

# Supporting Information

## 牛虻化学成分研究

庄小翠<sup>1,2</sup>, 晏永明<sup>2</sup>, 罗奇<sup>2</sup>, 邸磊<sup>2</sup>, 程永现<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>云南中医学院, 昆明 650500; <sup>2</sup>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 在氘代甲醇中的 $^{13}\text{C-NMR}$ 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 中的 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  $^1\text{H-NMR}$  谱

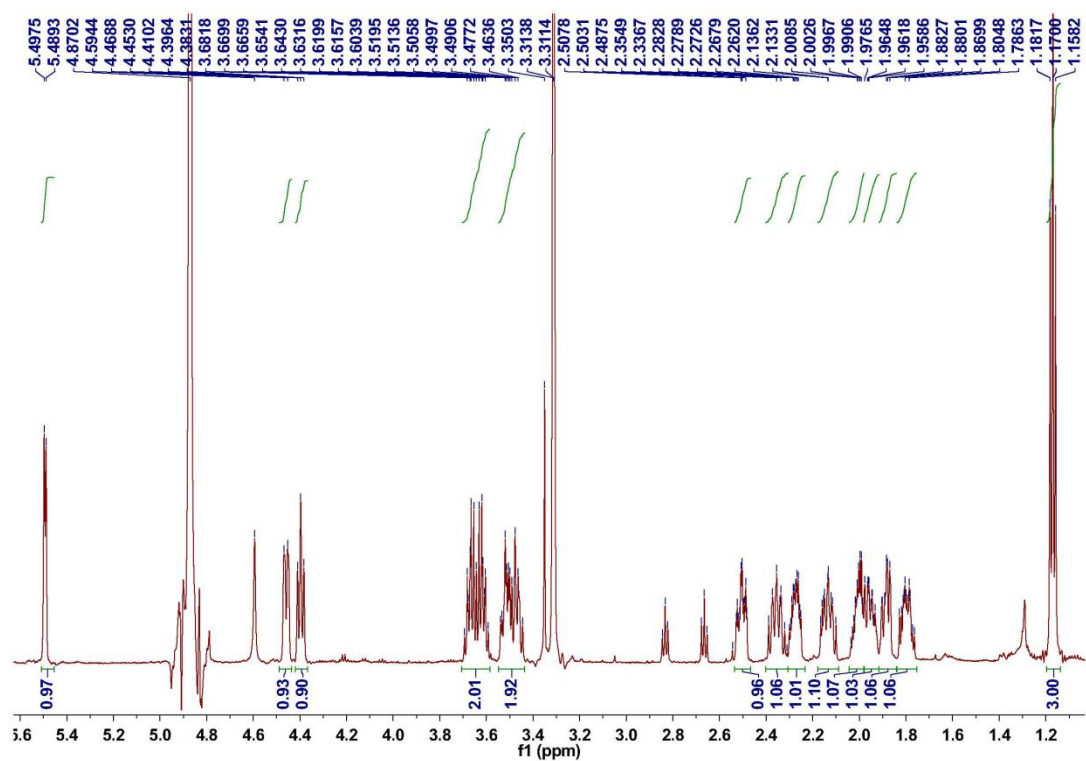
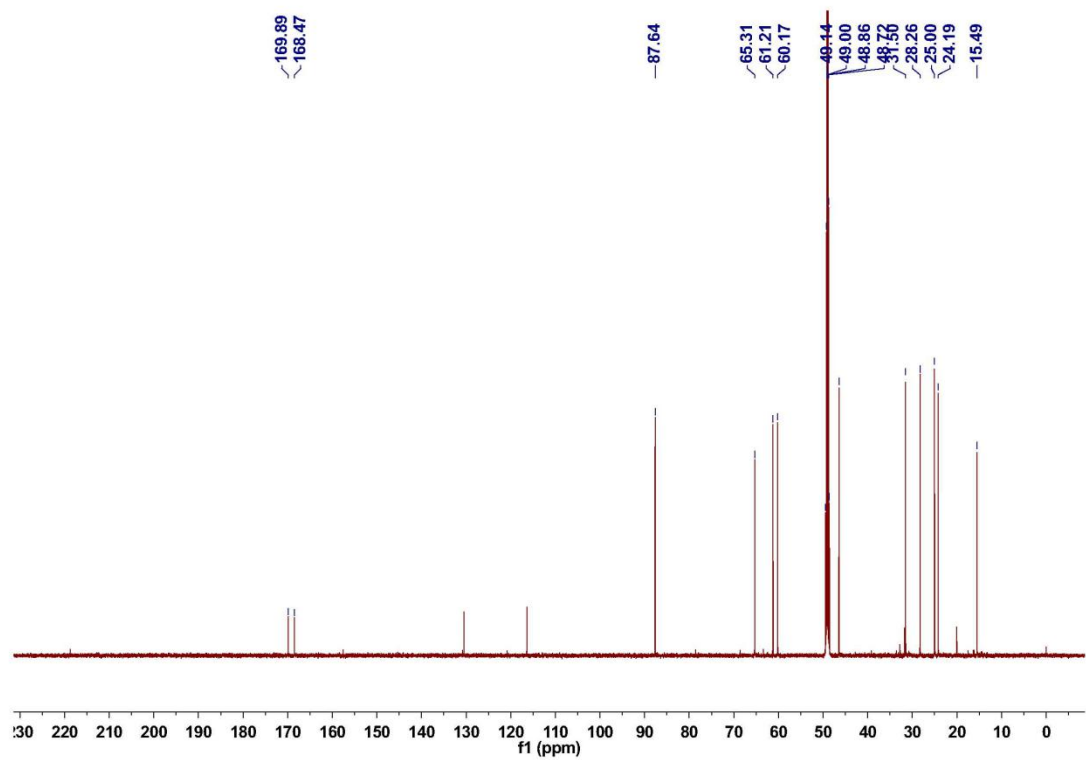


