

计算化合物分子式的五种方法

余志立, 高丽梅, 山广志, 刘宗英, 武连宗, 李艳萍

(中国医学科学院中国协和医科大学医药生物技术研究所, 北京 100050)

摘要: 计算化合物分子式的五种方法包括高分辨质谱法(HRMS), 高分辨质谱数据法(HRMS data), 元素分析法(EA), ^{13}C -核磁共振(COM, DEPT)数据法(^{13}C -NMR (COM, DEPT) data)和三相似法。第一种方法: 根据HRMS测得的分子量精确值M和环加双键数($r+db$), 推断出化合物的分子式。第二种方法: 计算分子式的方法与第一种方法相类似, 只不过是首先应按照测得的精确分子量的尾数, 估算出分子式的总含氢原子数, 然后再确定分子式。第三种方法: 按照HRMS测量的M、($r+db$)和EA测量的化合物的组成元素百分比含量, 计算分子式。第四种方法: 根据 ^{13}C -NMR测量的化合物分子各组成功能团的数目来确认分子式。第五种方法: 通过被测化合物的特征离子质谱与共同的分子式 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{COR}$ 进行比较后, 推断出分子式, 例如柱晶白霉素、麦地霉素和生枝霉素具有共同的分子式 $\text{C}_{35}\text{H}_{56}\text{NO}_{13}\text{RR}_1\text{R}_2$, 其差别仅是它们的R、 R_1 和 R_2 不同。

关键词: 质谱学; 计算分子式; 高分辨质谱法(HRMS); 高分辨质谱数据法(HRMS data); 元素分析法(EA); ^{13}C -核磁共振(COM, DEPT)法(^{13}C -NMR (COM, DEPT)); 三相似法

中图分类号: O 657. 63; O 576. 1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-2997(2004)02-121-06

Five Calculating Methods for the Molecular Formula of Compounds

YU Zhi-li, GAO Li-mei, SHAN Guang-zhi, LIU Zong-ying, WU Lian-zong, LI Yan-ping

(Institute of Medicinal Biotechnology, Chinese Academy of
Medical Sciences and Peking Union Medical College, Beijing 100050, China)

Abstract: Five methods of the molecular formula of calculated compounds consist of high resolution mass spectrometer (HRMS), high resolution mass spectrometer data (HRMS data), element analysis (EA), ^{13}C nuclear magnetic resonance (COM, DEPT) data (^{13}C -NMR data (COM, DEPT)) and three fact similarity. (1) The molecular formula of compound was supposed on the basis of precise molecular weight (M) and cycles plus double bonds ($r+db$) measured by HRMS. (2) The calculation method is similar with the previous, but the hydrogen atom amounts in molecular formula have been estimated to go by decimal of precise molecular weight at first. (3) The molecular formula of compound was determined according to the precise molecular weight and cycles plus double and the elemental percentage content by HRMS and EA. (4) It was calculated to go by amounts of the various functional groups acquired by ^{13}C -NMR. (5) On the basis of comparison between the characteristic ion mass spectra and the common molecular formula $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{COR}$, the detected mo-

lecular formula was certified, for example, Leucomycins, Midecamycins and Shenjimyins have the common molecular formula $C_{35}H_{56}NO_{13}R_1R_2$, their differences are only the different R_1 , R_2

Key words: mass spectrometry; calculation of molecular formula; HR-MS; HR-MS data; ^{13}C -NMR (COM, DEPT) data; three fact similarity

分子式和分子量是化合物重要的理化数据, 分子量可用质谱法准确测定。分子式计算方法也很多^[1-4]。本文拟简要介绍用现代质谱数据与其它分析数据相结合的五种计算方法。

1 高分辨质谱法 (HRMS)

