Supporting Information

反柄紫芝中的二个新化合物

秦付营[1,2]，戴伟锋[2,3]，程永现[1,2,*]

[1]河南中医药大学，郑州 450008；[2]中国科学院昆明植物研究所植物化学与西部植物资源持续利用国家重点实验室，昆明 6502013 [3]昆明理工大学生命科学与技术学院，昆明 650500

目录

图 1 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{1}H-NMR 谱 3
图 2 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{13}C-NMR 谱 1
图 3 化合物 1 在氘代甲醇中的 HSQC 谱 3
图 4 化合物 1 在氘代甲醇中的 HMBC 谱 2
图 5 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{1}H-^{1}H COSY 谱 3
图 6 化合物 1 在氘代甲醇中的 ROESY 谱 3
图 7 化合物 1 的高分辨质谱 4
图 8 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{1}H-NMR 谱 7
图 9 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{13}C-NMR 谱 5
图 10 化合物 2 在氘代氯仿中的 HSQC 谱 6
图 11 化合物 2 在氘代氯仿中的 HMBC 谱 6
图 12 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{1}H-^{1}H COSY 谱 9
图 13 化合物 2 的高分辨质谱 10

图 1 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{1}H-NMR 谱

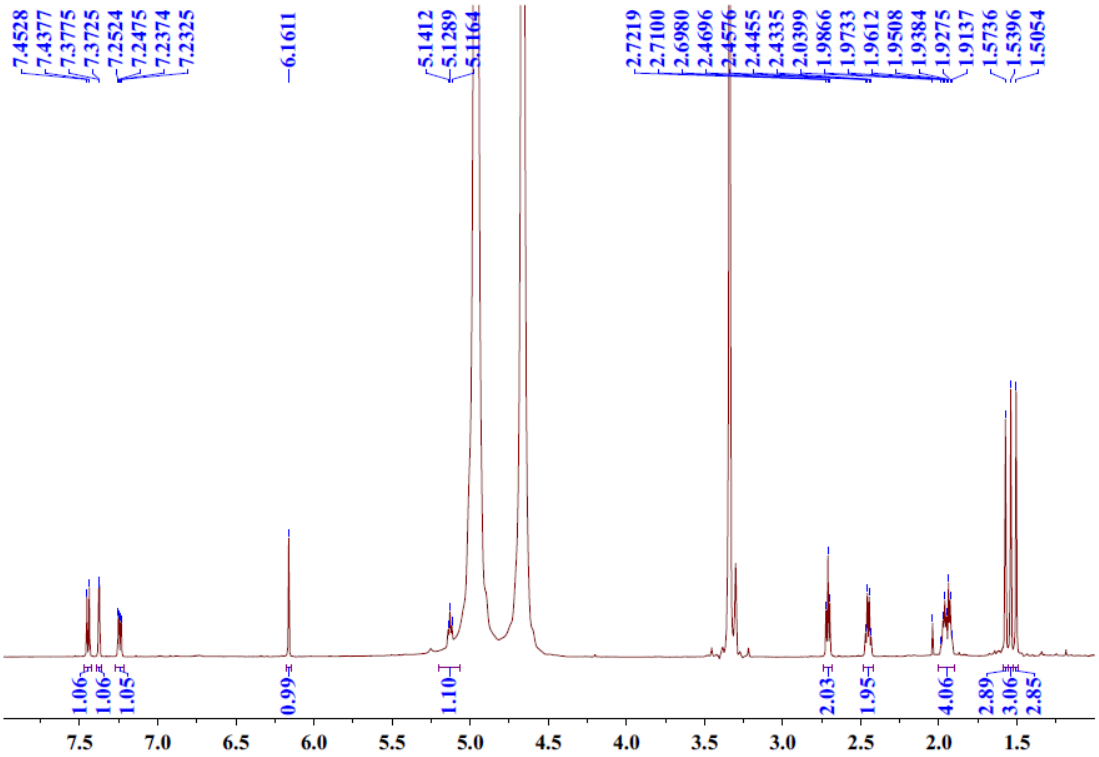


图 2 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{13}C-NMR 谱

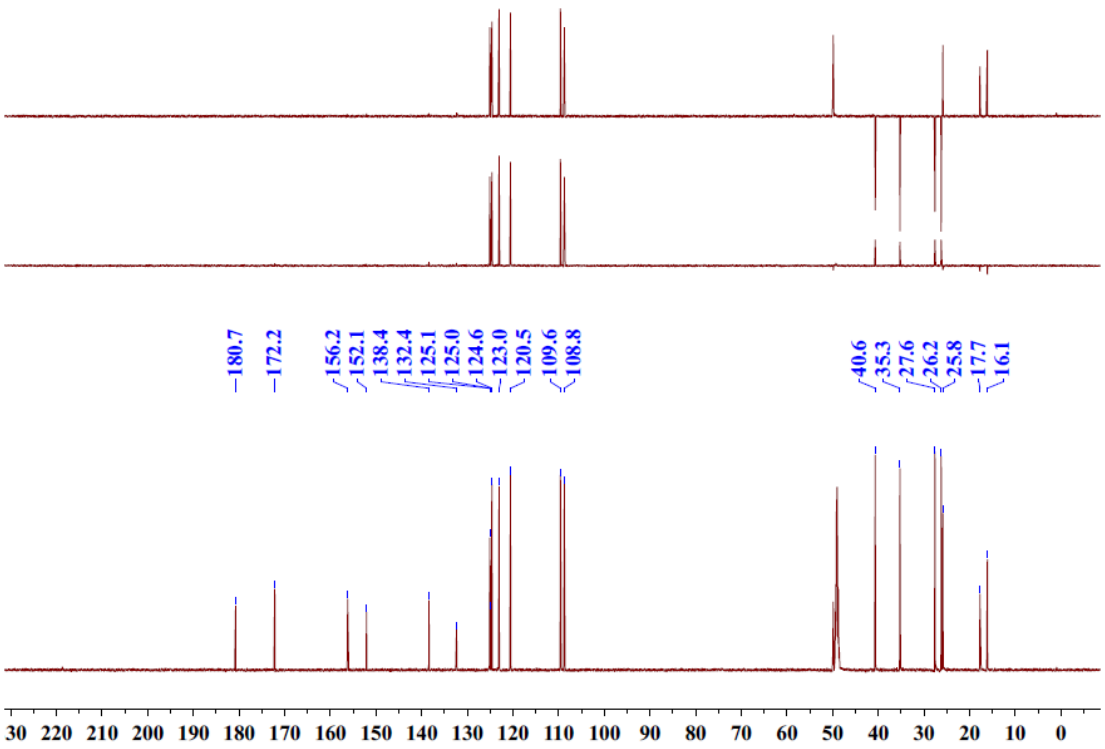


图 3 化合物 1 在氘代甲醇中的 HSQC 谱

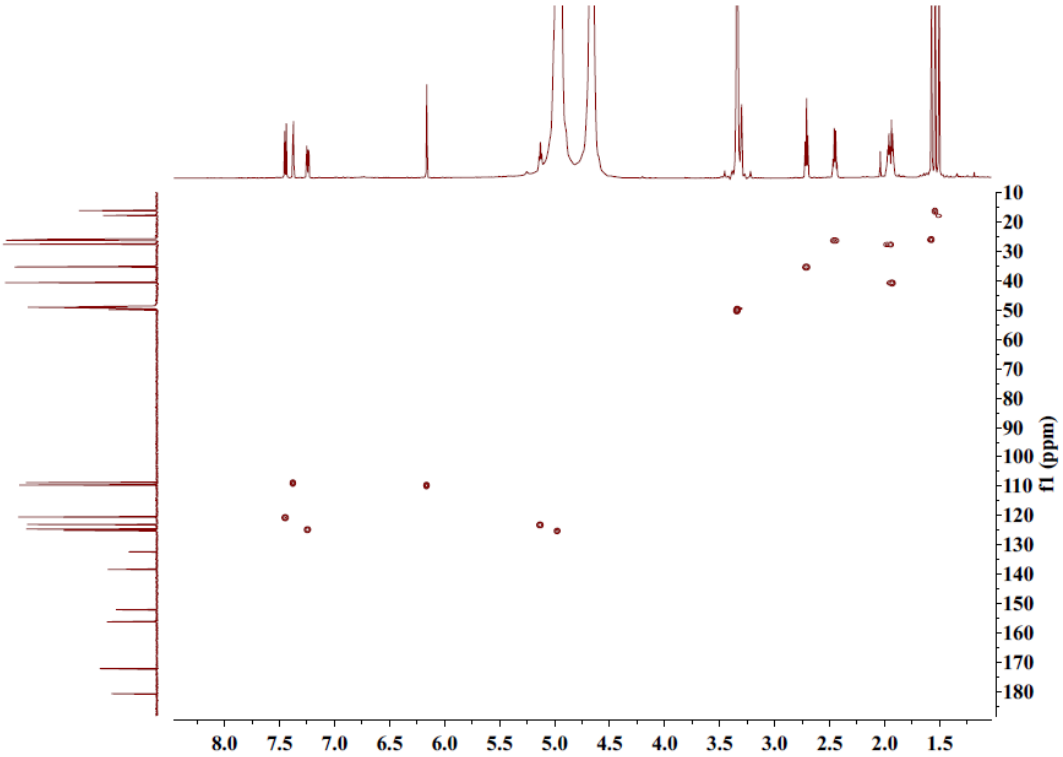


图 4 化合物 1 在氘代甲醇中的 HMBC 谱

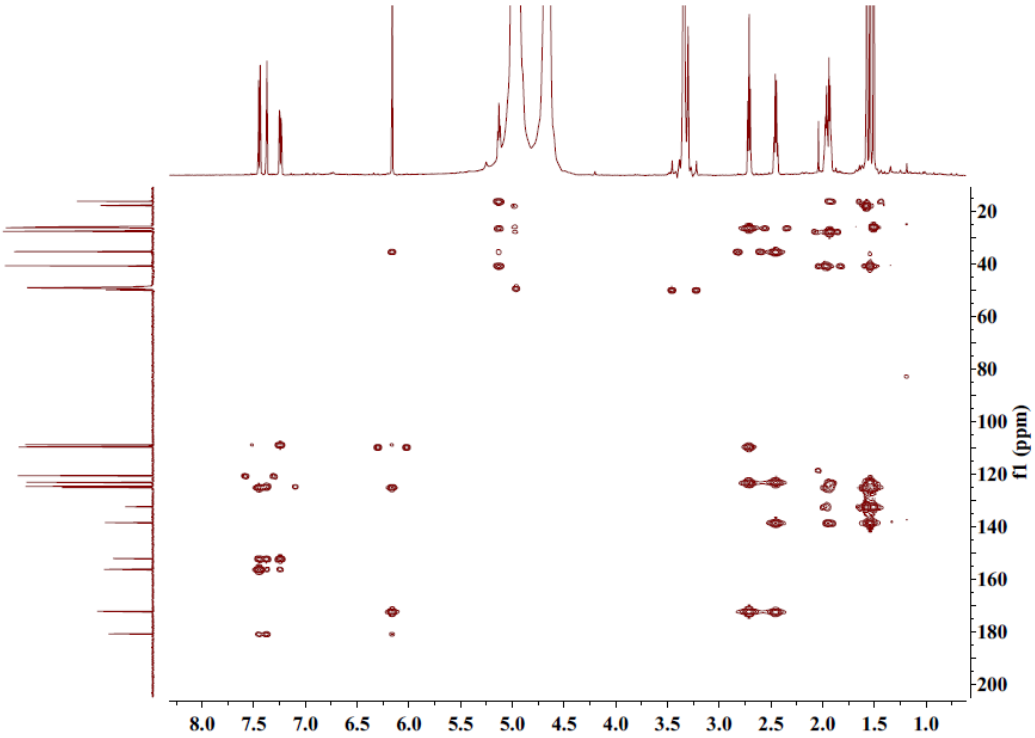


