

肉豆蔻中二芳基丙烷类抗炎活性成分（补充数据）

李大山，曾天艳，马 莎，王文静*，邵立东*

云南中医药大学中药学院云南省南药资源可持续利用重点实验室，昆明 650500

目录

图 S1 化合物 1 的 ^1H NMR 谱.....	2
图 S2 化合物 1 的 ^{13}C NMR (DEPT) 谱.....	3
图 S3 化合物 1 的 HSQC 谱.....	4
图 S4 化合物 1 的 ^1H - ^1H COSY 谱.....	5
图 S5 化合物 1 的 HMBC 谱.....	6
图 S6 化合物 1 的 HR-EI-MS 谱.....	7
图 S7 化合物 1 的 IR 谱.....	8
图 S8 化合物 1 的 UV 谱.....	9

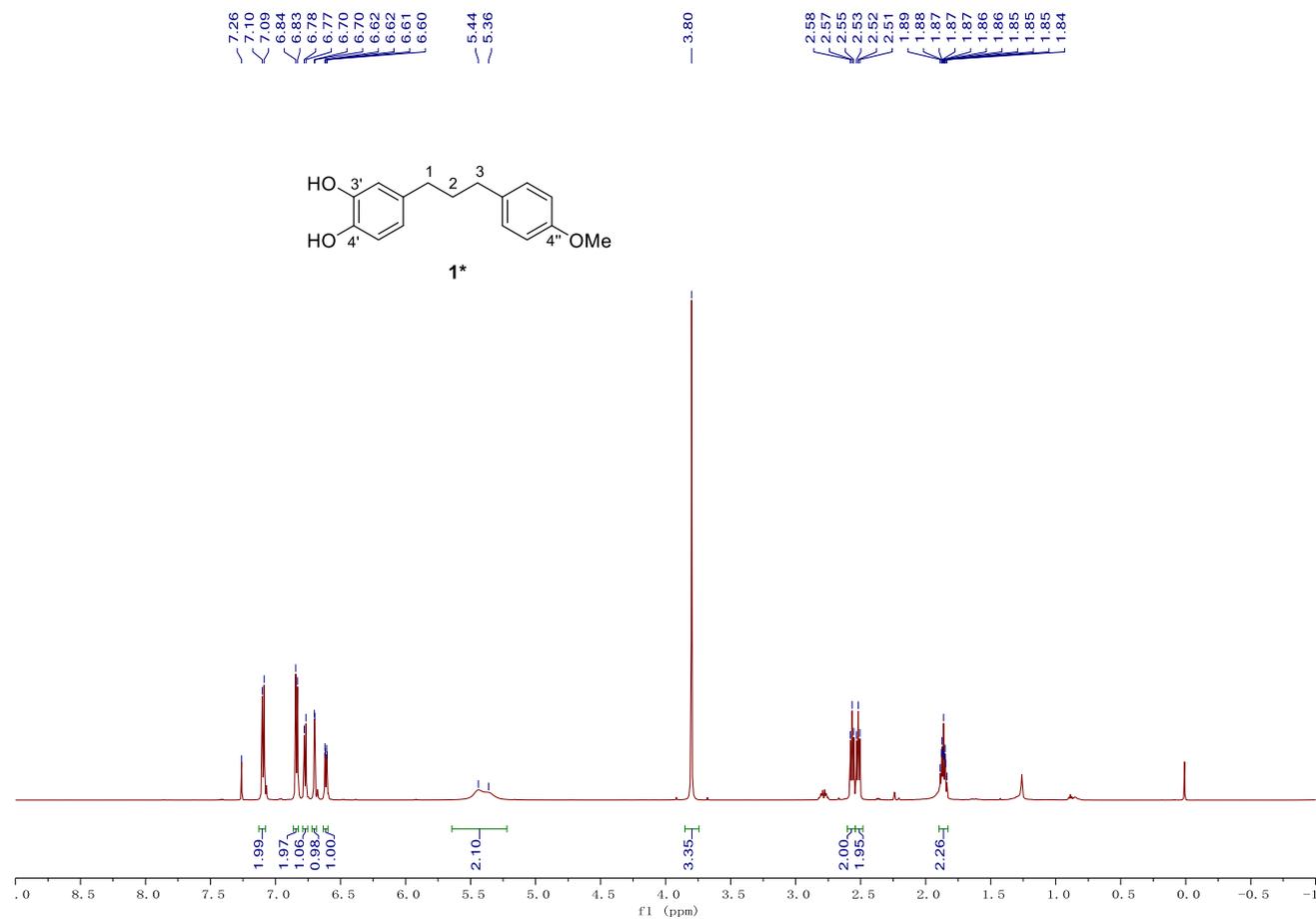


图 S1 化合物 1 的 ¹H NMR 谱
 Fig. S1 ¹H NMR spectrum of compound 1

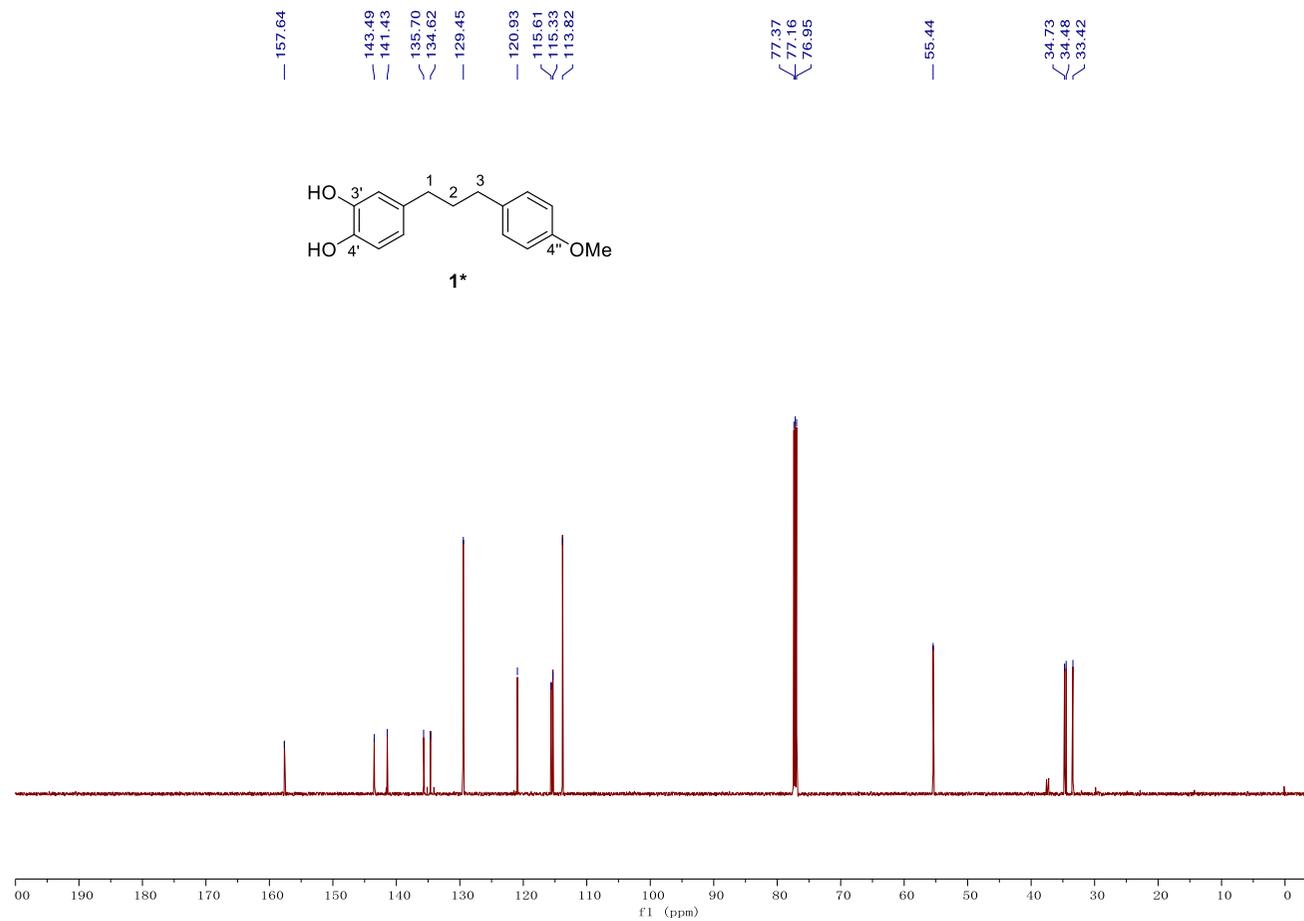


图 S2 化合物 1 的 ^{13}C NMR (DEPT) 谱
 Fig. S2 ^{13}C NMR (DEPT) spectrum of compound **1**

