

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

К СТАТЬЕ

9-ХЛОР-5,9-ДИЕНОВЫЕ И ДРУГИЕ ЖИРНЫЕ КИСЛОТЫ ИЗ ГУБКИ *Penares* sp.

Е. А. Санталова, С. А. Колесникова

Тихоокеанский институт биоорганической химии им. Г.Б. Елякова Дальневосточного отделения РАН,

Россия, 690022 Владивосток, просп. 100 лет Владивостоку, 159

СОДЕРЖАНИЕ

Рис. S1. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-пентакозациеновой кислоты (Ia).....	3
Рис. S2. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гексакозациеновой кислоты (IIa).....	4
Рис. S3. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-гексакозациеновой кислоты (IIIa).....	5
Рис. S4. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гептакозациеновой кислоты (IVa).....	6
Рис. S5. Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-пентакозациеновой кислоты (Ib), 479/481 $[M]^+$, 444 $[M - Cl]^+$	7, 8
Рис. S6. Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гексакозациеновой кислоты (IIb), 493/495 $[M]^+$, 458 $[M - Cl]^+$	9, 10
Рис. S7. Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-гексакозациеновой кислоты (IIIb), 493/495 $[M]^+$, 458 $[M - Cl]^+$	11, 12
Рис. S8. Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гептакозациеновой кислоты (IVb), 507/509 $[M]^+$, 472 $[M - Cl]^+$	13
Рис. S9. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-20-метил-4-генэйкозеновой кислоты (Vb), 424/425/426/427 $[M - 1]^+/[M]^+$, 390 $[M - Cl]^+$	14
Рис. S10. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-19-метил-4-генэйкозеновой кислоты (VIb), 424/425/426/427 $[M - 1]^+/[M]^+$, 390 $[M - Cl]^+$	15
Рис. S11. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-20-метил-4-докозеновой кислоты (VIIb), 438/439/440/441 $[M - 1]^+/[M]^+$, 404 $[M - Cl]^+$	16
Рис. S12. Масс-спектр пирролидида <i>цис</i> -17,18-метилен-тетракозановой кислоты (VIIIb), 433 $[M]^+$	17
Рис. S13. Масс-спектр 4,4-диметилкоксазолинового производного <i>цис</i> -17,18-метилен-тетракозановой кислоты, 433 $[M]^+$	18

Рис. S14. Масс-спектр этилового эфира 16,21-диметилдокозановой кислоты (IXa), 396 $[M]^+$	19
Рис. S15. Масс-спектр пирролидида 16,21-диметилдокозановой кислоты (IXb), 421 $[M]^+$	20
Рис. S16. Масс-спектр этилового эфира 18,23-диметилтетракозановой кислоты (Xa), 424 $[M]^+$	21
Рис. S17. Масс-спектр пирролидида 18,23-диметилтетракозановой кислоты (Xb), 449 $[M]^+$	22
Рис. S18. Масс-спектр этилового эфира 16,18,22-триметилтрикозановой кислоты (XIa), 424 $[M]^+$	23
Рис. S19. Масс-спектр пирролидида 16,18,22-триметилтрикозановой кислоты (XIb), 449 $[M]^+$	24
Рис. S20. Масс-спектр этилового эфира 18,20,24-триметилпентакозановой кислоты (XIIa), 452 $[M]^+$	25
Рис. S21. Масс-спектр пирролидида 18,20,24-триметилпентакозановой кислоты (XIIb), 477 $[M]^+$	26

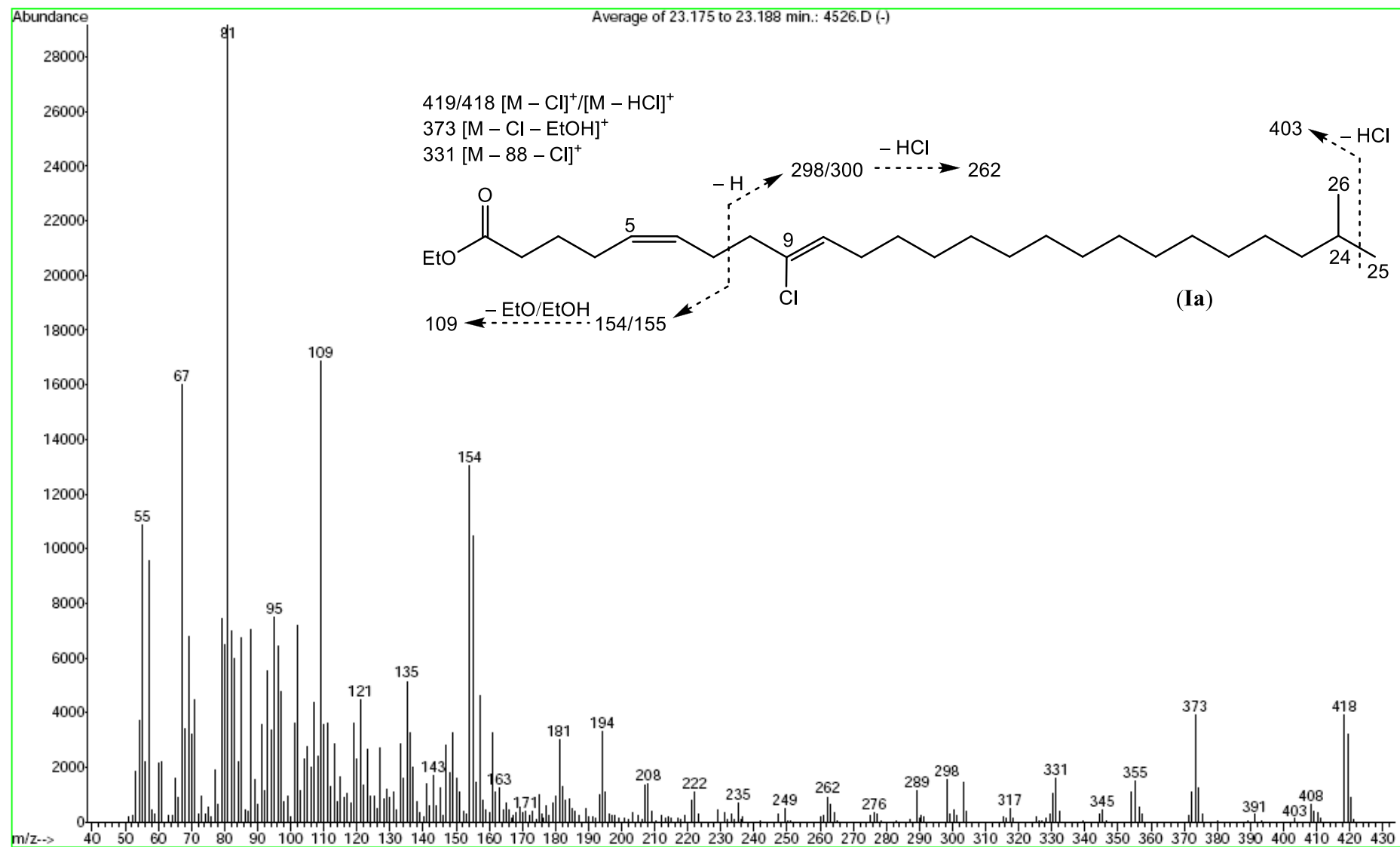


Рис. S1. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-пентакозadiensеновой кислоты (**Ia**).

