

附加材料

一株北极海绵共附生放线菌*Streptomyces somaliensis* 1107中生物碱类次级代谢产物的研究

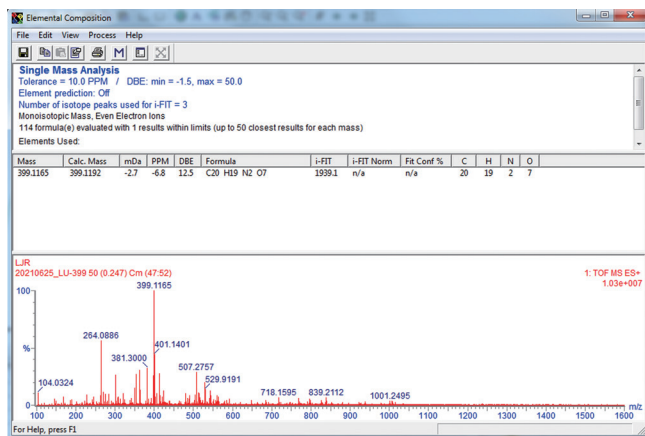
孙雪华¹ 吕凤翊² 林鹏程³ 杨帆^{2,*} 成熙^{4,*} 林厚文²

(1 上海海洋大学食品学院, 上海 201306; 2 上海交通大学医学院附属仁济医院药学部, 上海 200127;

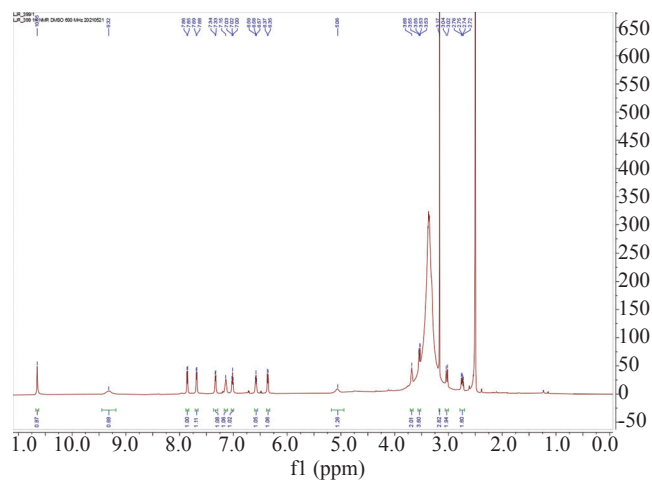
3 青海民族大学药学院, 西宁 810007; 4 同济大学附属天佑医院, 上海 200331)

目录

- 图S1 化合物1的高分辨电喷雾电离质谱谱图(正离子模式)
- 图S2 化合物1的比旋光度数据
- 图S3 化合物1在甲醇中的紫外光谱
- 图S4 化合物1在甲醇中的电子圆二色光谱
- 图S5 化合物1的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)
- 图S6 化合物1的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)
- 图S7 化合物1的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S8 化合物1的¹H-¹H COSY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S9 化合物1的HSQC谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S10 化合物1的HMBC谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S11 化合物1的ROESY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S12 化合物1的NOESY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S13 化合物2的高分辨电喷雾电离质谱谱图(正离子模式)
- 图S14 化合物2的比旋光度数据
- 图S15 化合物2在甲醇中的紫外光谱
- 图S16 化合物2在甲醇中的电子圆二色光谱
- 图S17 化合物2的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)
- 图S18 化合物2的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)
- 图S19 化合物2的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S20 化合物2的¹H-¹H COSY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S21 化合物2的HSQC谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S22 化合物2的HMBC谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S23 化合物2的ROESY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S24 化合物2的NOESY谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S25 化合物3的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)
- 图S26 化合物3的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)
- 图S27 化合物3的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)
- 图S28 化合物4的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)
- 图S29 化合物4的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)
- 图S30 化合物4的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)
- 公式S1 范特霍夫光学叠加原理



图S1 化合物1的高分辨电喷雾电离质谱谱图(正离子模式)



图S5 化合物1的¹H核磁共振谱图(in DMSO-d₆) (600 Hz)