图 5 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^{1}H-^{1}H COSY 谱

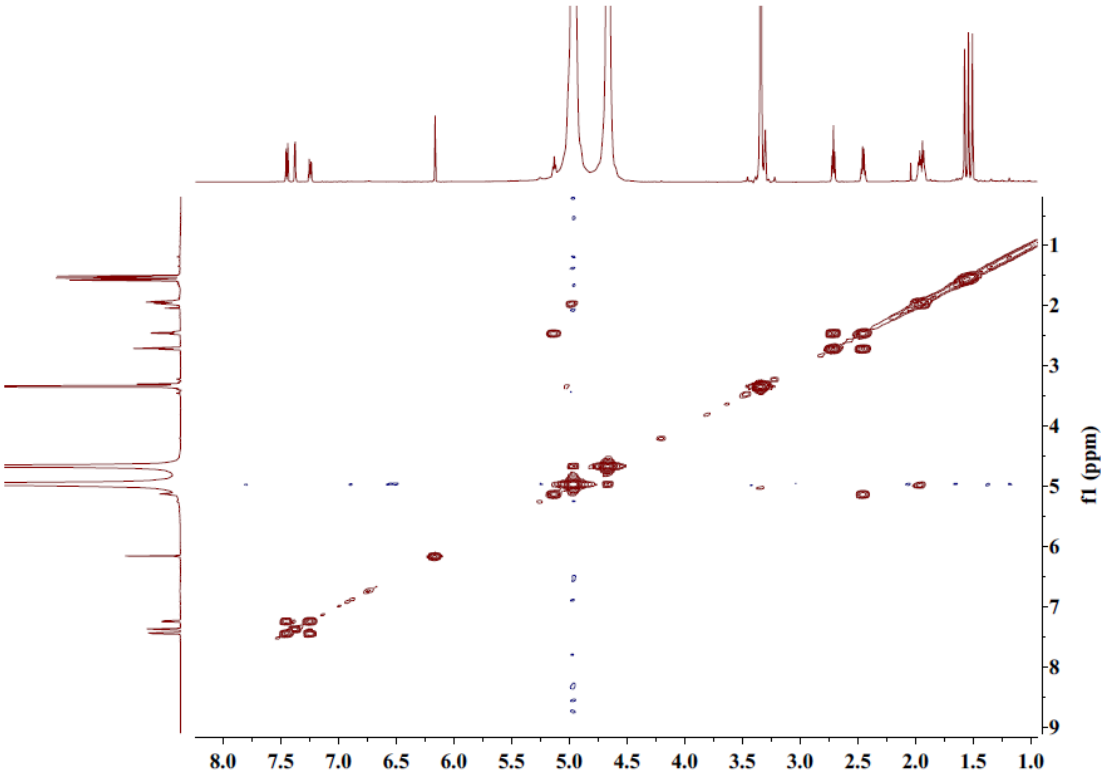


图 6 化合物 1 在氘代甲醇中的 ROESY 谱

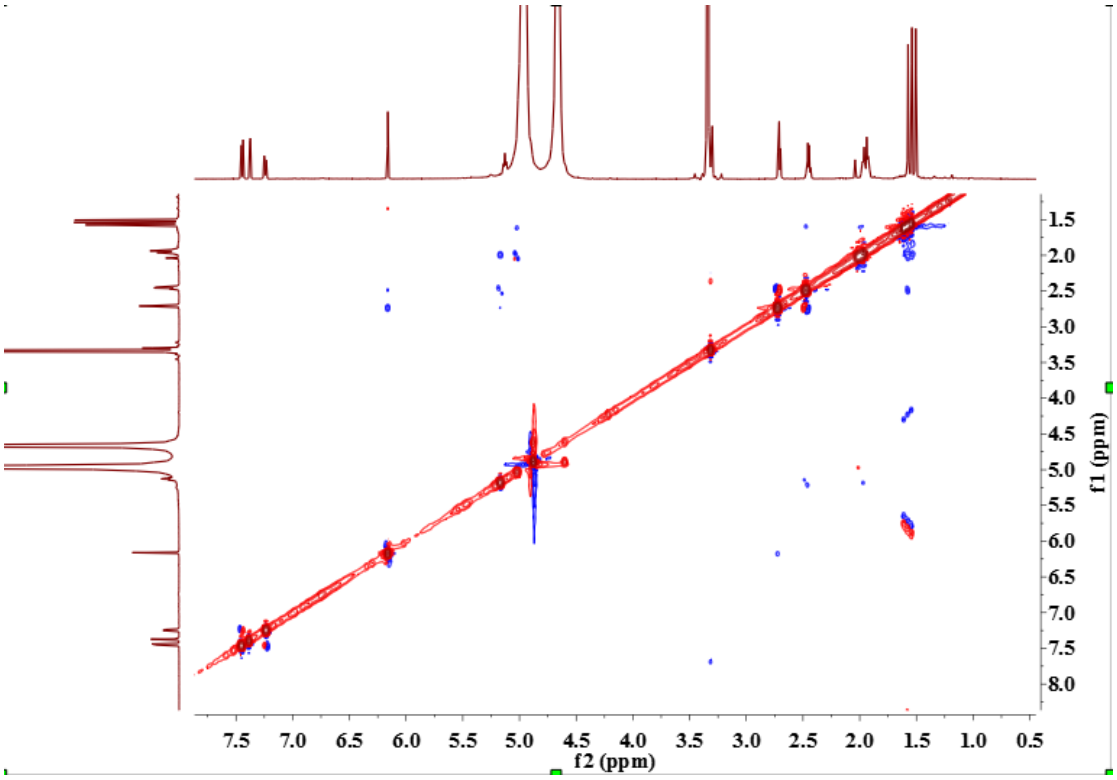


图 7 化合物 1 的高分辨质谱

Qualitative Analysis Report

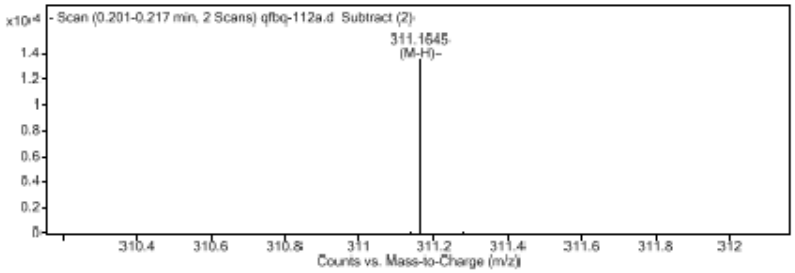
Data Filename	qfbq-112a.d	**Sample Name**	qfbq-112a
Sample Type	Sample	**Position**	P1-B1
Instrument Name	Instrument 1	**User Name**	
Acq Method	SIBU-ESI-i.m	**Acquired Time**	12/25/2015 2:43:47 PM
IRM Calibration Status	Success	**DA Method**	ESI+.m
Comment			

Sample Group **Info.**

Acquisition SW Version 6200 series TOF/6500 series Q-TOF B.05.01 (B5125.2)

User Spectra

Fragmentor Voltage	Collision Energy	Ionization Mode
135	0	ESI



Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
59.0144		939.4		
181.0712		990.38		
311.1645	1	13552.84	C20 H24 O3	(M-H)-
312.1679	1	2816.83	C20 H24 O3	(M-H)-
343.1547	1	1136.62		
357.1713	1	1369.68		
563.2244	1	2970.05		
564.2265	1	763.6		

Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	3	120
H	0	240
O	0	60

Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	CalculatedMz	Mz	Diff. (mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C20 H24 O3	312.1725	311.1653	311.1645	0.8	2.4	9.0000