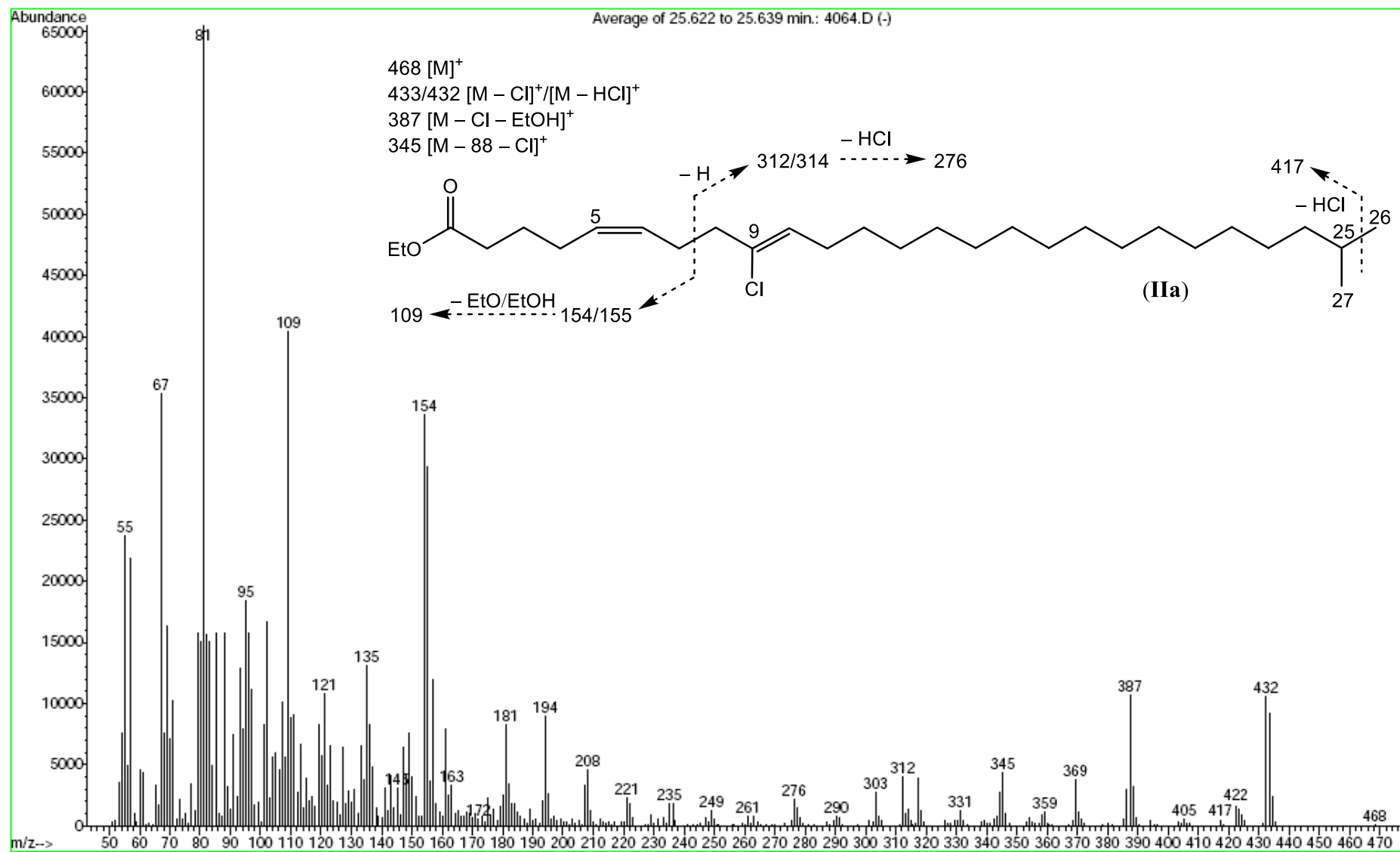


Рис. S2. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гексакозadiensовой кислоты (IIa).

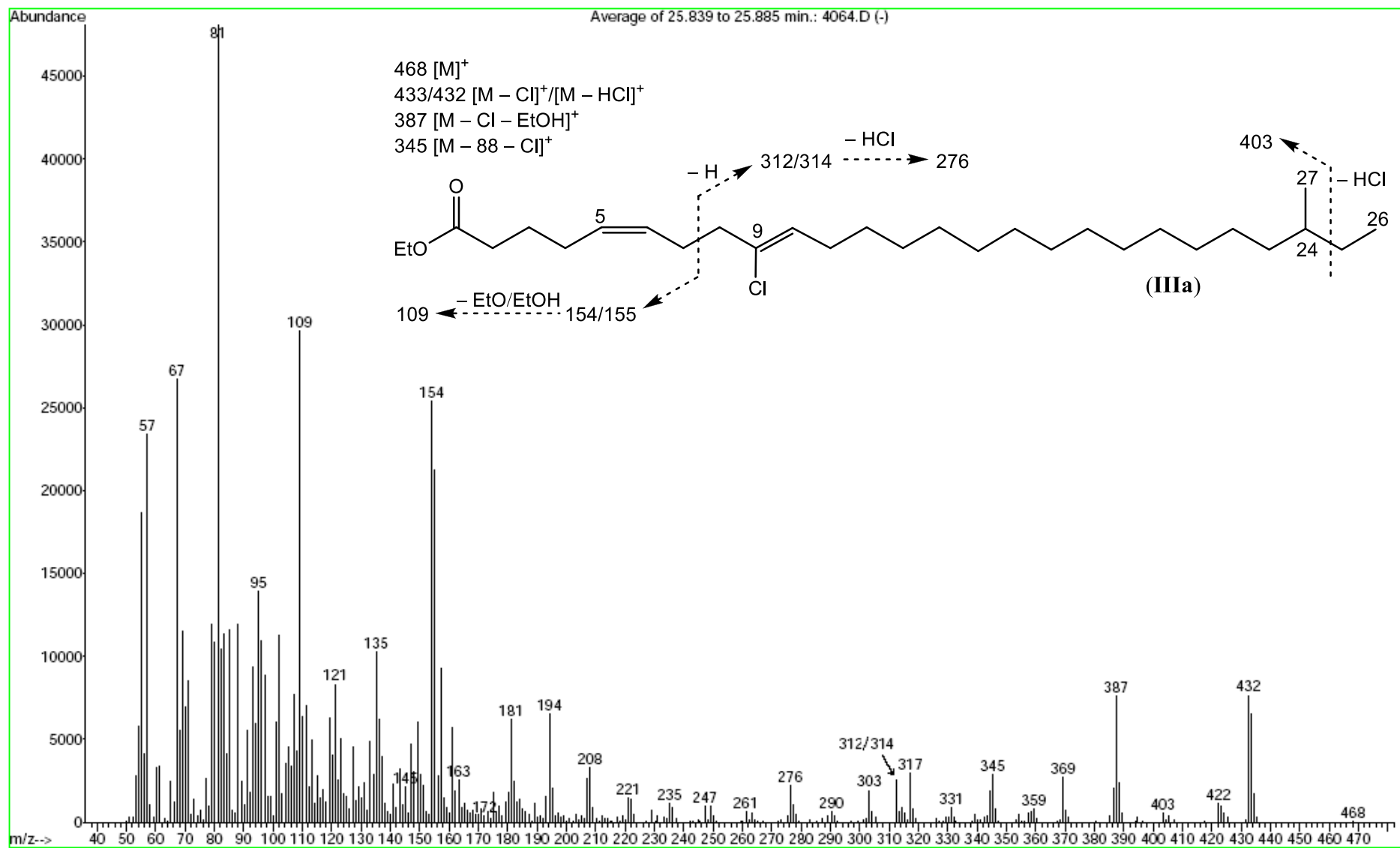


Рис. S3. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-гексакозодиеновой кислоты (IIIa).