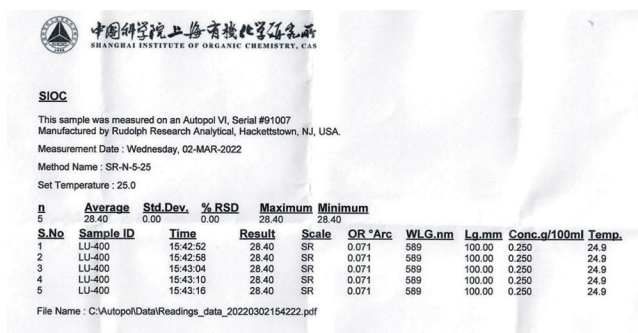
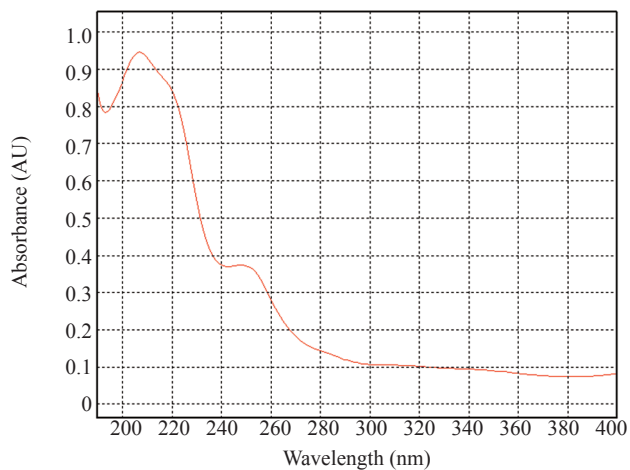
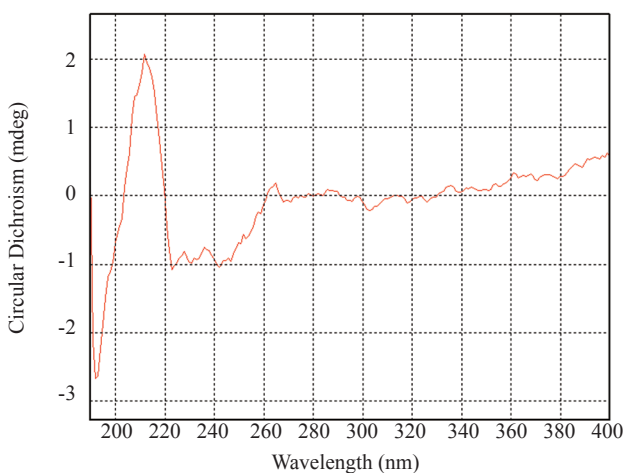


