

# 补充数据

## 怀山药内生真菌 *Chaetomium* sp. 的次生代谢产物研究

盛蒙珂<sup>1</sup>, 赵莹菲<sup>1</sup>,

田若丹<sup>1</sup>, 文春南<sup>1,2</sup>, 刘 森<sup>1,2\*</sup>, 麻兵继<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>河南农业大学农学院; <sup>2</sup>郑州市中药材种质资源创新与代谢工程重点实验室, 郑州 450046

### 目录

图 1 化合物 1 的 HR-ESI-MS 图谱

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

图 3 化合物 1 的 <sup>13</sup>C NMR (150 MHz, CDCl<sub>3</sub>) 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 UV 图谱

图 7 化合物 2 的 HR-ESI-MS 图谱

图 8 化合物 2 的 <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱

图 9 化合物 2 的 <sup>13</sup>C NMR (100 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 UV 图谱

### Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 mDa / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Element prediction: Off

Monoisotopic Mass, Even Electron Ions

38 formula(e) evaluated with 2 results within limits (all results (up to 1000) for each mass)

Elements Used:

C: 0-500

H: 0-1000

O: 0-200

Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Formula	C	H	O
241.1062	241.1076	-1.4	-5.8	4.5	C12 H17 O5	12	17	5

Im-sy45-3-13 86 (0.185)

