

# 补充数据

## 中药灵芝降羊毛甾烷三萜类成分研究

梁旭博<sup>1,2</sup>, 王妍<sup>1,2</sup>, 司盈盈<sup>1,2</sup>,

赵琪璐<sup>1</sup>, 赵晨光<sup>1,2</sup>, 杜锐<sup>1,2</sup>, 冯卫生<sup>1,2\*</sup>, 赵珍珠<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>河南中医药大学药学院; <sup>2</sup>河南省中药开发工程技术研究中心, 郑州 450046

### 目录

- 图 1 化合物 1 的 <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>) 图谱
- 图 2 化合物 1 的 <sup>13</sup>C NMR 和 DEPT (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>) 图谱
- 图 3 化合物 1 的 HSQC 图谱
- 图 4 化合物 1 的 <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY 图谱
- 图 5 化合物 1 的 HMBC 图谱
- 图 6 化合物 1 的 ROESY 图谱
- 图 7 化合物 1 的 HR-ESI-MS 图谱
- 图 8 化合物 2 的 <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱
- 图 9 化合物 2 的 <sup>13</sup>C NMR 和 DEPT (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱
- 图 10 化合物 2 的 HSQC 图谱
- 图 11 化合物 2 的 <sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY 图谱
- 图 12 化合物 2 的 HMBC 图谱
- 图 13 化合物 2 的 ROESY 图谱
- 图 14 化合物 2 的 HR-ESI-MS 图谱

11g70a. 21.1.1r - 11g70a hsqc

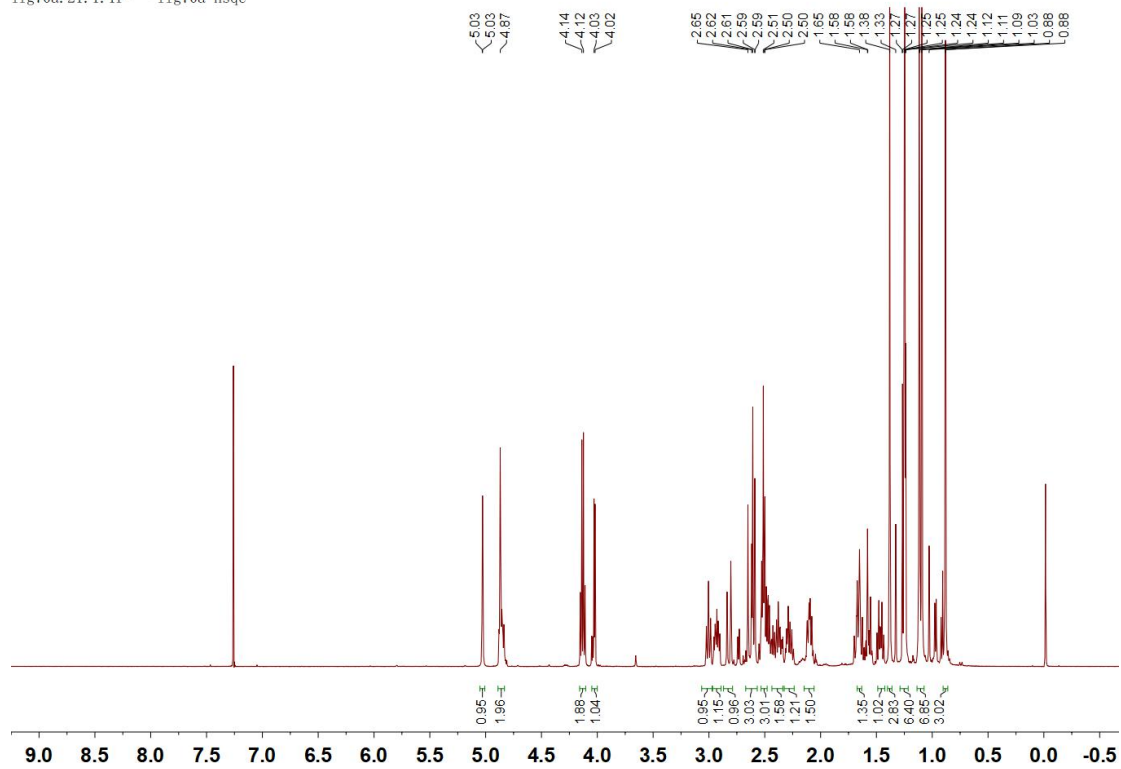
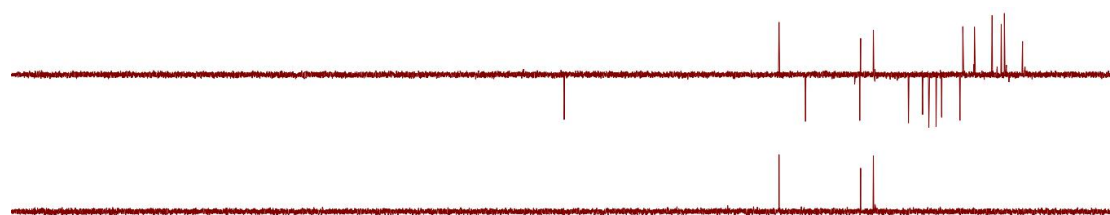


