

补充数据

植物内生真菌 *Fusarium guttiforme* 次生代谢产物

研究

李慧媛¹, 岳婧怡³, 王举涛^{1,2*}, 蔡百祥^{1*}

¹安徽中医药大学药学院; ²安徽省中药研究与开发重点实验室, 合肥 230012; ³芜湖职业技术学院, 芜湖 241006

目录

图 1 化合物 1 的 ¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)图谱

图 2 化合物 1 的 ¹³C NMR(125 MHz, CDCl₃)图谱

图 3 化合物 1 的 ¹H-¹H COSY 图谱

图 4 化合物 1 的 HSQC 图谱

图 5 化合物 1 的 HMBC 图谱

图 6 化合物 1 的(-)-HR-ESI-MS 图谱

图 7 化合物 1 的 UV 图谱

图 8 化合物 1 的旋光数据

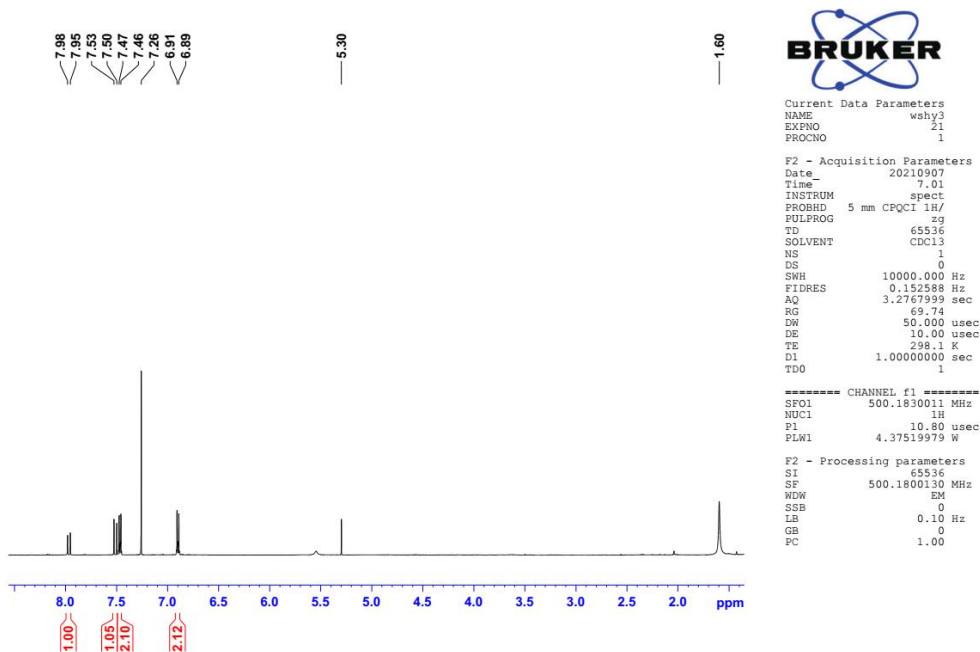


图1 化合物1的¹H NMR(500 MHz, CDCl₃)图谱

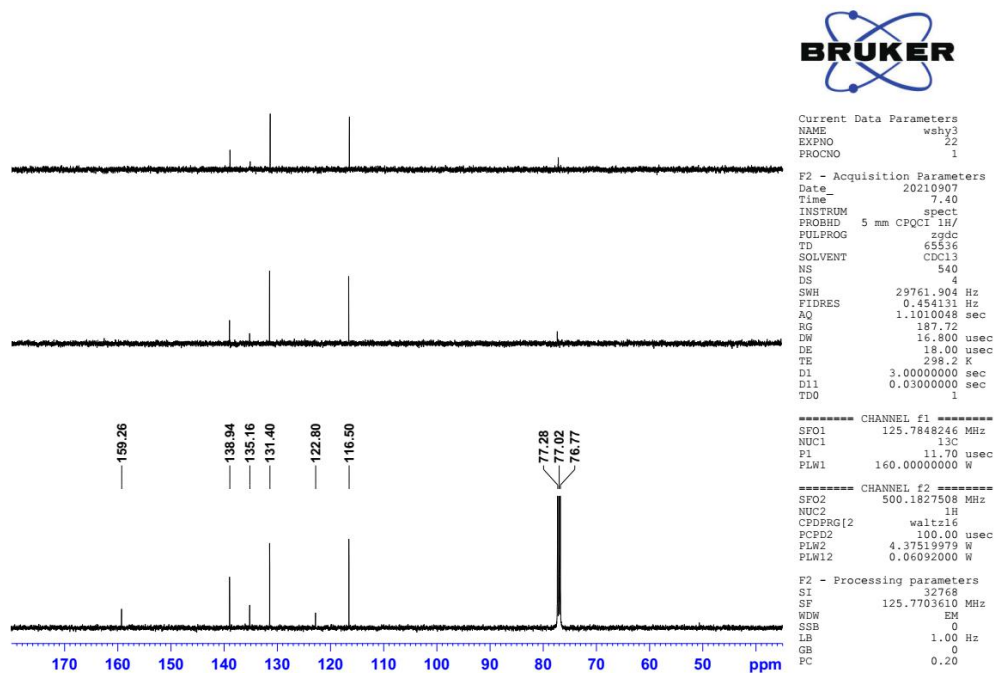


图2 化合物1的¹³C NMR (125 MHz, CDCl₃)图谱

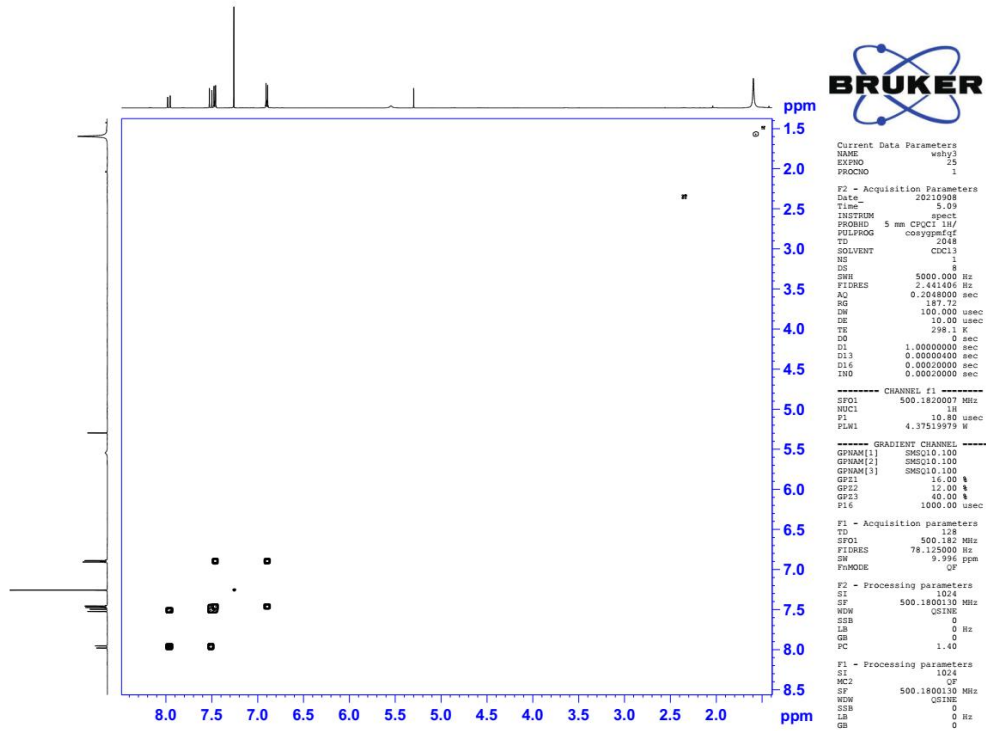


图3 化合物1的¹H-¹H COSY图谱

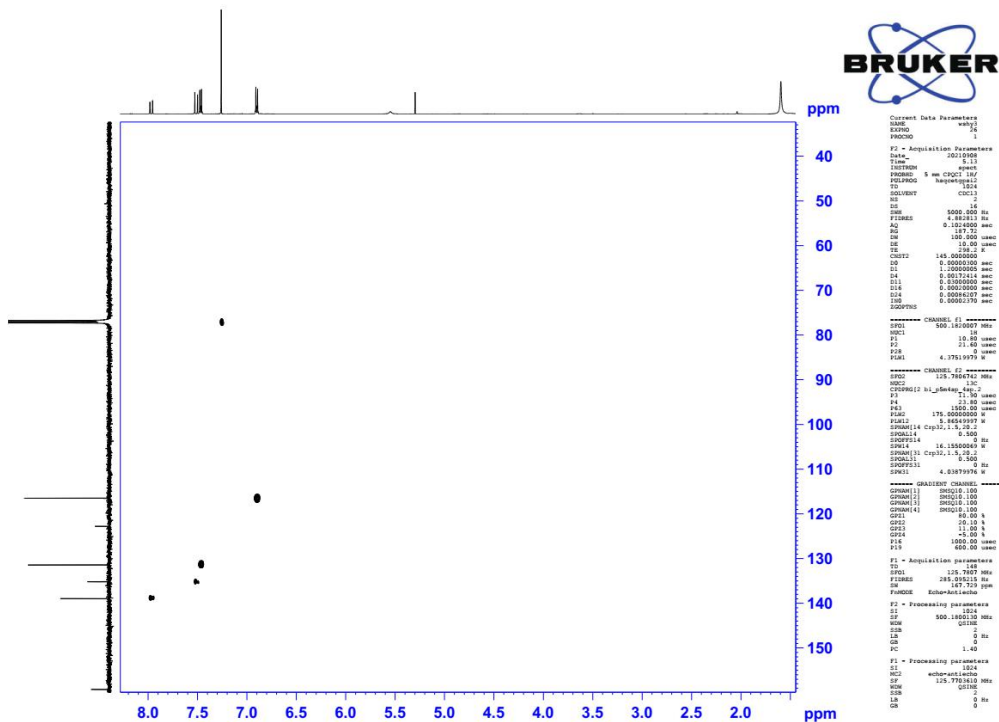


图4 化合物1的HSQC图谱

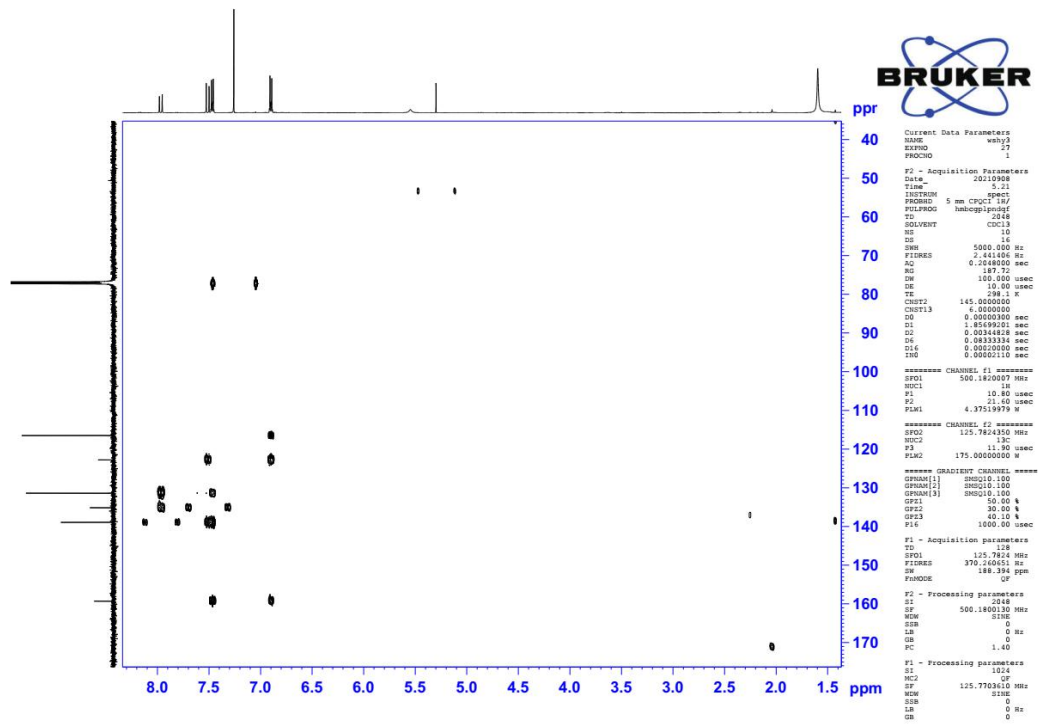


图5 化合物1的HMBC图谱