图2 化合物 1 在氘代甲醇中的  $^{13}\text{C-NMR}$  谱



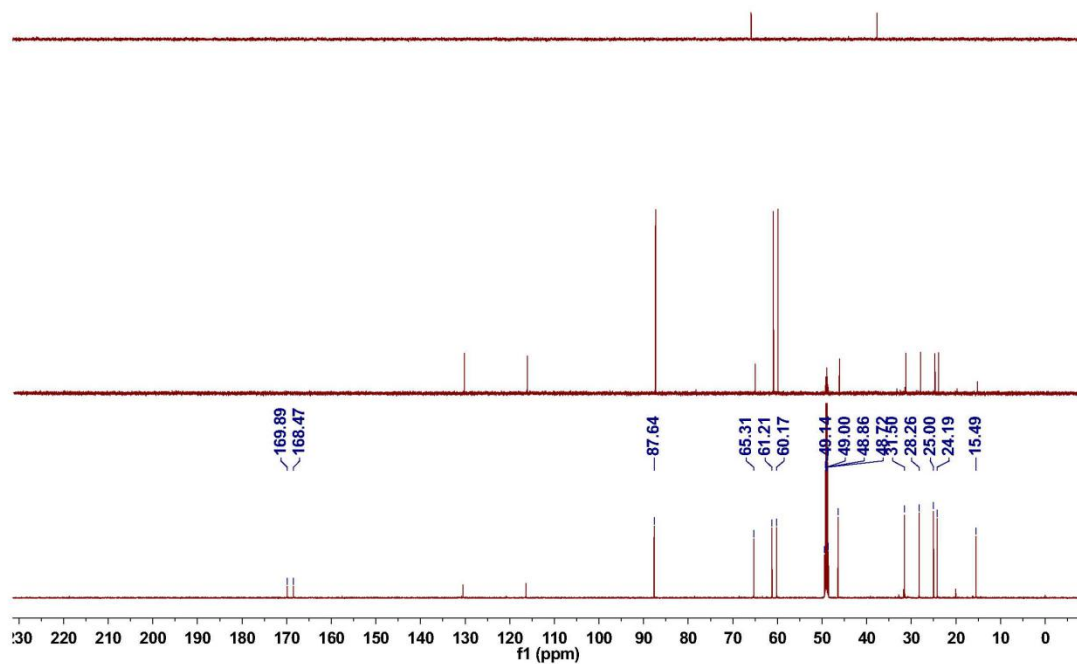


图3 化合物 1 在氘代甲醇中的 HSQC 谱

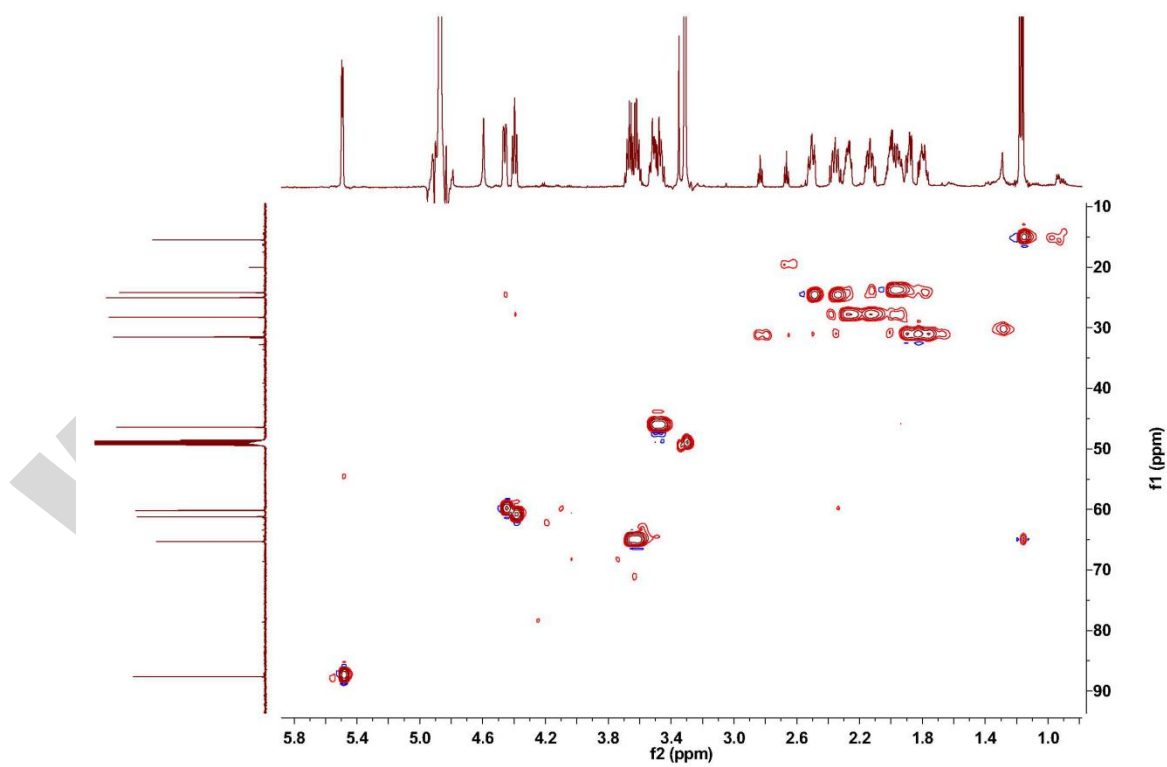


图 4 化合物 1 在氘代甲醇中的 HMBC 谱

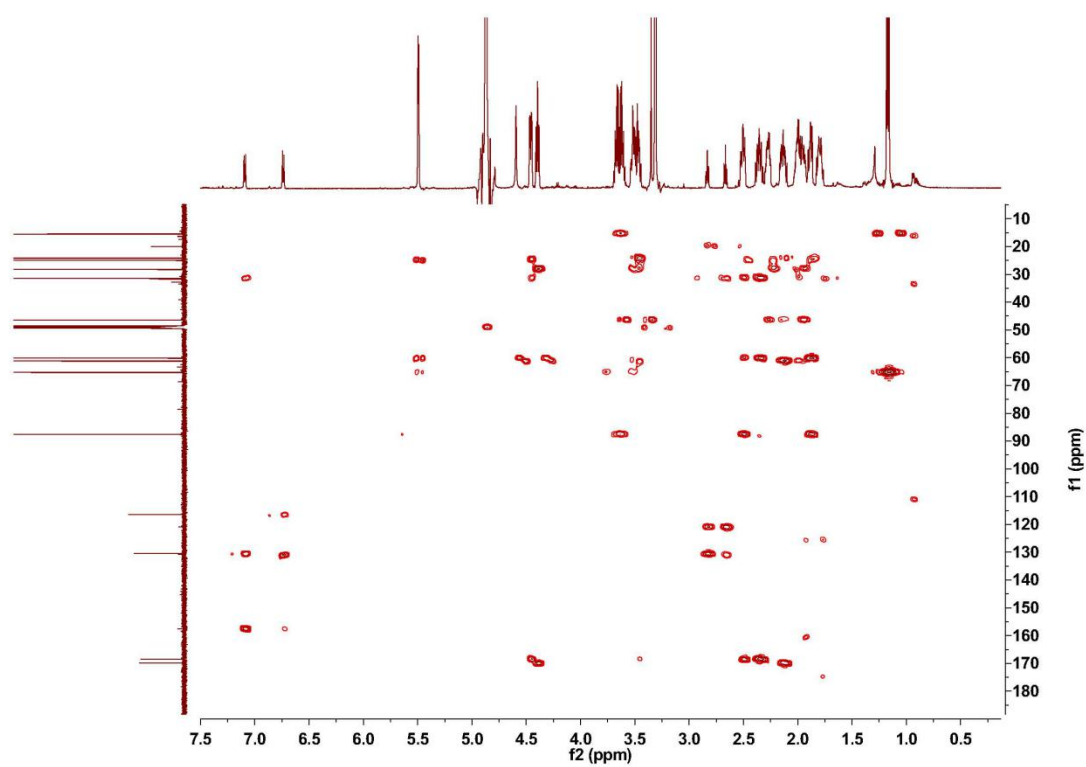


图 5 化合物 1 在氘代甲醇中的  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY 谱

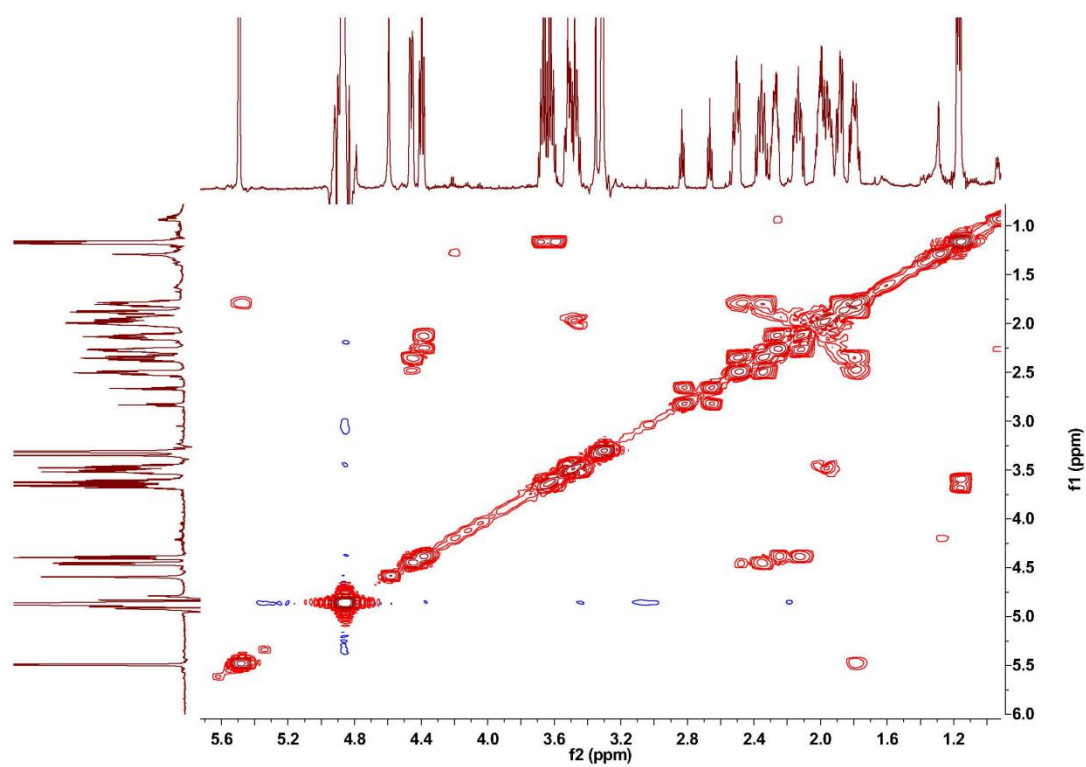


图 6 化合物 1 在氘代甲醇中的 ROESY 谱

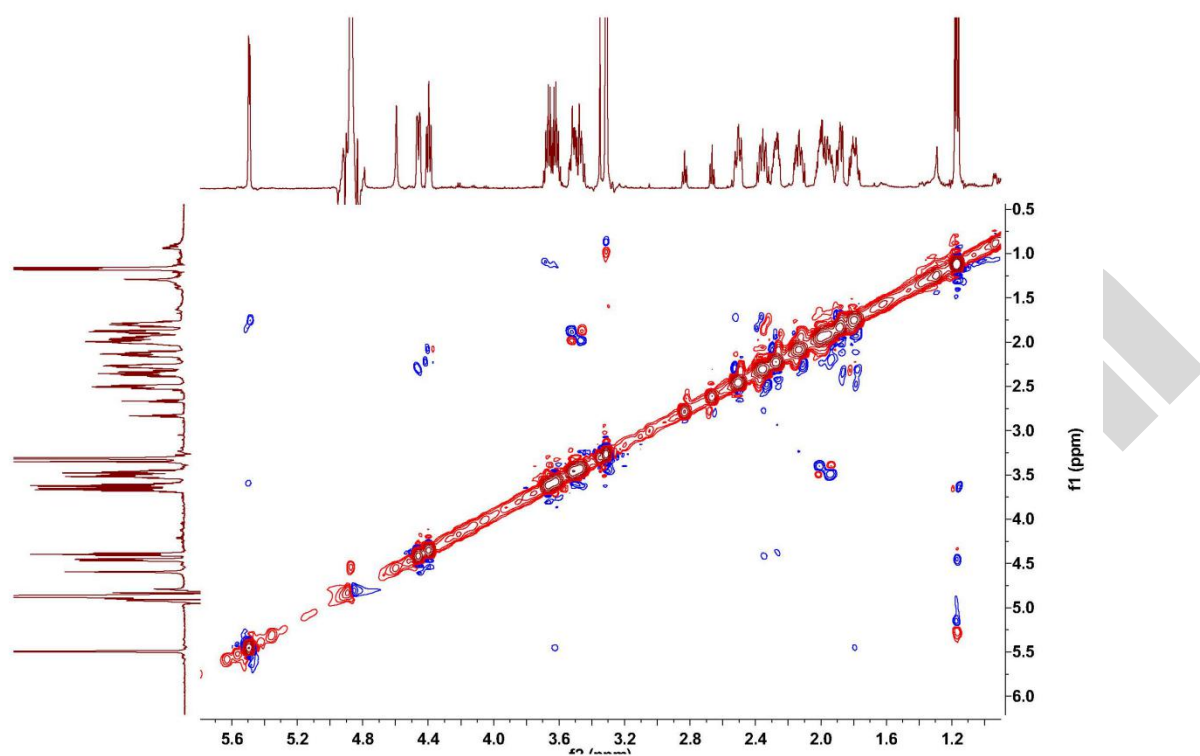