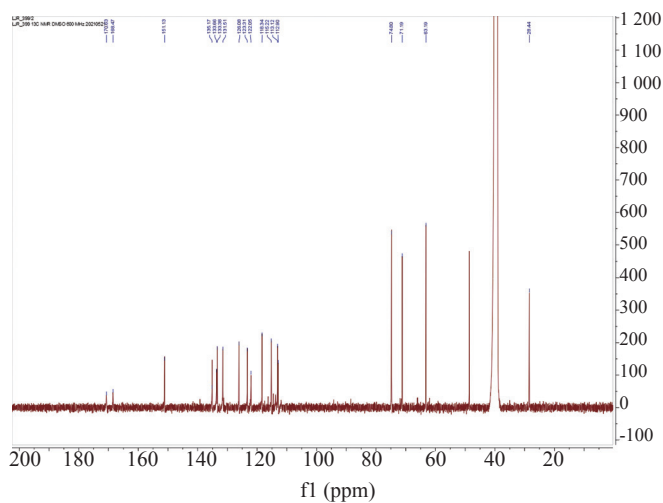
图 S2 化合物1的比旋光度数据



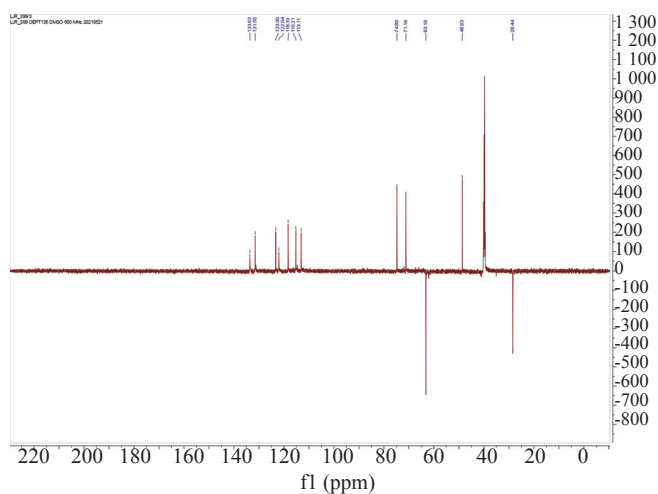
图S3 化合物1在甲醇中的紫外光谱



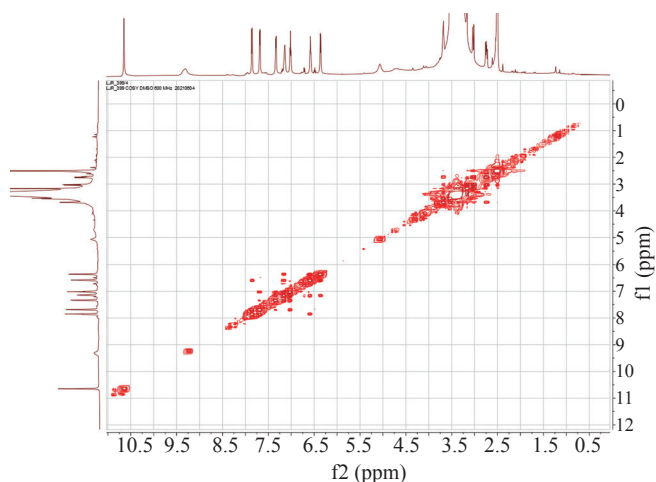
图S4 化合物1在甲醇中的电子圆二色谱



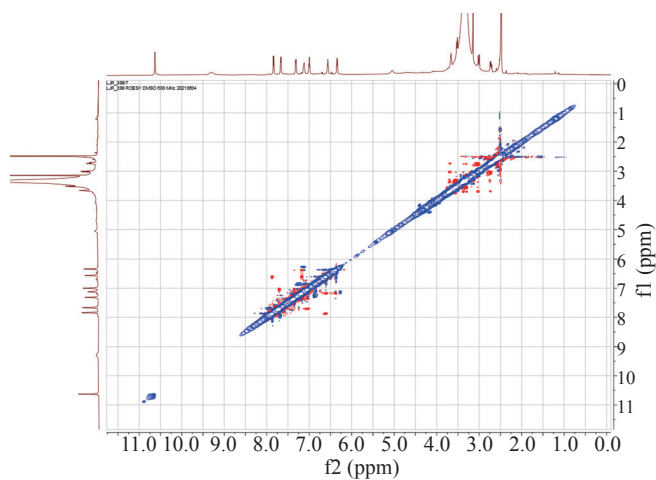
图S6 化合物1的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-d₆) (150 Hz)



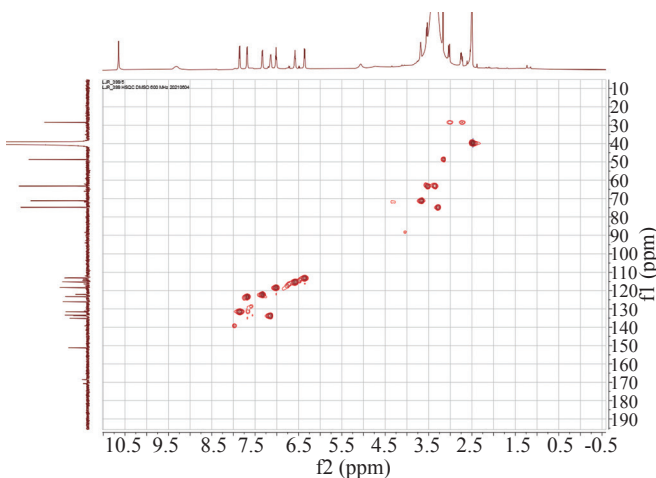
图S7 化合物1的DEPT谱图(in DMSO-d₆)



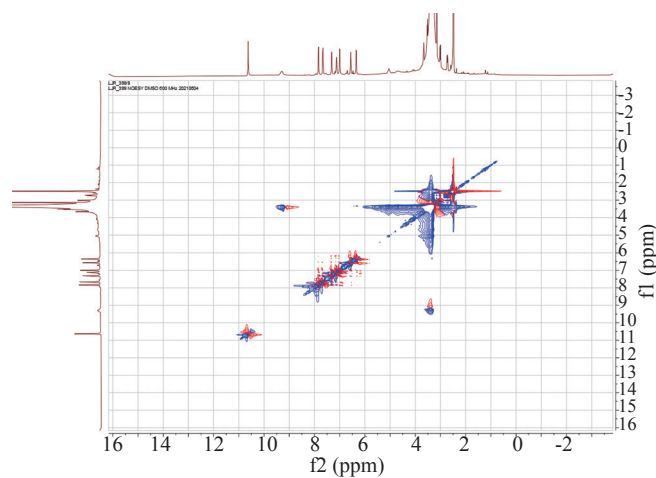
图S8 化合物1的¹H-¹H COSY谱图(in DMSO-*d*₆).



