

补充数据

草莓番石榴内生真菌 *Nigrospora* sp. 次生代谢产物研究

张 琴¹, 罗志强², 贾海燕^{1,3},

何云清¹, 刘佳宝¹, 许自攀¹, 高原^{1,4*}, 杨 健^{2,3*}

¹ 宜宾学院 过程分析与控制四川省高校重点实验室, 宜宾 644000; ² 中国中医科学院中药资源中心 道地药材品质保障与资源持续利用全国重点实验室, 北京 100700; ³ 江西省道地药材质量评价研究中心, 南昌 330000; ⁴ 宜宾学院 香料植物资源开发与利用四川省高校重点实验室, 宜宾 644000

目录

图1 化合物1的红外光谱图

图2 化合物1的紫外光谱图

图3 化合物1的旋光光谱图

图4 化合物1的¹H NMR图谱 (500 MHz, CDCl₃)

图5 化合物1的¹³C NMR图谱 (125 MHz, CDCl₃)

图6 化合物1的HMBC图谱

图7 化合物1的HSQC图谱

图8 化合物1的ROSEY图谱

图9 化合物1的HR-ESI-MS图谱

图10 A) 1a和1b的¹³C NMR化学位移实验值和理论值的回归分析; B) 1a和1b的DP4+概率

表1 在气相条件下, 基于B3LYP/6-31G(d)方法对1a的构象进行的能量分析

图1 化合物1 的红外光谱图

图2 化合物1 的紫外光谱图

图3 化合物1 的旋光光谱图

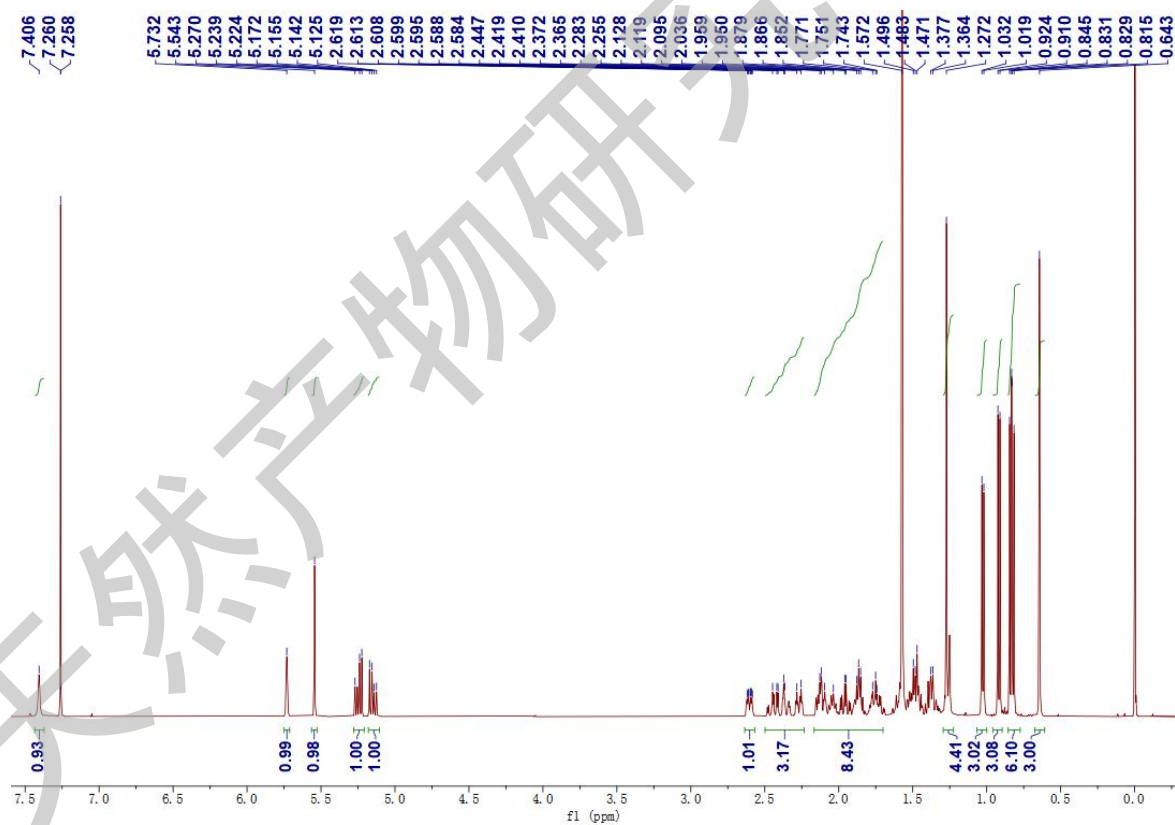


图4 化合物1 的 ^1H NMR 图谱 (500 MHz, CDCl_3)

图 5 化合物1 的 ^{13}C NMR 图谱 (125 MHz, CDCl_3)

图 6 化合物1 的HMBC 图谱

图7 化合物1的HSQC图谱

图8 化合物1的ROSEY图谱

Data File: E:\DATA\2021\1105\1\Ens14.lcd

Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Use Adduct
H	1	5	100	F	1	0	0	Cl	1	0	0	Ag	1	0	0	Na
2H	1	0	0	Na	1	0	0	Co	2	0	0	I	3	0	0	
B	3	0	0	Mg	2	0	0	Cu	2	0	0	Ir	3	0	0	
C	4	5	50	Si	4	0	0	Se	2	0	0					
N	3	0	10	P	3	0	0	Br	1	0	0					
O	2	0	30	S	2	0	0	Pd	2	0	0					