化合物 a (31-Homorifamycin W)^[5] (图 1a) 经高分辨快原子轰击质谱法 (HR-FABMS) 测得 $[M+H]^+$ 的精确质量为 670.3221 Da, 分子量的精确值为 669.3149 Da, 分子式为 $C_{36}H_{47}NO_{11}$, 环加双键数 ($r+db$) 为 14。化合物 b 尼莫地 (Nimodipine)^[6] 经 HR-EMS 法测得分子量精确值为 418.1721 Da, 分子式为 $C_{21}H_{26}N_2O_7$, ($r+db$) 为 10。化合物 c 生枝霉素 (Shengjimyacin A)^[7]

经高分辨二次离子质谱法 (HRMS) 测得分子量精确值为 982.5956 Da, 分子式为 $C_{51}H_{86}N_2O_{16}$, ($r+db$) 为 10, 与理论值相符 (列于表 1)。

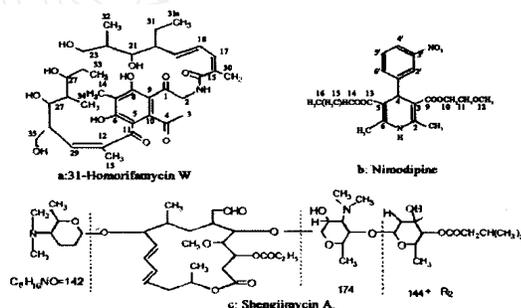


图 1 化合物 a, b, c 的结构

Fig 1 Geometric structure of compound a, b and c

表 1 化合物 a, b, c 的 HRMS 测量值与理论值

Table 1 HRMS data of compound a, b and c

化合物 Compound	测量方法 Measurement method	分子量精确值/Da Precise value of molecular mass	分子式 Molecular formula	($r+db$)
a	HR-MS Found	669.3149	$C_{36}H_{47}NO_{11}$	14
	理论值 Calculated	669.3146	$C_{36}H_{47}NO_{11}$	14
b	HR-MS Found	418.1721	$C_{21}H_{26}N_2O_7$	10
	理论值 Calculated	418.1738	$C_{21}H_{26}N_2O_7$	10
c	HR-MS Found	982.5956	$C_{51}H_{86}N_2O_{16}$	10
	理论值 Calculated	982.5992	$C_{51}H_{86}N_2O_{16}$	10

2 高分辨质谱数据 (HRMS data) 法

对已知成分的化合物, HRMS 法可测得一个 M 精确值, 一个分子式和一个 ($r+db$)。对未知化合物情况就复杂了。C、H、O、N 等参数是 MS 测量者凭经验输入计算机的, 若其中一项有错, 整个打印出的有关分子式的数据就全错。另外, 测量误差范围选择也是一个难题。误差小的数据有可能不是想要的, 而误差大的数据有可能是所需要的, 误差选择过小, 有可能把误差偏大而分子式准确的数据给删掉了。误差选择偏大, 又可能得到多个分子式数据。仪器长期使用, 仪

器分辨率下降也会给测定增加难度。基于以上原因, 经验不足的人难以准确判断数据。采用 HR-MS data 算法可避免这些问题。此法与 HR-MS 相结合, 相辅相成, 经过对比选择后, 可得到准确结果。

化合物 a (31-Homorifamycin W) 经高分辨快原子轰击质谱 (HR-FABMS) 法测得 $[M+H]^+$ 精确值为 670.3227 Da^[5], M 精确值为 669.3149 Da, 小数为 0.3149 Da, 表明该分子式内含 H 在 36 个以上。按高分辨计算分子式的方法^[8], 小数 0.1~0.2 表明分子式含氢 12 个以

上, 小数为 0.2~0.3 表明分子式含氢 24 个以上, 小数 0.3~0.4 表明分子式含氢 36 个以上, 求出 A 的 [M-36H] 的精确值为 633.0332, 整数为 52, 余数为 9, 小数范围为 0.0332 ± 0.006 (列于表 2)。计算化合物分子式为 C₃₆H₄₁NO₁₁, (r+db) 为 14 (列于表 3)。

