

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

三元非对映异构体复合物的直接实验证据及其在对映体手性分离中的作用

于擎, 曹洁, 张成根

中国科学院研究生院化学与化学工程学院, 北京100049

摘要:

以含L-苯丙氨酸铜配位络合物的溶液作为手性流动相, 采用反相高效液相色谱法拆分了非衍生苯甘氨酸对映体, 使用质谱对拆分组分进行了结构鉴定, 得到了拆分组分的化学结构, 用量子化学计算预测了该结构的最稳定构象. 质谱实验结果表明, 拆分组分是一对铜混合配体复合物离子, 其中的一个配体是提供手性环境的流动相添加剂(L-苯丙氨酸), 另一配体是待拆分物质的某一构型对映体, 这对铜混合配体复合物离子本质上属于非对映异构体. 在色谱分离实验中还考察了手性流动相pH值、甲醇含量以及L-苯丙氨酸与Cu²⁺的摩尔比等因素对分离效果的影响.

关键词: 手性流动相 反相高效液相色谱法 苯甘氨酸 质谱 理论计算

Direct Experimental Evidence of Ternary Diastereomeric Complexes in Chiral Separations of Phenylglycine Enantiomers with Chiral Mobile Phase by RP-HPLC

YU Qing, CAO Jie*, ZHANG Cheng-Gen

College of Chemistry and Chemical Engineering, Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract:

Chiral separation of *D*-,*L*-phenylglycine by RP-HPLC was accomplished by adding a complex of optically active *L*-Phe-Cu²⁺ to the mobile phase. Chiral separation mechanism was further elucidated in light of unambiguously assigning the structure of the elutents from RP-HPLC by taking advantage of tandem mass spectrometry due to its unique capability of structural identification of the unknowns. Mass spectrometry results revealed that the pair of elutents represented a pair of ternary copper complexes with mixed ligands, providing the first experimental evidence. These complexes are diastereoisomer in nature. The optimized configuration of the diastereoisomer was predicted by theoretical calculation. In addition, the effects of the ratio of Cu²⁺ to *L*-Phe, pH of chiral mobile phase as well as the concentrations of methanol were investigated.

Keywords: Chiral mobile phase RP-HPLC Phenylglycine Mass spectrometry Theoretical calculation

收稿日期 2008-07-14 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

教育部科学技术研究重点项目(批准号: 106064)资助.

通讯作者: 曹洁, 女, 博士, 副教授, 主要从事手性拆分及识别的质谱研究, E-mail: jcao@gucas.ac.cn

作者简介:

参考文献:

1. Lan S. J., Chromatogr. Sci. [J], 1984, 22(9): 416—423
2. Galaverna G., Corradini R., Demunari E., *et al.* J. Chromatogr. A [J], 1993, 657(1): 43—54
3. Davies J. S., Peptides and Proteins [M], New York, Marcel Dekker, 1997: 1
4. Preston R. L., Comp. Biochem. Physiol. B [J], 1987, 87(1): 55—62
5. Aniello A. D', Giuditta A., J. Neurochem. [J], 1977, 29(6): 1053—1057
6. Roumeliotis P., Unger K. K., Kurganov A. A., *et al.* Angew. Chem. Int. Ed. Engl. [J], 1982, 21(12): 930—931
7. Nimura N., Suzuki T., Kasahara Y., *et al.* Anal. Chem. [J], 1981, 53(9): 1380—1383

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (395KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

▶ 手性流动相

▶ 反相高效液相色谱法

▶ 苯甘氨酸

▶ 质谱

▶ 理论计算

本文作者相关文章

PubMed

8. Davankov V. A., Navratil J. D., Walton H. F.. Ligand Exchange Chromatography[M], Boca Raton, CRC Press, 1988
9. John B. F., Matthias M., Chin K. M., *et al.* Mass Spectrom. Rev.[J], 1990, 9(1): 37—70
10. Tao W. A., Zhang D., Nikolaev E. N., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2000, 122(43): 10598—10609
11. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.* Gaussian 03, Revision B.01[CP], Pittsburgh, PA: Gaussian, Inc., 2004

