

藥物化學研究所M3-4 人才加值工程-專題演講：分子裂解的模擬

◎ 藥物化學研究所 鄭雍怡、廖志中老師校閱 2010-03-02

本學期3月2日 本所(藥物化學研究所)很榮幸邀請到本所榮譽教授-陳勝智老師回到所上為同學演講質譜的應用，講題為「分子裂解的模擬」。

長期以來，質譜中分子裂解的方式總是模糊的帶過自由基分配到哪個片斷、或是單純以結構片斷表示以及介紹特定分子應具有某些特定片斷，進而學習以片斷說明質譜裂解的方式與應用，卻引|少說明其背後的機轉與原理。透過陳老師其系統的整理與經驗歸納，並藉由實例以分子結構及裂解規則來說明片斷的形成。學生在這堂演講中重新認識到分子質譜片斷在分子結構鑑定上精細的差距與意義。

過去學習的經驗告訴學生，分子的質譜裂解的規則有McLaffery rearrangement, allylic cleavage, benzylic cleavage、retro-Diels-Alder cleavage等。陳老師的述說釐清這些規則可為鱈-cleavage和鯨-cleavage兩種主要分子裂解方式的應用。由淺入深的說明離子如何裂解、正電荷引發的裂解反應和重排裂解。同時陳老師以Ajmaline與5 α -Cholestane為例模擬裂解情形，並與高解析質譜資料相比對。例如：Ajmaline是Rauwolfia serpentina所含之生物鹼，化學結構上有苯環、兩個氮原子及兩個氧原子，在解讀質譜時，這些都是電荷與自由基出現機率較高的位置，尤其是誘發裂解的位置，先判斷可能的誘發裂解的位置，再依裂解規則推測相關片斷。

陳老師的演講結束後，學生最大的收穫是以不同的方式了解質譜的規則、片斷的生成、對質譜資料更有研究的興趣及如何解讀質譜資料給予的訊息等。十分感謝老師傾囊相授，學生才能受益良多。

【相關圖片】



資料來源：http://www.cmu.edu.tw/news_detail.php?id=779