Data File: E:\DATA\2021\1103\wshy-3.lcd

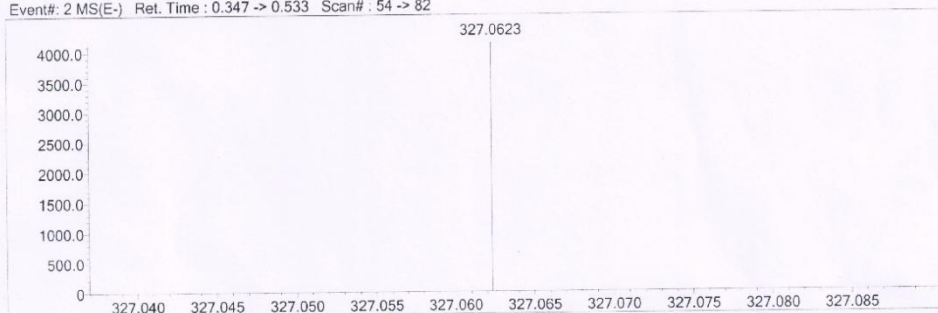
Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Elmt	Val.	Min	Max	Use Adduct
H	1	5	100	F	1	0	0	Cl	1	0	0	Ag	1	0	0	H
2H	1	0	0	Na	1	0	0	Co	2	0	0	I	3	0	0	HCOO
B	3	0	0	Mg	2	0	0	Cu	2	0	0	Ir	3	0	0	
C	4	5	50	Si	4	0	0	Se	2	0	0					
N	3	0	10	P	3	0	0	Br	1	0	0					
O	2	0	30	S	2	0	0	Pd	2	0	0					

Error Margin (ppm): 5
