

8 α -OH马尾杉碱B的结构鉴定:NMR谱分析及密度泛函理论研究

谭小健,王海顷,蒋华良,朱维良,蒋山好,朱大元,陈凯先,嵇汝运

中国科学院上海药物研究所.上海(200031)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 从千层塔中分离得到了一新生物碱,图谱分析不能确定其相对构型,为此我们运用量子化学密度泛函方法对其进行了NMR理论计算。核磁共振理论模拟表明,8 α -OH马尾杉碱B的化学位移值与实验值吻合得非常好。同时,理论研究与COSY,NOESY谱图的对照,以及偶合常数的分析、取代基效应的分析都进一步确证了该化合物的结构。此外我们的研究还表明,NMR的量子化学计算为天然产物的结构鉴定提供了一种新的工具。

关键词 [马尾杉碱B](#) [密度泛函理论](#) [核磁共振谱法](#) [化学位移](#)

分类号 [0641](#)

Structure assignment of 8 α -OH phlegmariurine B: A combined NMR and density functional theory investigation

Tan Xiaojian,Wang Haiqing,Jiang Hualiang,Zhu Weiliang,Jiang Shan hao,Zhu Dayuan,Chen Kaixian, Ji Ruyun

Shanghai Inst Mat Med., CAS.Shanghai(200031)

Abstract A combined NMR and density functional theory (B3LYP) investigation was carried out on a new alkaloid obtained from huperzia serrata Thunb (Trev.). The theoretical NMR data of 8 α -OH phlegmariurine B are in excellent agreement with the experimental results. The configuration was then established through analysis of the vicinal coupling constants and 2D NMR (NOESY and COSY) spectra. This work shows that the quantum chemistry study of NMR can serve as a promising tool in aiding structural assignment of natural products.

Key words [NMR SPECTROMETRY](#) [CHEMICAL SHIFT](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“马尾杉碱B”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [谭小健](#)
- [王海顷](#)
- [蒋华良](#)
- [朱维良](#)
- [蒋山好](#)
- [朱大元](#)
- [陈凯先](#)
- [嵇汝运](#)