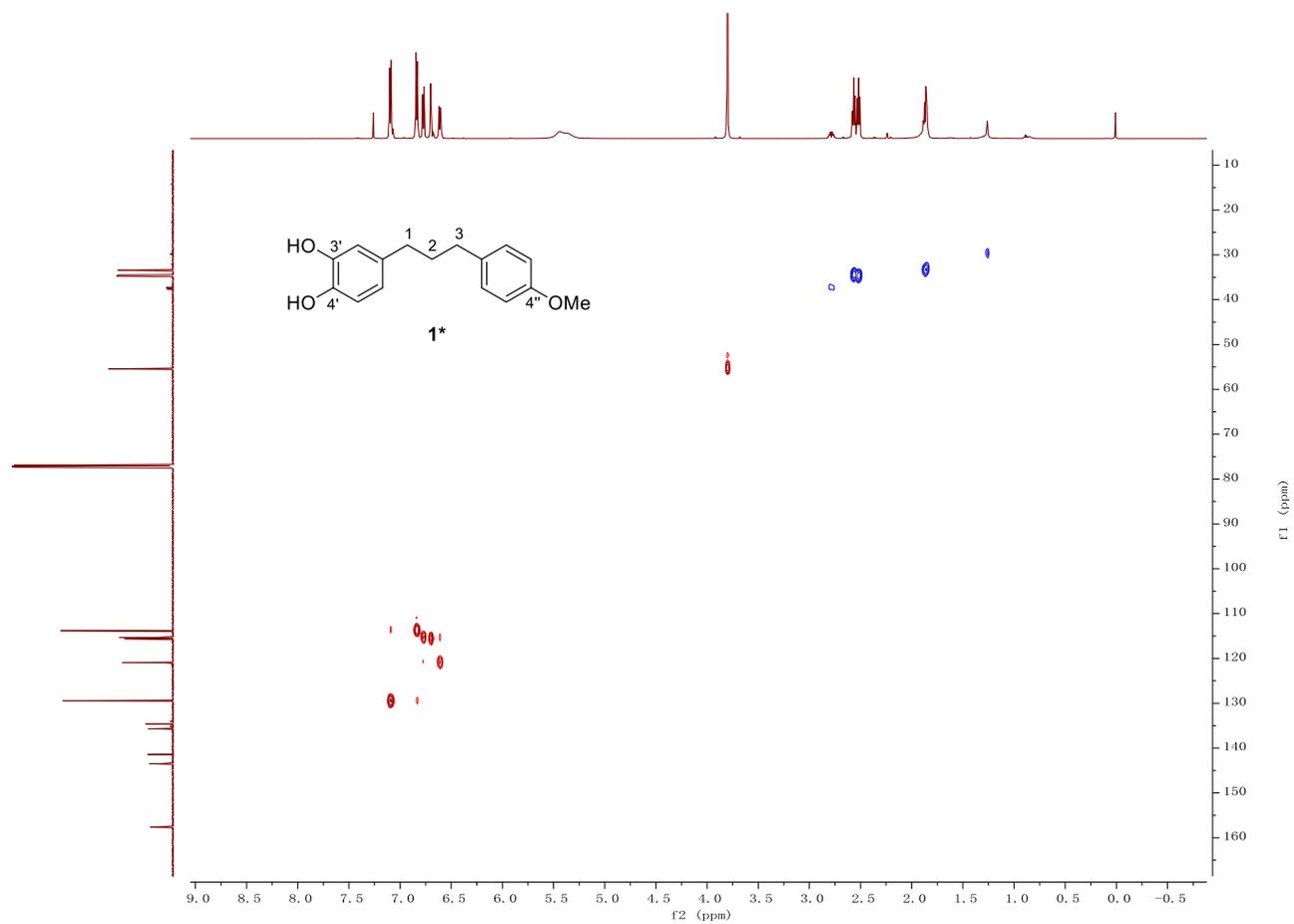


图 S3 化合物 1 的 HSQC 谱
Fig. S3 HSQC spectrum of compound 1

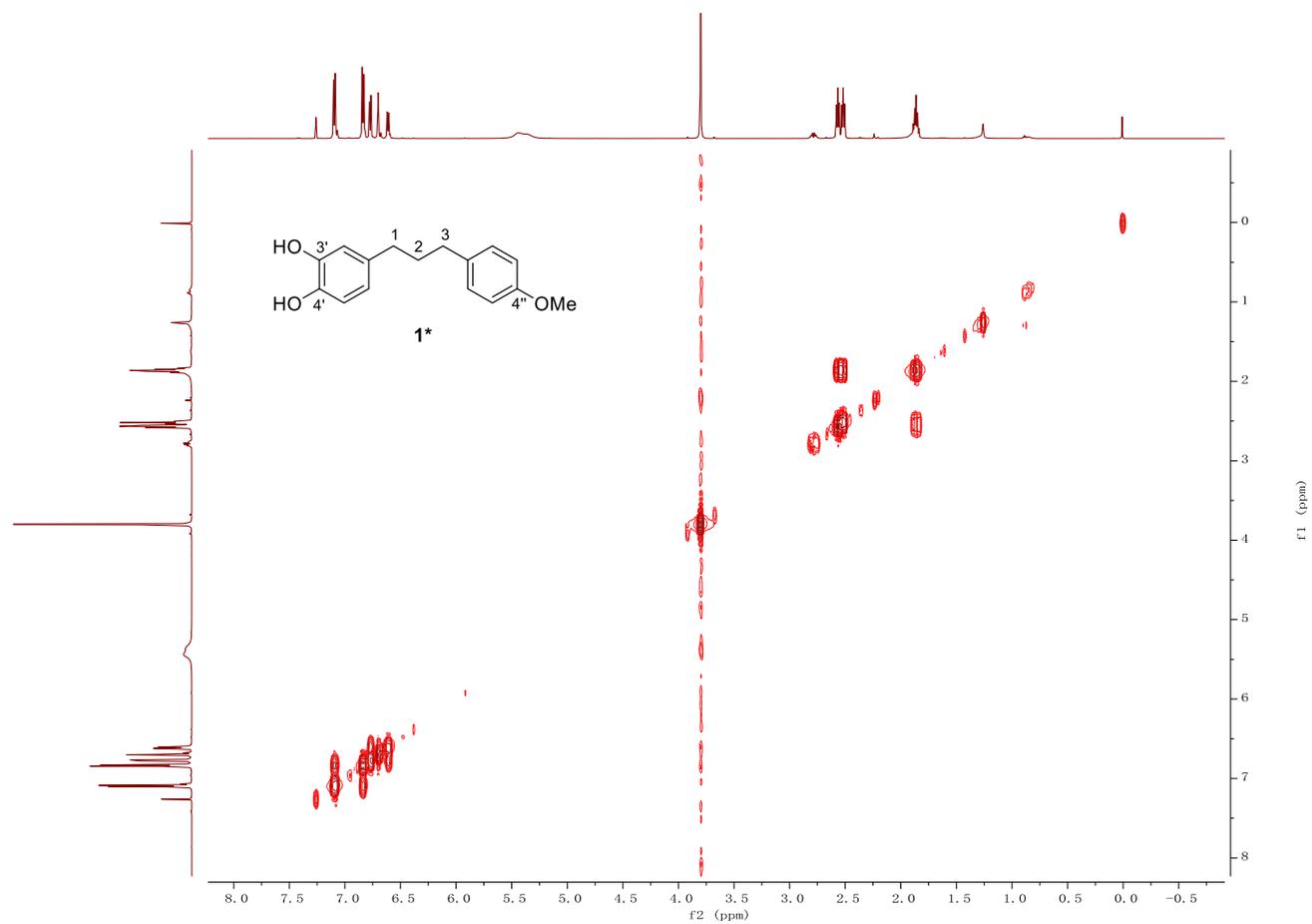


图 S4 化合物 1 的 ^1H - ^1H COSY 谱
Fig. S4 ^1H - ^1H COSY spectrum of compound **1**