1: TOF MS ES+

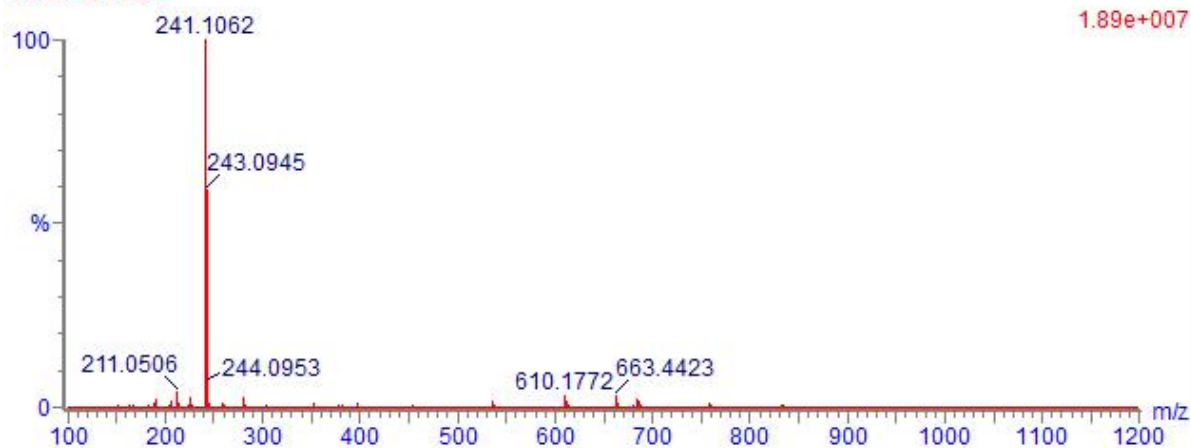


图 1 化合物 1 的 HR-ESI-MS 图谱

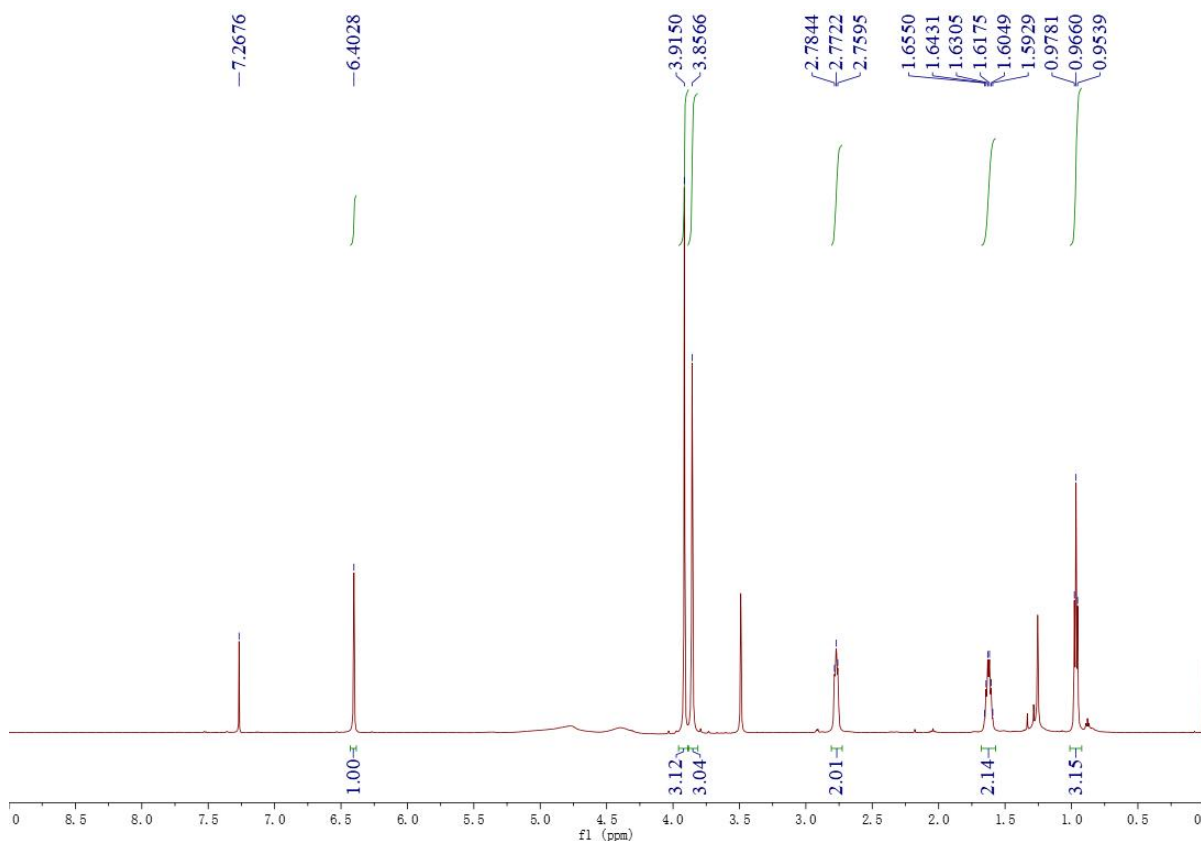


图 2 化合物 1 的 <sup>1</sup>H NMR (600 MHz, CDCl<sub>3</sub>) 图谱

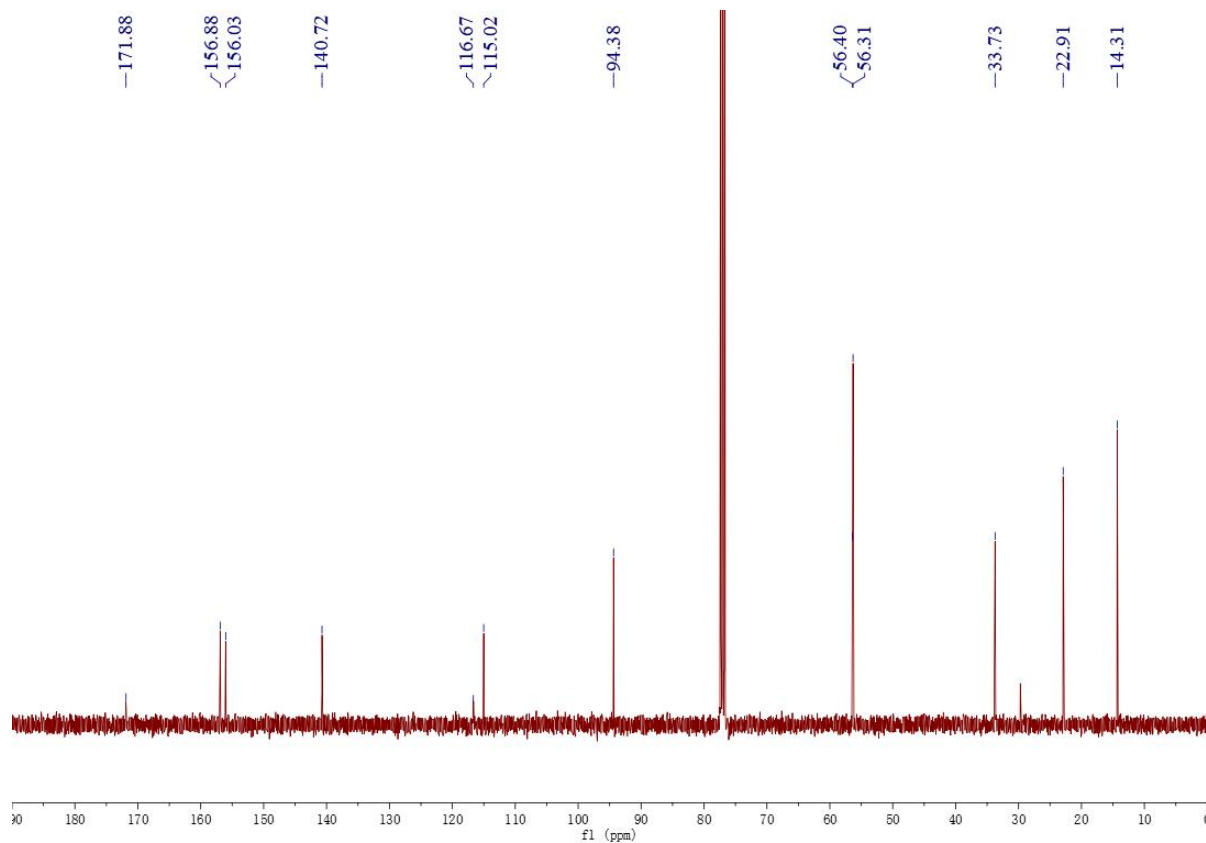


图3 化合物 1 的  $^{13}\text{C}$  NMR (150 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) 图谱