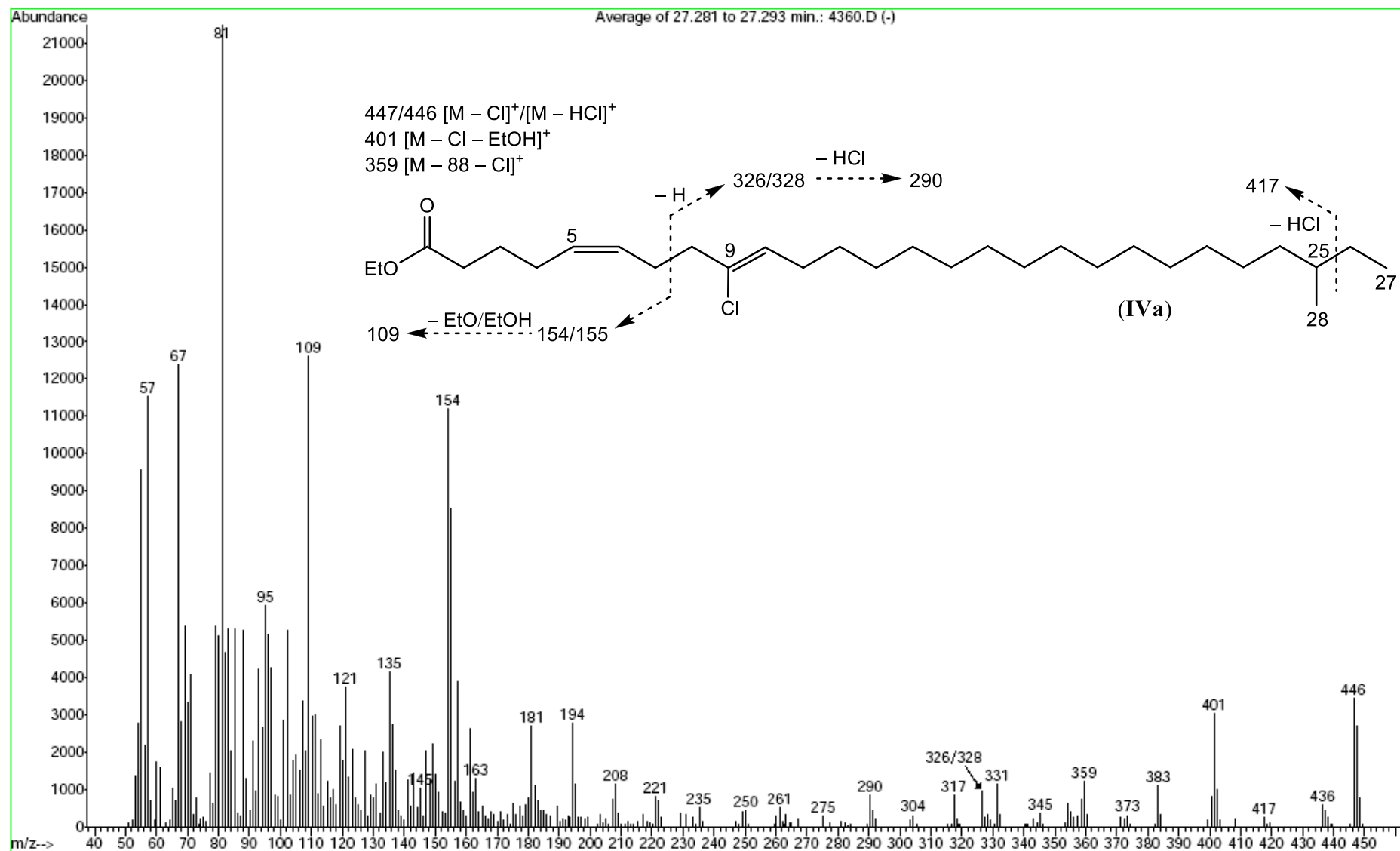


Рис. S4. Масс-спектр этилового эфира (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гептакозadiensовой кислоты (IVa).

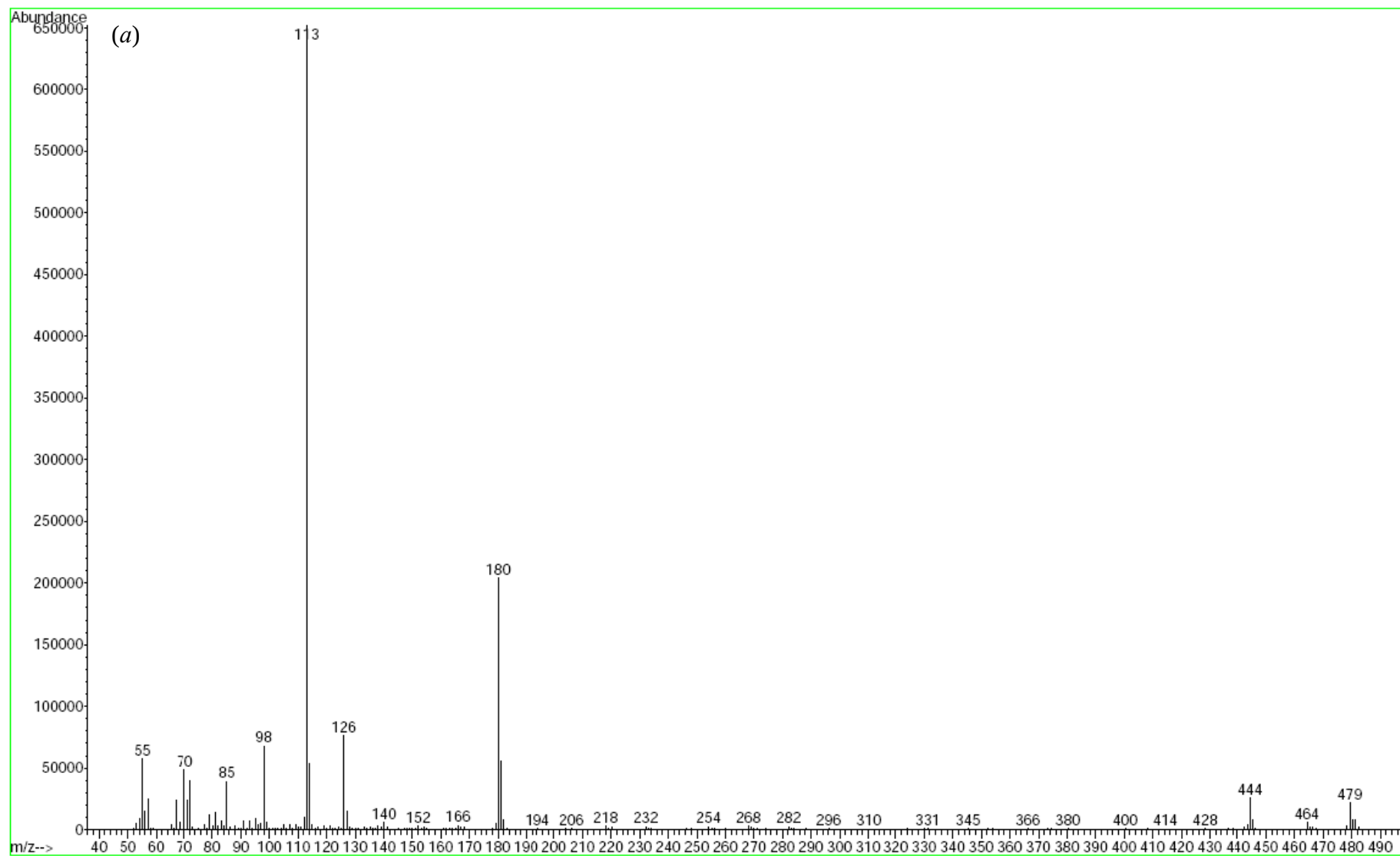


Рис. S5. (a) – Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-пентакозadiensовой кислоты (**Ib**), $479/481 [M]^+$, $444 [M - Cl]^+$.