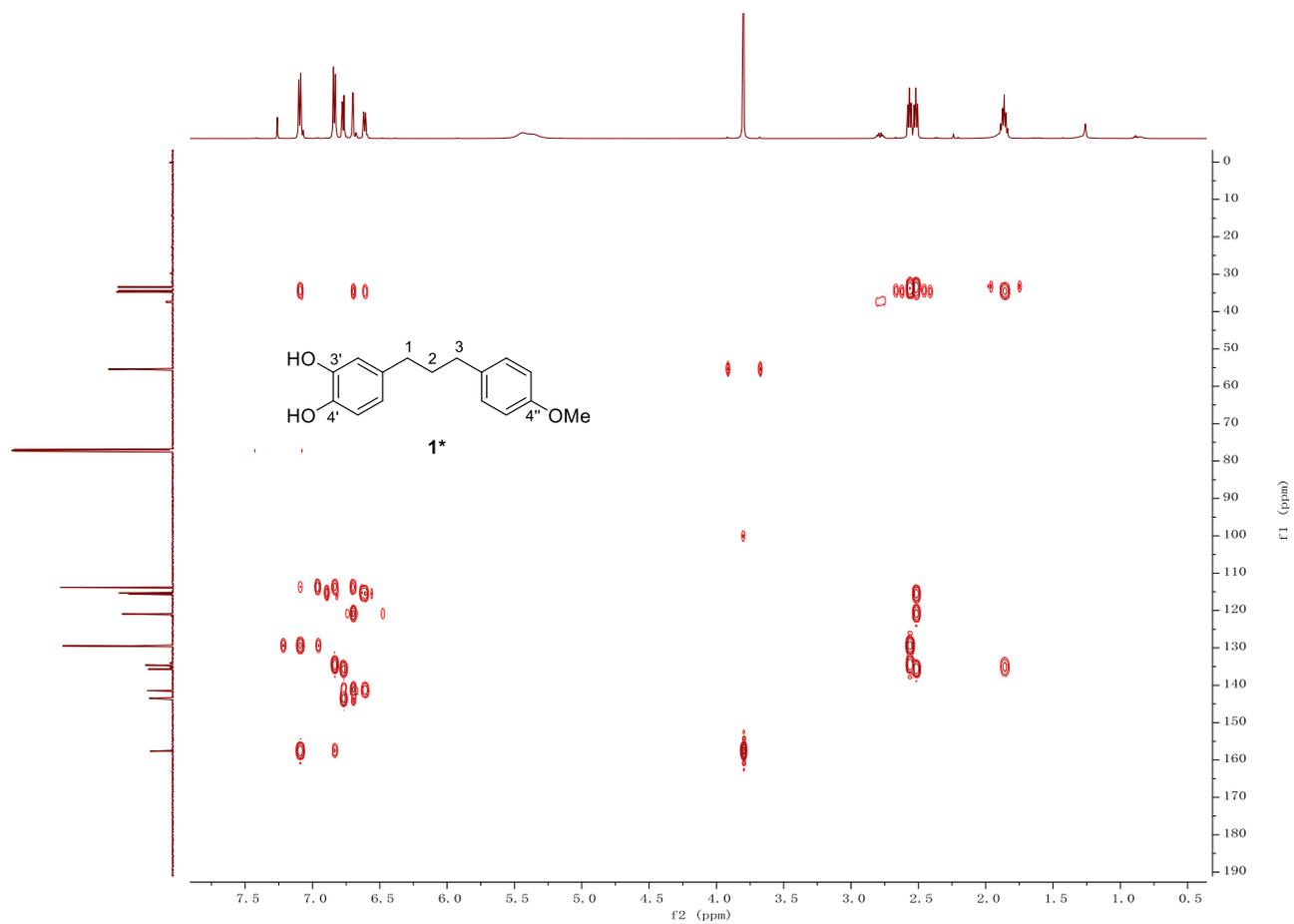


图 S5 化合物 1 的 HMBC 谱
 Fig. S5 HMBC spectrum of compound 1

Single Mass Analysis (displaying only valid results)

Tolerance = 10.0 PPM / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Selected filters: None

Monoisotopic Mass, Odd and Even Electron Ions

14 formula(e) evaluated with 1 results within limits (up to 50 closest results for each mass)

