

肿瘤坏死因子诱生剂 RT-A₂ 的质谱研究

余志立 许 津 周 立

(中国医学科学院、中国协和医科大学 医药生物技术研究所 100050)

〔摘要〕本文报导了猫爪草有效成份 RT-A₂ 的 EI 谱。RT-A₂ 对肿瘤坏死因子 (TNF) 有较强的诱生作用。RT-A₂ 的分子式被推断为 n-C₁₅H₃₁COOH, 并讨论了特征碎片离子可能裂解方式。

关键词: 猫爪草 RT-A₂ 肿瘤坏死因子 n-C₁₅H₃₁COOH 特征碎片离子 裂解方式

1 前言

从中草药猫爪草中提取一个有生理活性物质 RT-A₂, 该物质对肿瘤坏死因子 (TNF) 有较强的诱生作用^{〔1〕}。经 EI 法测定, 推断它的分子式为 n-C₁₅H₃₁COOH, 并讨论了特征碎片离子可能的裂解方式。

2 实验部分

2.1 仪器: JEOL DX-300 质谱仪, EI 离子源, 70eV, 发射电流 300mA, 分辨率 500。

2.2 样品: RT-A₂ (由我所周立提供)。

3 结果与讨论

用 EI 法对样品 RT-A₂ 测试, M⁺ 为 256, 特征碎片离子有 m/z 60、73、129、185 等。

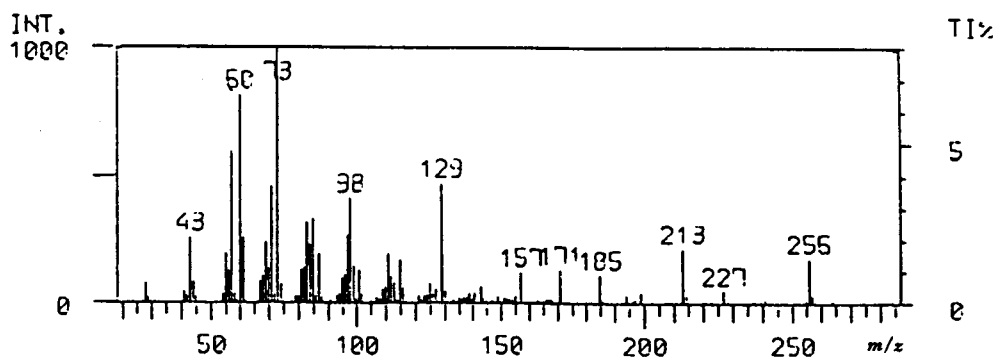


图 1 RT-A₂ 的 EI 谱

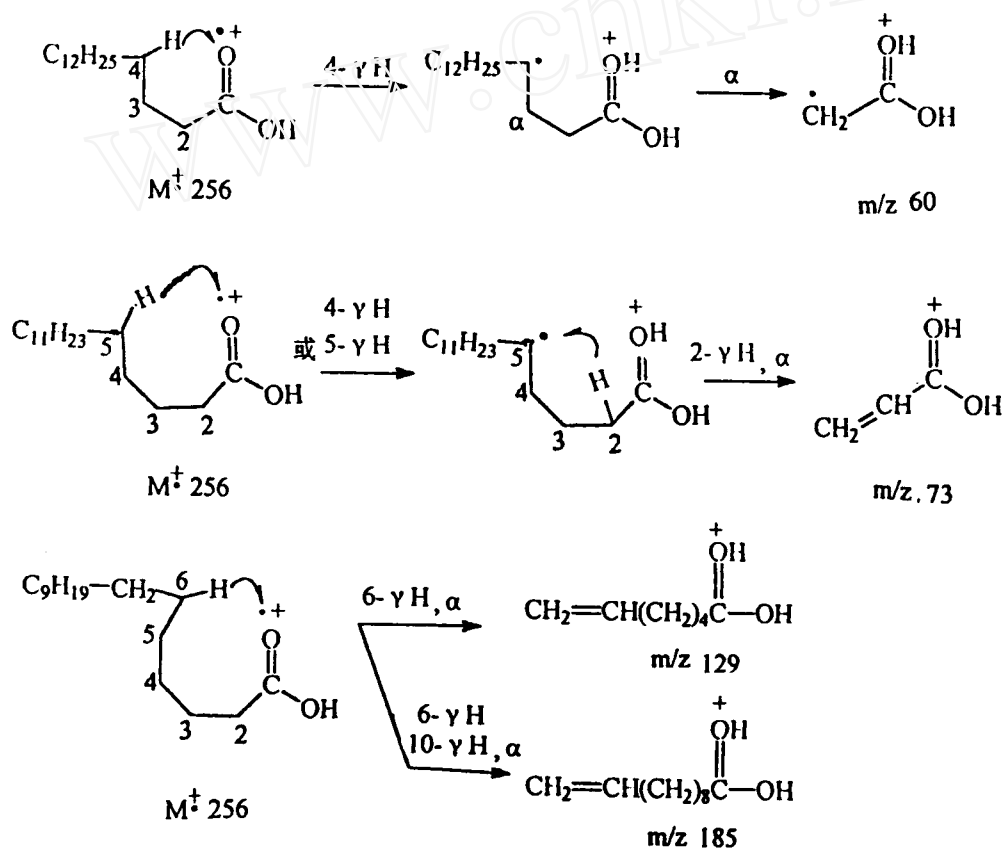
1997-03-07 收

EI 谱上有 m/z 60、73, 质量差 13amu, 这是典型羧酸的特征碎片离子峰。另外图上还有 m/z 73、129、185, 质量差为 56amu。这是典型长链脂肪酸的特征碎片离子峰。经计算 RT-A₂ 的分子式为 $n\text{-C}_{15}\text{H}_{31}\text{COOH}$ 。RT-A₂ 与许多其它长链脂肪酸一样有相同的特征碎片离子(表 1)。化合物结构相似性导致裂解方式的相似性和特征碎片离子的相似性。

表 1 长链脂肪酸的特征碎片离子

化合物	$M^{+\cdot}$	特征碎片离子(m/z)	参考文献
$n\text{-C}_{17}\text{H}_{35}\text{COOH}$	284	60, 73, 129, 185, 241	2, 3, 4, 5, 6
$n\text{-C}_{15}\text{H}_{31}\text{COOH}$	256	60, 73, 129, 185	7
$n\text{-C}_{13}\text{H}_{27}\text{COOH}$	228	60, 73, 129, 185	8, 9
$n\text{-C}_{11}\text{H}_{23}\text{COOH}$	200	60, 73, 129	10, 11, 12, 13
$n\text{-C}_9\text{H}_{19}\text{COOH}$	172	60, 73, 129	14, 15

