

论文

诱导效应指数用于吲哚类生物碱质谱特征预测

张良晓, 梁逸曾, 欧阳永中

中南大学化学化工学院中药现代化研究中心, 长沙 410083

摘要:

在原有质谱裂解理论的基础上, 结合诱导效应指数, 通过比较吲哚生物碱中两类不同化学环境中的氮原子(吲哚环上的氮原子 $N_a$ 和侧链上的氮原子 $N_b$ )周围取代基诱导效应指数, 对质谱碰撞过程中电荷定域及吲哚生物碱的质谱特征进行了预测, 结果与标准物质质谱数据完全相同. 建立了利用比较杂原子诱导指数从化合物结构直接预测吲哚生物碱质谱特征的新方法. 该方法可用于吲哚生物碱和其它含氮化合物及其代谢产物的质谱特征的预测.

关键词: 诱导效应指数 质谱 吲哚类生物碱 质谱特征预测

Prediction of Mass Spectral Characteristic of Indole Alkaloids Utilizing Inductive Effect Index

ZHANG Liang-Xiao, LIANG Yi-Zeng\*, OUYANG Yong-Zhong

Research Center of Modernization of Chinese Herbal Medicines, College of Chemistry and Chemical Engineering, Central South University, Changsha 410083, China

Abstract:

In this article, based on the traditional theory of mass spectra, the inductive effect index of substitutes of both styles nitrogen atoms( $N_a$  and  $N_b$ ) in indole alkaloids are calculated, respectively, utilizing the formula proposed by Jiang Ming-qian. And then, the charge sites in ionization source and mass spectral characteristic are predicted by comparing the inductive effect index of  $N_a$  with that of  $N_b$  in same molecule. The results show that all predictive mass spectral characteristic(base peak) are correct. So the conclusion is gained that the charges localize on the nitrogen atom with lower inductive effect index. In addition, a facile approach to predict the mass spectral characteristic of the corresponding compounds is proposed based on the above conclusion.

Keywords: Inductive effect index Mass spectra Indole alkaloids Prediction of mass spectral characteristics

收稿日期 2008-03-10 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 梁逸曾

作者简介:

参考文献:

1. Yong D. W., Harry P.. Chromatography[J], 2006, 27(3): 135—140
2. Jonsson P., Gullberg J., Nordstrom A., *et al.* Anal. Chem.[J], 2004, 76(6): 1738—1745
3. Lisek J., Schauer N., Kopka J., *et al.* Nature Protocols[J], 2006, 1(1): 387—396
4. Yoo H. J., Liu H. C., Hakansson K.. Analytical Chemistry[J], 2007, 79(20): 7858—7866
5. Wang H. Y., Guo Y. L., Lu L.. J. Am. Soc. Mass. Spectrom.[J], 2004, 15(12): 1820—1832

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(328KB)

[HTML全文](OKB)

参考文献[PDF]

参考文献

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 诱导效应指数

▶ 质谱

▶ 吲哚类生物碱

▶ 质谱特征预测

本文作者相关文章

▶ 张良晓

▶ 梁逸曾

▶ 欧阳永中

▶ 张良晓

▶ 梁逸曾

▶ 欧阳永中

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

6. Wang H. Y., Zhang X., Guo Y. L., *et al.*. J. Am. Soc. Mass Spectrom.[J], 2006, 17(2): 253—263
7. Alberto L., Moraes B., Eberlin M. N.. J. Am. Soc. Mass Spectrom.[J], 2000, 11(8): 697—704
8. WANG Guang-Hui(王光辉), XIONG Shao-Xiang(熊少祥). Interpretation of Organic Mass Spectra(有机质谱解析)[M], Beijing: Chemical Industry Press, 2005: 27—29
9. CHEN Yao-Zu(陈耀祖), TU Ya-Ping(涂亚平). Principle and Application of Organic Mass Spectrometry(有机质谱原理及应用)[M], Beijing: Science Press, 2004: 44—46
10. McLafferty F. W., Turecek F.. Interpretation of Mass Spectra, Fourth Edition[M], Sausalito: University Science Books, 1993: 52—54
11. Smith R. M.. Understanding Mass Spectra A Basic Approach, Second Edition[M], Hoboken, John Wiley & Sons, Inc., 2004: 99—107
12. XUAN Wei-Dong(宣伟东), CHEN Hai-Sheng(陈海生), YUAN Zhi-Xian(袁志仙), *et al.*. Acad. J. Sec. Mil. Med. Univ.(第二军医大学学报)[J], 2006, 27(1): 92—96
13. ZHANG Xiang-Fei(张向飞), WANG Shu-Fang(王淑芳), LÜ Xian-Yu(吕宪禹). Modern Instruments[J], 2003, 9(5): 21—22
14. KANG Wen-Yi(康文艺), YANG Xiao-Sheng(杨小生). Chinese Traditional and Herbal Drugs[J], 2002, 33(8): 762—765
15. CONG Pu-Zhu(丛辅珠), LI Sun-Sheng(李笋生). Mass Spectrometry of Natural Organic Compounds(天然物有机质谱学)[M], Beijing: Chinese Medical Science Press, 2003: 18—25
16. ZHANG Xiu-Li(张秀利), WANG Yong-Xian(汪勇先), LI Jun-Ling(李俊玲). Organic Chemistry(有机化学)[J], 2003, 23(2): 198—202
17. JIANG Ming-Qian(蒋明谦), DAI Cui-Chen(戴萃辰). Inductive Effect Index and It's Application of QSAR(诱导效应指数及其在分子结构与化学活性间定量关系中的应用)[M], Beijing: Science Press, 1963: 5—7; 94—125
18. NIE Chang-Ming(聂长明), XIA Liang-Shu(夏良树). Chinese Journal of Organic Chemistry(有机化学)[J], 2000, 20(2): 237—242
19. YANG Jin-Rui(杨金瑞), YU Shang-Xian(余尚先), Chemistry(化学通报)[J], 2006, 69(5): 331—336

#### 本刊中的类似文章

1. 窦文超, 郇延富, 张志权, 张华容, 王超, 李明, 冯国栋, 金钦汉. 小型微波谐振腔用于蛋白质微波辅助酶解[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 238-241
2. 渠琛玲, 张寒琦, 张华蓉, 白雨萍, 温慧. 电喷雾质谱法研究氨基酸的质谱碎裂及其与人参皂苷Rb<sub>3</sub>的相互作用[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1721-1726
3. 黄河清, 陈平, 朱斌琳, 林青, 罗联忠. 用MALDI-TOF质谱和电子光谱研究纳米胰岛素核-铁蛋白的构建技术和特性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2073-2077
4. 陈东仕; 黄河清, ; 吴韩志, ; 蔡宗菁. 优化分离与鉴定蓝斑背肛海兔口腔神经节蛋白质组[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1257-1261
5. 陈兰慧, 胡冬华, 王道武, 杨双阳, 苏忠民, 刘淑莹. 小檗碱质谱碎片离子稳定性分析及碎裂机理的量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 905-908

#### 文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-11-16	frsahfkjsdagjk	hsjkafh@sdk.com	ugg boots	Ugg Boots Sale l Online Ugg Boots C Discount Uggs Dis Ugg Ugg Shoes Sal Sale Cheap Ugg B Cheap Uggs ugg k