图 1 化合物 1 的  $^1\text{H}$  NMR (600 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 图谱



11g70a. 22.1.1r - 11g70a c13 and dept

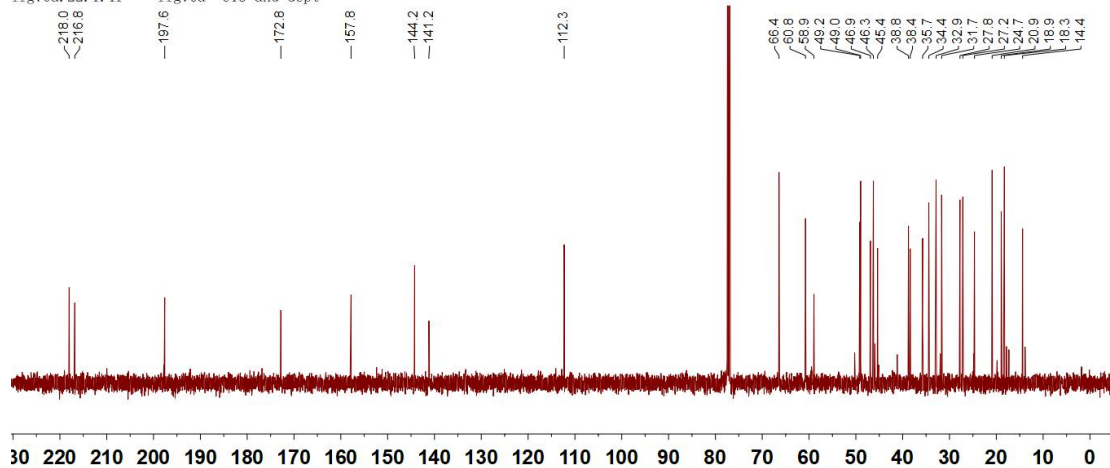


图 2 化合物 1 的  $^{13}\text{C}$  NMR 和 DEPT (150 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 图谱