表 2 化合物 a 的 [M-36H] 的整数、余数和小数
Table 2 Integer, remainder, decimal of [M-36H]

669.3149	12	$\sqrt{52}$	整数 52
<u>36.2817 (36H)</u>		<u>60</u>	余数 9
633.0332		<u>33</u>	小数 0.0332 ± 0.006
		<u>24</u>	
		9	

表 3 化合物 a 的分子式计算

Table 3 Calculation of molecular formula of compound a

小数 Decimal	H	N	O	-C	分子式 Molecular formula	(r+ db)
02.734	7	1	6	9	C ₄₃ H ₄₃ NO ₆	23
02.868	3	5	2	8	C ₄₄ H ₃₉ N ₅ O ₂	28
03.270	3	3	0	3	C ₄₉ H ₃₉ N ₃	32
03.321	11	1	11	16	C ₃₆ H ₄₇ NO ₁₁	14
03.455	7	5	7	15	C ₃₇ H ₄₃ N ₅ O ₇	19

若两种方法的结果不相符时, 就要对数据重新处理或重新测定。例如某化合物^[9]经高分辨电子电离质谱 (HR-EMS) 法测得分子量为 396.2912 Da, 分子式为 C₂₂H₂₀O₇。按 HR-MS data 法规定, 小数为 0.2912 表明该化合物分子式内含 30 个以上 H, 这与报道的该分子式是不相符的。

该算法适用于分子式内含 O 在 11 个以内, 含 N 在 6 个以内。若分子式内含 O、N 超过此数目, 可采用变通方法, 即采用 [M-10O] 或 [M-6N] 精确值, 再采用上述算法也能得到正确结果。

化合物 Shengjinyin A1 经 HR-SMS 测得 [M+H]⁺ 为 983.6034 Da, M 精确值为 982.5956 Da。因该分子式内含 O 很多, 先求

[M-10O] 为 822.6466 Da, 小数为 0.6466, 表明该分子式内含 H 在 72 个以上。求出 [M-10O-72H] 精确值为 750.0850 Da, 整数 62, 余数 6, 小数范围 0.0850 ± 0.006 (列于表 4) 计算该分子式为 C₅₁H₈₆N₂O₁₆, (r+ db) 为 10 (列于表 5)。

表 4 Shengjinyin A1 的

[M-10O-72H] 精确值、整数、余数、小数

Table 4 Integer, remainder, decimal of [M-10O-72H] of Shengjinyin A1

982.5956	12	$\sqrt{62}$	整数 62
<u>159.9490 (10O)</u>		<u>72</u>	余数 6
822.6466		<u>30</u>	小数 0.0850 ± 0.006
<u>822.6466</u>		<u>24</u>	
72.5616 (72H)		6	
750.0850			

表 5 Shengjinyin A1 的分子式计算

Table 5 Calculation of molecular formula of shengjinyin A1

小数 Decimal	H	N	O	-C	分子式 Molecular formula	(r+ db)
07.931	10	2	1	4	C ₅₈ H ₈₂ N ₂ O ₁₁	19
08.117	14	4	8	16	C ₄₆ H ₈₆ N ₄ O ₁₈	6
08.519	14	2	6	11	C ₅₁ H ₈₆ N ₂ O ₁₆	10
09.055	10	4	0	5	C ₅₇ H ₈₂ N ₄ O ₁₀	19
09.106	18	2	11	18	C ₄₄ H ₉₀ N ₂ O ₂₁	1

3 元素分析法

利用质谱法测得分子量 M 数据和元素分析数据计算分子式也是一种很方便的方法^[1]。

化合物 b (Nimodipine) (图 1b) 经 EMS 法测得的分子量为 418 Da。元素分析法测得 C% 为 60.68, H% 为 6.30, N% 为 6.75。计算该分子式为 $C_{21}H_{26}N_2O_7$ (表 6)^[6]。