Error Margin (ppm): 5

HC Ratio: unlimited

Max Isotopes: all

MSn Iso RI (%): 75.00

DBE Range: not fixed

Apply N Rule: yes

Isotope RI (%): 1.00

MSn Logic Mode: OR

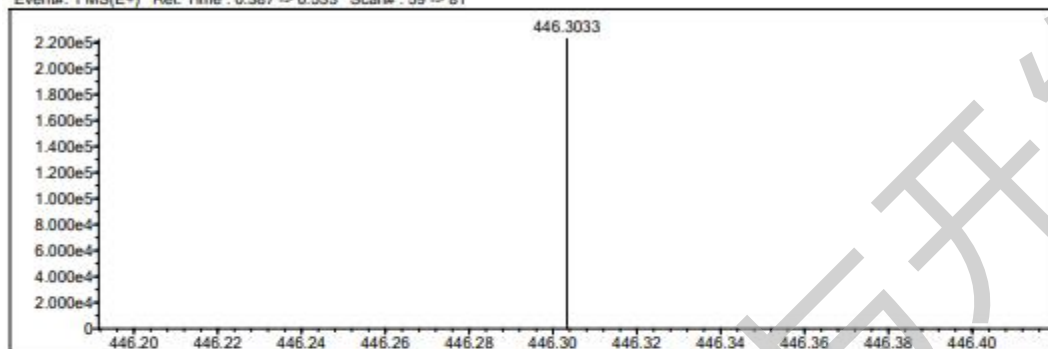
Electron Ions: both

Use MSn Info: yes

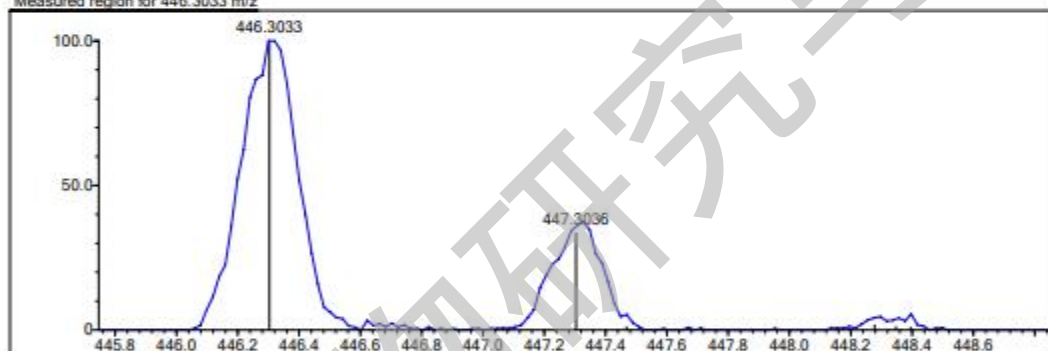
Isotope Res: 10000

Max Results: 20

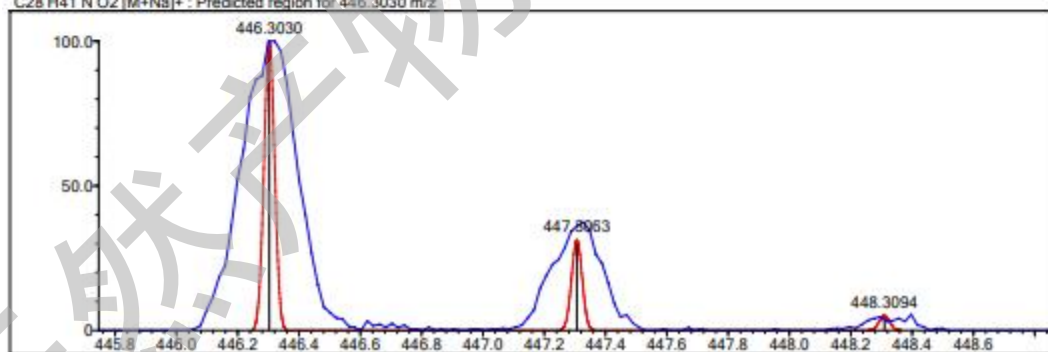
Event#: 1 MS(E+) Ret. Time : 0.387 -> 0.533 Scan#: 59 -> 81



Measured region for 446.3033 m/z



C28 H41 N O2 (M+Na)+ : Predicted region for 446.3030 m/z



Formula (M)	Ion	Meas. m/z	Pred. m/z	Df. (mDa)	Df. (ppm)	DBE
C28 H41 N O2	[M+Na]+	446.3033	446.3030	0.3	0.67	9.0

图9 化合物 1 的 HR-ESI-MS 图谱

采用PCM-mPW1PW91/6-311+G (d, p) 水平下的密度泛函理论，计算异构体**1a**和**1b**的¹³C-NMR化学位移值，分别将理论计算值与实验值进行对比。进一步对**1a**和**1b**碳信号的计算值与实验值进行sDP4+、uDP4+、DP4+概率分析（见图10）。

