

Supporting Information

肾茶化学成分研究

李小珍^{1,2}, 晏永明², 程永现^{2*}

¹ 云南中医学院, 昆明 650500; 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 650201

目录

图 1 化合物 1 在氘代甲醇中的 $^1\text{H-NMR}$ 谱.....	3
图 2 化合物 1 在在氘代甲醇及氘代氯仿中的 $^{13}\text{C-NMR}$ 谱.....	3
图 3 化合物 1 在氘代甲醇中的 HSQC 谱	4
图 4 化合物 1 在氘代甲醇中的 HMBC 谱	5
图 5 化合物 1 在氘代甲醇中的 $^1\text{H-}^1\text{H COSY}$ 谱.....	5
图 6 化合物 1 在氘代甲醇中的 ROESY 谱.....	6
图 7 化合物 1 的高分辨质谱.....	7
图 8 化合物 2 在氘代甲醇中的 $^1\text{H-NMR}$ 谱.....	8
图 9 化合物 2 在氘代甲醇中的 $^{13}\text{C-NMR}$ 谱.....	8
图 10 化合物 2 在氘代甲醇中的 HSQC 谱	9
图 11 化合物 2 在氘代甲醇中的 HMBC 谱	9
图 12 化合物 2 在氘代甲醇中的 $^1\text{H-}^1\text{H COSY}$ 谱.....	10
图 13 化合物 2 在氘代 DMSO 的 ROESY 谱.....	10
图 14 化合物 2 的高分辨质谱.....	11

图1 化合物1在氘代甲醇中的¹H-NMR谱

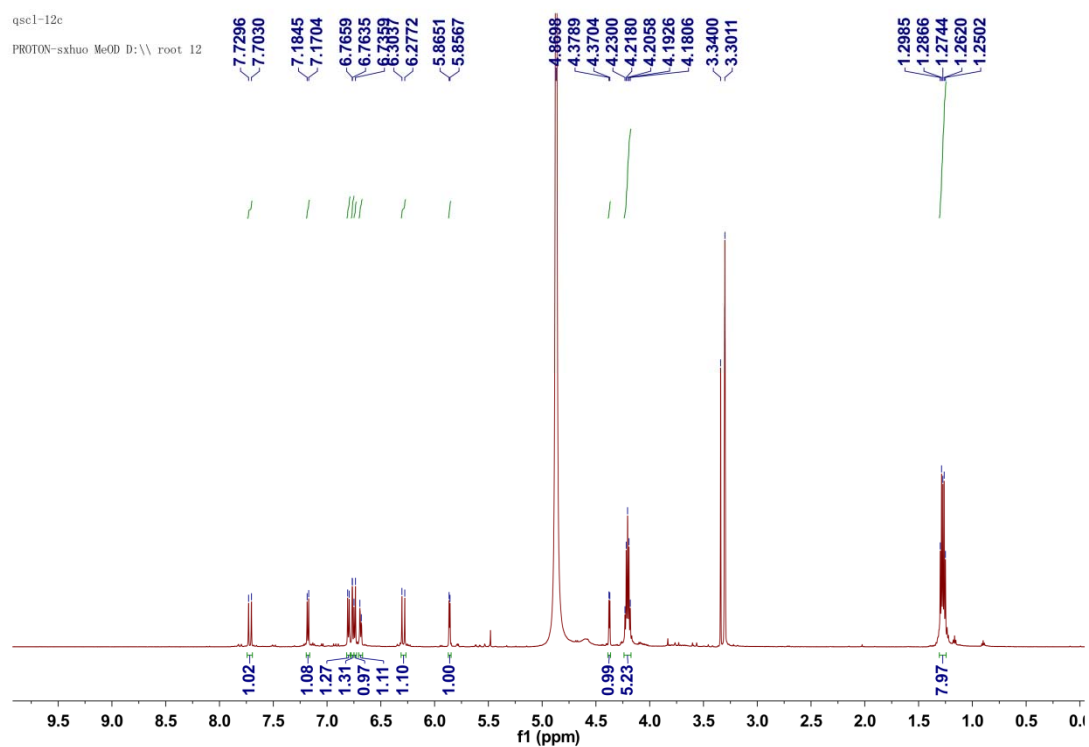
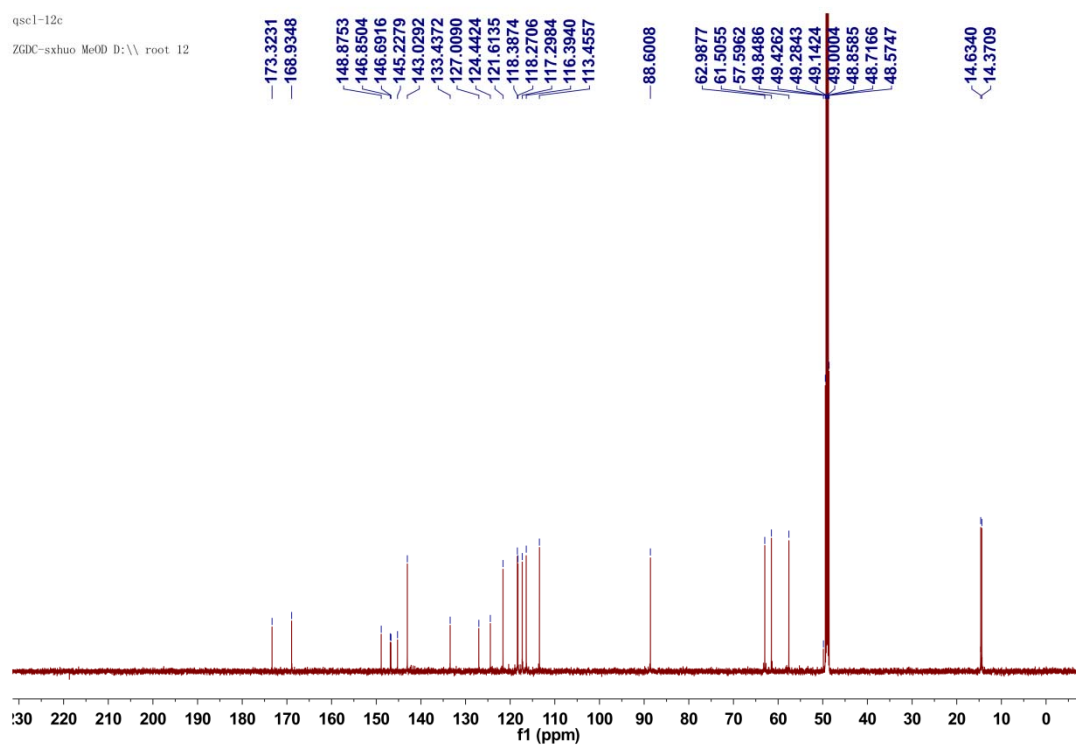