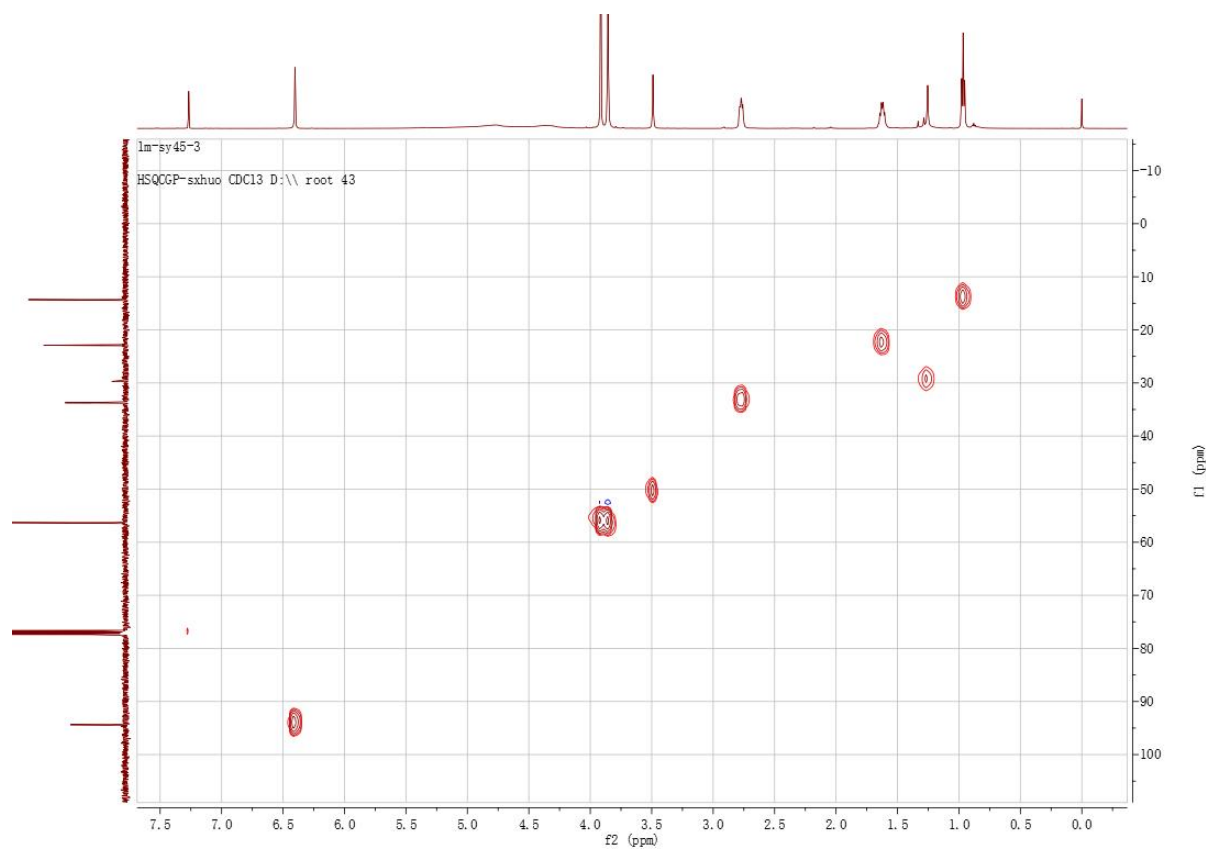


图4 化合物 1 的 HSQC 图谱

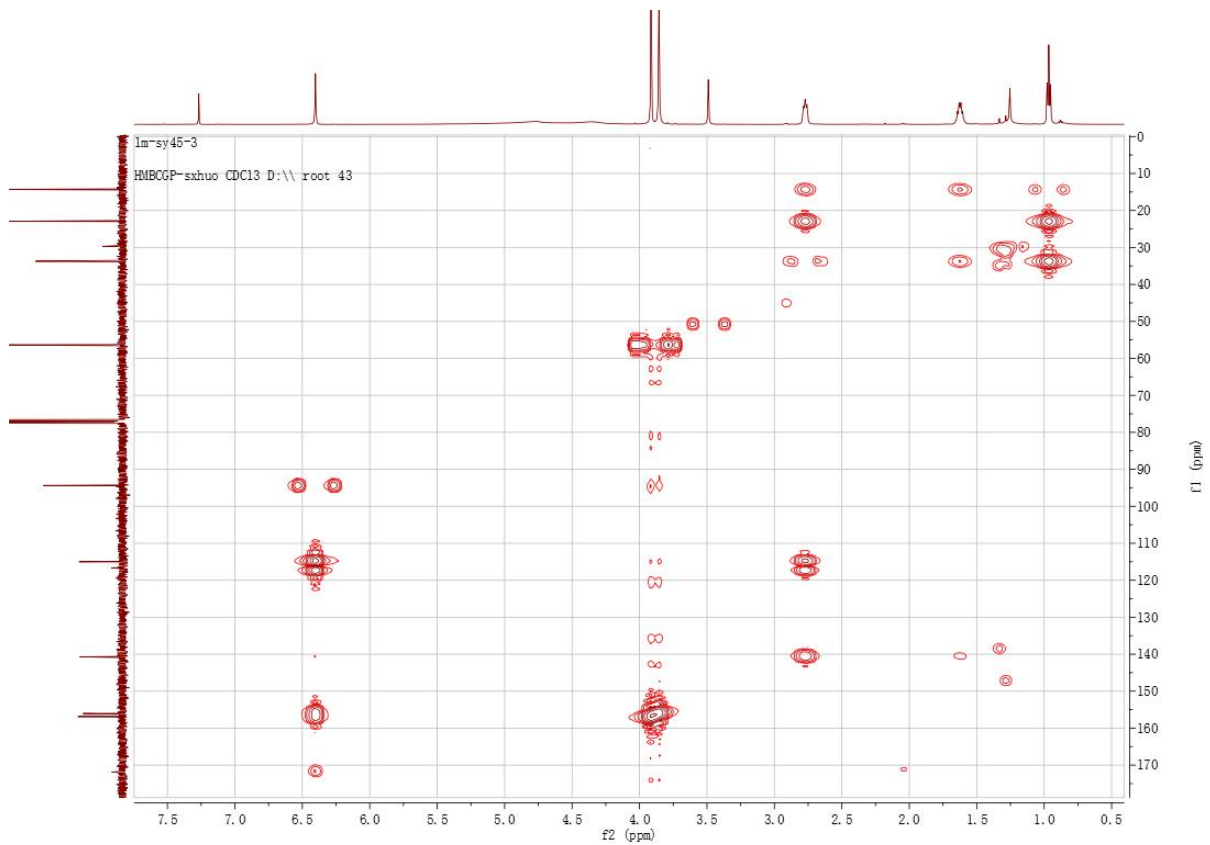
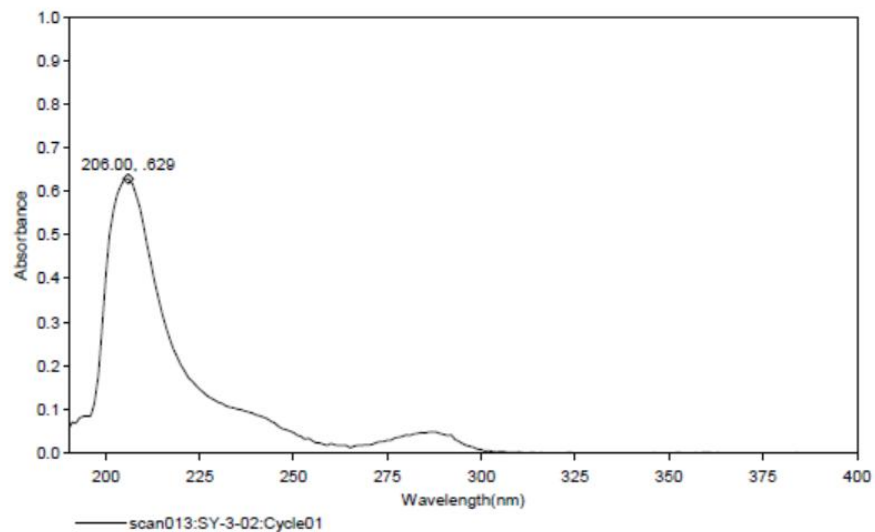


图 5 化合物 1 的 HMBC 图谱

Thermo Scientific ~ VISIONpro SOFTWARE V4.41

Operator Name	(None Entered)	Date of Report	2024/1/20
Department	(None Entered)	Time of Report	12:28:15下午
Organization	(None Entered)		
Information	(None Entered)		

Scan Graph



Results Table - scan013,SY-3-02,Cycle01

nm	A	Peak Pick Method
206.00	.629	Find 8 Peaks Above -3.0000 A Start Wavelength190.00 nm Stop Wavelength400.00 nm Sort By Wavelength

图 6 化合物 1 的 UV 图谱

### Single Mass Analysis

Tolerance = 5.0 mDa / DBE: min = -1.5, max = 50.0

Element prediction: Off

Monoisotopic Mass, Even Electron Ions

683 formula(e) evaluated with 11 results within limits (up to 50 closest results for each mass)

Elements Used:

C: 0-500    H: 0-1000    N: 0-200    O: 0-200    Na: 0-1

Mass	Calc. Mass	mDa	PPM	DBE	Formula	C	H	N	O	Na
252.1003	252.1000	0.3	1.2	7.5	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N O <sub>2</sub> Na	14	15	1	2	1

sy45-12 83 (0.179) Cm (69:100)