表 6 化合物 b 的分子式计算
Table 6 Calculation of molecular formula of compound b

C 数	C%M/12.01= (0.0608 × 418)/12.01= 21.1	21
H 数	H%M/1.01= (0.0630 × 418)/1.01= 26.1	26
N 数	N%M/14.01= (0.0675 × 418)/14.01= 2.0	2
O 数	O%M/16.00= (0.2627 × 418)/16.00= 6.9	7
分子式	$C_{21}H_{26}N_2O_7$	
分子量	418	

4 ^{13}C -NMR (COM, DEPT) 数据法^[1,3,4]

^{13}C -NMR 谱中 COM (全去偶) 能测得分子式内全部 ^{13}C 数目和化学位移, 而 DEPT 法或 NEPT 法能正确地判断分子式内含 CH_3 , CH_2 , CH 的数目, 并计算化合物的分子式和 $(r+db)$ 。

化合物 c (Shengjinyin A1)^[4,7], 用二次离子质谱 (SMS) 法测得准分子离子峰 $(M+H)^+$ 为 983, 分子量为 982 Da。用 ^{13}C -NMR (COM, DEPT) 法测得该分子式内含 CH_3 9 个, NCH_3 4 个, OCH_3 1 个, CH_2 9 个, $CH=$ 4 个, CH 19 个, 孤 C 1 个, $C=O$ 4 个, $(r+db) > 7$ (表 5)。该分子式为 $C_{51}H_{86}N_2O_{16}$, $(r+db)$ 为 10 (表 7)。

化合物 b (Nimodipine) 经 EMS 法测得分子量为 418 Da。用 ^{13}C -NMR (COM, DEPT) 法测得该分子式内含 CH_3 4 个, OCH_3 1 个, CH_2 2 个, CH 6 个, 季 C = 6 个, $C=O$ 2 个, 该分子式为 $C_{21}H_{26}N_2O_7$, $(r+db)$ 为 10 (表 8)^[6]。

表 7 Shengjinyin A1 的分子式的计算

Table 7 Calculation of molecular formula of Shengjinyin A1

MS			982		
^{13}C NMR			775	$C_{51}H_{86}N_2O_{16}$	$(r+db) > 7$
差数 Difference			207		
H	N	O	MF	$(r+db)$	
3	2	11	$C_{51}H_{86}N_2O_{16}$	10	
19	2	10	$C_{51}H_{102}N_2O_{15}$	2	
7	4	9	$C_{51}H_{90}N_2O_{14}$	9	

表 8 Nimodipine 的分子式计算

Table 8 Calculation of molecular formula of Nimodipine

MS			418		
^{13}C NMR			325	$C_{21}H_{26}N_2O_7$	$(r+db) > 8$
差数 Difference			93		
H	N	O	分子式 Molecular formula	$(r+db)$	
13	0	5	$C_{21}H_{38}O_8$	3	
29	0	4	$C_{21}H_{54}O_7$	- 5	
1	2	4	$C_{21}H_{26}N_2O_7$	10	
17	2	3	$C_{21}H_{42}N_2O_6$	2	

5 三相似法

许多化合物的结构很复杂, 但很相似。结构的相似性导致质谱裂解规律的相似性和特征离子的相似性 (三相似性)。利用三相似性很容易判断该化合物的结构式、分子式和 $(r+db)$ 。该方法对未知化合物测定有利。

有通式为 $CH_3(CH_2)_nCOR_1$ 的长链羰基化

合物, R_1 为 OH , OCH_3 , OC_2H_5 , CH_3 , C_2H_5 , NH_2 等。它们有相同的裂解规律和相似的特征离子, 如 m/z ($43+R_1$), m/z ($43+13+R_1$), m/z ($56+56+R_1$) 和 m/z ($56+56+56+R_1$)。前两个峰的质量差为 13, 后两个峰的质量差为 56 (列于表 9)^[2]。