图2 化合物1在氘代甲醇及氘代氯仿中的¹³C-NMR谱



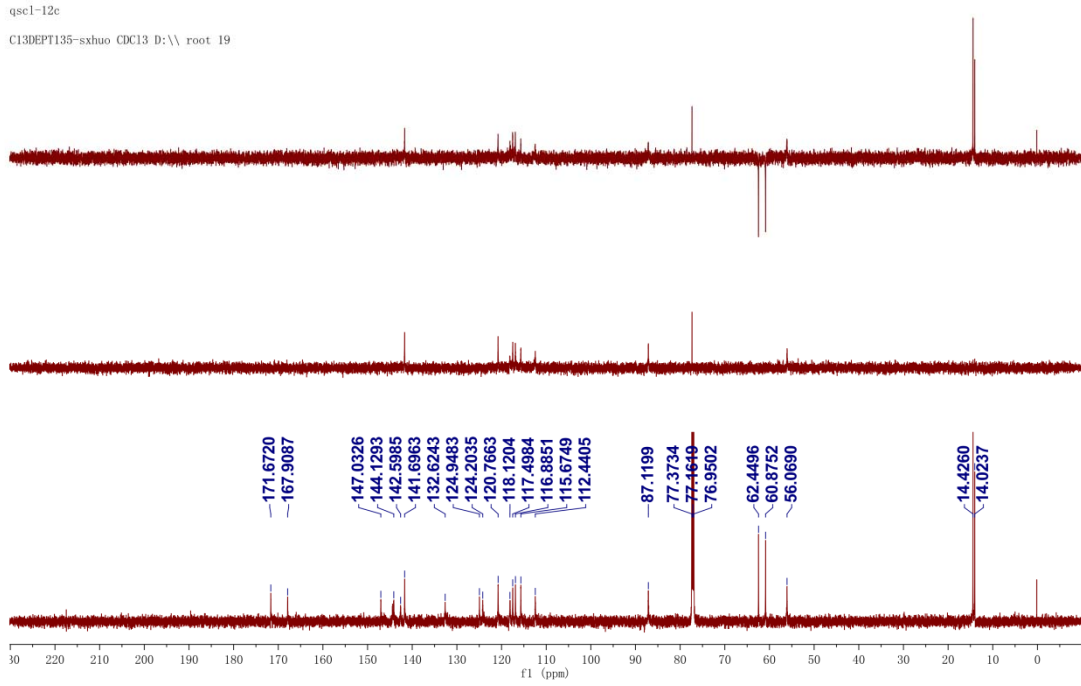


图3 化合物 1 在氘代甲醇中的 HSQC 谱

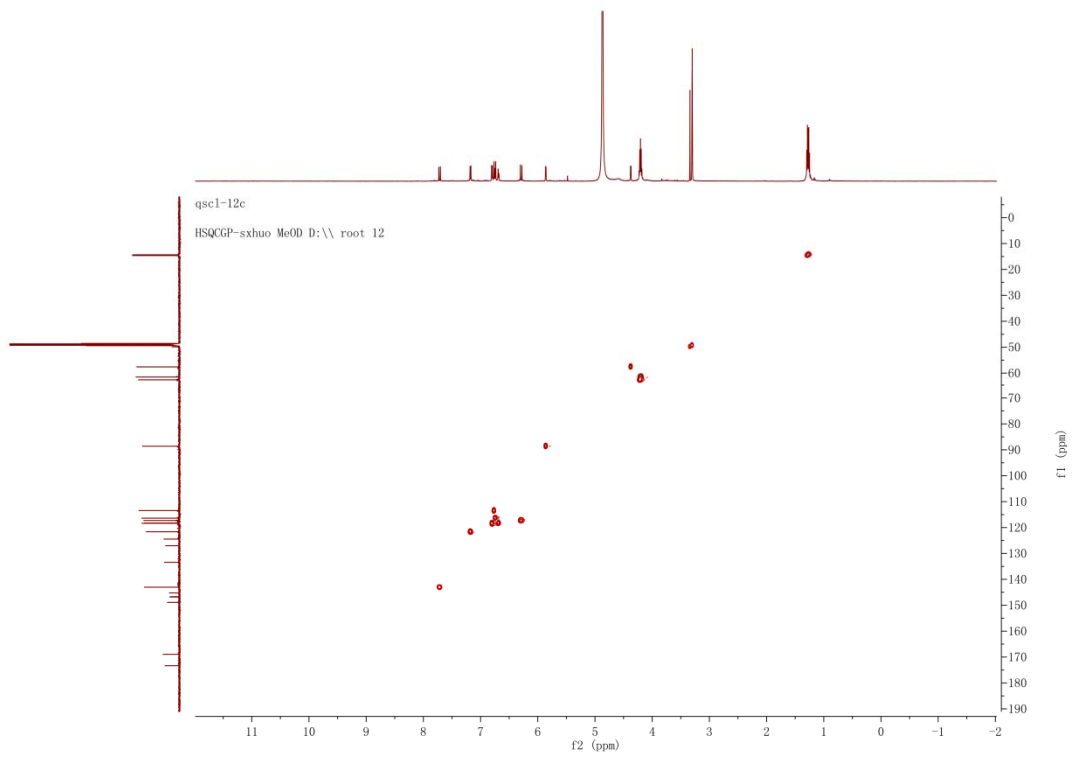


图 4 化合物 1 在氘代甲醇中的 HMBC 谱

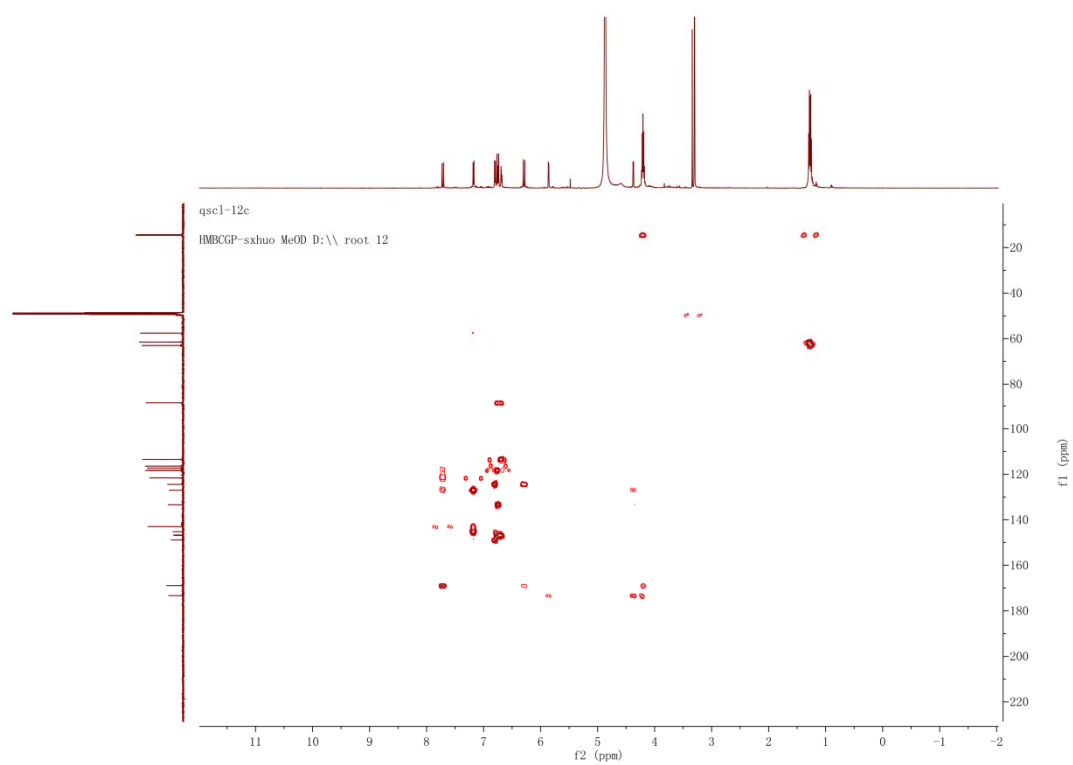


图 5 化合物 1 在氘代甲醇中的 ^1H - ^1H COSY 谱

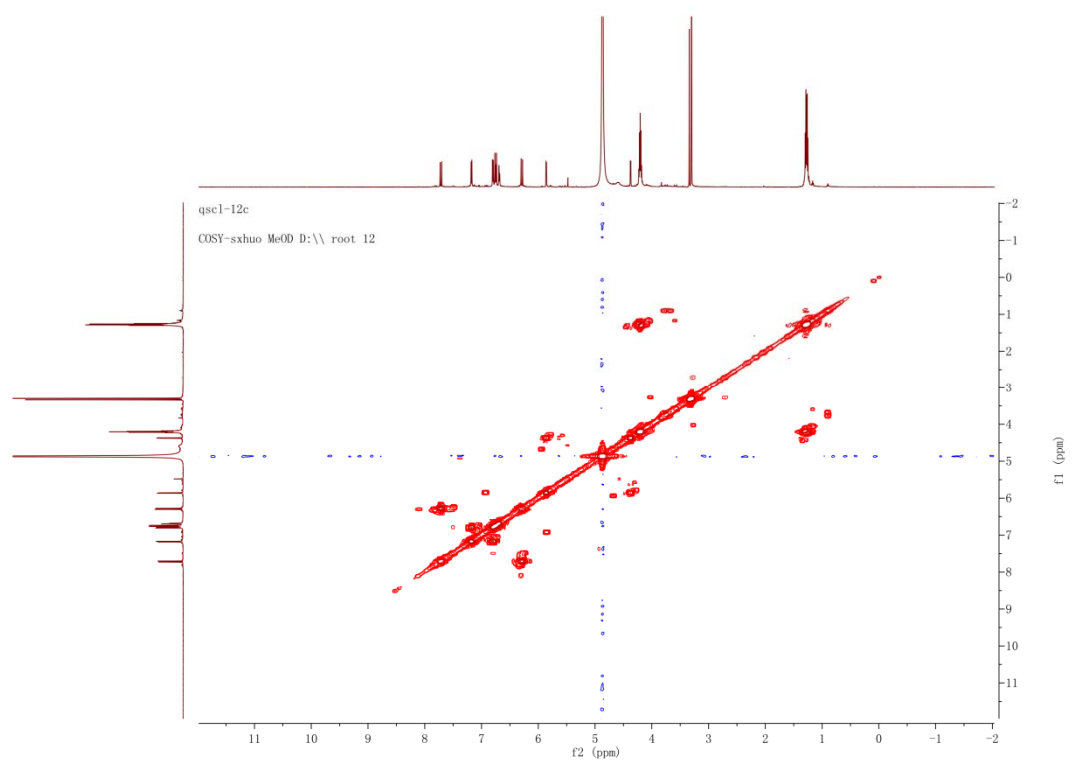


图 6 化合物 1 在氘代甲醇中的 ROESY 谱

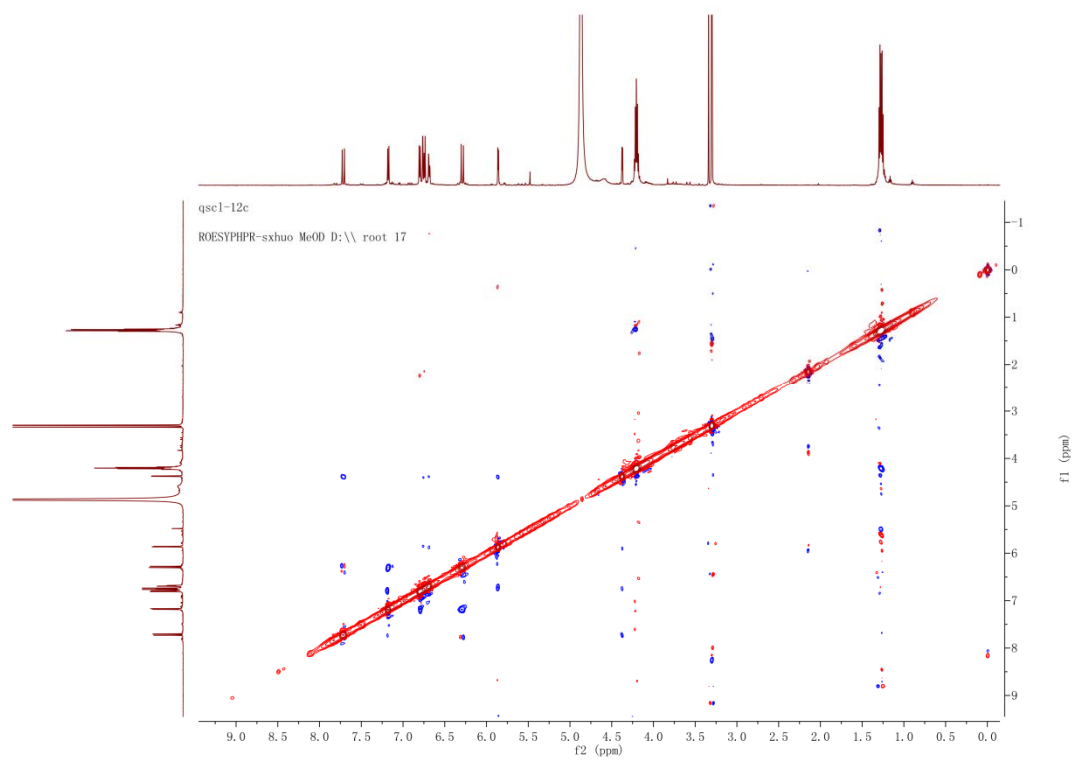


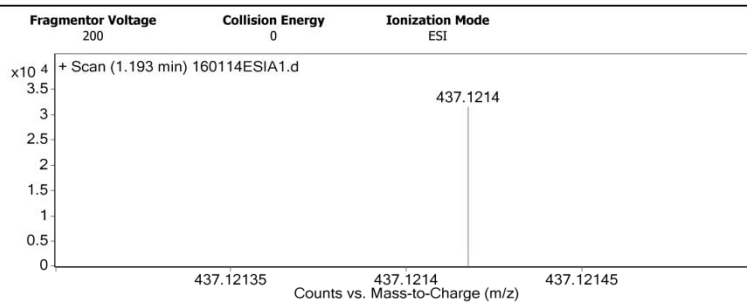
图 7 化合物 1 的高分辨质谱

Qualitative Analysis Report

Data Filename	160114ESIA1.d	Sample Name	qscd-12c
Sample Type	Sample	Position	
Instrument Name	Agilent G6230 TOF MS	User Name	KIB
Acq Method	ESI.m	Acquired Time	1/14/2016 2:50:02 PM
IRM Calibration Status	Success	DA Method	Default.m
Comment			

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

User Spectra



Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
121.0509	1	44777.22		
232.1119	1	60764.51		
233.1148	1	9446.49		
274.2738		8271.41		
301.1406		8627.94		
330.3369	1	12845.95		
437.1214	1	31514.45	C22 H22 Na O8	M+
851.2513	1	10064.86		
922.0098	1	55923.52		
923.0129	1	8965.4		

Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	0	200
H	0	400
O	0	15
Na	1	1

Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	Mz	Diff.(mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C22 H22 Na O8	437.1212	437.1214	-0.2	0.4	11.5