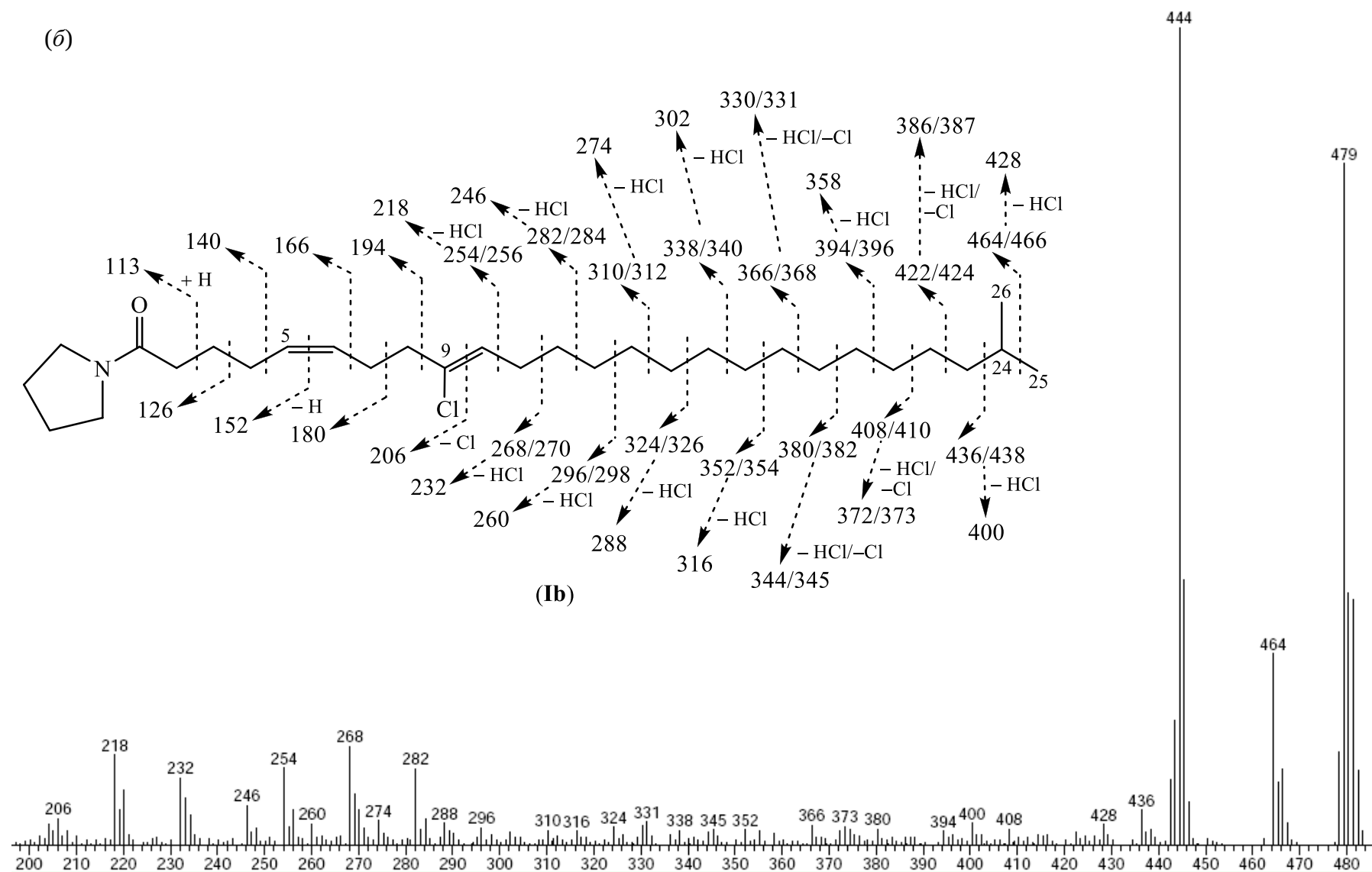


Рис. S5. Продолжение. (б) – Увеличенная часть масс-спектра пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-пентакозadiensовой кислоты (Ib).

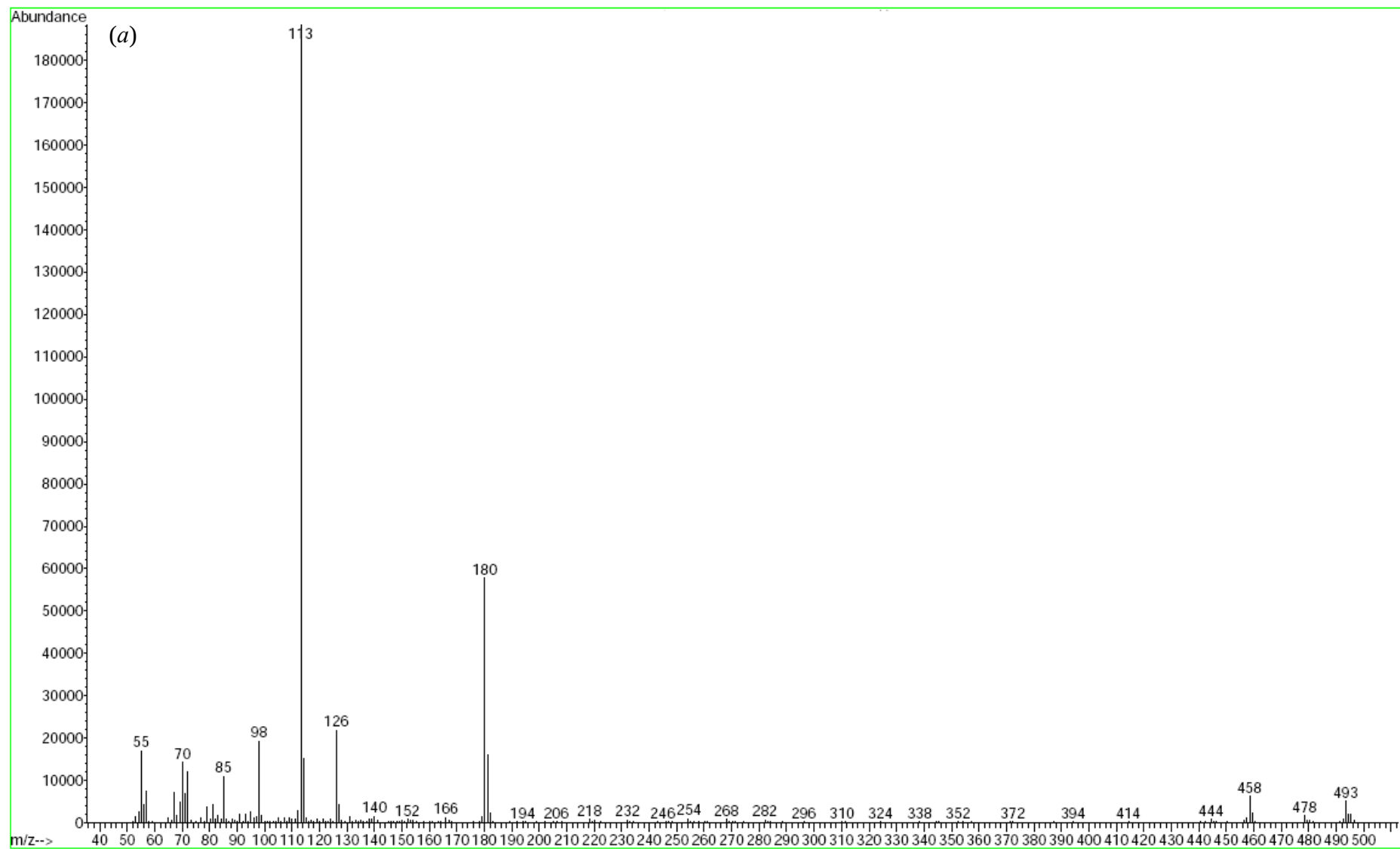


Рис. S6. (a) – Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гексакозациеновой кислоты (**IIb**), $493/495 [M]^+$, $458 [M - Cl]^+$.