本刊中的类似文章

1. 董红娟,刘志强,宋凤瑞,于湛,李惠琳,刘淑莹.芍药苷的电喷雾串联质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2066-2069
2. 黄河宁,李安章,翁露娜,林庆梅,黄河清,郑忠辉,李棋福,蔡宗苇.茶多酚锰合成、表征及络合和诱导肿瘤细胞凋亡的研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1072-1076
3. 黄欣,龚益飞,王毅,瞿海斌,程翼宇.代谢组学方法研究水飞蓟宾对四氯化碳致小鼠肝损伤的保护作用[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 714-719
4. 于阿娟,韦堃,吴养洁.环钼二茂铁亚胺-膦配合物的电喷雾离子阱质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 881-884
5. 路显锋,刘志强,邢俊鹏,刘淑莹.利用MALDI-TOF质谱技术研究MPEG-b-PCL两嵌段共聚物的嵌段长度及嵌段分布[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1267-1270
6. 刘悦,刘志强,李慧琳,宋凤瑞,刘淑莹.传统中药甘遂根中二萜类化学成分的电喷雾质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1727-1735
7. 李丽,刘志强,刘春明,Tsao Rong,吕磊,刘淑莹.车前草中苯乙醇苷化合物的电喷雾多级串联质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1430-1434
8. 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
9. 黎根,刘宁,刘志强,刘淑莹. β_2 -微球蛋白连续表位的免疫亲和质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 92-96
10. 陈焕文,李明,周建光,费强,姜杰,金钦汉,张天幕,张燮.电喷雾解吸电离质谱法用于临床尿样的直接分析[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1439-1442
11. 杨柳,许舜军,曾星,巫志峰,邓远辉,刘奕明,邓时贵,欧润妹.人参皂苷Rb₁在大鼠体内的药物代谢研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1042-1044
12. 冉小蓉,杨辉华,梁琼麟,陈君,王义明,罗国安,李平,李克明,陈玉武.质谱差谱方法及其在中药复方研究中的应用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 250-253
13. 陈军辉,谢明勇,王凤美,王小如,黎先春.RP-HPLC-ICP-MS技术用于西洋参中多元素溶出特性及形态分析[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1844-1848
14. 易伦朝,梁逸曾,曾仲大,袁大林,王平.交互移动窗口因子分析法(AMWFA)用于二维数据重叠色谱峰的比较分析[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2052-2055
15. 张华蓉,张寒琦,王玉堂,李丹,丁兰.电喷雾质谱法研究人参皂苷Rb₁和Rd与细胞色素c的非共价复合物[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2061-2065
16. 储艳秋,戴兆云,蒋公羽,郑松柏,陈玺,丁传凡.电喷雾质谱法研究谷胱甘肽与L型芳香性氨基酸非共价复合物[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(5): 869-875
17. 段继诚,刘和春,梁振,张维冰,张丽华,张玉奎.新型纳升级毛细管刻蚀电喷雾质谱接口研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 29-33
18. 万惠新,陈莉莉,李欣,王昕,胡定宇,沈旭,沈竟康.新型SARS-CoV 3CL蛋白酶荧光多肽底物的设计、制备及其酶动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 79-82
19. 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Rb₃的相互作用[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1721-1726
20. 毛华平,于有海,陈梁,卢晓峰,张万金,张红星.“哑铃状”偶氮化合物的合成与表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1999-2001
21. 邹向宇,周建光,冯国栋,张磊,李明,金钦汉.表面等离子体共振技术用于分析手性药物与蛋白作用差异的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1631-1634
22. 易伦朝,梁逸曾,曾仲大,王平,袁大林.GC-MS与交互移动窗口因子分析法(AMWFA)用于3种陈皮挥发油成分的比较分析[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1626-1630
23. 侯可勇,陈新华,董璨,李京华,姚琰,王海龙,王俊德,李海洋.快速测量挥发性有机物的膜进样-飞行时间质谱仪的设计和应用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1240-
24. 娄文勇,宗敏华.离子液体的组成及溶剂性质与木瓜蛋白酶催化特性的关系[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1283-
25. 姜瑞芝,王颖,陈英红,高阳,黄恩喜,高其品.猴头菌寡糖的分离及其结构确定[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1313-
26. 陈君,梁琼麟,李琨,罗国安,王义明.利用GC/MRM检测去势大鼠前列腺中睾酮、双氢睾酮和脱氢表雄酮[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2155-2158
27. 苏强,刘清飞,梁琼麟,王义明,,毕开顺,刘伟平,罗国安.高效液相色谱-电喷雾质谱(HPLC-ESI-MS/MS)测定新型抗癌铂配合物[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1486-1488
28. 李善玉,范佳,席景会,张海玉,杜宏伟,周欣,王旭,宁波,刘兰英,郝东云.哮喘大鼠淋巴细胞蛋白质组的分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1696-1700
29. 胡万群,许毓,刘飞,芮蕾,郭庆祥.液质联用检测人体血浆中的阿奇霉素[J]. 高等学校化学学报, 2007,28