图 10 A) **1a** 和 **1b** 的 ¹³C NMR 化学位移实验值和理论值的回归分析； B) **1a** 和 **1b** 的 DP4+概率

利用PC Model 10软件以MMFF94分子力场水平对化合物**1a**的结构进行分子动力学构象搜索，其构象分布率高于1%的构象异构体有8个（见表1）；利用Gaussian 16软件，以TDDFT方法在B3LYP/6-31G (d) 水平下对这些构象进一步优化。经过优化的构象结构进一步在甲醇中采用含时密度泛函理论（TDDFT）在B3LYP/6-311+G (d, p)水平下，通过IEFPCM进行ECD的理论计算。这些构象的ECD光谱通过玻尔兹曼分布进行加权，并与SpecDis 1.7软件中的实验ECD光谱进行比较。

表 1 在气相条件下，基于 B3LYP/6-31G(d) 方法对 **1a** 的构象进行的能量分析

species	Gibbs free energy	ΔE (kcal/mol)	PE%
141	-1296.263527	0	43.22%
142	-1296.263299	0.14307228	33.89%
144	-1296.262165	0.85466862	10.12%
145	-1296.261284	1.40750493	3.95%
143	-1296.260951	1.61646576	2.77%
148	-1296.260634	1.81538643	1.98%
1413	-1296.260139	2.12600388	1.17%
147	-1296.260081	2.16239946	1.10%