(б)

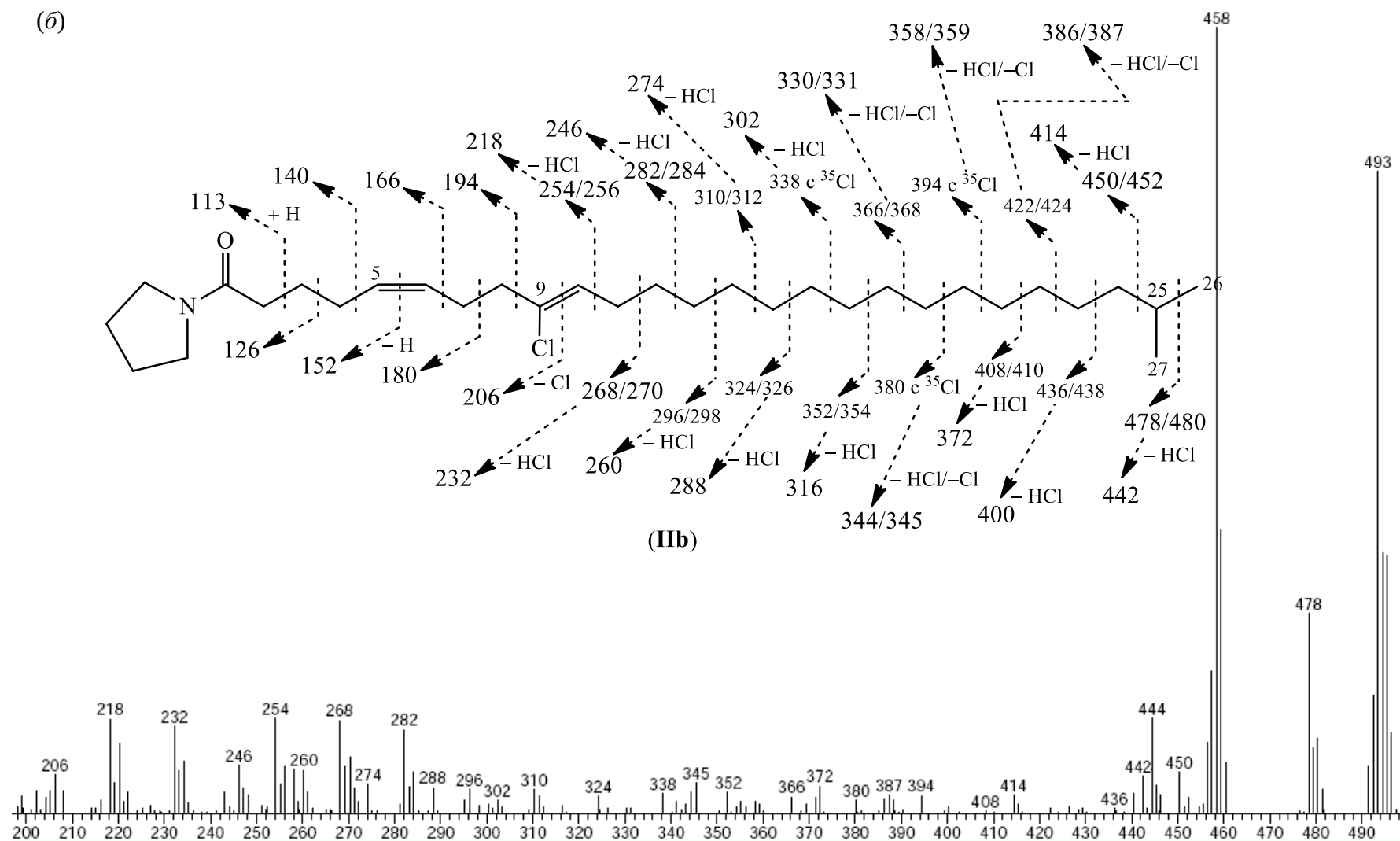


Рис. S6. Продолжение. (б) – Увеличенная часть масс-спектра пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гексакозодиеновой кислоты (IIb).

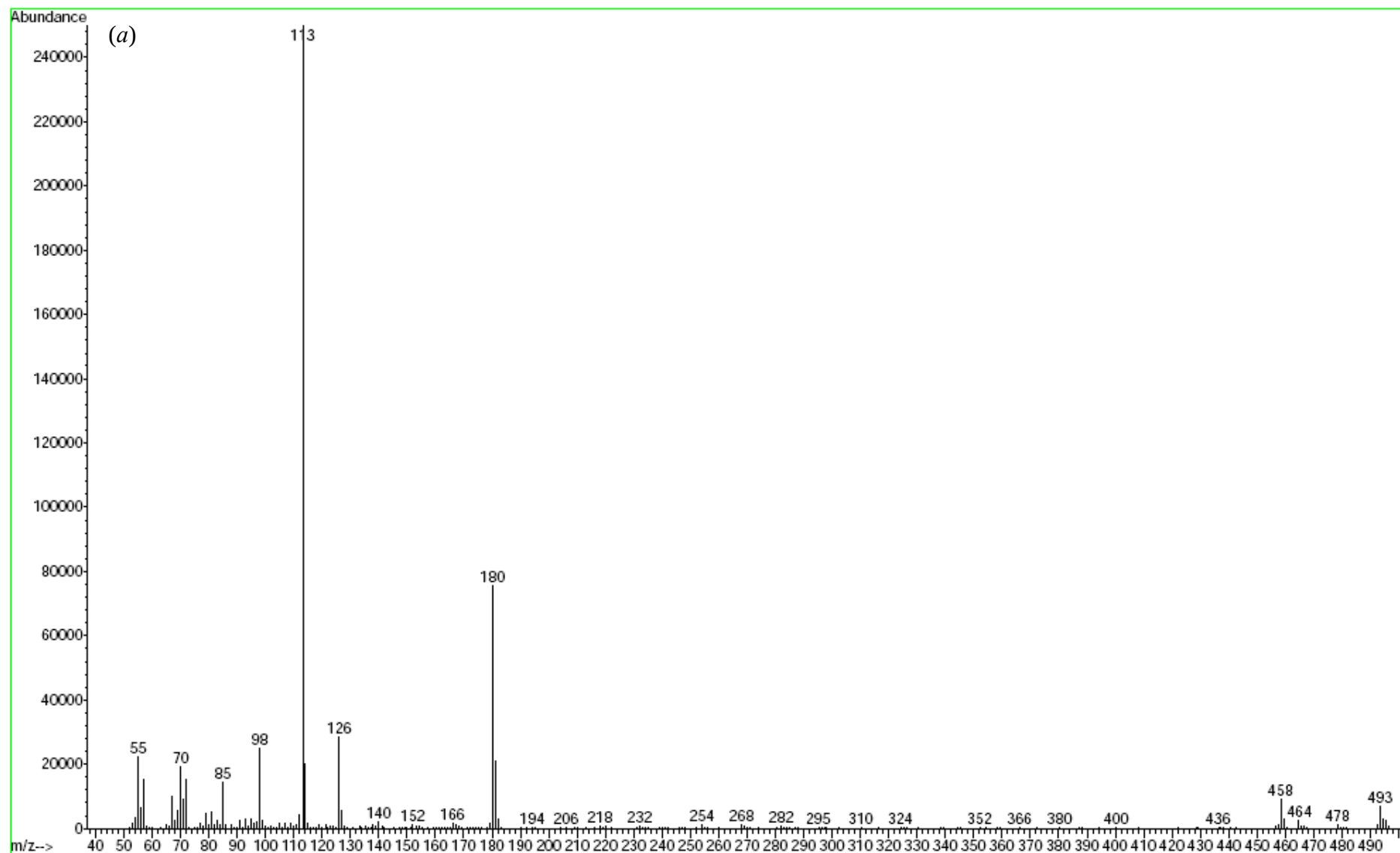


Рис. S7. (a) –Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-гексакозадиеновой кислоты (**IIIb**), 493/495 $[M]^+$, 458 $[M - Cl]^+$.

