

新型降血胆固醇的物质 Monacolin K 的 质谱研究

余志立 袁建勇

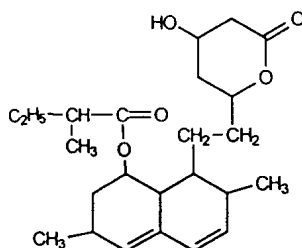
(中国医学科学院中国协和医科大学 医药生物技术研究所以 北京 100050)

[摘要]本文报告了新型降血胆固醇的物质 Monacolin K 的 EI 谱和 FAB 谱, 并根据高分辨质谱 (HRMS) 数据讨论了主要特征碎片离子的裂解途径。m/z 224 碎片离子可能来自 3 氢原子的重排的结果。

关键词: Monacolin K 特征碎片离子 裂解途径 降血胆固醇

1 引言

Monacolin K 是 1 种新型降血胆固醇物质, 动物试验表明, 它较好的降血胆固醇的功能^(1, 2, 3)。本文报告了 Monacolin K 的 EI 谱和 FAB 谱, 并根据 HRMS 数据讨论了主要特征碎片离子的可能裂解途径。



Monacolin K

图 1 Monacolin K 的结构

2 实验部分

2.1 仪器和测定条件

JMS-DX300 质谱仪, JMA-3100 数据处理系统。EI 离子源, 加速电压 3KV, 离子源温度 230, 发射电流 300mA, 低分辨测定时分辨率 500, HR 测定时分辨率 1000。FAB 离子源, Ar 气, 底物甘油。

2.2 样品

Monacolin K (由我所姜志贤教授提供)

3 结果与讨论

用 EI 法测得该化合物的分子量 M 为 404, 主要碎片有 m/z386, m/z302, m/z284, m/z269, m/z224, m/z200, m/z198, m/z172, m/z159 和 m/z157 等(图 2)。用 FAB 法测得该化合物的准分子离子峰(M + H)⁺ 为 405(图 3)。

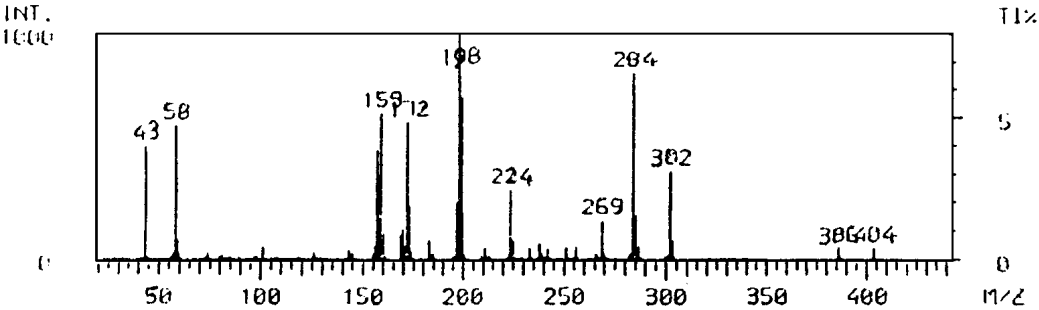


图 2 Monacolin K 的 EI 谱

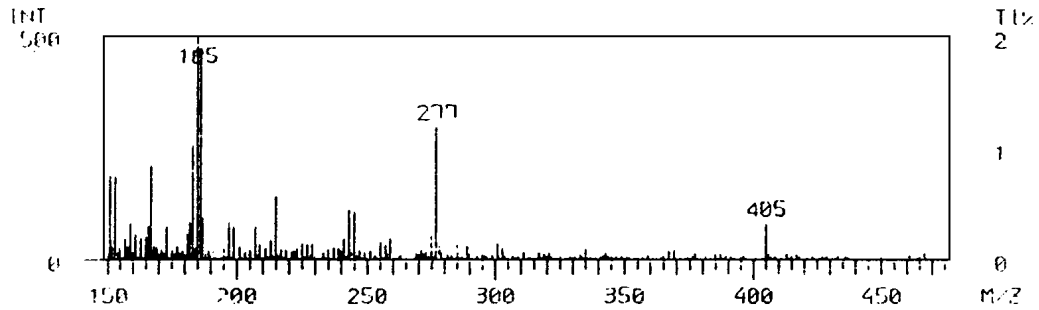


图 3 Monacolin K 的 FAB 谱(底物甘油)

用 HREMS 法测得分子量 M 精确值和主要碎片离子的精确质量, 元素组成比和环加双键数(r+ db)(表 1)。M 的精确质量为 404. 2527, 分子式为 C₂₄H₃₆O₅, (r+ db) 为 7. 0。

表 1 Monacolin K 的 HREI 数据

测量值	元素组成	误差(mm u)	(r+ db)
155. 08839	C ₁₂ H ₁₁	2. 3	7. 5
157. 10310	C ₁₂ H ₁₃	1. 3	6. 5
159. 11809	C ₁₂ H ₁₅	0. 7	5. 5
172. 12748	C ₁₃ H ₁₆	2. 3	6. 0
198. 14176	C ₁₅ H ₁₈	0. 9	7. 0
200. 15597	C ₁₅ H ₂₀	- 0. 5	6. 0
224. 15083	C ₁₇ H ₂₀	- 5. 6	8. 0
269. 15464	C ₁₈ H ₂₁ O ₂	0. 5	8. 5
284. 17444	C ₁₉ H ₂₄ O ₂	- 3. 1	8. 0
302. 18262	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	- 5. 5	7. 0
404. 25270	C ₂₄ H ₃₆ O ₅	- 3. 5	7. 0

参 考 文 献

- 1 A Endo. J Antibiotic, 1979, 32(8), 852
- 2 A Endo *et al* J Antibiotic, 1985, 38(3), 444
- 3 A Endo *et al* J Antibiotic, 1986, 39(12), 1670

Study on Mass Spectrometry of A New Hypocholesterolem ic Agent Monacolin K

Yu Zhili, Yuan Jianyong

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

Received 1999-06-03

Abstract

In this paper EI and FAB mass spectra of a new hypocholesterolem ic agent monacolin K were measured. Their Mass Spectra fragmentations of characteristic fragmentations were discussed on the basis of high resolution Mass spectra data m/z 224 fragmentation probably results from a rearrangement of three hydrogens.

Key Words: monacolin K, EI, FAB hypocholesterolem ic, fragmentation, characteristic fragment