图 7 化合物 1 的高分辨质谱

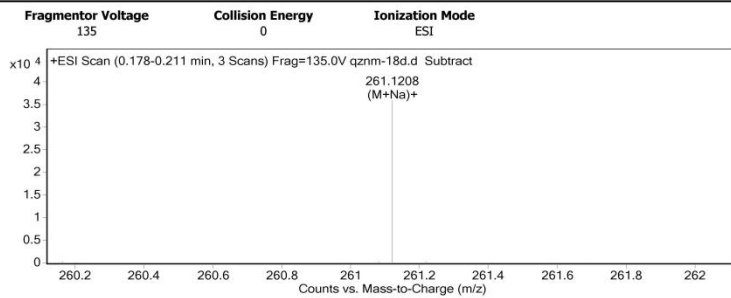


## Qualitative Analysis Report

<b>Data Filename</b>	qznm-18d.d	<b>Sample Name</b>	qznm-18d
<b>Sample Type</b>	Sample	<b>Position</b>	P1-A9
<b>Instrument Name</b>	Instrument 1	<b>User Name</b>	
<b>Acq Method</b>	SIBU.m	<b>Acquired Time</b>	8/22/2016 2:08:31 PM
<b>IRM Calibration Status</b>	Success	<b>DA Method</b>	ESI+.m
<b>Comment</b>			

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

### User Spectra



### Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
165.1023	1	12167.36		
193.0971	1	8127.96		
239.1388	1	12160.2		
261.1208	1	35940.18	C12 H18 N2 O3	(M+Na)+
277.1155	1	7233.19		
499.2528	1	9228.92		
657.4437	1	8164.93		
662.3988	1	11044.64		

### Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	3	60
H	0	120
O	0	30
N	0	10

### Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	CalculatedMz	Mz	Diff. (mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C12 H18 N2 O3	238.1317	261.1210	261.1208	0.1	0.2	5.0000

--- End Of Report ---

图 8 化合物 2 在氘代甲醇中的  $^1\text{H-NMR}$  谱

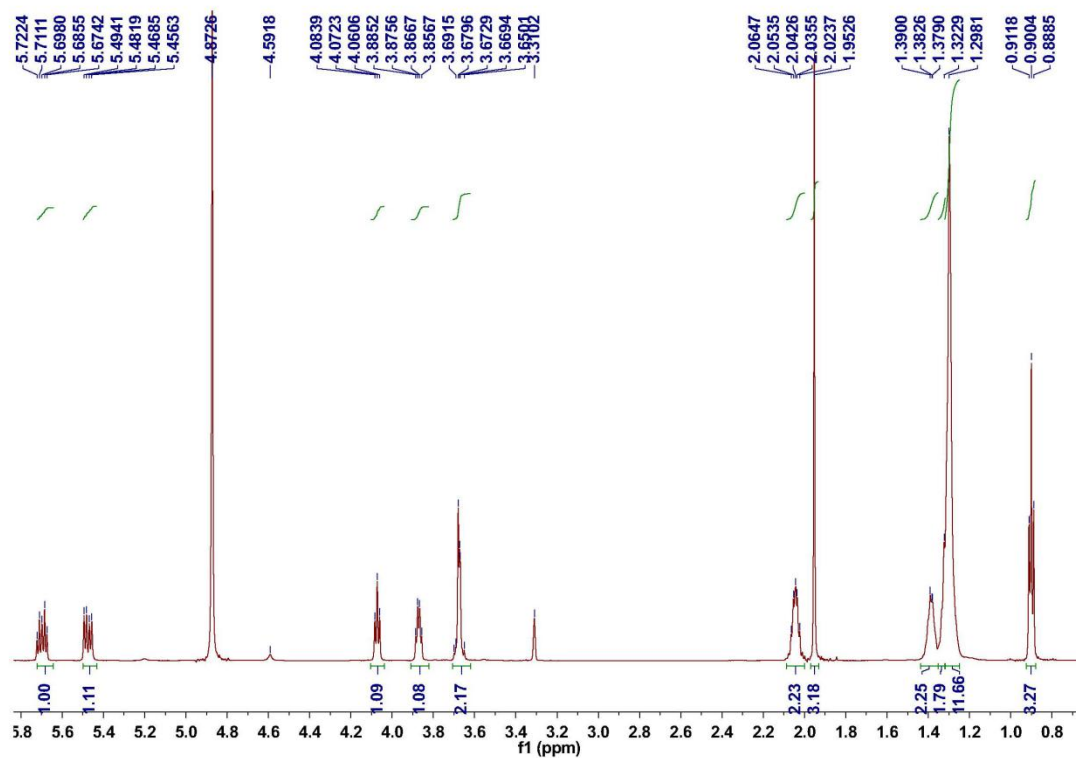
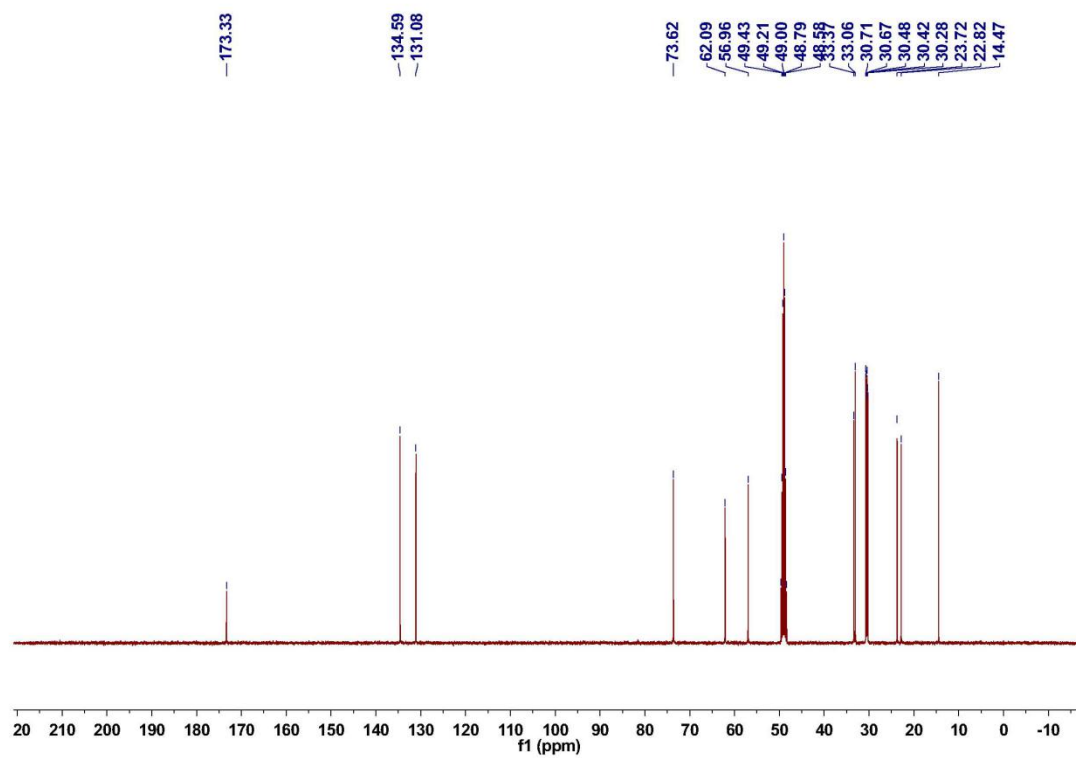