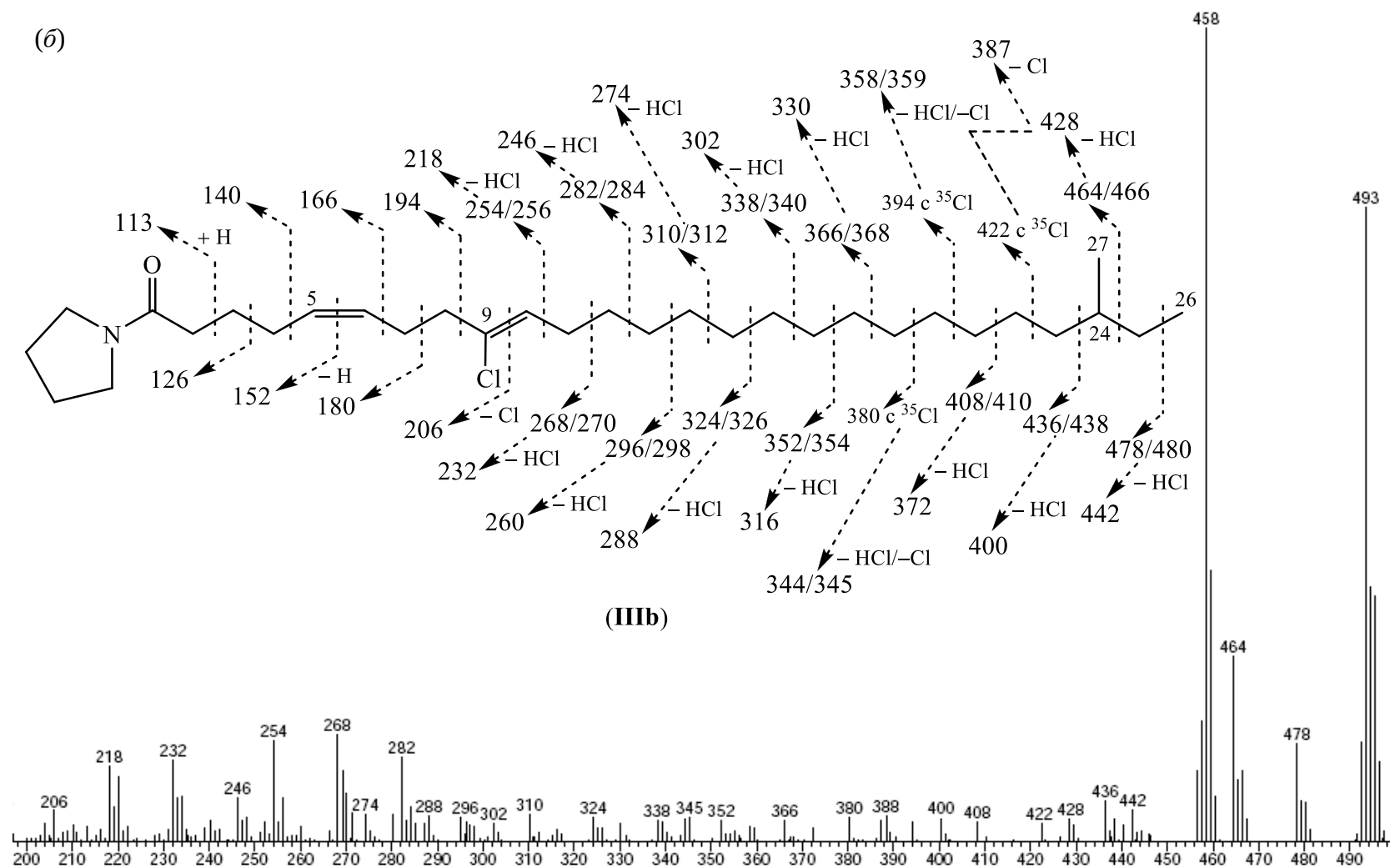


Рис. S7. Продолжение. (б) – Увеличенная часть масс-спектра пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-24-метил-5,9-гексакозодиеновой кислоты (IIIb).

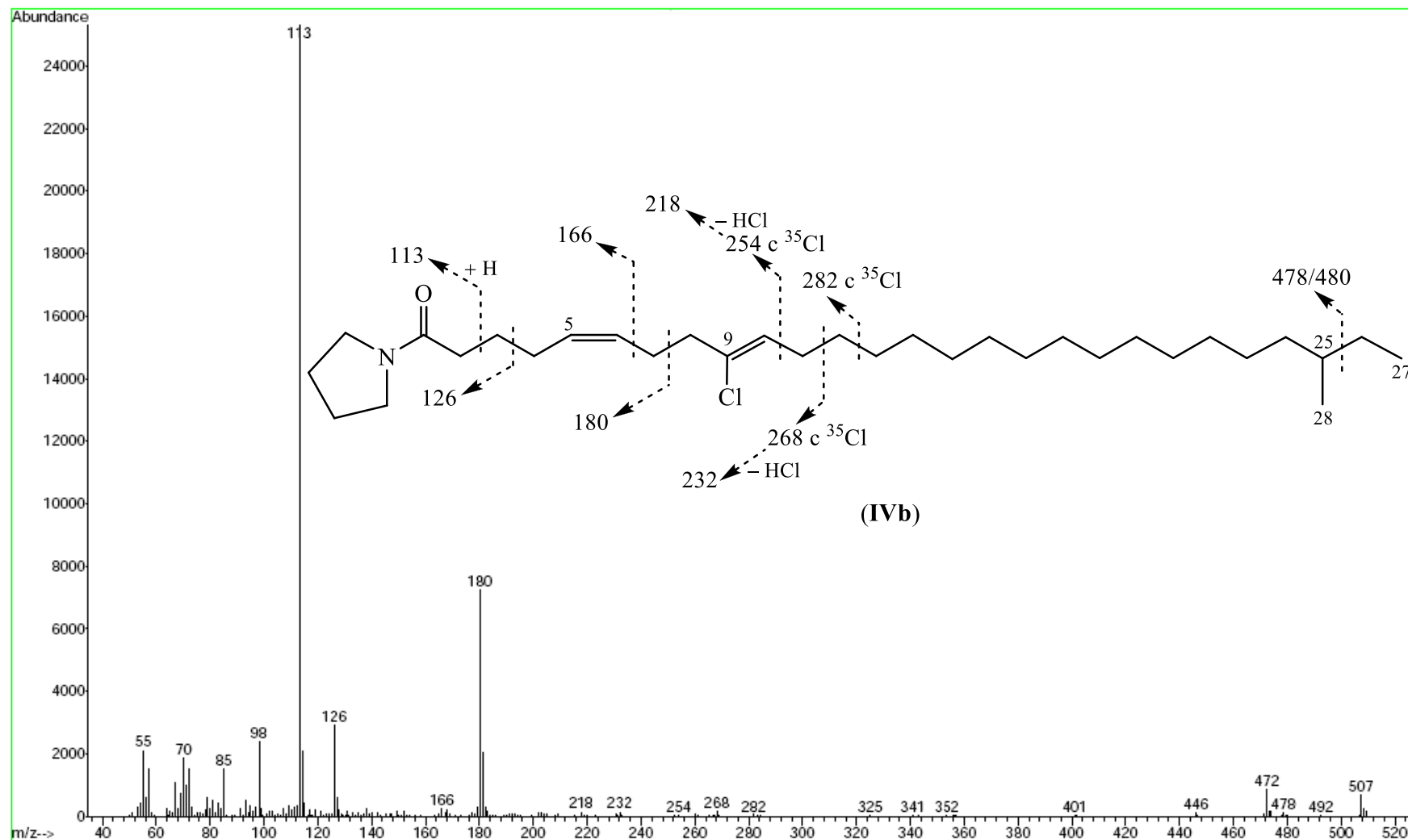


Рис. S8. Масс-спектр пирролидида (5Z,9Z)-9-хлор-25-метил-5,9-гептакозациеновой кислоты (**IVb**), 507/509 $[M]^+$, 472 $[M - \text{Cl}]^+$. Из-за низкой концентрации соединения (**IVb**) большинство ионов с ^{37}Cl не зарегистрировались, однако ионы при m/z 254, 268 и 282 были отнесены к моноизотопным ионам с ^{35}Cl по аналогии с такими же ионами, наблюдавшимися при фрагментации гомологов (**Ib–IIIb**).