表 9 化合物 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{COR}_1$ 的
裂解规律和特征子离子

Table 9 Fragmentation, characteristic fragment
ion of $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_n\text{COR}_1$

R ₁	OH	OCH ₃	OC ₂ H ₅	CH ₃	C ₂ H ₅	NH ₂
<i>m/z</i>	60	74	88	58	72	59
	73	87	101	71	85	72
	129	143	157	127		
	185	199				

从中草药猫爪草中提取一个生理活性物质即肿瘤坏死因子诱生剂 RT-A 2^[21], 经 E M S 法测得分子量为 256 Da, 特征子离子有 *m/z* 60, 73, 129, 185 等, 判断该化合物为 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOH}$ 。从发酵产物中分离到一个植物生长调节剂 EB-82B^[10], 经 E M S 法测得分子量为 396

Da, 特征子离子有 *m/z* 60, 73, 129, 185, 241 等, 判断该化合物为 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOH}$ 。化合物 2-十一(烷)酮(2-undecanone)为昆虫生长调节剂^[11], 经 E M S 法测得分子量为 170 Da, 特征子离子有 *m/z* 58, 71, 127 等, 判断该化合物为 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{COCH}_3$ 。化合物十二(烷)酰胺(Dodecanamide)经 E M S 法测得分子量为 199 Da, 特征子离子有 *m/z* 59, 72, 128 等, 判断该化合物为 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{CONH}_2$ ^[12]。柱晶霉素(Leucomycins), 麦地霉素(Midecamycins)和 Shengjinycons 都是大环内酯类抗生素, 分子量大, 结构复杂, 组分很多, 但主要区别在于 R, R₁, R₂。用 FABMS 或 SMS 可测得准分子离子峰 $(M+H)^+$ 和特征子离子, 并推算各组分的分子式 $\text{C}_{35}\text{H}_{56}\text{NO}_{13}\text{RR}_1\text{R}_2$ 和 $(r+db)$ (列于表 10)。