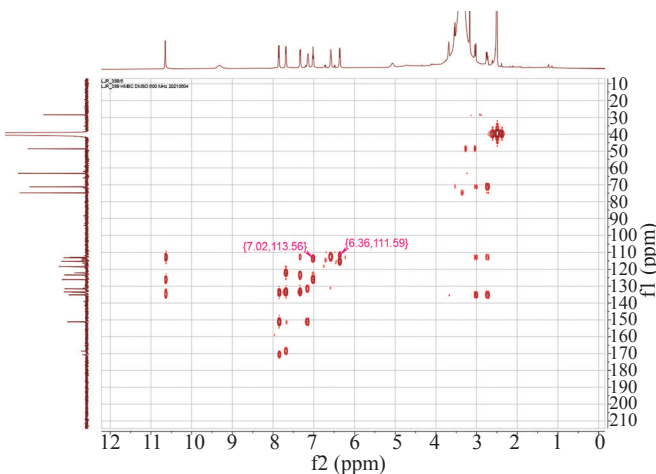
图S11 化合物1的ROESY谱图(in DMSO-*d*₆).



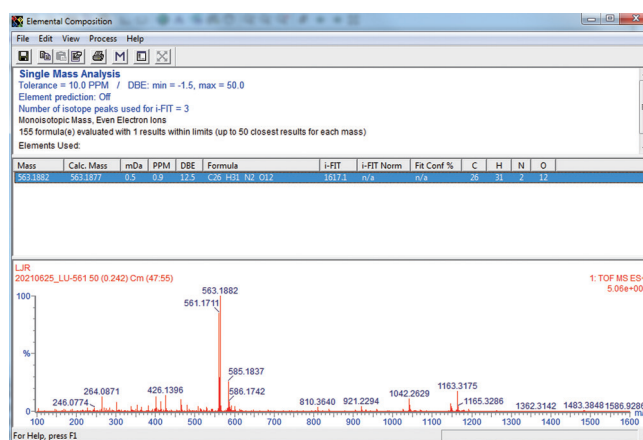
图S9 化合物1的HSQC谱图(in DMSO-*d*₆).



图S12 化合物1的NOESY谱图(in DMSO-*d*₆).



图S10 化合物1的HMBC谱图(in DMSO-*d*₆).



图S13 化合物2的高分辨电喷雾电离质谱谱图(正离子模式)

中国科学院上海有机化学研究所
SHANGHAI INSTITUTE OF ORGANIC CHEMISTRY, CAS

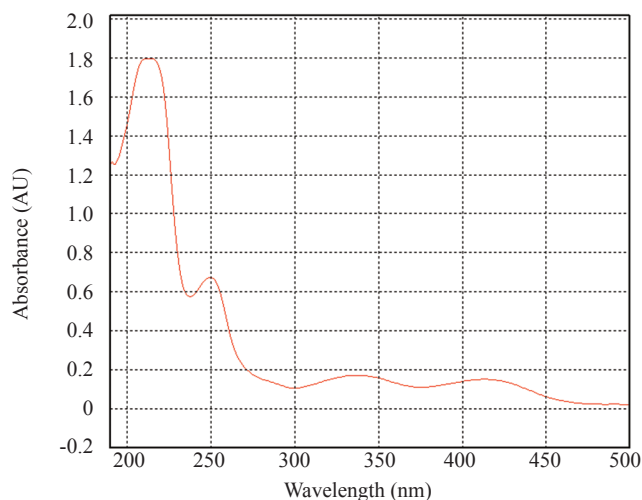
SICG
This sample was measured on an Autopol VI, Serial #91007
Manufactured by Rudolph Research Analytical, Hackettstown, NJ, USA
Measurement Date : Tuesday, 21-DEC-2021
Method Name : SR-N-5-20
Set Temperature : 20.0

n	Average	Std.Dev.	% RSD	Maximum	Minimum
5	72.00	0.00	0.00	72.00	72.00

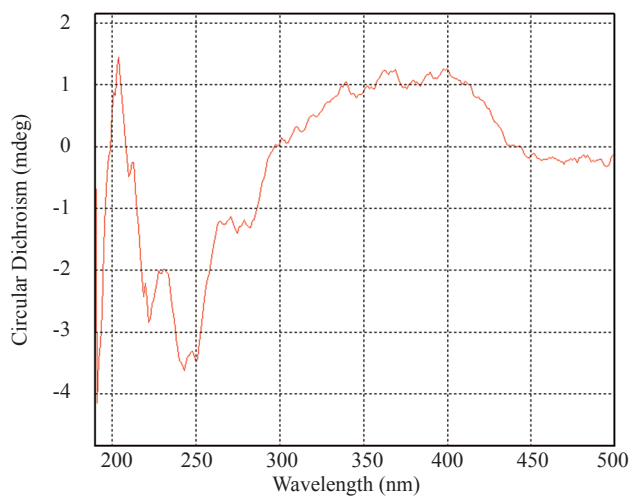
S.No	Sample ID	Time	Result	Scale	OR *Arc	WLG,mm	La,mm	Conc.g/100ml	Temp.
1	h-561	12:07:09	72.00	SR	0.180	589	100.00	0.250	20.0
2	h-561	12:07:14	72.00	SR	0.180	589	100.00	0.250	20.0
3	h-561	12:07:19	72.00	SR	0.180	589	100.00	0.250	20.0
4	h-561	12:07:23	72.00	SR	0.180	589	100.00	0.250	20.0
5	h-561	12:07:28	72.00	SR	0.180	589	100.00	0.250	20.0