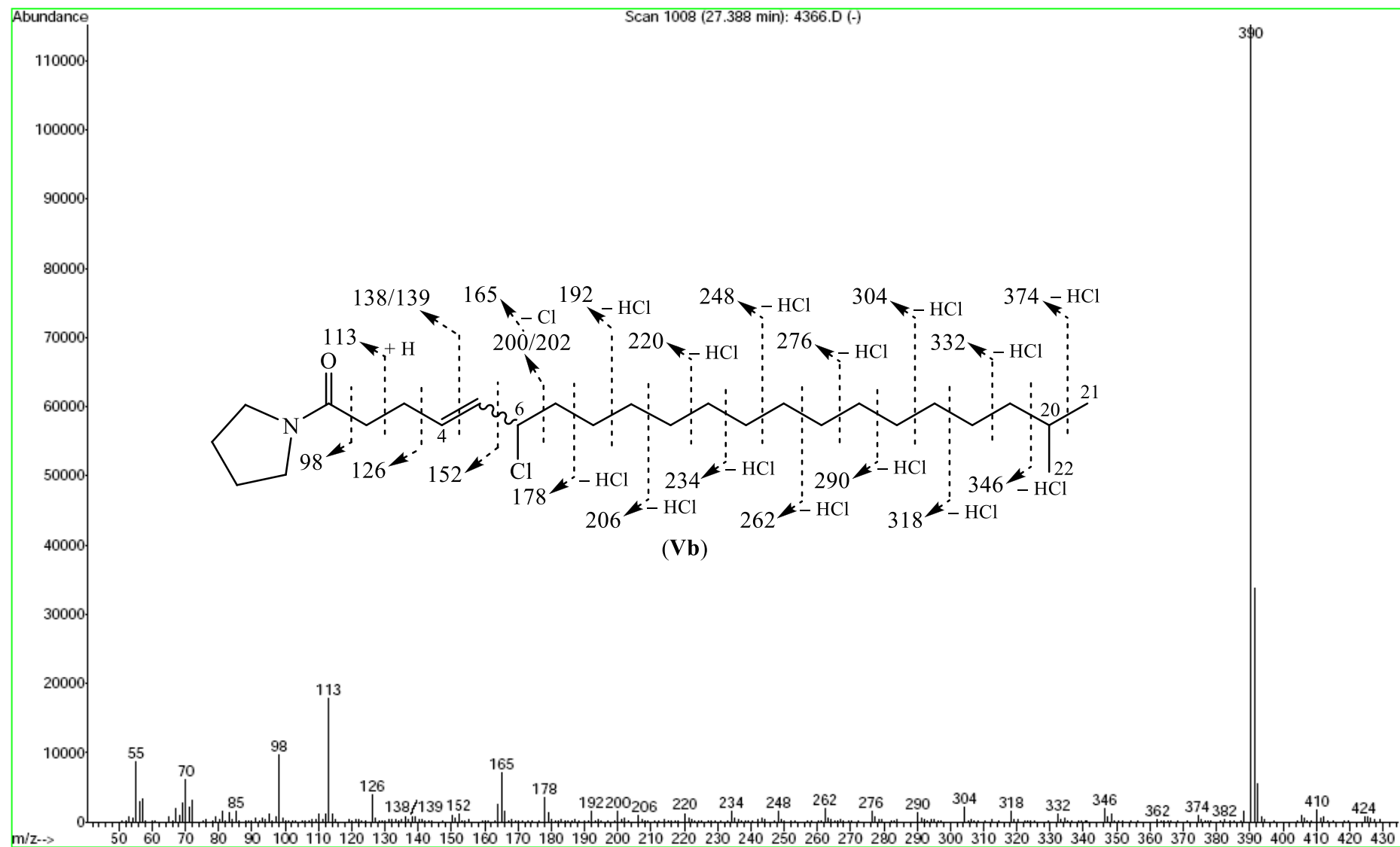


Рис. S9. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-20-метил-4-генэйкозеновой кислоты (**Vb**), m/z 424/425/426/427 $[M - 1]^+/[M]^+$, 390 $[M - Cl]^+$.

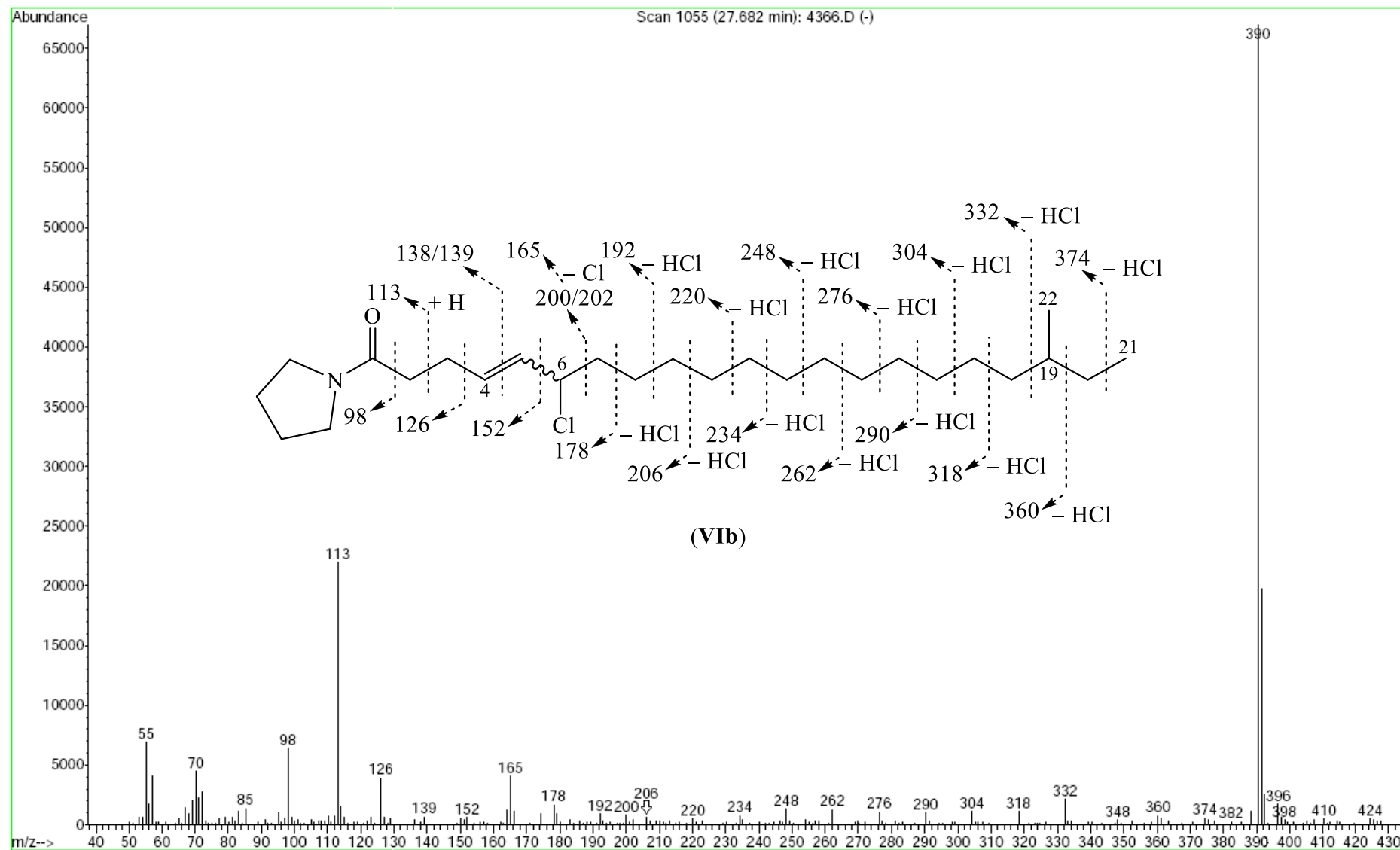


Рис. S10. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-19-метил-4-генэйкозеновой кислоты (VIb), m/z 424/425/426/427 $[M - 1]^+/[M]^+$, 390 $[M - Cl]^+$.