表 10 Leucomycins, Midecamycins 和 Shengjinycons 的分子式

Table 10 Molecular formula of Leucomycins, Midecamycins and Shengjinycons

化合物 Compound	R	R ₁	R ₂	分子量/Da Molecular weight	子离子 <i>m/z</i> Fragment ion	$\text{C}_{35}\text{H}_{56}\text{NO}_{13}\text{RR}_1\text{R}_2$	<i>r+db</i>
Leucomycins A 1	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	785	174, 229	$\text{C}_{40}\text{H}_{67}\text{NO}_{14}$	8
A 3	H	COCH_3	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	827	174, 229	$\text{C}_{42}\text{H}_{69}\text{NO}_{15}$	9
A 4	H	COCH_3	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	813	174, 215	$\text{C}_{41}\text{H}_{67}\text{NO}_{15}$	9
A 5	H	H	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	771	174, 215	$\text{C}_{39}\text{H}_{65}\text{NO}_{14}$	8
A 6	H	COCH_3	COCH_2CH_3	799	174, 201 (202)	$\text{C}_{40}\text{H}_{65}\text{NO}_{15}$	9
A 7	H	H	COCH_2CH_3	757	174, 201 (202)	$\text{C}_{38}\text{H}_{63}\text{NO}_{14}$	8
A 8	H	H	COCH_3	785	174, 187	$\text{C}_{39}\text{H}_{65}\text{NO}_{15}$	9
A 9	H	H	COCH_3	743	174, 187	$\text{C}_{37}\text{H}_{61}\text{NO}_{14}$	8
U	H	COCH_3	H	743	174, 145	$\text{C}_{37}\text{H}_{61}\text{NO}_{14}$	8
V	H	H	H	701	174, 145	$\text{C}_{35}\text{H}_{59}\text{NO}_{13}$	7
Midecamycins A 1	H	COCH_2CH_3	COCH_2CH_3	813	174, 201	$\text{C}_{41}\text{H}_{67}\text{NO}_{15}$	9
A 2	H	COCH_2CH_3	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	827	174, 215	$\text{C}_{42}\text{H}_{69}\text{NO}_{15}$	9
Shengjinycons A 1	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COC_2H_5	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	982	142, 174, 229	$\text{C}_{51}\text{H}_{86}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
A 2 α	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COC_2H_5	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	968	142, 174, 215	$\text{C}_{50}\text{H}_{84}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
A 2 β	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COC_2H_5	$\text{COCH}(\text{CH}_3)_2$	968	142, 174, 215	$\text{C}_{50}\text{H}_{84}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
B 1	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COCH_3	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	968	142, 174, 229	$\text{C}_{50}\text{H}_{84}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
B 2 α	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COCH_3	$\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	954	142, 174, 215	$\text{C}_{49}\text{H}_{82}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
B 2 β	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COCH_3	$\text{COCH}(\text{CH}_3)_2$	954	142, 174, 215	$\text{C}_{49}\text{H}_{82}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
B 3	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COC_2H_5	COCH_2CH_3	954	142, 174, 201	$\text{C}_{49}\text{H}_{82}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
C 1	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COC_2H_5	COCH_3	940	142, 174, 187	$\text{C}_{48}\text{H}_{80}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
C 2	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COCH_3	COCH_2CH_3	940	142, 174, 201	$\text{C}_{48}\text{H}_{80}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
D	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	COCH_3	COCH_3	926	142, 174, 187	$\text{C}_{47}\text{H}_{78}\text{N}_2\text{O}_{16}$	10
E	$\text{C}_8\text{H}_{14}\text{NO}$	H	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	926	142, 174, 229	$\text{C}_{48}\text{H}_{82}\text{N}_2\text{O}_{15}$	9
A 0	H	COC_2H_5	$\text{COCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	841	174, 229	$\text{C}_{43}\text{H}_{71}\text{NO}_{15}$	9

柱晶白霉素 (Leucomycins) A₄ 经 FAB/MS 法测得准确分子离子峰 $[M + H]^+$ 为 814, 分子量为 813 Da, 特征子离子有 m/z 174, 215, 推断该化合物分子式为 C₄₁H₆₇N₁₅O₁₅, ($r + db$) 为 9^[13]。

Shenjmycin 是生物工程基因的方法得到一组复合抗生素, 有 12 个组分。Shenjmycin A₁ 经 SMS 法测得 $[M + H]^+$ 为 983, 分子量为 982 Da, 特征子离子有 m/z 142, 174 和 229, 推断 A₁ 的分子式为 C₅₁H₈₆N₂O₁₆, ($r + db$) 为 10, 与 HR-SMS 法测得的分子式和 ¹³C-NMR (COM、DEPT) 数据法计算的分子式是相同的^[14, 7]。

Shenjmycin A_{2α} 和 Shenjmycin A_{2β}^[15] 的分子量相同, 特征子离子相同, 分子式相同。用 ¹³C-NMR (COM、DEPT) 法检查。判断 A_{2α} 为 4-丁酰化螺旋霉素 C, 是已知化合物, 而 A_{2β} 为 4-异丁酰化螺旋霉素 C, 是个新抗生素。