File Name : C:\Autopol\Data\Readings_data_20211221\20632.pdf

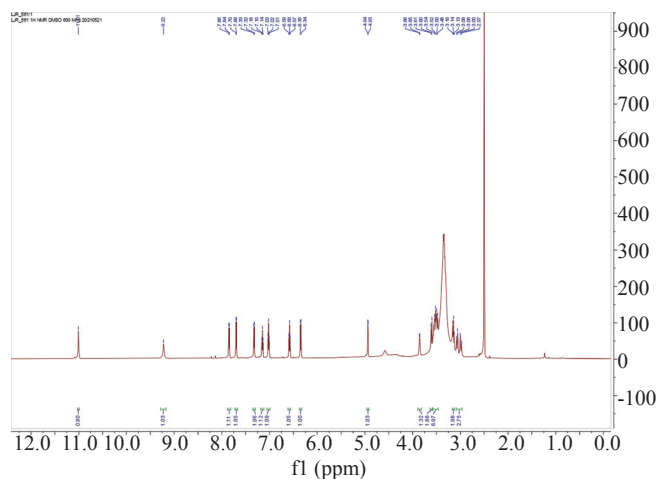
图S14 化合物2的比旋光度数据



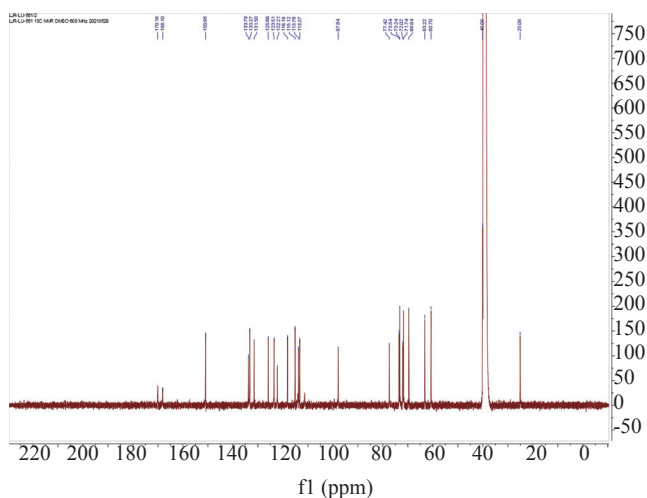
图S15 化合物2在甲醇中的紫外光谱



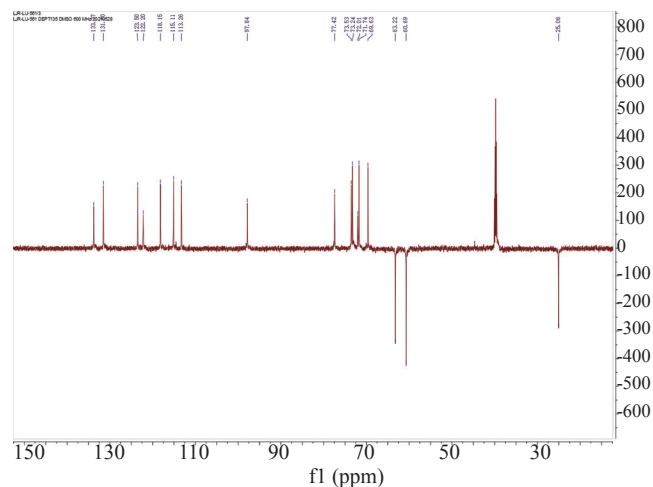
图S16 化合物2在甲醇中的电子圆二色光谱



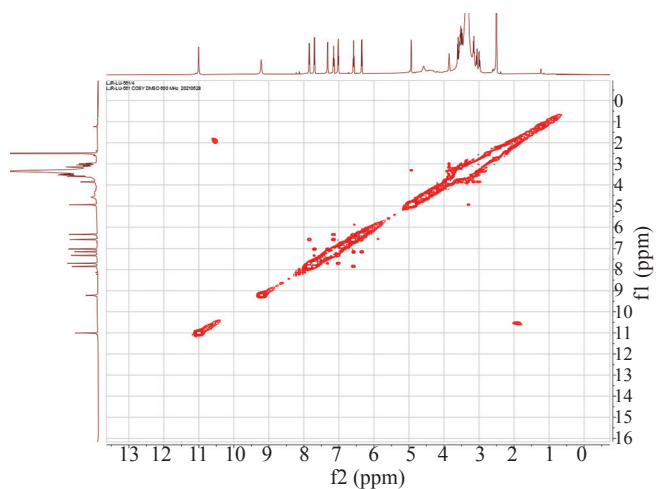
图S17 化合物2的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)