--- End Of Report ---

图 8 化合物 2 在氘代甲醇中的 $^1\text{H-NMR}$ 谱

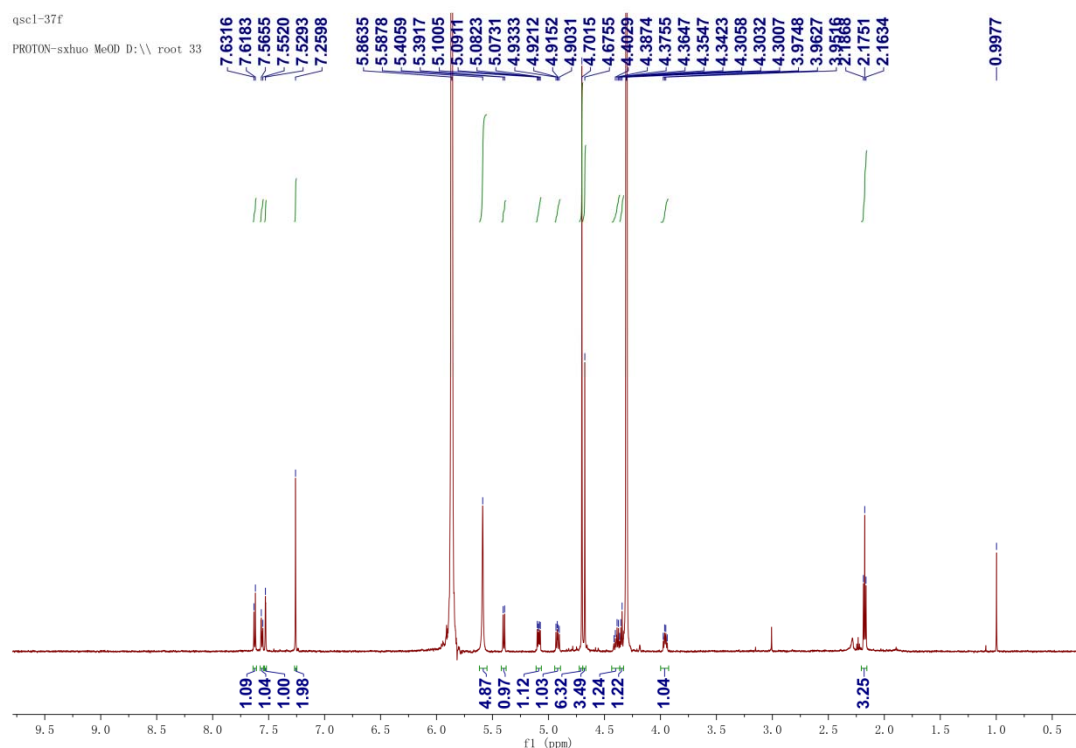


图 9 化合物 2 在氘代甲醇中的 $^{13}\text{C-NMR}$ 谱

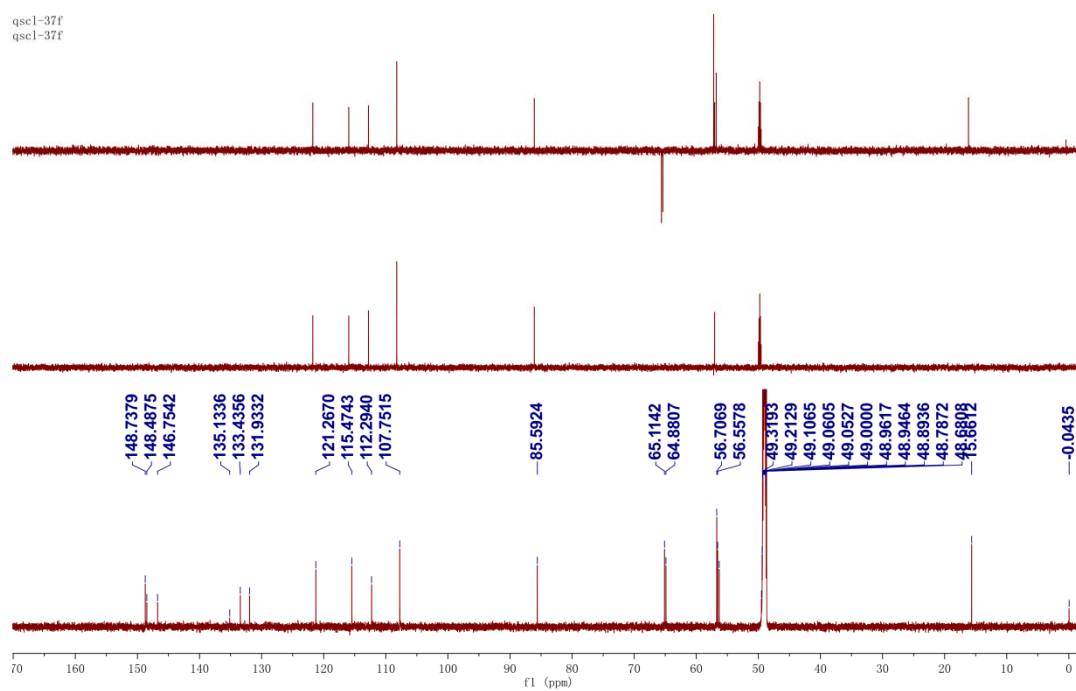


图 10 化合物 2 在氘代甲醇中的 HSQC 谱

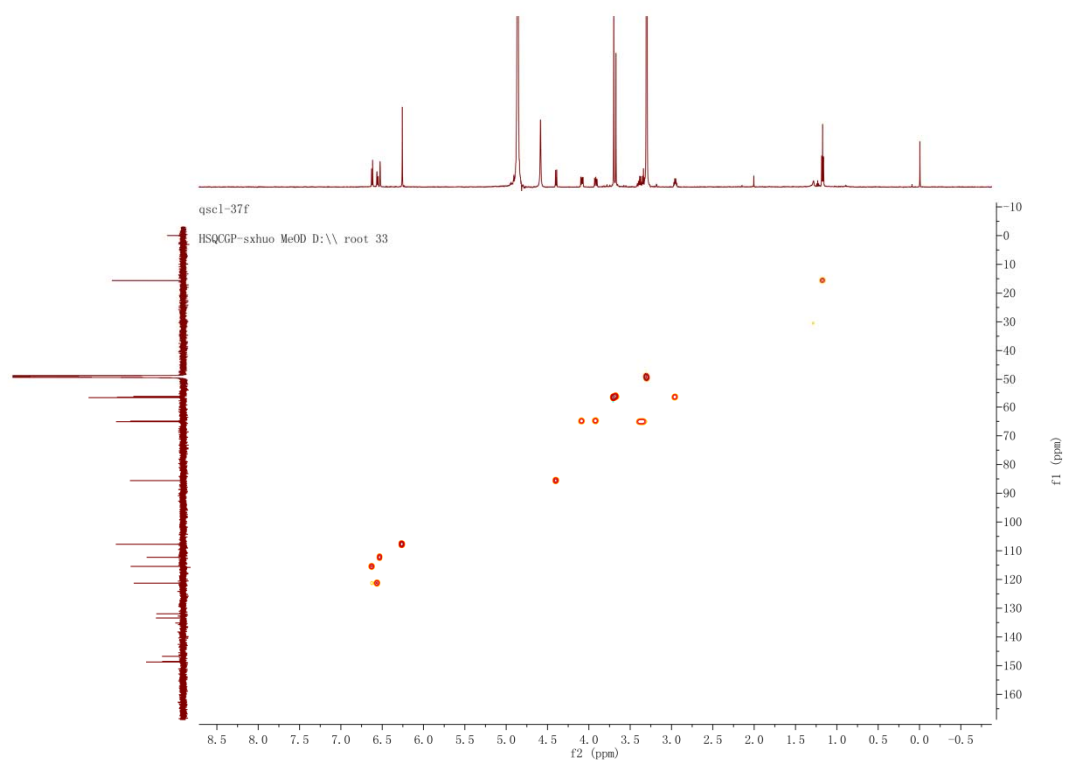


图 11 化合物 2 在氘代甲醇中的 HMBC 谱

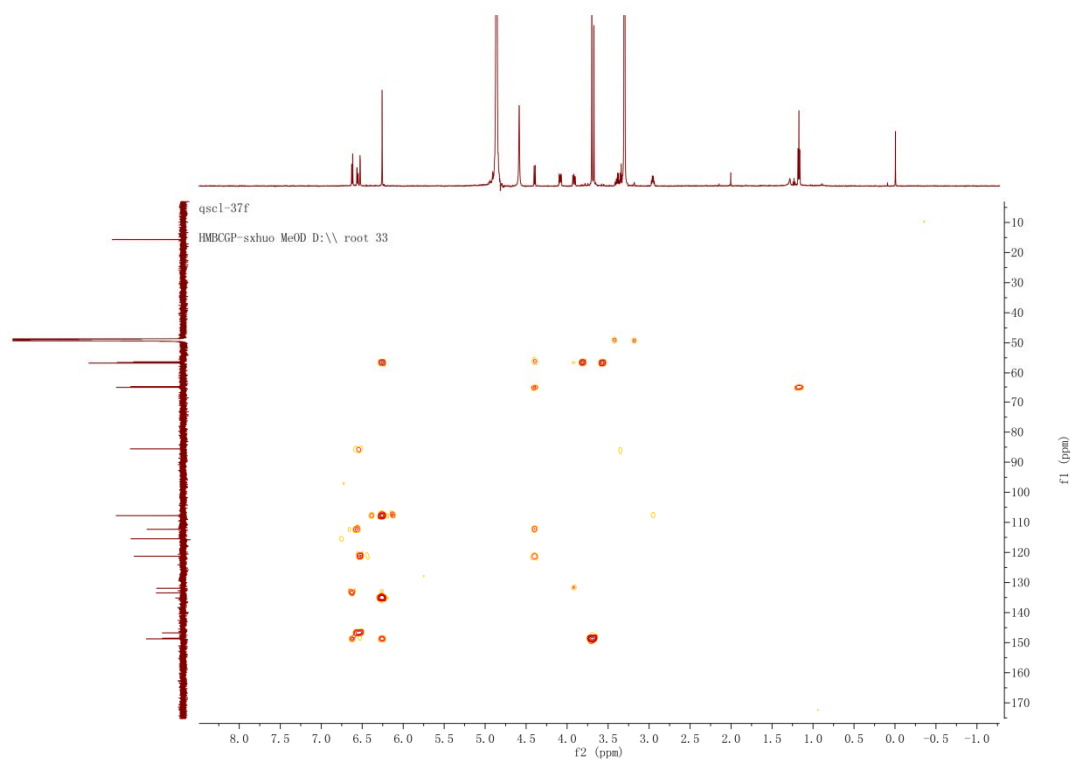


图 12 化合物 2 在氘代甲醇中的 ^1H - ^1H COSY 谱