1: TOF MS ES+

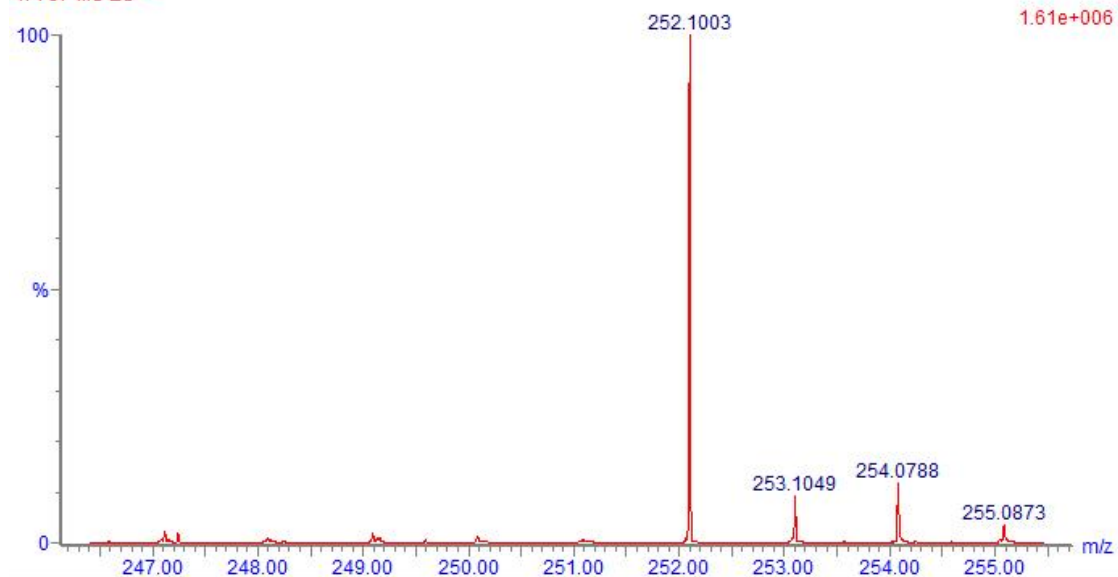


图 7 化合物 2 的 HR-ESI-MS 图谱

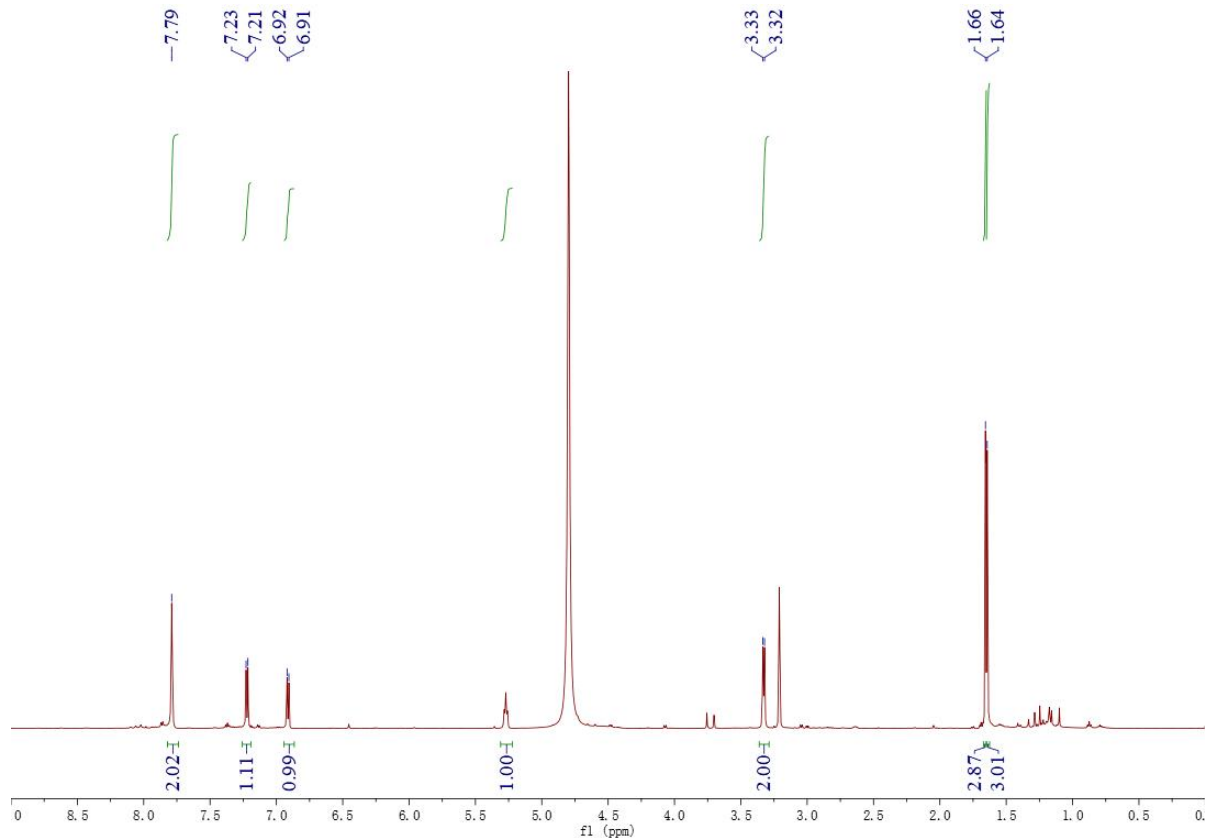


图 8 化合物 2 的 <sup>1</sup>H NMR (400 MHz, CD<sub>3</sub>OD) 图谱

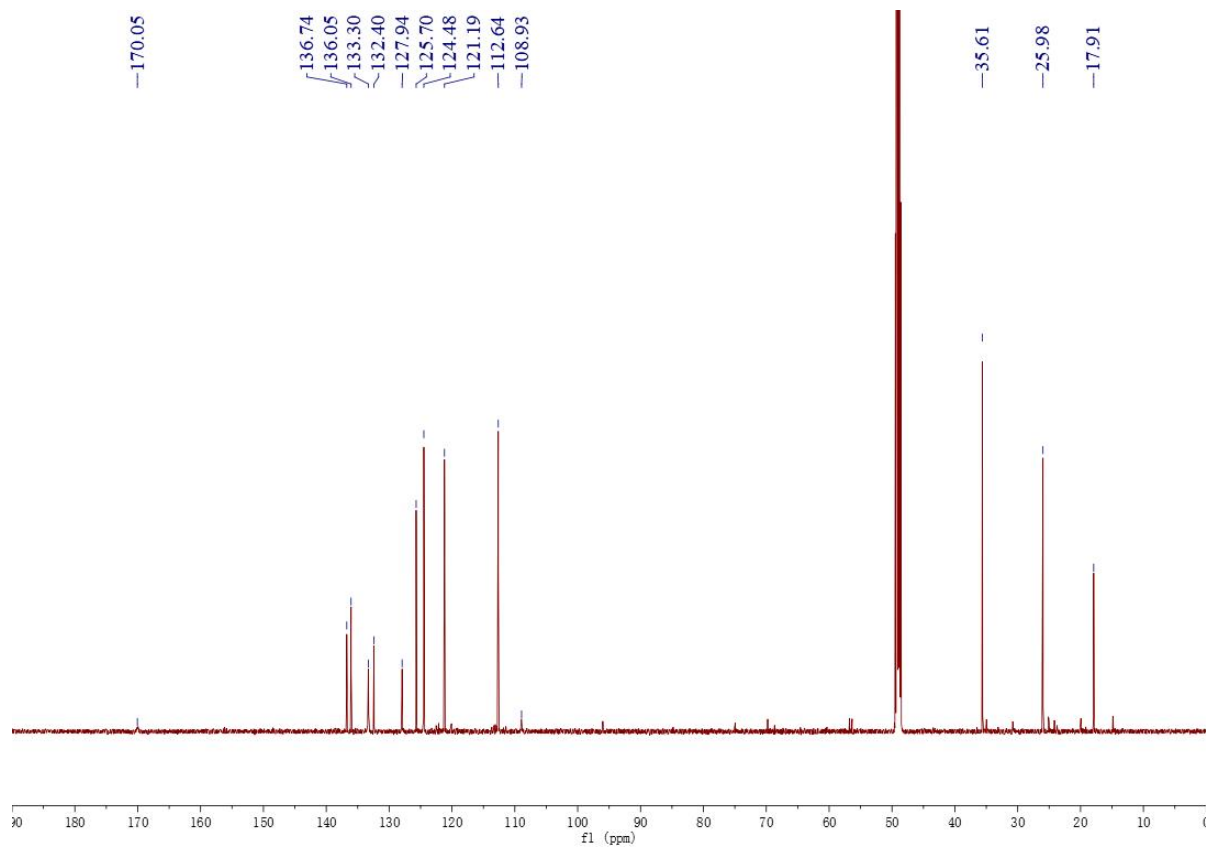