 HC Ratio: unlimited
 Max Isotopes: all
 MSn Iso RI (%): 75.00

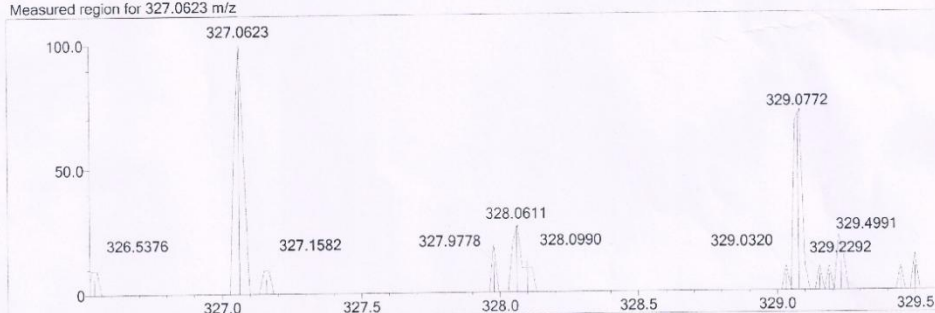
DBE Range: not fixed
 Apply N Rule: yes
 Isotope RI (%): 1.00
 MSn Logic Mode: OR

Electron Ions: both
 Use MSn Info: yes
 Isotope Res: 10000
 Max Results: 20

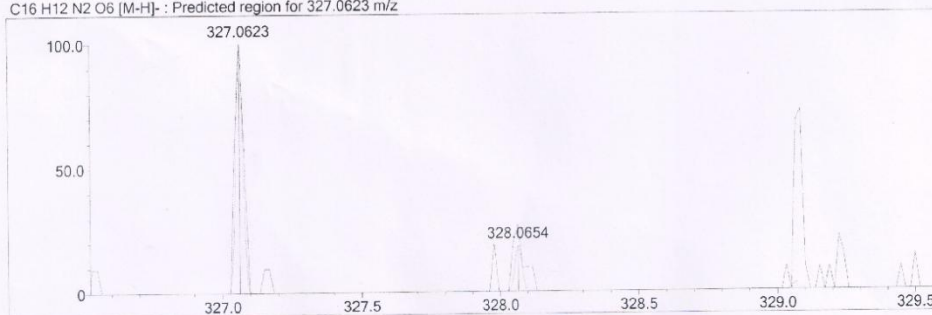
Event#: 2 MS(E-) Ret. Time : 0.347 -> 0.533 Scan# : 54 -> 82