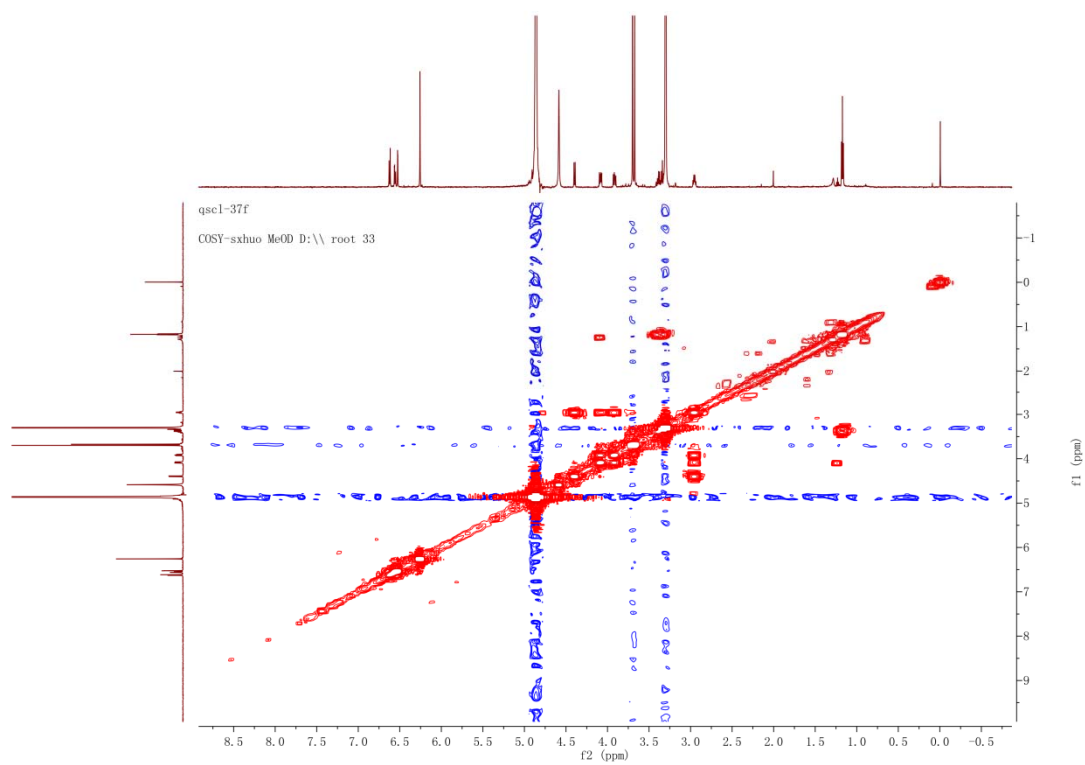


图 13 化合物 2 在 DMSO 中的 ROESY 谱

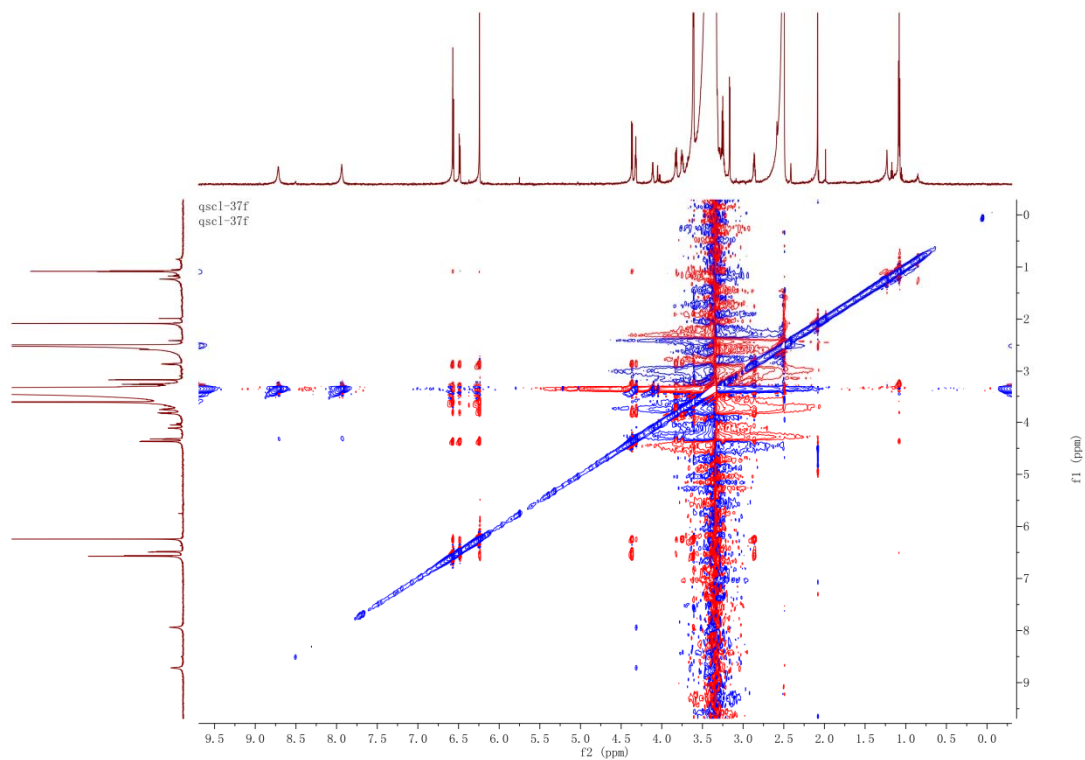


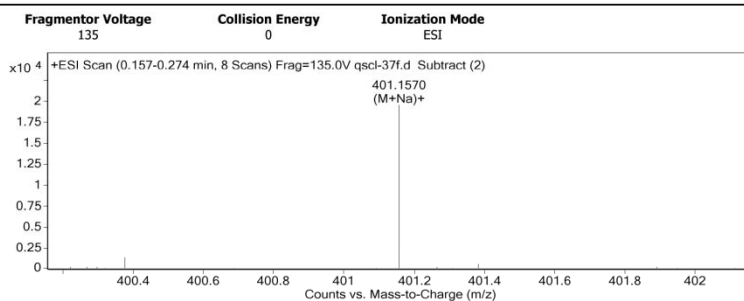
图 14 化合物 2 的高分辨质谱

Qualitative Analysis Report

Data Filename	qscl-37f.d	Sample Name	qscl-37f
Sample Type	Sample	Position	P1-F1
Instrument Name	Instrument 1	User Name	
Acq Method	SIBU.m	Acquired Time	8/16/2016 9:35:28 AM
IRM Calibration Status	Success	DA Method	ESI+.m
Comment			

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

User Spectra



Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
102.1278	1	28543.66		
274.2744	1	63959.22		
302.3059	1	26988.31		
318.3006	1	43067.45		
330.3371	1	41844.74		
336.1233	1	21154.07		
401.157	1	19549.72	C20 H26 O7	(M+Na)+
453.1676	1	24213.2		

Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	3	60
H	0	120
O	0	30

Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	CalculatedMz	Mz	Diff. (mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C20 H26 O7	378.1679	401.1571	401.1570	0.1	0.3	8.0000

--- End Of Report ---