11g70a. 26. 1. 2rr -- 11g70a hsqc

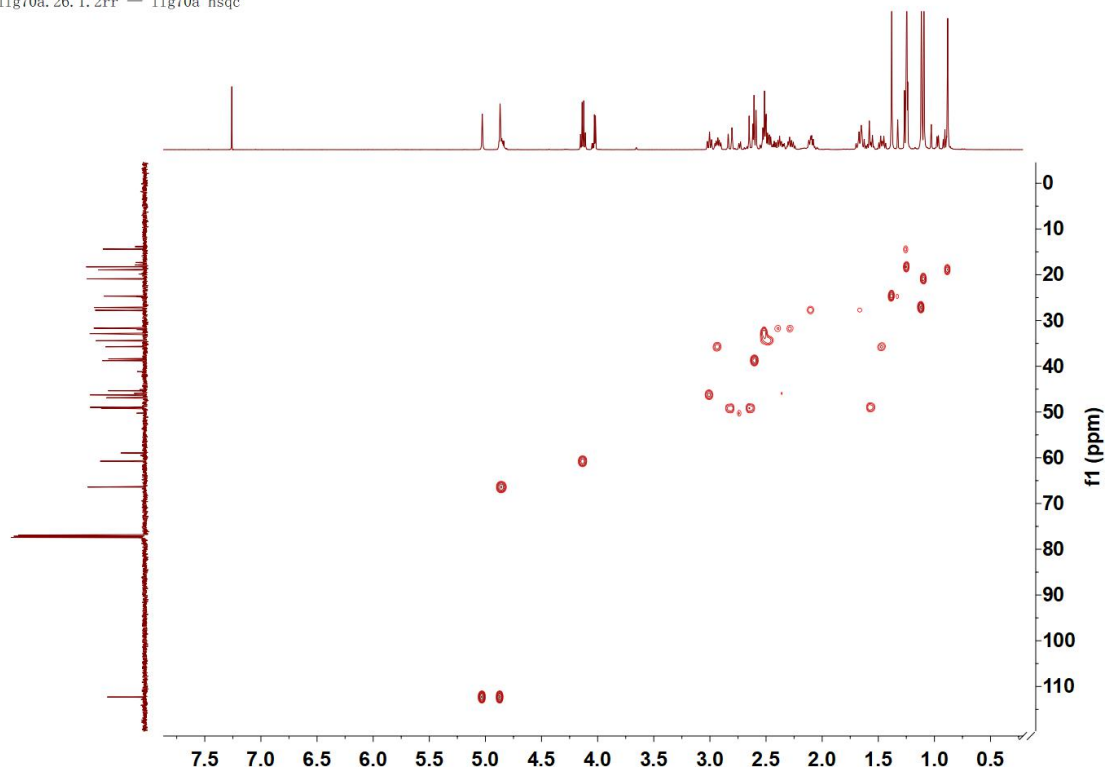


图3 化合物1的HSQC图谱

11g70a. 25. 1. 2rr -- 11g70a cosy

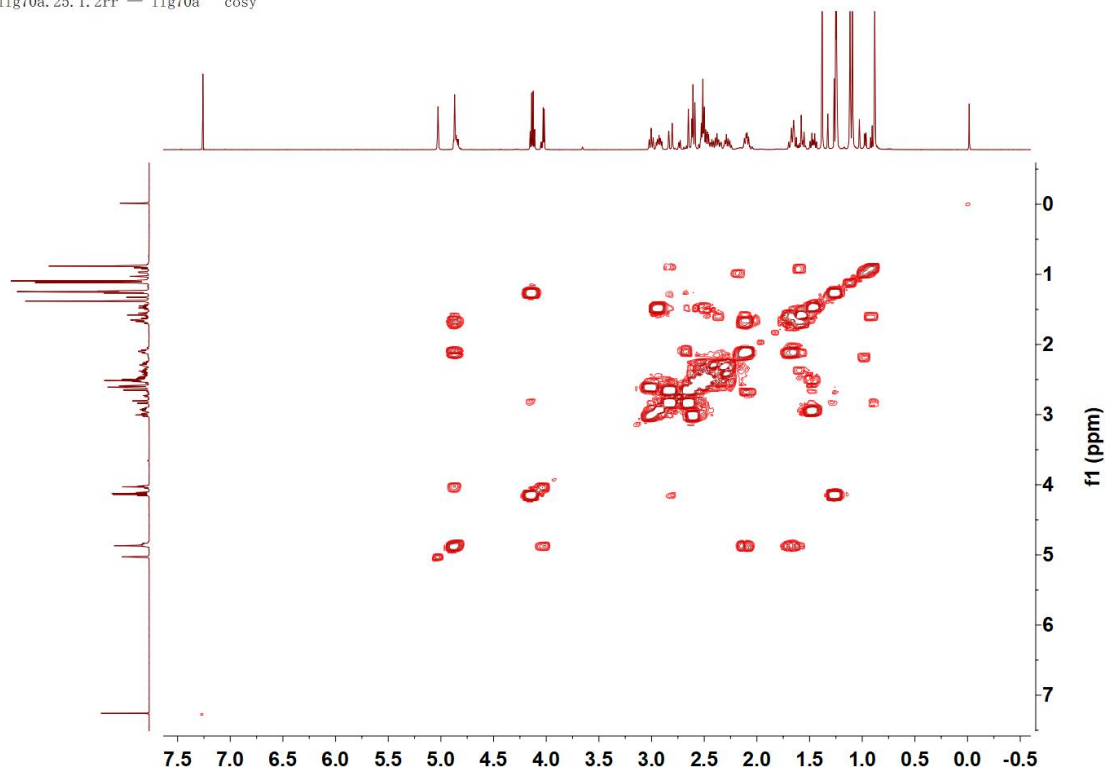


图4 化合物1的<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H COSY 图谱

11g70a. 27.1. 2rr -- 11g70a hmbc

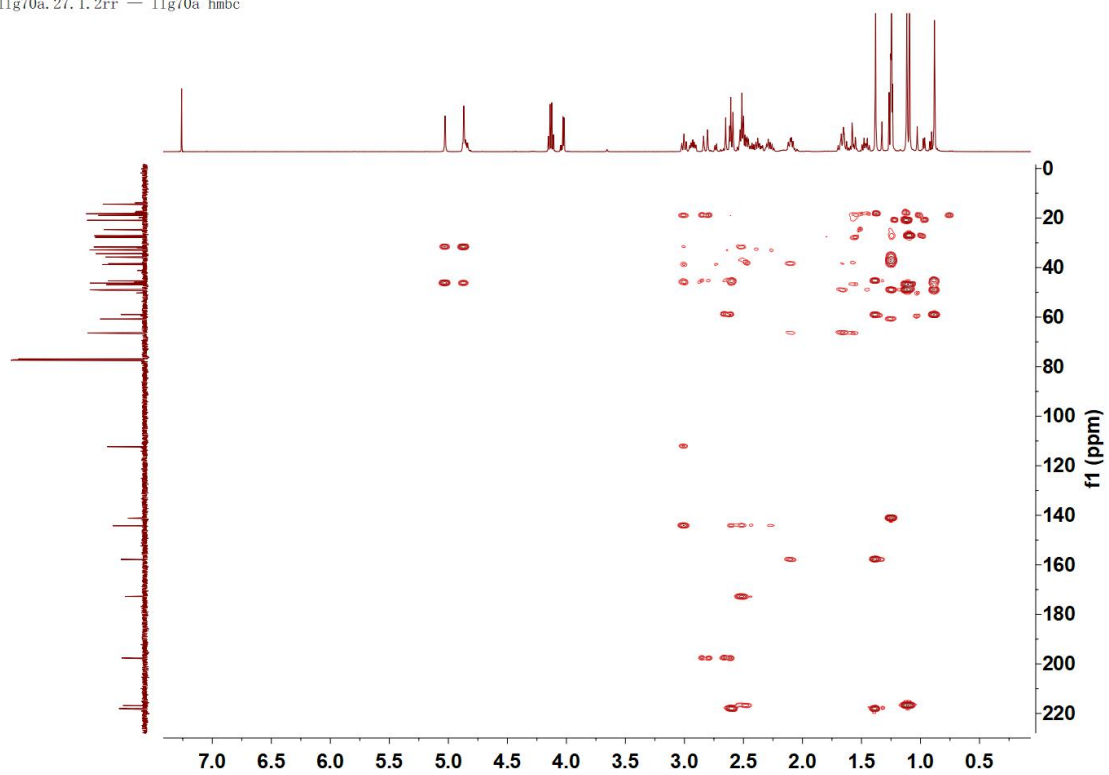


图 5 化合物 1 的 HMBC 图谱

11g70a. 28.1. 2rr -- 11g70a roesy

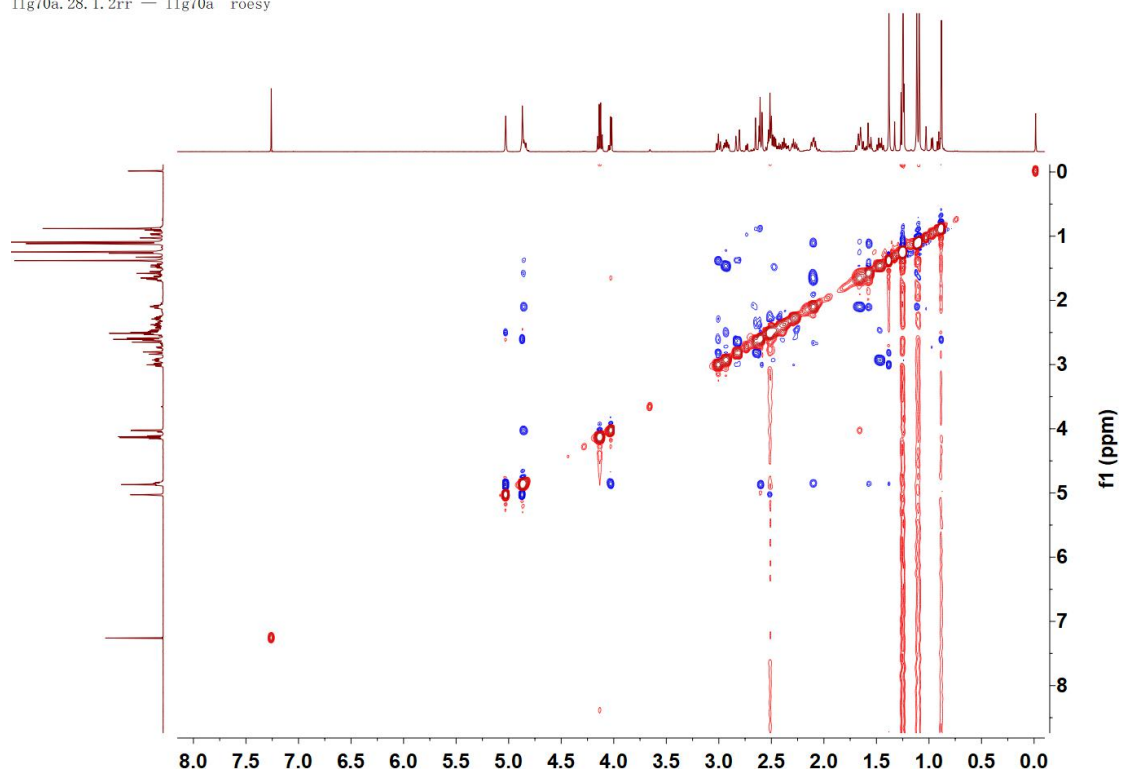


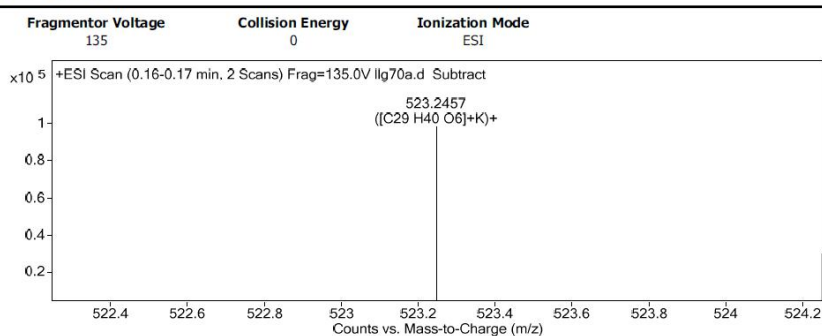
图 6 化合物 1 的 ROESY 图谱

## Qualitative Analysis Report

Data Filename	llg70a.d	Sample Name	llg70a
Sample Type	Sample	Position	P1-B8
Instrument Name	Instrument 1	User Name	
Acq Method	SIBU.m	Acquired Time	4/13/2017 5:00:30 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
467.2793	1	50456.57		
468.2822	1	16109.3		
507.2713	1	83639.59		
508.2749	1	23916.08		
523.2457	1	98240.46	C29 H40 O6	(M+K)+
524.2488	1	29589	C29 H40 O6	(M+K)+
991.554	1	28443.32		
992.5564	1	18321.49		