图 9 化合物 2 在氘代甲醇中的  $^{13}\text{C-NMR}$  谱





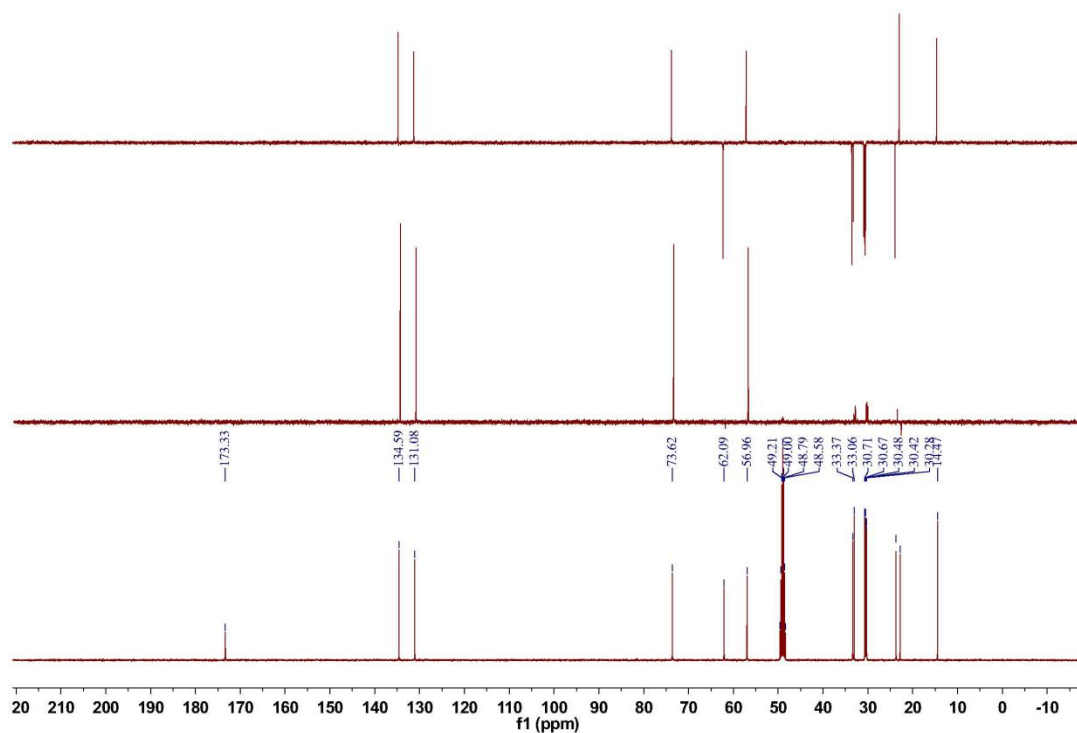


图 10 化合物 2 在氘代甲醇中的 HSQC 谱

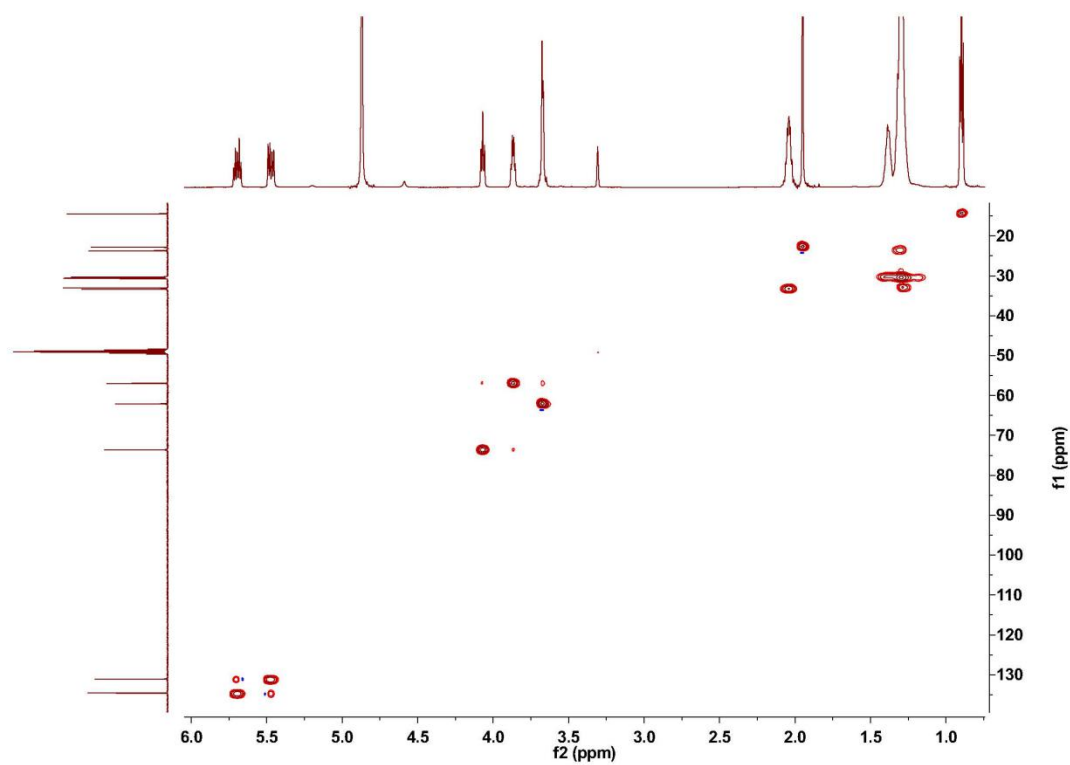


图 11 化合物 2 在氘代甲醇中的 HMBC 谱

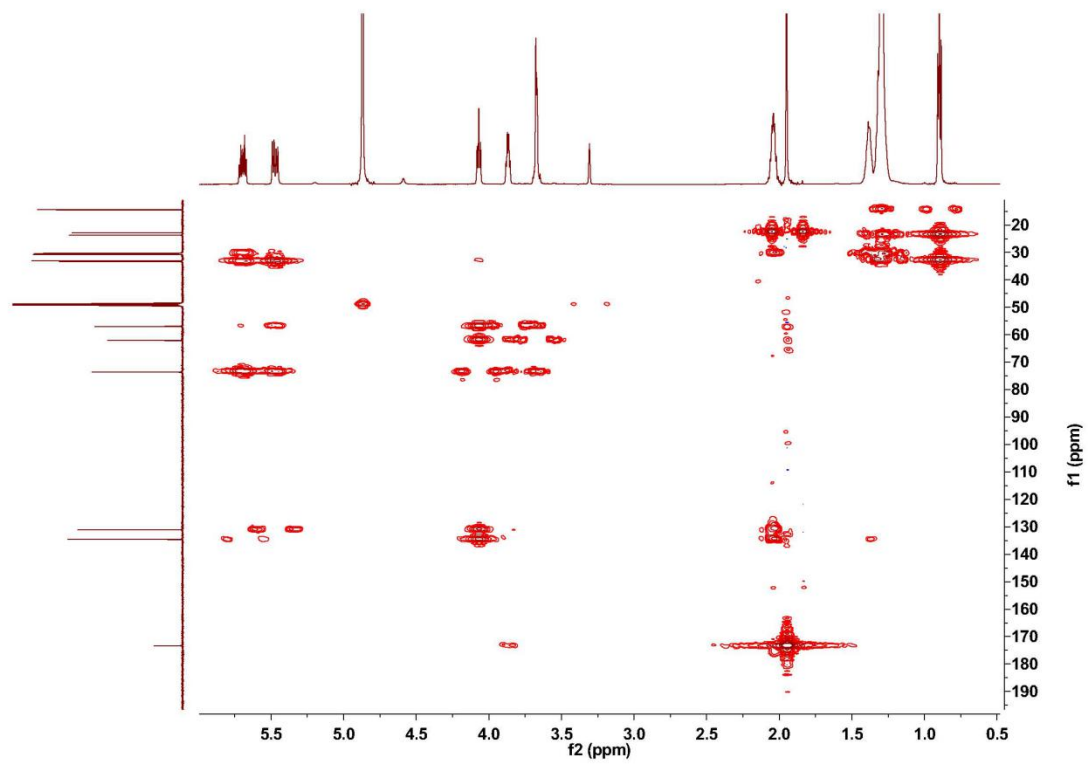


图 12 化合物 2 在氘代甲醇中的  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY 谱

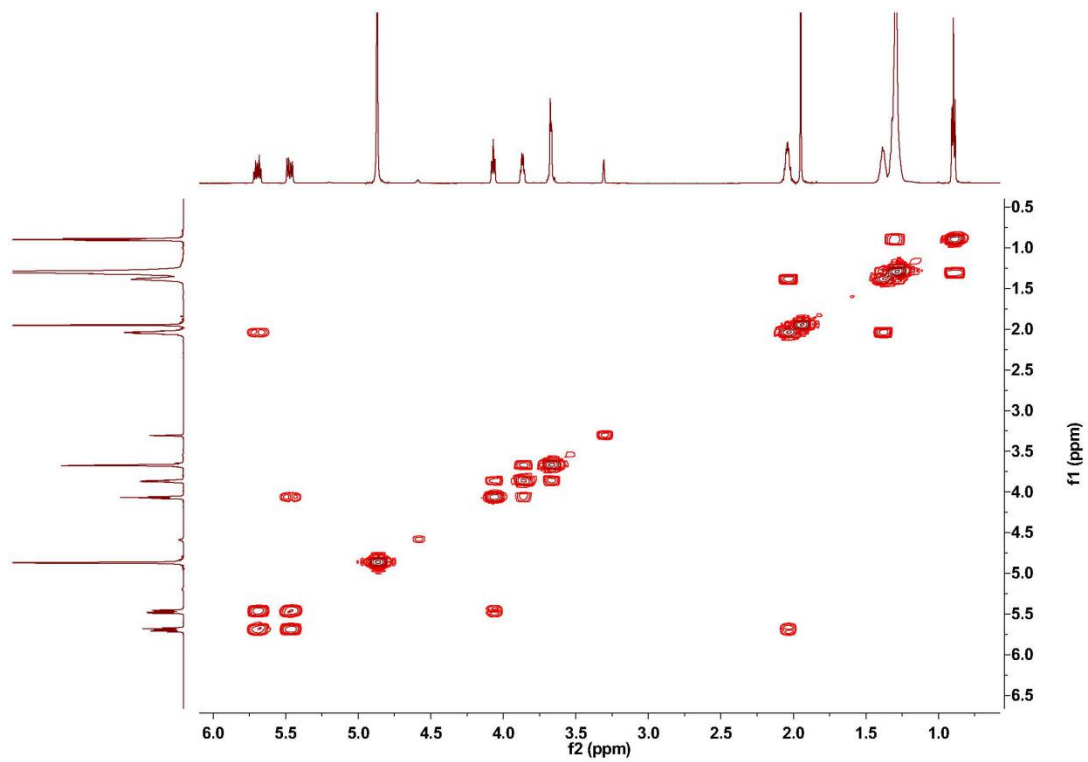


图 13 化合物 2 在 DMSO 中的 ROESY 谱

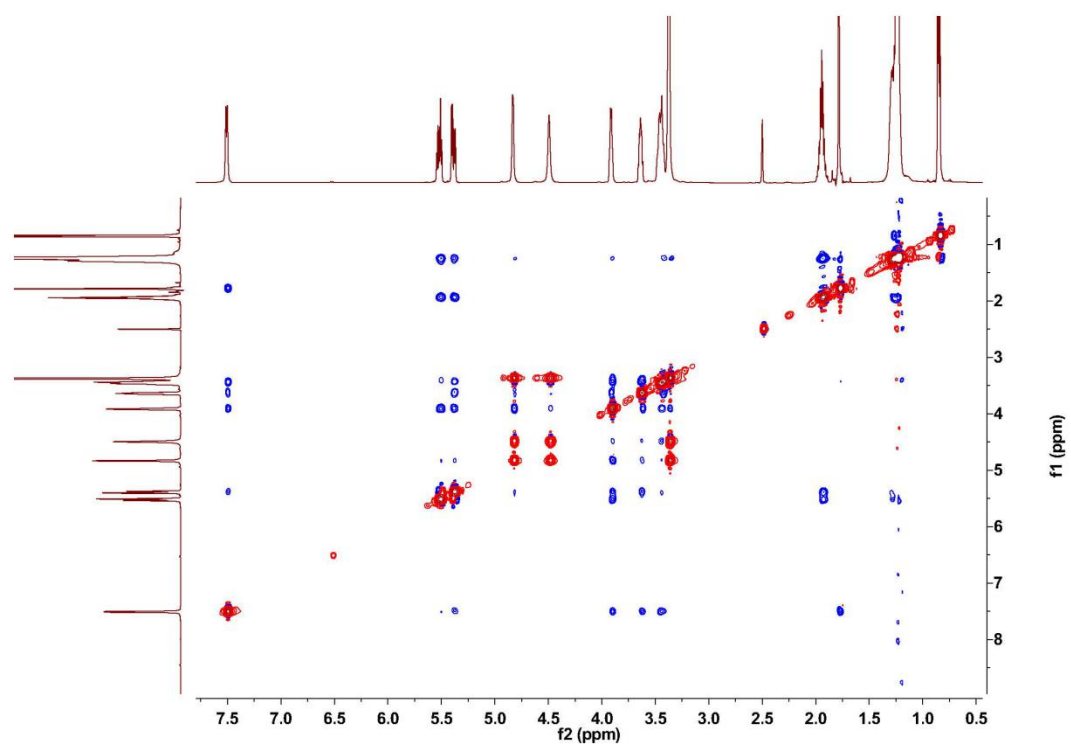


图 14 化合物 2 的高分辨质谱

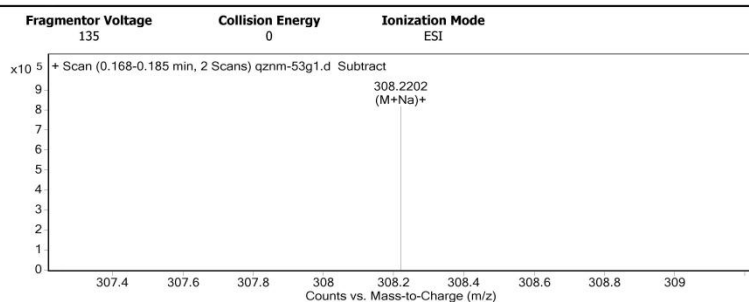