--- End Of Report ---

图 8 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{1}H-NMR 谱

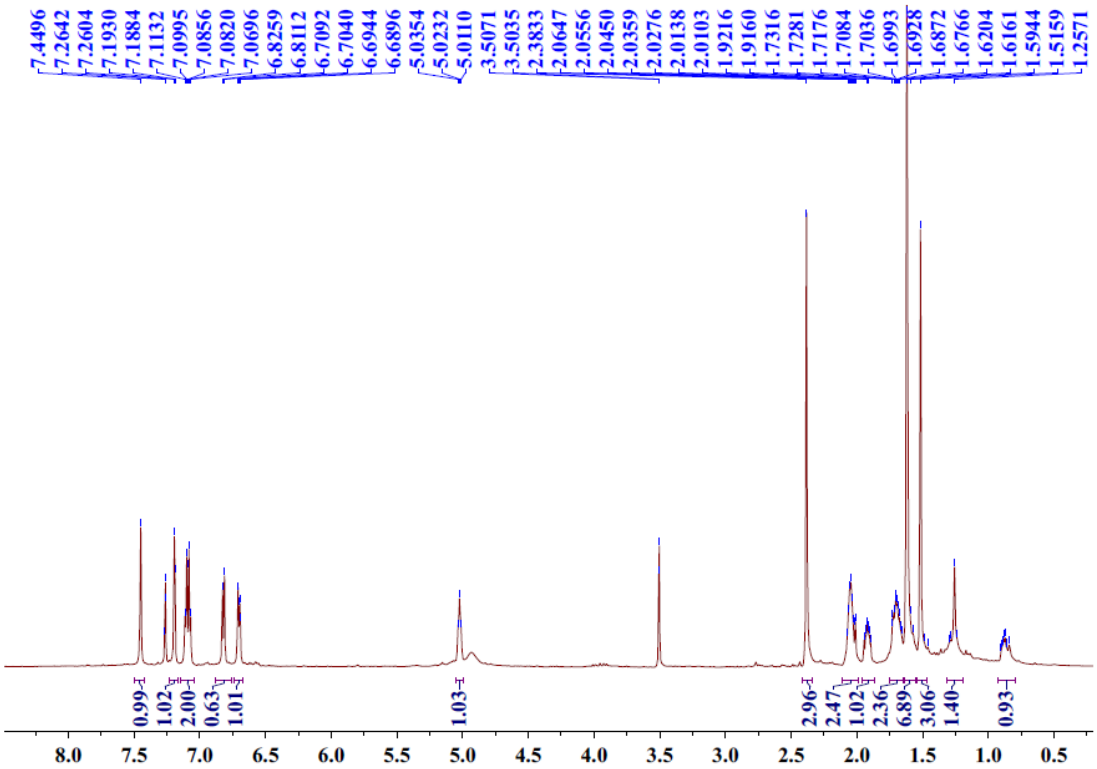


图 9 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{13}C-NMR 谱

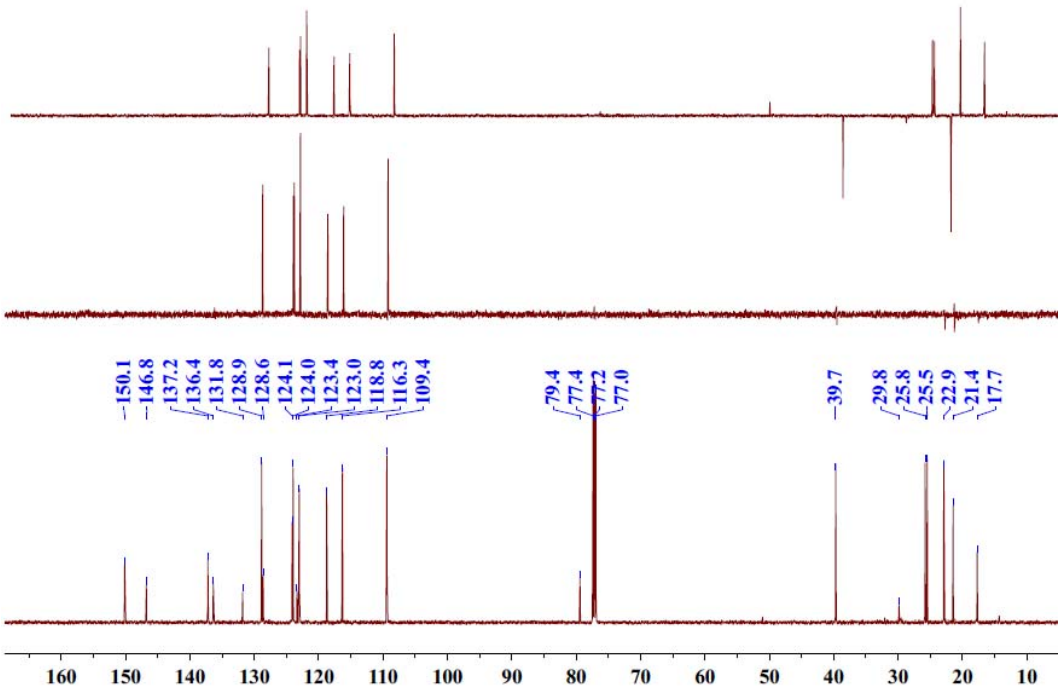


图 10 化合物 2 在氘代氯仿中的 HSQC 谱

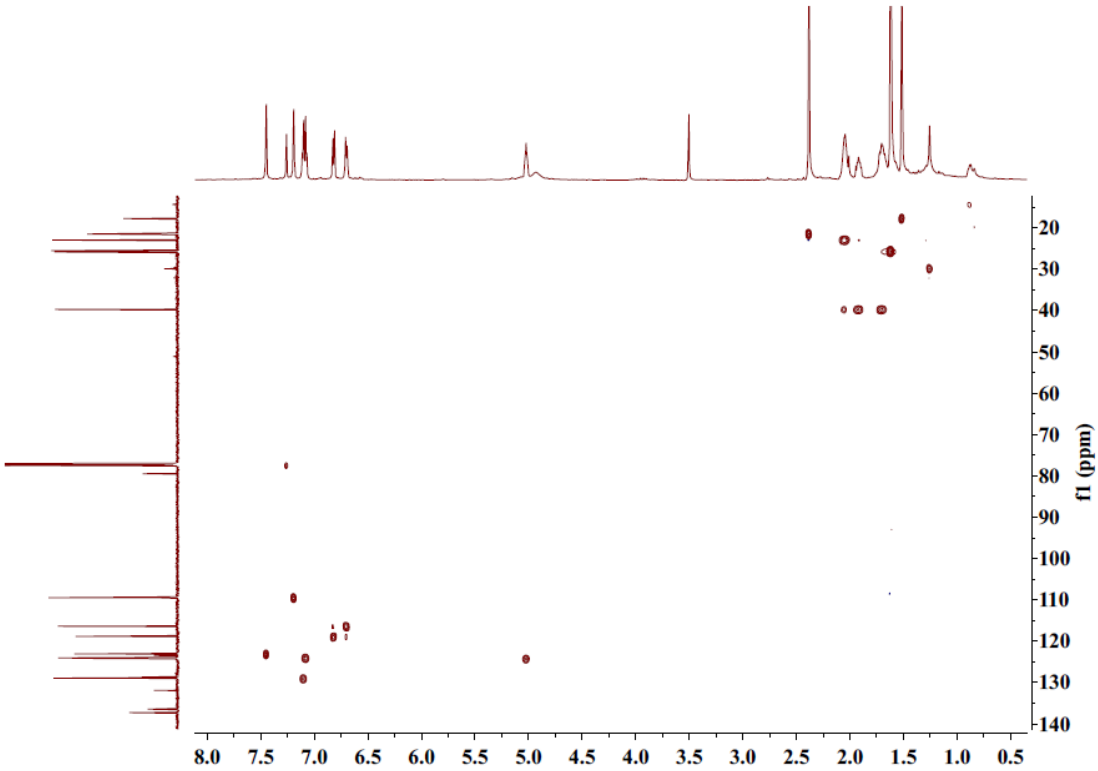


图 11 化合物 2 在氘代氯仿中的 HMBC 谱

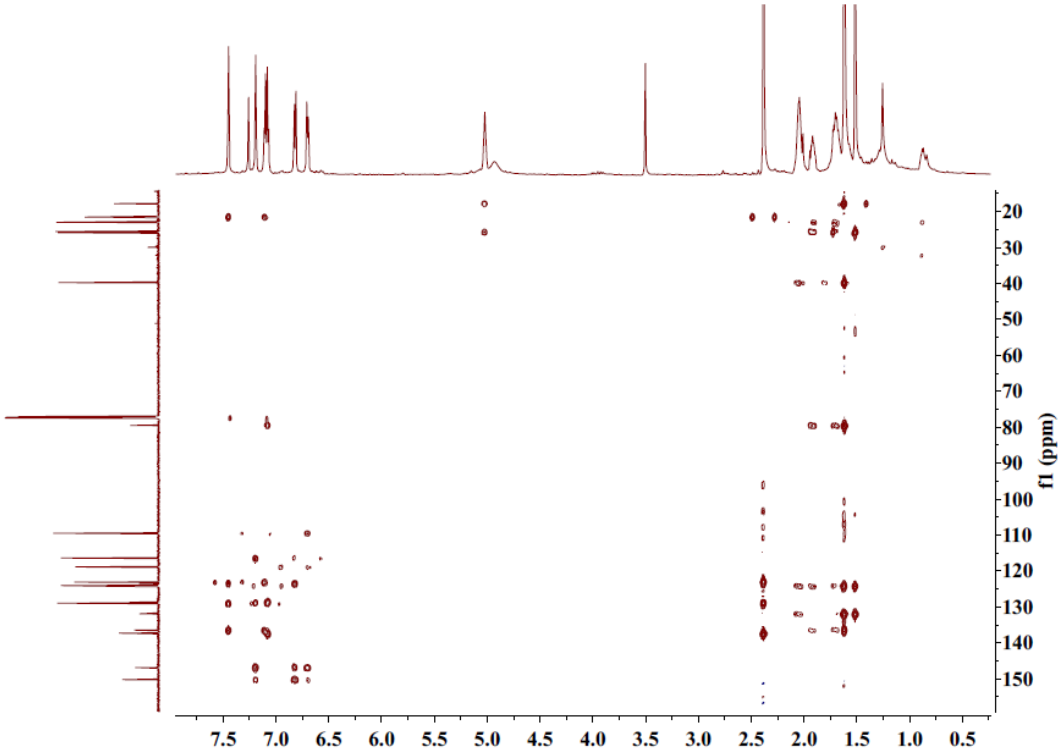