Measured region for 327.0623 m/z

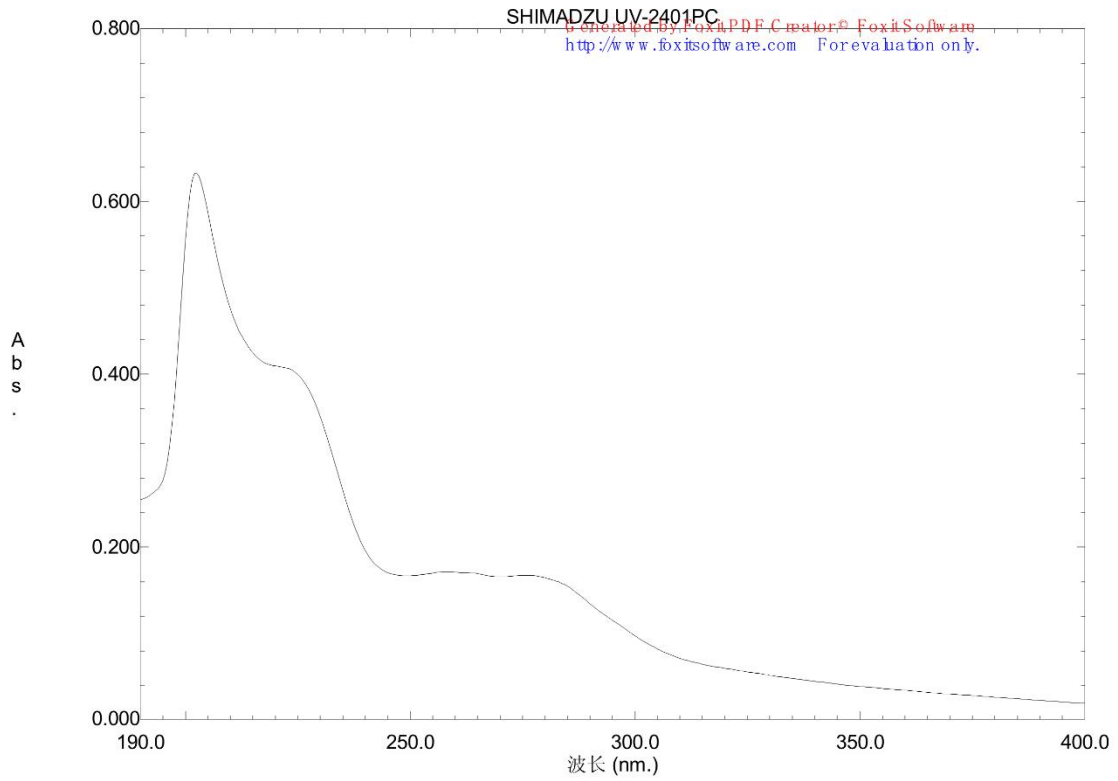


C16 H12 N2 O6 [M-H]- : Predicted region for 327.0623 m/z



Formula (M)	Ion	Meas. m/z	Pred. m/z	Df. (mDa)	Df. (ppm)	DBE
C16 H12 N2 O6	[M-H]-	327.0623	327.0623	0.0	0.00	12.0

图6 化合物1的 (-)-HR-ESI-MS图谱



文件名: WSHY-3

WSHY-3

创建于: 15:42 21-11-12

样品浓度: 0.0300毫克/毫升

数据: 原始

溶剂: 甲醇

测量模式: Abs.
扫描速度: 中速
狭缝: 5.0
采样间隔: 0.5

序	波长 (nm.)	Abs.
1	202.00	0.6322
2	221.50	0.4082
3	258.50	0.1710
4	273.00	0.1661

图7 化合物1的UV图谱

Rudolph Research Analytical

This sample was measured on an Autopol VI, Serial #91058
Manufactured by Rudolph Research Analytical, Hackettstown, NJ, USA.

Measurement Date : Wednesday, 10-NOV-2021

Set Temperature : OFF

Time Delay : Disabled

Delay between Measurement : Disabled

<u>n</u>	<u>Average</u>	<u>Std.Dev.</u>	<u>% RSD</u>	<u>Maximum</u>	<u>Minimum</u>					
5	5.80	0.65	11.20	6.60	5.00					
<u>S.No</u>	<u>Sample ID</u>	<u>Time</u>	<u>Result</u>	<u>Scale</u>	<u>OR °Arc</u>	<u>WLG.nm</u>	<u>Lq.mm</u>	<u>Conc.g/100ml</u>	<u>Temp.</u>	
1	WSHY-3	07:52:25 PM	5.00	SR	0.0075	589	100.00	0.150	19.6	
2	WSHY-3	07:52:33 PM	5.33	SR	0.0080	589	100.00	0.150	19.6	
3	WSHY-3	07:52:41 PM	5.87	SR	0.0088	589	100.00	0.150	19.6	
4	WSHY-3	07:52:49 PM	6.20	SR	0.0093	589	100.00	0.150	19.6	
5	WSHY-3	07:52:58 PM	6.60	SR	0.0099	589	100.00	0.150	19.6	

图8 化合物1的旋光数据