#### 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
C29 H40 O6	484.2825	523.2456	523.2457	0.3	0.5	10.0000

--- End Of Report ---

图 7 化合物 1 的 HR-ESI-MS 图谱

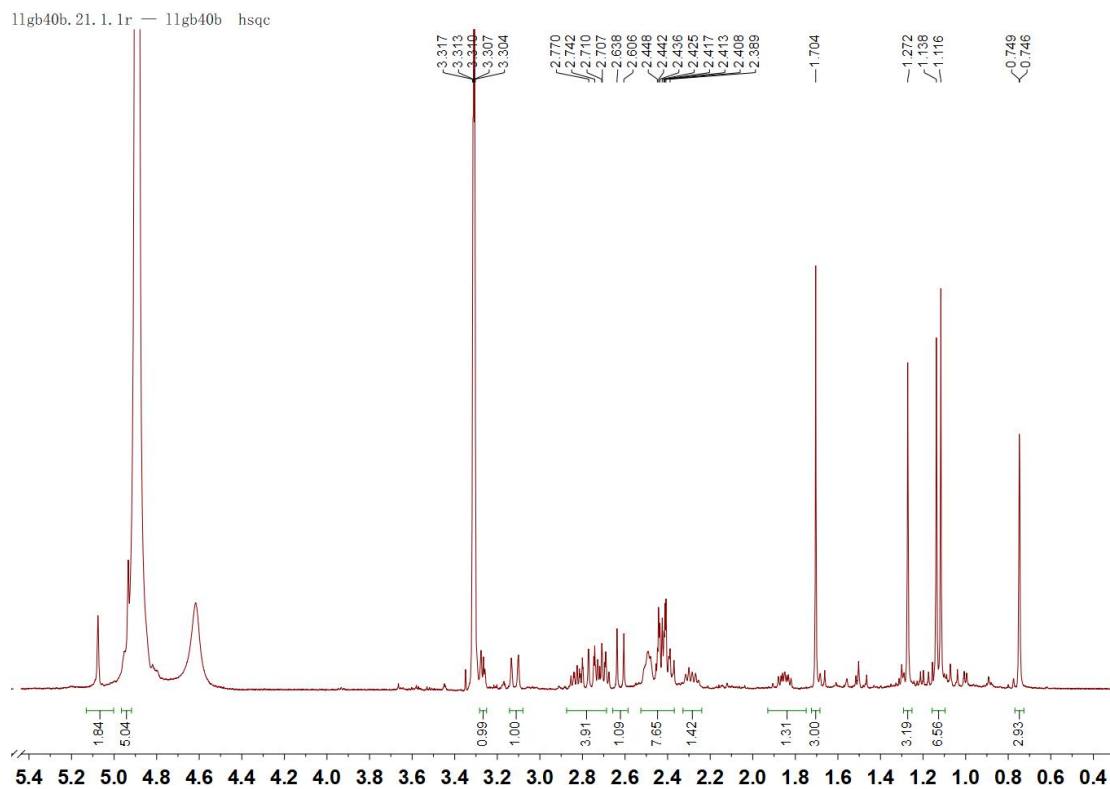


图8 化合物2的<sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱

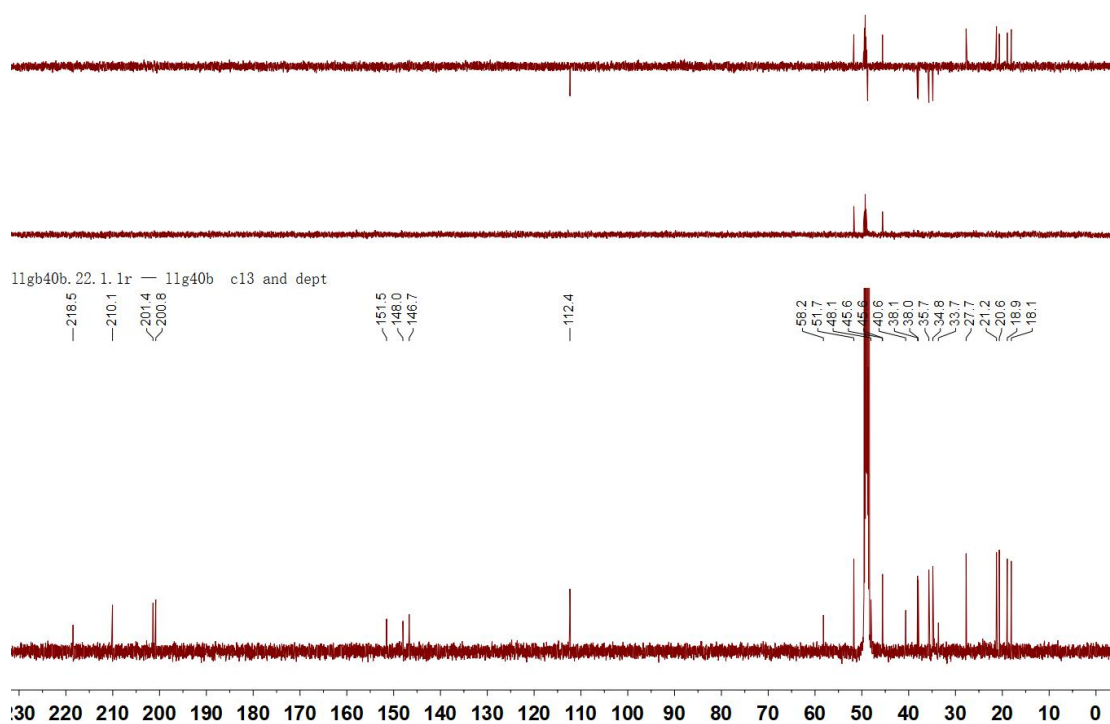


图9 化合物2的<sup>13</sup>C NMR和DEPT (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱

11gb40b.26.1.2rr — 11gb40b hsqc

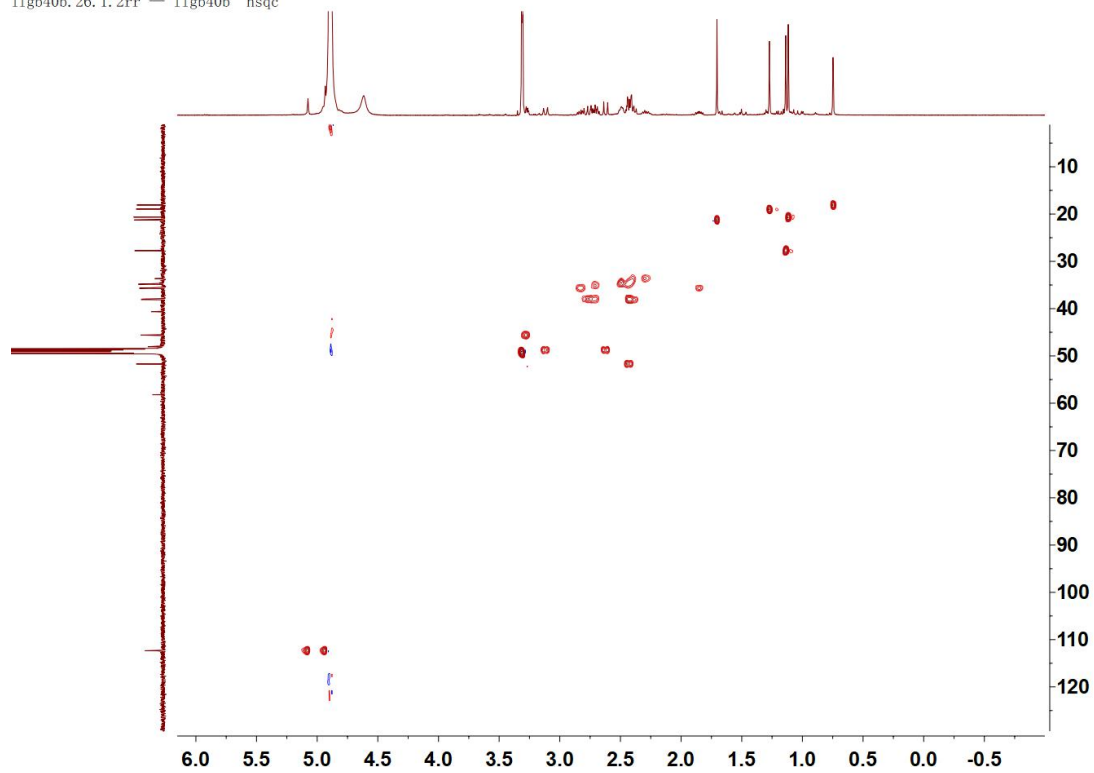


图 10 化合物 2 的 HSQC 图谱

### Figure S11 $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$ COSY spectrum of 2

11gb40b.25.1.2rr — 11gb40b cosy

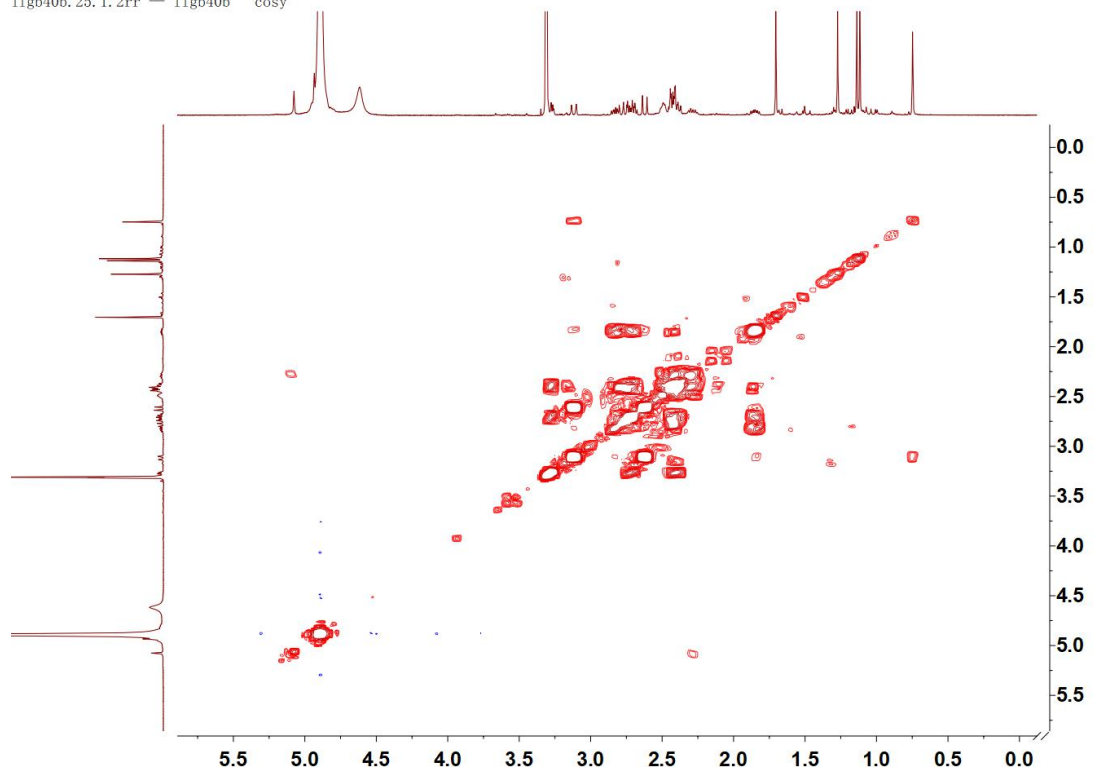


图 11 化合物 2 的  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY 图谱

11gb40b.27.1.2rr - 11gb40b hmbc

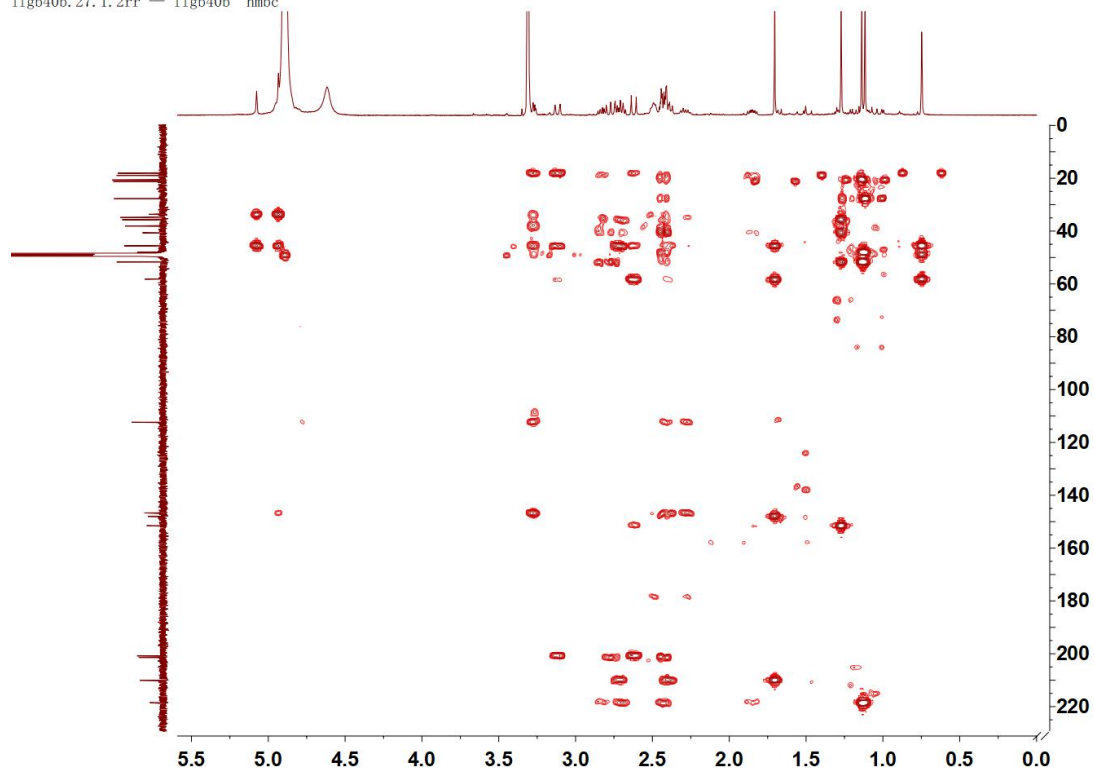


图 12 化合物 2 的 HMBC 图谱