图 9 化合物 2 的  $^{13}\text{C}$  NMR (100 MHz,  $\text{CD}_3\text{OD}$ ) 图谱

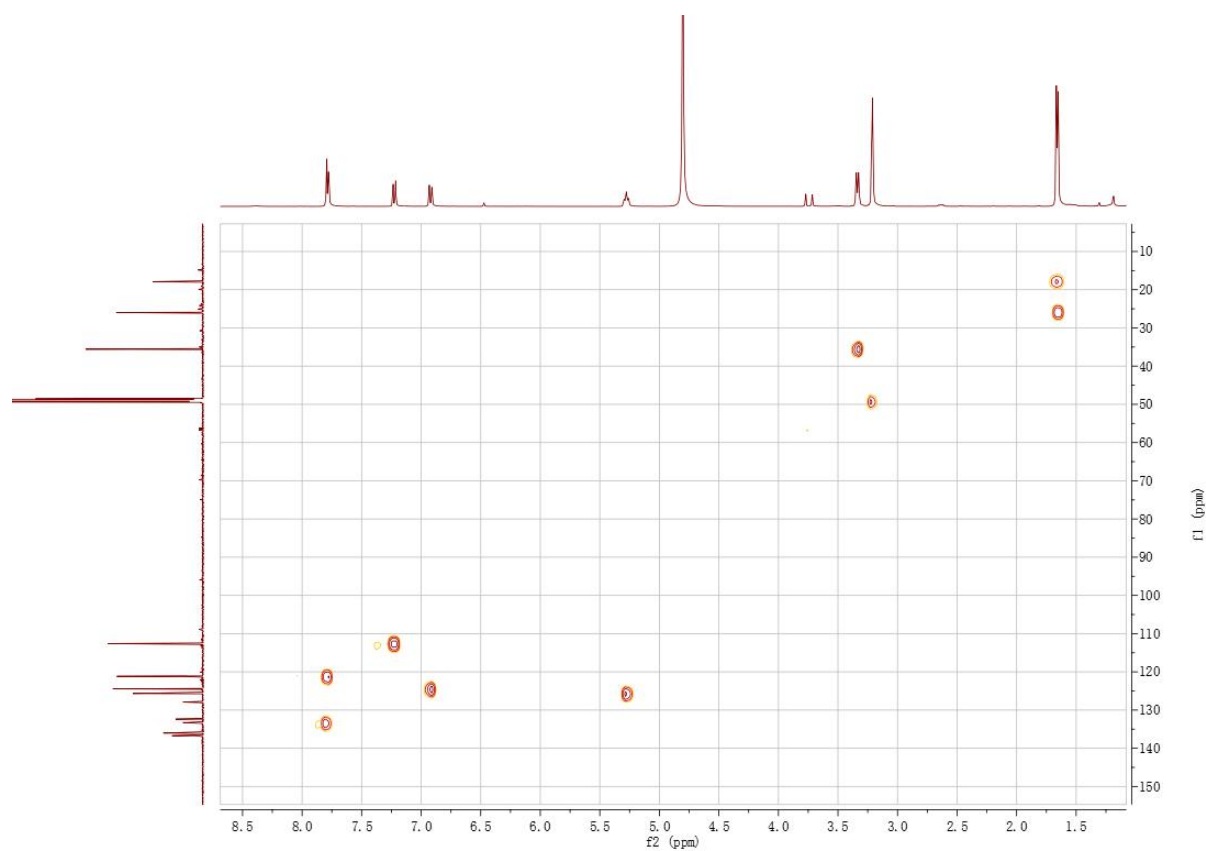


图 10 化合物 2 的 HSQC 图谱

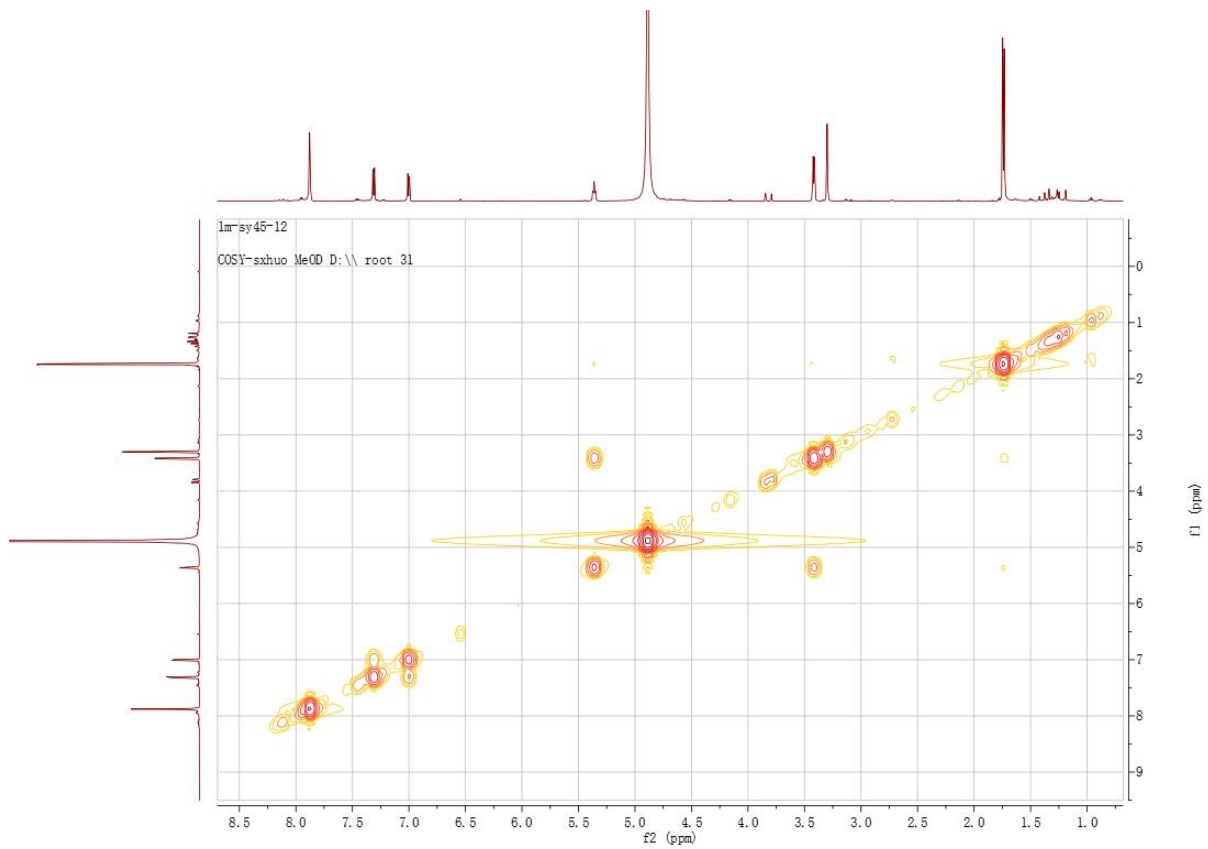


图 11 化合物 2 的  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  COSY 图谱