图 12 化合物 2 在氘代氯仿中的 ^{1}H-^{1}H COSY 谱

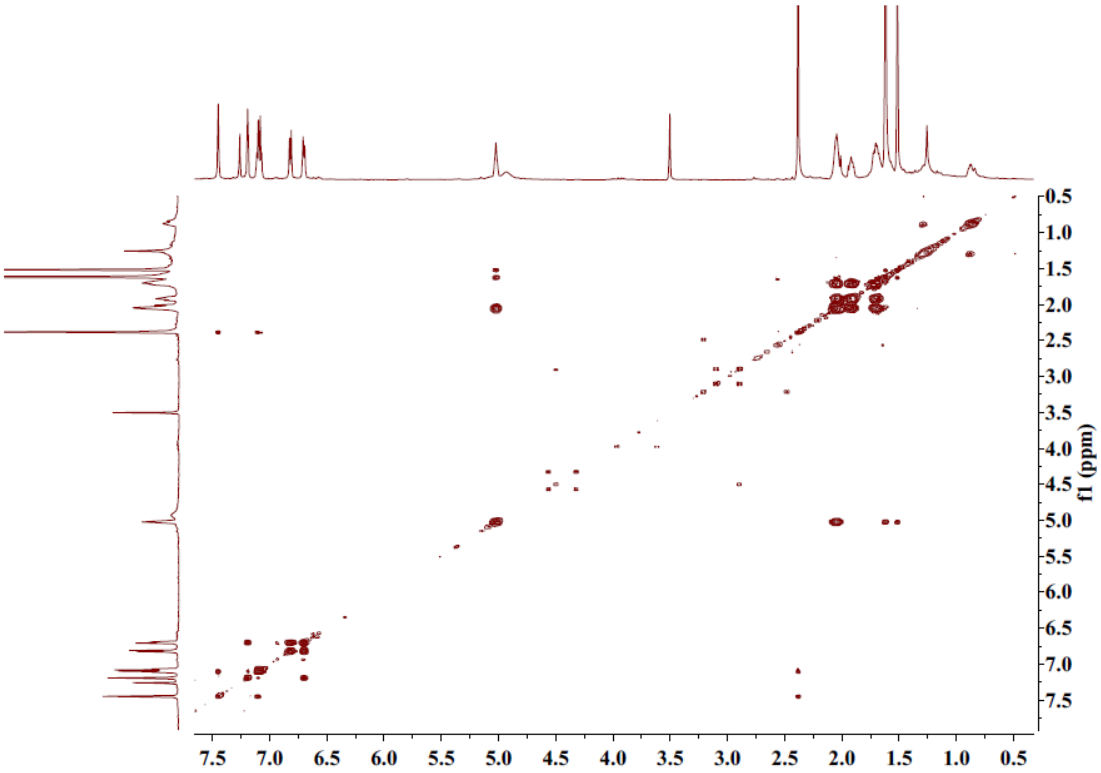


图 13 化合物 2 的高分辨质谱

Qualitative Analysis Report

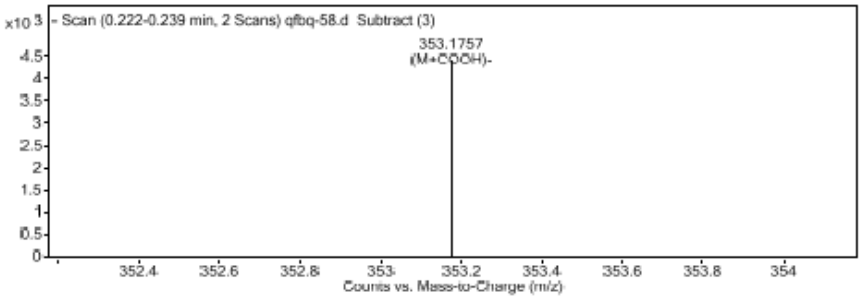
Data Filename	qfbq-58.d	**Sample Name**	qfbq-58
Sample Type	Sample	**Position**	P1-B2
Instrument Name	Instrument 1	**User Name**	
Acq Method	SIBU-ESI-i.m	**Acquired Time**	12/25/2015 2:45:18 PM
IRM Calibration Status	Success	**DA Method**	ESI+.m
Comment			

Sample Group **Info.**

Acquisition SW Version 6200 series TOF/6500 series Q-TOF B.05.01 (B5125.2)

User Spectra

Fragmentor Voltage	**Collision Energy**	**Ionization Mode**
135	0	ESI



Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
181.0712		1603.18		
311.1652	1	2182.86		
313.1802	1	1142.85		
353.1757	1	4392.83	C21 H24 O2	(M+COOH)-
359.1865		1010.17		
369.1692	1	1323.26		
427.1748		1310.39		
679.3608	1	1379.85		

Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	3	120
H	0	240
O	0	60

Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	CalculatedMz	Mz	Diff. (mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C21 H24 O2	308.1776	353.1758	353.1757	0.1	0.3	10.0000