(11): 2046-2050

30. 杨成对, 宋莉晖. 多杀菌素及其光照降解产物分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2056-2059
31. 李慧, 万乐人, 王弘, 端裕树, 陈世忠. 异黄酮同分异构体的ESI-IT-TOF质谱特征及区别[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2284-2289
32. 赵宇峰, 宋凤瑞, 越皓, 国新华, 李惠琳, 刘志强, 刘淑莹. 乌头碱的代谢产物去氧乌头碱的生物转化及其电喷雾串联质谱[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2051-2055
33. 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
34. 赵宇峰, 宋凤瑞, 国新华, 刘淑莹. 利用软电离质谱技术研究乌头碱在肠内细菌中的生物转化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 55-59
35. 胡斌, 陈兰慧, 郇延富, 张燮, 李明, 梁华正, 陈焕文. 甲基羟基钼酰离子与水的复分解反应[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 912-915
36. 赵峡, 付海宁, 于广利, 王金霞, 李小军, 管华诗. 固相酸解法制备古糖酯寡糖及其电喷雾质谱分析[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1344-1348
37. 陈东仕; 黄河清; ; 吴韩志; ; 蔡宗苇. 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
38. 董肖椿, 胥颖, Carlos AFONSO, 蒋为群, Jean-Claude TABET, 闻韧. 用生物质谱方法研究抗肿瘤双 β -咔啉与DNA及核苷酸的非共价结合[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1578-1582
39. 张良晓, 梁逸曾, 欧阳永中. 诱导效应指数用于咪唑类生物碱质谱特征预测[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1740-1743
40. 王一, 王永, 韩克利. 非血红素配合物 $[\text{FeIV}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCMe})]^{2+}$ 与 $[\text{FeIV}(\text{O})(\text{TMCS})]^{+}$ 的几何结构、电子结构、成键性和反应活性比较[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2469-2473
41. 刘淑清, 孙明忠, 赵宝昌. 质谱法分析蛇毒蛋白翻译后修饰[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2194-2200
42. 张洁, 严丽娟, 林琳, 陈文贵, 宋秀宇, 颜晓梅, 杭纬, 黄本立. 基于UPLC-oeTOF-MS的糖尿病及糖尿病肾病的代谢组学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2171-2173
43. 何坚, 黄荣夫, 余泉, 杭纬, 黄本立. 激光溅射电离飞行时间质谱用于不锈钢无标样半定量元素分析[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 57-59
44. 沈成银, 李建权, 徐国华, 王鸿梅, 韩海燕, 郑培超, 李虎, 王玉杰, 储焰南. TATP的质子转移反应的质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 274-278
45. 金红, 狄扬, 陈耀辉, 傅德良, 杨芑原. 正常组织和胰腺癌组织中差异表达蛋白的鉴定[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 302-307
46. 孙明忠, 刘淑清, 唐建武. 鼠肝癌淋巴道转移细胞模型的蛋白质组学研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 517-524
47. 孙麒, 马强, 何立, 巨勇, 赵玉芬. 甘露糖磷酸氨基酸缀合物的ESI-MS研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1070-1074
48. 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
49. 黄荣谊, 陈宏, 严娟, 朱坤, 刘光祥, 任小明. 三种新型铜配合物的合成、结构及理论计算[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 655-660
50. 赵怀鑫, 孙学军, 孙志伟, 闫涛, 张在庆, 刘钦泽, 索有瑞, 李玉林, 尤进茂. EASC荧光标记和LC-APCI-MS检测环境水样中游离脂肪酸[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 675-681
51. 周新文, 严钦, 周珮, 杨芑原. 磺基异硫氰酸苯酯化学辅助方法对新蛋白质进行从头测序[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 706-711

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题
				UGG Sale U UGGS Disco Cheap UG boots onlr sale ugg bo sale chea