灰黄霉素 (griseofulvin) 和尿中代谢物^[16] 6-氧-二甲基灰黄霉素 (6-O-dimethyl glyoxime, 6-O-DMG) 经 EMS 测得前者分子量为 352 Da, 后者为 338 Da, 两者均有相同的子离子 m/z (M-15), m/z (M-31), m/z (M-42), m/z (M-68), m/z (M-98), m/z (M-137) 和 m/z (M-138), 公共碎片有 m/z 69, m/z 138。¹H-NMR 谱表明, 前者在 δ 3.66, 3.97, 和 4.07 ppm 处有 3 个单峰, 表明有 3 个 OCH₃ 基团, 后者在 δ 3.69, 3.88 ppm 处有 2 个单峰, 表明有 2 个 OCH₃ 基团。红外 (IR) 谱差别是代谢物在 3565 cm⁻¹ 处有一个游离酚羟基的强吸收带, 表明该基团在 6 位, 而灰黄霉素却没有这个吸收带。灰黄霉素的分子式为 C₁₇H₁₇O₆Cl, 而代谢物的分子式为 C₁₆H₁₅O₆Cl。

用三相似法鉴别 CH₃(CH₂)_nCOR₁, Leucomycins, Midecamycins 和 Shenjmycins 的各组分、分子式、结构式和 ($r + db$) 还是很方便和可靠的^[17]。

参考文献:

[1] 余志立 计算化合物分子式的三种方法[J] 质谱学报, 1996, 17(4): 68
 [2] 余志立, 王燕云 长链羰基化合物的质谱裂解规律及分子式计算[J] 质谱学报, 1999, 20(1): 57
 [3] 苏焕华, 王光辉, 王维国, 等 现代有机质谱技术及应用[M] 北京: 中国人民公安大学出版社, 1999

465

[4] 余志立, 王燕云, 佟红岩. 用¹³C-NMR (COM、DEPT) 数据计算化合物的分子式[J]. 波谱学杂志, 2000, 17(3): 249
 [5] Wang Nanjin, Han Baoling, Yamashita Noriyuki, et al. 31-Homofanycin W, a Novel Melibolide From Amycolatopsis mediterranei[J]. J Antibiotic, 1994, 47(5): 726
 [6] 余志立, 胡来兴, 胡琼莹, 等 新型钙拮抗剂 Nimodipine 的质谱研究[J] 质谱学报, 2001, 22(2): 59
 [7] Sun Chenghang, Jiang Wei, Huang Jie, et al. Shengjincins: a Group of Hybrid Antibiotics, 4-Acylspiramycins[J]. Actinomycetologica, 1999, 13(2): 120
 [8] 洪山海 光谱解析法在有机化学中的应用[M] 北京: 科学出版社, 1981, 653~658
 [9] 胡海峰, 朱宝泉, 龚炳永, 等 微生物来源的胆固醇生物合成酶抑制剂-抗生素 sipi-8917-1 的研究[J] 中国抗生素杂志, 1998, 23(4): 217
 [10] 王海燕, 陈勇, 许鸿章 毒虫霉 EB-82 灭蚜菌发酵产物的有效成分研究, 化合物 EB-82B 的分离和结构分析[J] 中国抗生素杂志, 1998, 23(6): 404
 [11] 贺尊诗, 张振权, 李来明, 等 有机农药质谱手册[M] 吉林: 东北师范大学出版社, 1992, 330
 [12] S. R. Heller EPA/NIH Mass Spectra Data Base [M] Washington: USA Government Printing Office, 1978: 1170
 [13] 余志立, 孙承航, 姜威, 等 用 FAB/MS 法研究抗生素柱晶白霉素, 4-酰化螺旋霉素和 shengjincins 的质谱裂解规律[J] 质谱学报, 2001, 22(1): 63
 [14] 方纲, 叶绪慰, 刘熙, 等 抗菌素生物理化特性(第二册)[M] 北京: 人民卫生出版社, 1981, 91~95, 173~175
 [15] 孙承航, 金文藻 天然来源的新化合物 4-异丁酰螺旋霉素 III[J] 中国抗生素杂志, 1998, 23(4): 253
 [16] 余志立 灰黄霉素及其尿中代谢物的质谱研究[J] 质谱学报, 1996, 17(1): 72
 [17] 余志立, 高丽梅, 郑中辉, 等 三相似法在结构分析中的应用[J]. 分析测试学报, 2002, 21(5): 115.