11gb40b.28.1.2rr - 11gb40b roesy

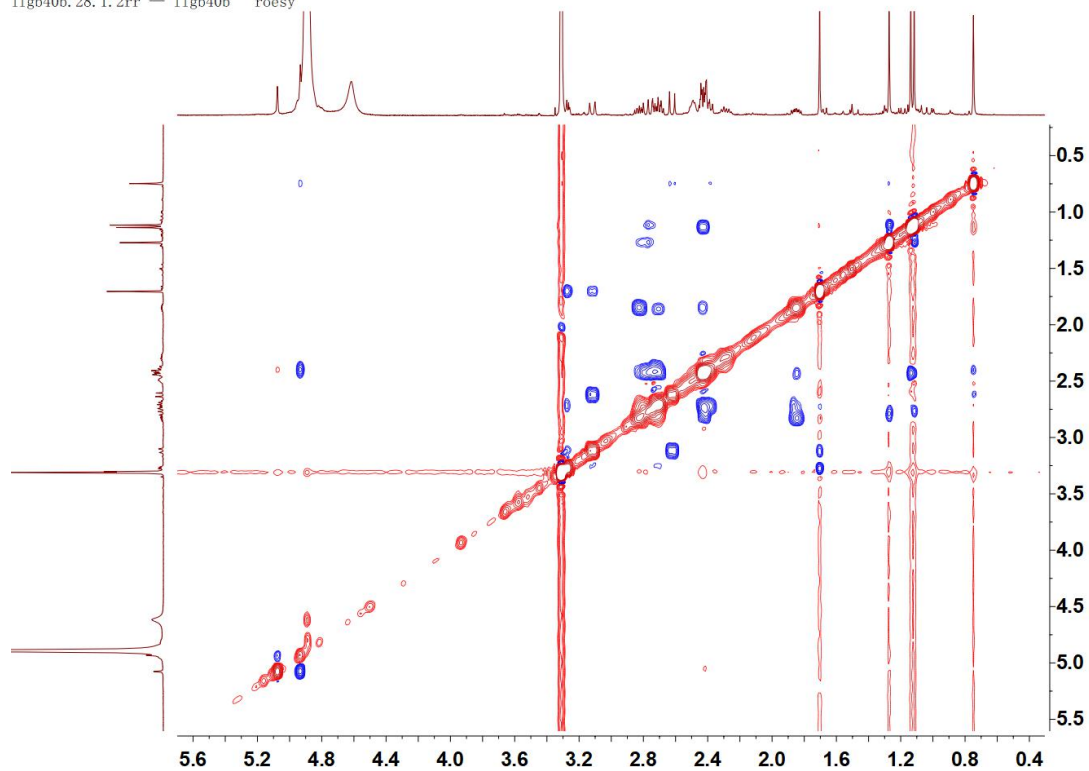


图 13 化合物 2 的 ROESY 图谱

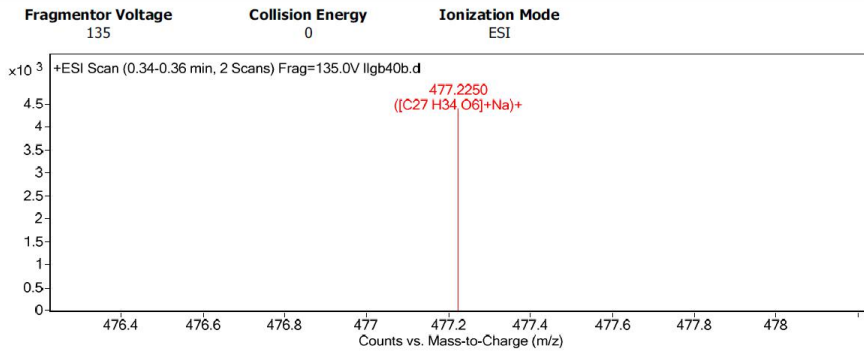


## Qualitative Analysis Report

<b>Data Filename</b>	llgb40b.d	<b>Sample Name</b>	llgb40b
<b>Sample Type</b>	Sample	<b>Position</b>	P1-B2
<b>Instrument Name</b>	Instrument 1	<b>User Name</b>	
<b>Acq Method</b>	SIBU.m	<b>Acquired Time</b>	11/22/2017 11:18:41 AM
<b>IRM Calibration Status</b>	Success	<b>DA Method</b>	Default.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
102.1282		2849.19		
128.9537		3817.82		
245.0782		3367.06		
251.2484	1	15220.99		
252.2518	1	3377.53		
287.1373	1	6852.96		
294.1493	1	6307.88		
477.225	1	4393.71	C27 H34 O6	(M+Na)+
922.0098	1	3711.58		
959.9672	1	6245.35		

#### 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
C27 H34 O6	454.2355	477.2248	477.2250	-0.2	-0.5	11.0000

--- End Of Report ---

图 14 化合物 2 的 HR-ESI-MS 图谱