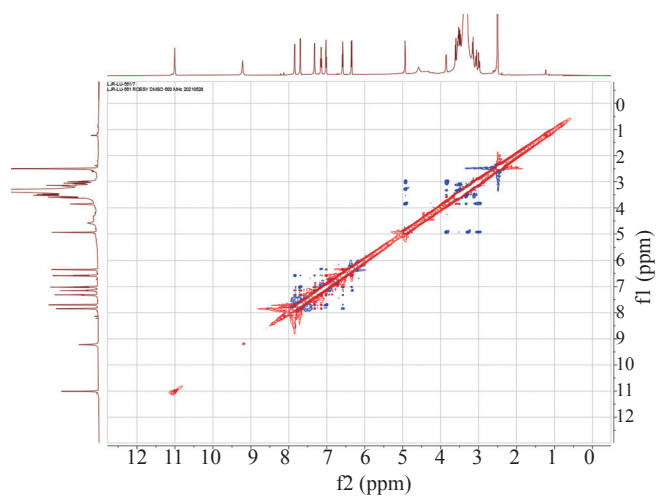
图S18 化合物2的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)



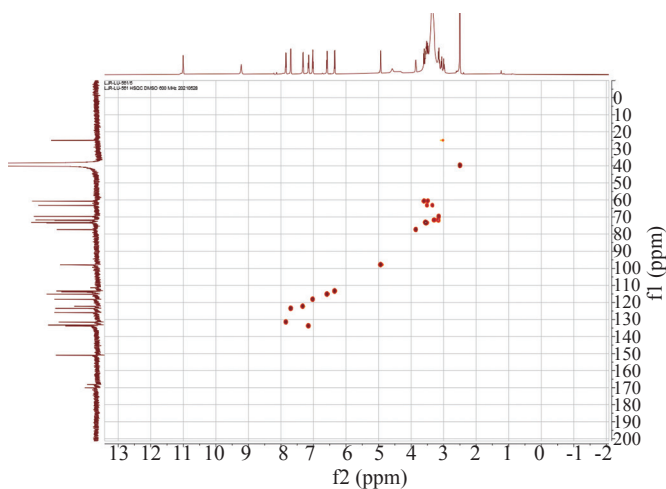
图S19 化合物2的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)



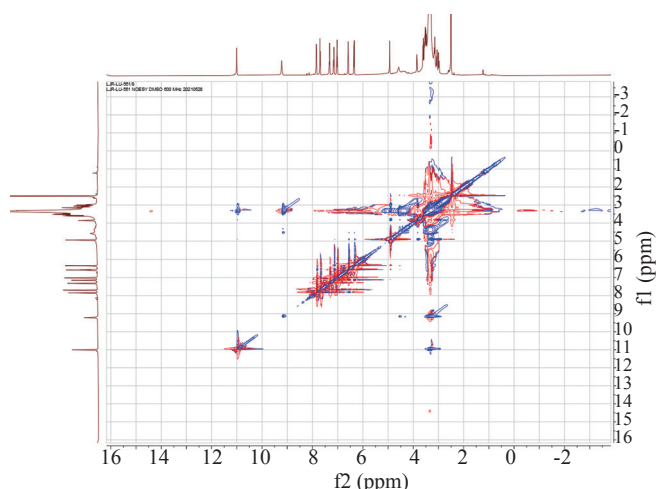
图S20 化合物2的¹H-¹H COSY谱图(in DMSO-*d*₆)



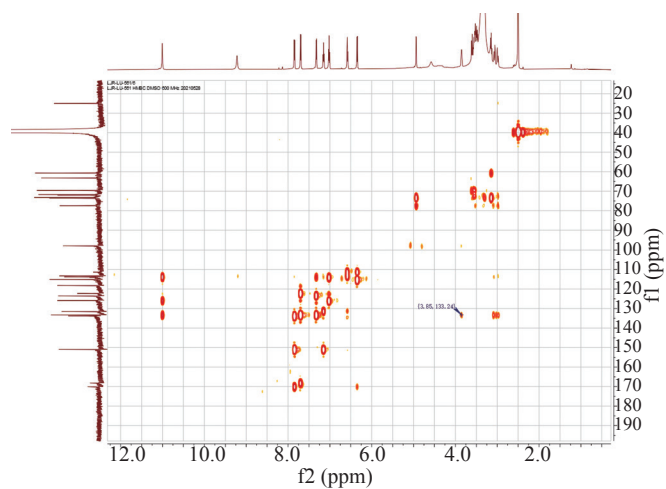
图S23 化合物2的ROESY谱图(in DMSO-*d*₆)