图 1 中 m/z 60 是典型麦氏重排而得, 即 4 位碳上活泼氢向双键上重排, 然后 α 裂解。 m/z 73 可能是 4 位碳或 5 位碳上活泼氢向双键上重排, 2 位碳上氢向 4 位或 5 位碳上重排, 然后 α 裂解。 m/z 129 可能是 6 位碳上氢向双键上重排, 然后 α 裂解而得。 m/z 185 可能是 6 位碳上氢向双键上重排, 10 位碳上氢又向 6 位碳上重排, 然后 α 裂解(式 1)。



式 1 主要特征碎片离子可能的裂解方式

参考文献

- 1 周立等. 中国医学科学院学报, 1995; 17(6): 456
- 2 F W 麦克拉弗蒂著. 王光辉等译. 质谱解析(第三版), 化学工业出版社, 1987
- 3 S R Heller *et al.* EPA/NIH Mass Spectra Data Bass, 1978. 3: 2090
- 4 丛浦珠. 质谱学在天然有机化学中的应用, 科学出版社, 1987. 69
- 5 贺尊诗等. 有机农药质谱手册, 东北师范大学出版社, 1992. 741, 982, 992
- 6 S R Heller *et al.* EPA/NIH Mass SpectraData Bass, 1978; 2: 1186, 1533, 1820
- 7 K Bieman. Mass Spectromitry Organic Chemical Applicaiton, 1962. 252
- 8 S R Heller *et al.* EPA/NIH Mass SpectraData Bass, 1978; 1: 792

Mass Spectrometric Study on the Inducting Agent RT-A₂ of the Tumor Necrosis Factor

Yu Zhili, Xu Jin, Zhou Li

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

Received 1996-05-20

Abstract

In this paper EI mass spectrography of the active component RT-A₂ of the Radix Ranunculi ternali were reported. The RT-A₂ is the inducing agent on the production of tumor necrosis factor (TNF). The molecular formul is n-C₁₅H₃₁COOH. The fragment pathway of the characteristic fragment ions were disscused.

Key Word: Radix Ranunculi Ternali, RT-A₂, n-C₁₅H₃₁COOH, inducing agent, TNF, fragment pathway, characteristic fragment ion