质谱学报 2009 30 (5): 287-294 ISSN: 1004-2997 CN: 11-2979/TH

研究报告

EGC/GC和EGCG/GCG的ESI-IT-TOF质谱裂解规律研究

刘国强[1],董静[2];王弘[1];万乐人[2];端裕树[2];陈世忠[1]

1. 北京大学医学部药学院，北京 100191
2. 岛津国际贸易(上海)有限公司北京分公司，北京 100020

收稿日期 2009-3-5 修回日期 2009-7-6 网络版发布日期:

摘要 利用离子阱飞行时间质谱仪的高质量准确度、高分辨率、多级测定的性能，对表没食子儿茶素/没食子儿茶素(EGC/GC)和表没食子儿茶素没食子酸酯/没食子儿茶素没食子酸酯(EGCG/GCG)（二组对映异构体）的质谱裂解规律进行了研究，并利用氢/氘交换的方法对其裂解方式进行了确证。研究发现，儿茶素对映异构体间具有相同的质谱裂解途径，即使在多级质谱中也无明显区别，仅碎片离子的相对丰度存在差异。二级质谱中，EGC/GC在B环丢失CO_2，且其A, B环都可失去C_2H_2O。$^{1,4}A^-$、$^{1,3}A^-$、$^{1,2}A^-$和[M-H-B环]$^-$四个碎片离子是EGC/GC的特征性离子，通过此四离子质荷比的变化，可推测A环上的取代情况。因EGCG/GCG的结构上都含有没食子酸的取代基，在二级质谱中均可见*m/z* 169的特征性离子峰，此离子可用于EGCG/GCG和EGC/GC的区分。

关键词 表没食子儿茶素/没食子儿茶素(EGC/GC) 表没食子儿茶素没食子酸酯/没食子儿茶素没食子酸酯(EGCG/GCG) 氢氘（H/D）交换 质谱裂解

分类号 O 657.63

Study on the Fragmentation Pathways of EGC/GC and EGCG/GCG Using ESI-IT-TOF

LIU Guo-qiang[1];DONG Jing[2];WANG Hong[1];WAN Le-ren[2];DUAN Yu-shu[2];CHEN Shi-zhong[1]

1. School of Pharmaceutical Science, Peking University, Beijing 100191,China; 2. Shimadzu International Trading (Shanghai) Co. Limited, Beijing Office, Beijing 100020,China

Abstract The fragmentation pathways of EGC/GC and EGCG/GCG (two group stereoisomers) were studied using the ion-trap time-of-flight (IT-TOF) mass spectrometer with the advantages of high mass accuracy, high resolution, multistage analysis. Hydrogen/deuterium exchange method was used to elucidate the fragmentation processes. The results show that catechin stereoisomers possess the same fragmentation pathways except for some differences in the relative abundances of product ions， and can not be differentiated even in MS^n spectrum. The loss of CO_2 for EGC/GC occurs at B ring and the loss of C_2H_2O involve both A ring and B ring. The ions of $^{1,4}A^-$, $^{1,3}A^-$, $^{1,2}A^-$ and [M-H-B ring]$^-$ are characteristic product ions for EGC/GC, and it can be used to propose the substituent group of A ring through the *m/z* shift of these ions. The ion at *m/z* 169 corresponded to the gallic acid anion is characteristic fragmentation of EGCG/GCG, which is helpful for differentiating EGCG/GCG and EGC/GC.

Key words epigallocatechin/gallocatechin(EGC/GC) epigallocatechin gallate/gallocatechin gallate(EGCG/GCG) hydrogen/deuterium(H/D) exchange mass fragmentation

DOI

扩展功能
本文信息
Supporting info
[PDF全文](288KB)
[HTML全文](0KB)
参考文献
服务与反馈
把本文推荐给朋友
文章反馈
浏览反馈信息
相关信息
本刊中 包含“表没食子儿茶素/没食子儿茶素(EGC/GC)”的 相关文章
本文作者相关文章
· 刘国强
· 董静
· 王弘
· 万乐人
· 端裕树
· 陈世忠

通讯作者 陈世忠 chenshizhong66@163.com