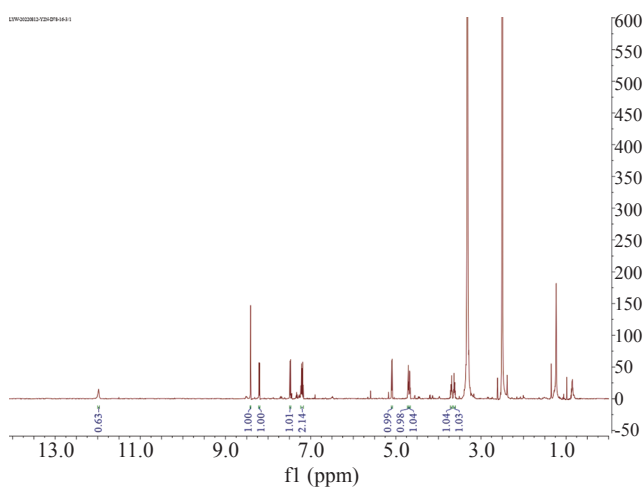
图S21 化合物2的HSQC谱图(in DMSO-*d*₆)



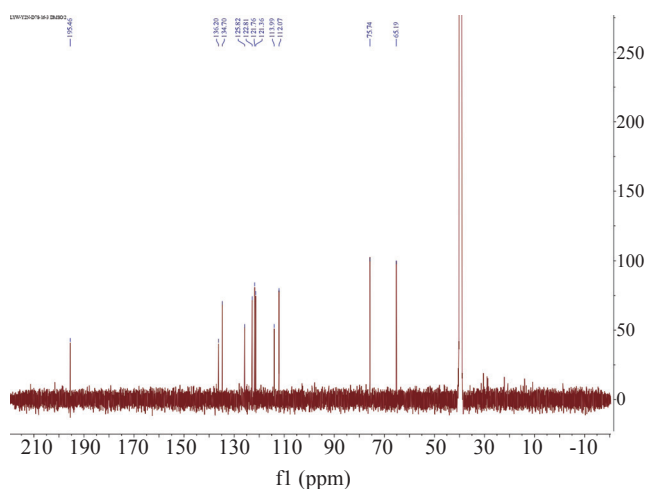
图S24 化合物2的NOESY谱图(in DMSO-*d*₆)



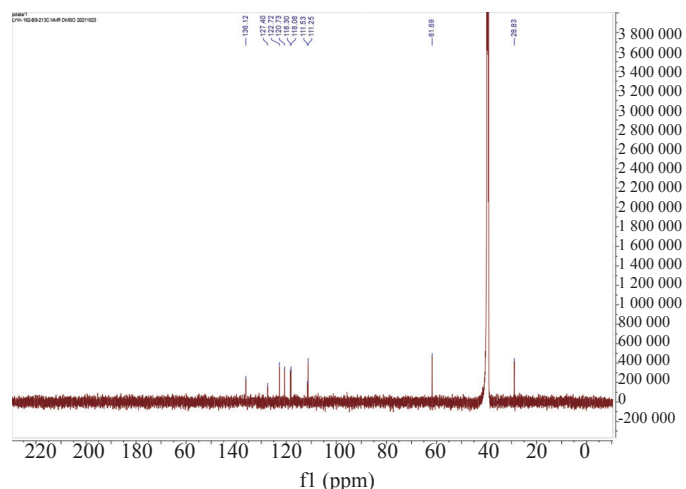
图S22 化合物2的HMBC谱图(in DMSO-*d*₆)



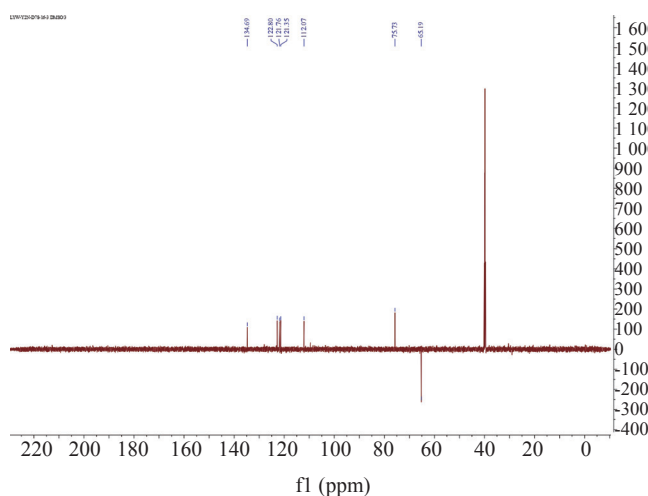
图S25 化合物3的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)