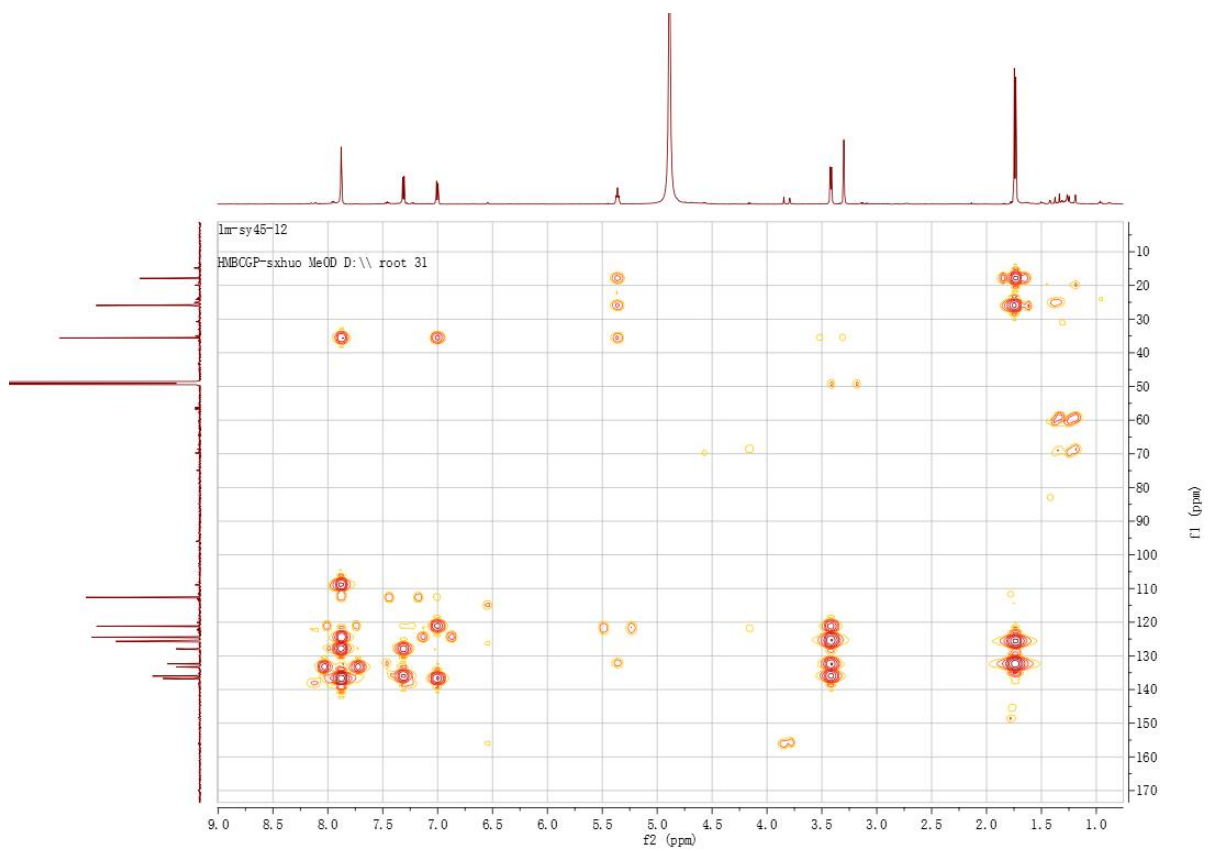


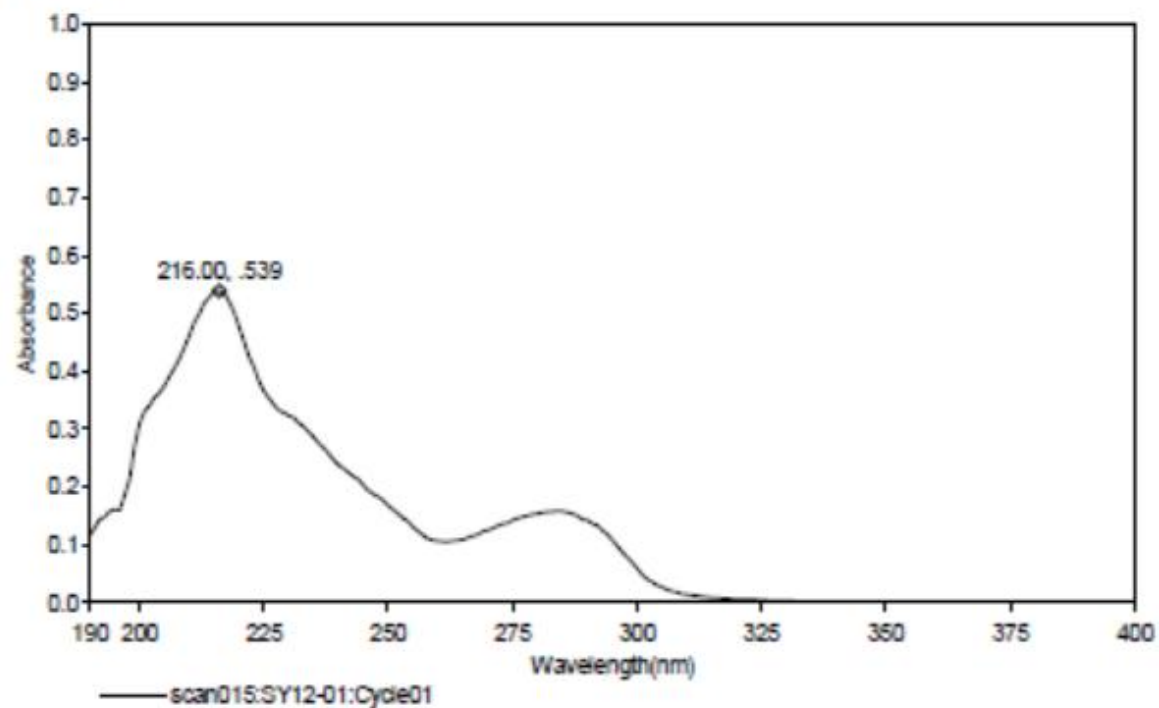
图 12 化合物 2 的 HMBC 图谱

Thermo Scientific ~ VISIONpro SOFTWARE V4.41

Operator Name (None Entered)  
Department (None Entered)  
Organization (None Entered)  
Information (None Entered)

Date of Report 2024/1/20  
Time of Report 12:42:30下午

Scan Graph



Results Table - scan015,SY12-01,Cycle01

nm	A	Peak Pick Method
216.00	.539	Find 8 Peaks Above -3.0000 A Start Wavelength 190.00 nm Stop Wavelength 400.00 nm Sort By Wavelength

图 13 化合物 2 的 UV 图谱