## Qualitative Analysis Report

<b>Data Filename</b>	qznm-53g1.d	<b>Sample Name</b>	qznm-53g1
<b>Sample Type</b>	Sample	<b>Position</b>	P1-A9
<b>Instrument Name</b>	Instrument 1	<b>User Name</b>	
<b>Acq Method</b>	SIBU.m	<b>Acquired Time</b>	5/24/2016 3:18:15 PM
<b>IRM Calibration Status</b>	Success	<b>DA Method</b>	ESI+.m
<b>Comment</b>			

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

### User Spectra



### Peak List

m/z	z	Abund	Formula	Ion
208.2061	1	209727.63		
268.2275	1	2309115.5		
269.2309	1	362897.78		
286.2381	1	615830		
308.2202	1	820692.88	C16 H31 N O3	(M+Na)+
324.1939	1	209446.75		
593.4511	1	1278405.63		
594.4545	1	399764.5		

### Formula Calculator Element Limits

Element	Min	Max
C	3	60
H	0	120
O	0	30
N	0	5
S	0	5

### Formula Calculator Results

Formula	CalculatedMass	CalculatedMz	Mz	Diff. (mDa)	Diff. (ppm)	DBE
C16 H31 N O3	285.2304	308.2196	308.2202	-0.6	-1.9	2.0000

--- End Of Report ---