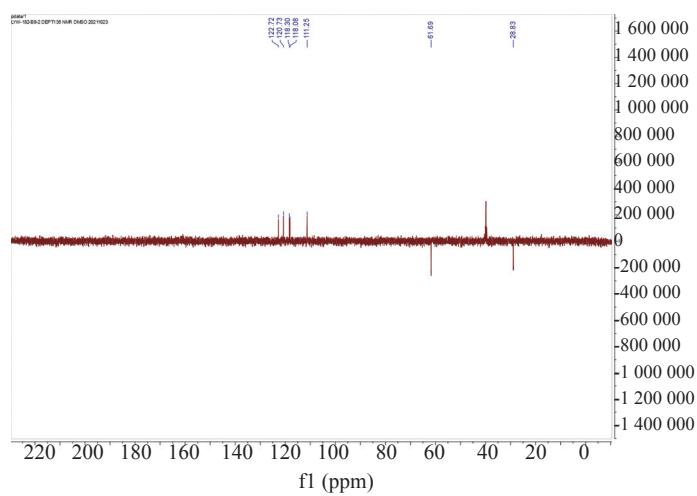
图S26 化合物3的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)



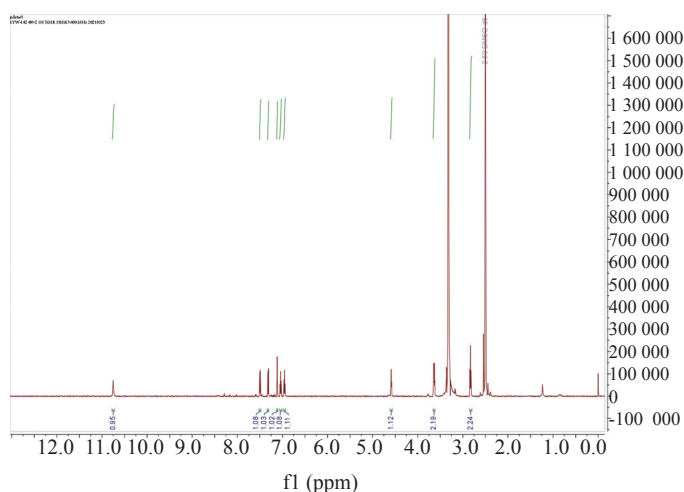
图S29 化合物4的¹³C核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (150 Hz)



图S27 化合物3的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)



图S30 化合物4的DEPT谱图(in DMSO-*d*₆)



图S28 化合物4的¹H核磁共振谱图(in DMSO-*d*₆) (600 Hz)

公式S1 范特霍夫光学叠加原理

$$[M] = [\alpha]_D \cdot MW / 100$$

注: $[M]$ -摩尔比旋光度; $[\alpha]_D$ -比旋光度; MW-摩尔质量。

范特霍夫光学叠加原理认为分子的光学活性是分子中各个手性中心以及其他可能影响光学活性的结构因素共同作用的结果。分子的总旋光能力可以看作是分子中各个部分旋光贡献的代数和, 对于含有多个手性中心的化合物, 每个手性中心对整个分子的旋光方向和大小都有一定的贡献, 而且这些贡献是相互独立的, 可以进行叠加。根据该原理, 我们进行摩尔比旋光计算, 化合物1的比旋光度 $[\alpha]_D^{25} + 28.4$, 其摩尔比旋光度实际值 $[M_1] = 113.6$, 化合物2的比旋光度 $[\alpha]_D^{25} + 72$, 其摩尔比旋光度实际值 $[M_2] = 404.6$ 。根据范特霍夫光学叠加原理, $[M_2] = [M_1] + [M \alpha_{-D-glucose}]$, 即化合物2的摩尔比旋光实际值近似于化合物1的摩尔比旋光度实际值和 α -D-glucose 摩尔比旋光度实际值之和, 求得 $[M \alpha_{-D-glucose}] = 291$, α -D-glucose 比旋光度实际值 $[\alpha]_D + 161.7$, 与文献中参考得到的 α -D-glucose 比旋光度理论值 $[\alpha]_D + 112$ 差异不大, 进一步验证该吡喃糖构型为 α -D-葡萄糖, $[M_2] = [M_1] + [M \alpha_{-D-glucose}]$ 可用于化合物2手性构型的确定。