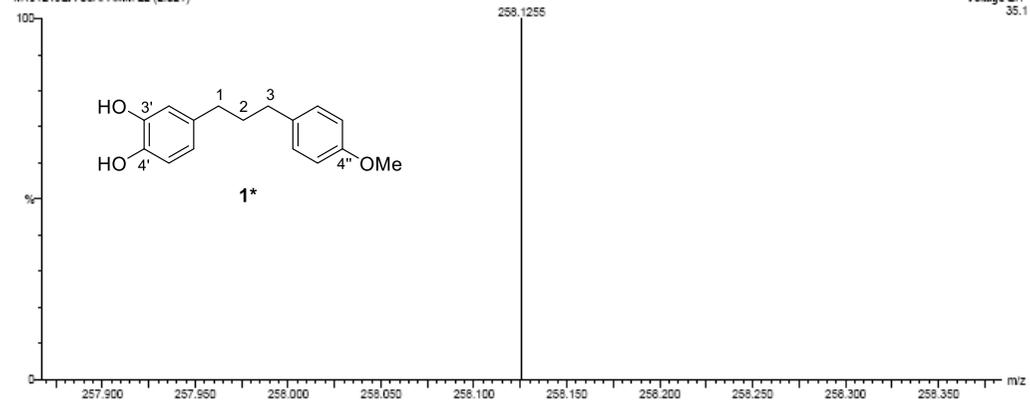
Elements Used:

C: 0-200 H: 0-400 O: 1-4

s181130B

M191219EA-03AFAMM 22 (2.021)

20-Dec-2019 14:51:07

Autospec
Voltage E1+
35.1

Minimum:				-1.5		
Maximum:	500.0	10.0		50.0		
Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	i-PIT	Formula
258.1255	258.1256	-0.1	-0.4	8.0	5546032.0	C16 H18 O3

图 S6 化合物 1 的 HR-EI-MS 谱

Fig. S6 HR-EI-MS spectrum of compound 1



Sample ID: liuyuanlie

Sample Scans: 8

Background Scans: 8

Resolution: 4

System Status: 良好

File Location: C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\Results\liuyuanlie_2019-09-18T21-39-30.a2r

Method

Name: C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLa

b\Methods\17中药兰茂.a2m

User: admin

Date/Time: 09/18/2019 9:39:30 下午

Range: 4000 - 400

Apodization: Happ-Genzel

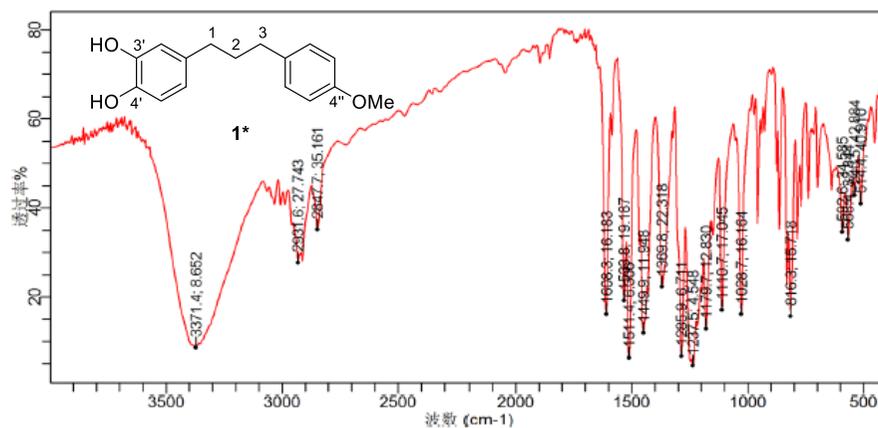


图 S7 化合物 1 的 IR 谱

Fig. S7 IR spectrum of compound 1

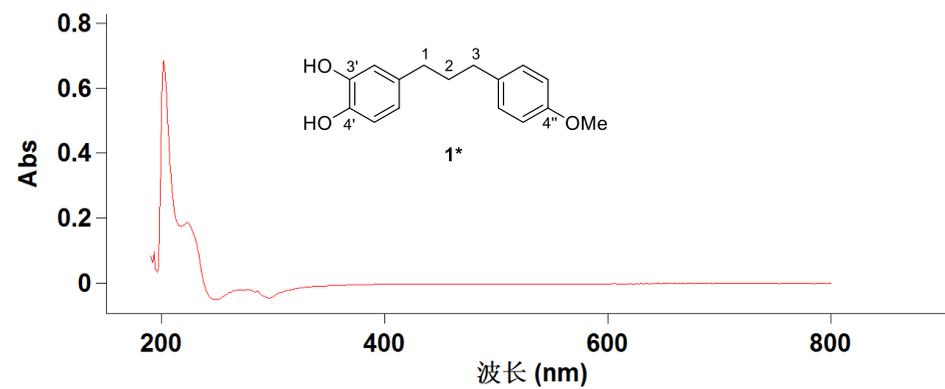


图 S8 化合物 **1** 的 UV 谱
Fig. S8 UV spectrum of compound **1**