

2-甲酰基雌甾化合物的合成及¹³C核磁共振谱和质谱的研究

谢如刚,涂勇,刘华骥,许建光,赵华明

四川大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 雌酚酮、雌二醇及炔雌醇与Grignard试剂交换后在HMPA存在下与聚甲醛反应,实现了雌甾化合物的区域选择性甲酰化,合成了一系列2-甲酰基雌甾化合物.测定了它们的¹³C NMR和MS,讨论了分子中互为邻位的酰基和羟基对甲酰基碳、A环dmdo及其它碳的 δ_c 的影响;讨论了主要碎片离子的生成途径及有关裂解规律.

关键词 [质谱法](#) [碳13核磁共振谱法](#) [甾族化合物](#) [雌甾二醇](#) [雌甾酮](#) [格氏试剂](#) [甲酰化](#) [聚甲醛](#)

分类号 [0629](#)

Syntheses of 2-formylestrogens and study on their C NMR and MS

XIE RUGANG, TU YONG, LIU HUAJI, XU JIANGUANG, ZHAO HUAMING

Abstract Reaction of EtMgBr and estrone, estradiol or ethynylestradiol with paraformaldehyde in hexamethylphosphoric triamide led to regiospecific formylation giving a series of 2-formylestrogens. The structures of the products were elucidated by ¹³C NMR and MS determination. The effect imposed by the formyl and the hydroxyl groups adjacent to one another on the δ_c of the carbon atoms of carbonyl, ring A and some others was discussed. Possible fragmentation pathway and the relevant regularity of fragmentation were also accounted for.

Key words [MASS SPECTROGRAPHY](#) [C13 NMR SPECTROMETRY](#) [STEROIDS](#) [ESTRADIOL](#) [ESTRONE](#) [GRIGNARD REAGENT](#) [FORMYLATION](#) [POLYOXYMETHYLENE](#)

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“质谱法”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [谢如刚](#)
- [涂勇](#)
- [刘华骥](#)
- [许建光](#)
- [赵华明](#)