学, 1994, 22 (4): 355-358.
- 2 丛浦珠. 质谱学在天然有机化学中的应用. 北京: 科学出版社, 1987.
- 3 王宪楷. 天然药物化学. 北京: 人民卫生出版社, 1988.

(责任编辑: 邓大玉)

(上接第 10 页 Continue from page 101)

- 13 白崎英明, 朝仓光司. 鼻アレルギーにおける鼻腔洗浄液中の血小板活性化因子 (PAF) の検出. 日本耳鼻咽喉科学会報, 1990, 93 (3): 420-427.
- 14 Meslier N, Braunstein G, Lacroix J et al. Local cellular and humoral responses to antigenic and distilled water challenge in subjects with allergic rhinitis. Am Res Respir Dis, 1988, 137: 617-624.
- 15 Nakamura M, Honda Z, Izumi T et al. Molecular cloning and expression of platelet-activating factor receptor from human leukocytes. J Biol Chem, 1991, 266: 20400-20405.
- 16 Lee T C, Blank M B, Snyder F. 1-Alkyl-2-Acetyl-sn-Glycero-3-Phosphocholine (platelet activating factor) stimulates calcium influx in rabbit platelets. Biochem Biophys Res Commun, 1981, 102: 1262-1268.

- 17 Vargaftig B B. Carrageenan and thrombin trigger prostaglandin synthetase independent aggregation of rabbit platelets inhibition by phospholipase A2 inhibitors. J Pharm Pharmacol, 1977, 29: 222.
- 18 小杉忠诚, 中村真理子, 仲吉博彦等. 鼻アレルギーにおける血小板機能の意義. 1. アレルギー-性鼻炎患者における Azeptin 投与前后的血液凝固纤溶血小板機能の推移. 耳鼻, 1987, 33: 852-858.
- 19 陈伊宁, 黄光武, 农辉图等. 大佛水与变应性鼻炎病人血小板聚集关系的研究. 广西医学, 1995, 17: 263-265.
- 20 Gnes D B, Vander K H, Levinson A I. In vitro binding of an Ig E protein to human platelets. J Immunol, 1986, 136: 3433-3440.
- 21 Astafieva N G. Platelet role in pathogenesis of atopic and nonimmunologic asthma. Allergol Immunopathol Madr, 1990, 18: 19-26.

(责任编辑: 蒋汉明)