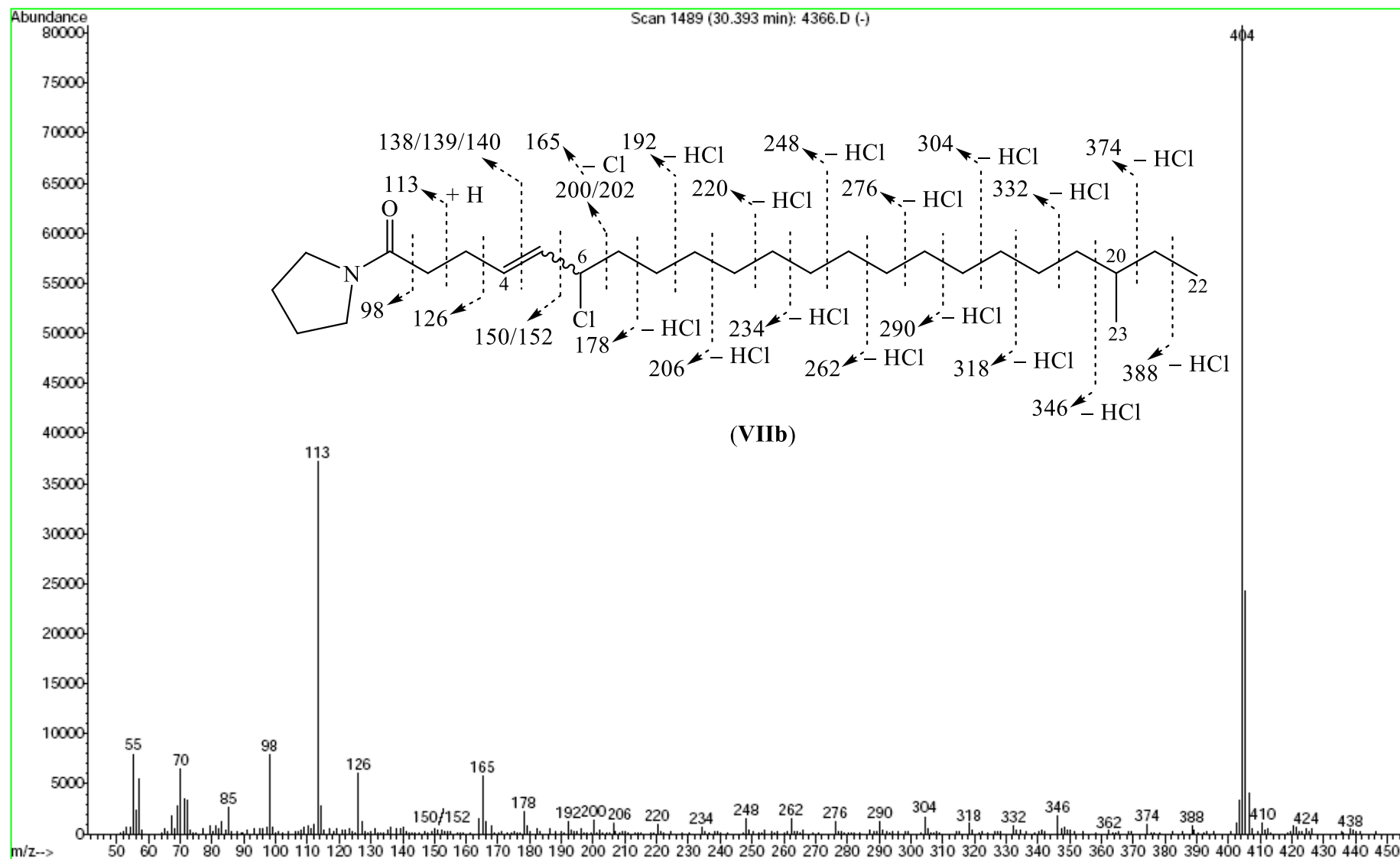


Рис. S11. Масс-спектр пирролидида 6-хлор-20-метил-4-докозеновой кислоты (**VIIb**), m/z 438/439/440/441 $[M - 1]^+/[M]^+$, 404 $[M - Cl]^+$.

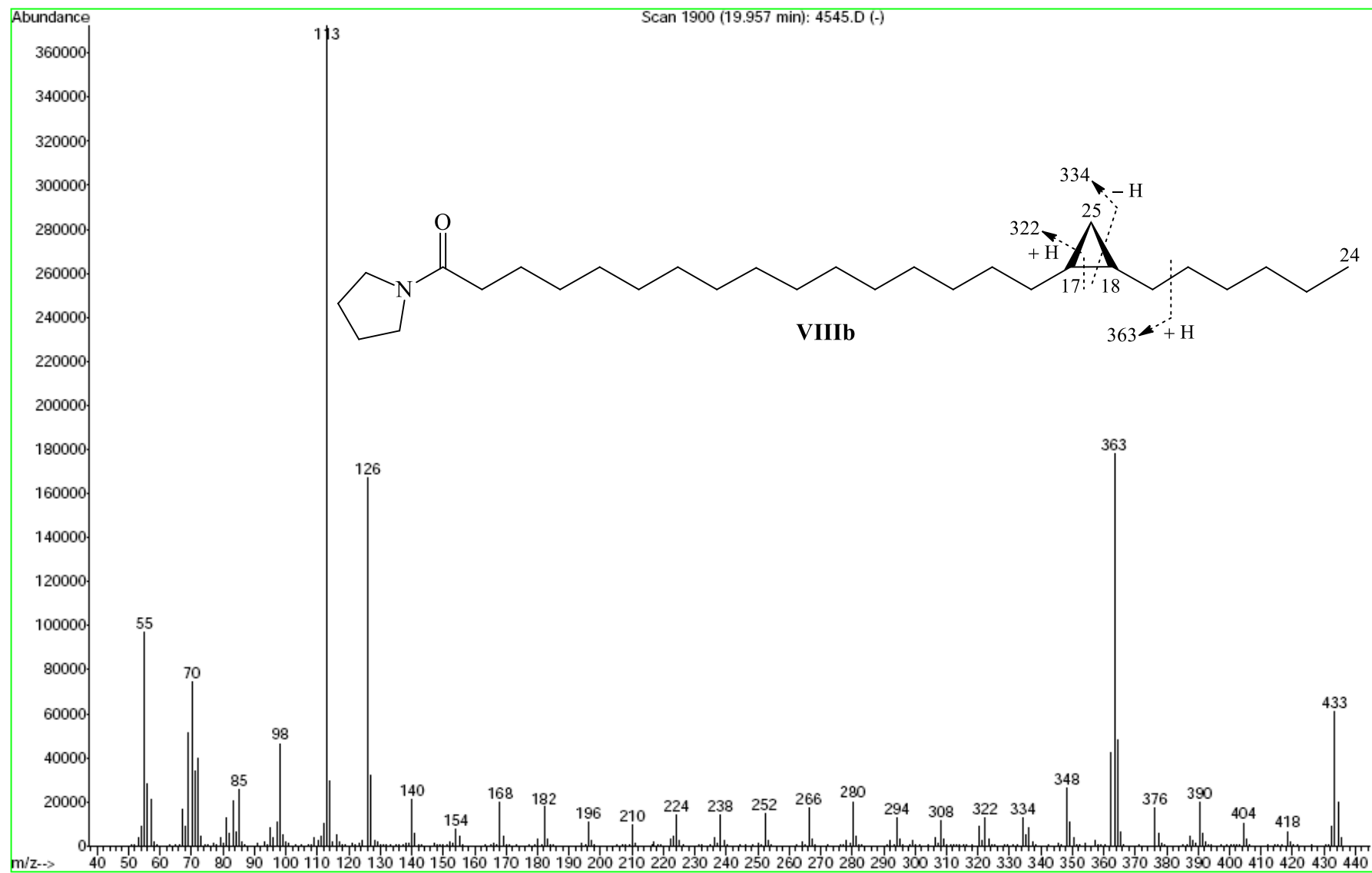


Рис. S12. Масс-спектр пирролидида *цис*-17,18-метилен-тетракозановой кислоты (**VIIIb**), 433 $[M]^+$.

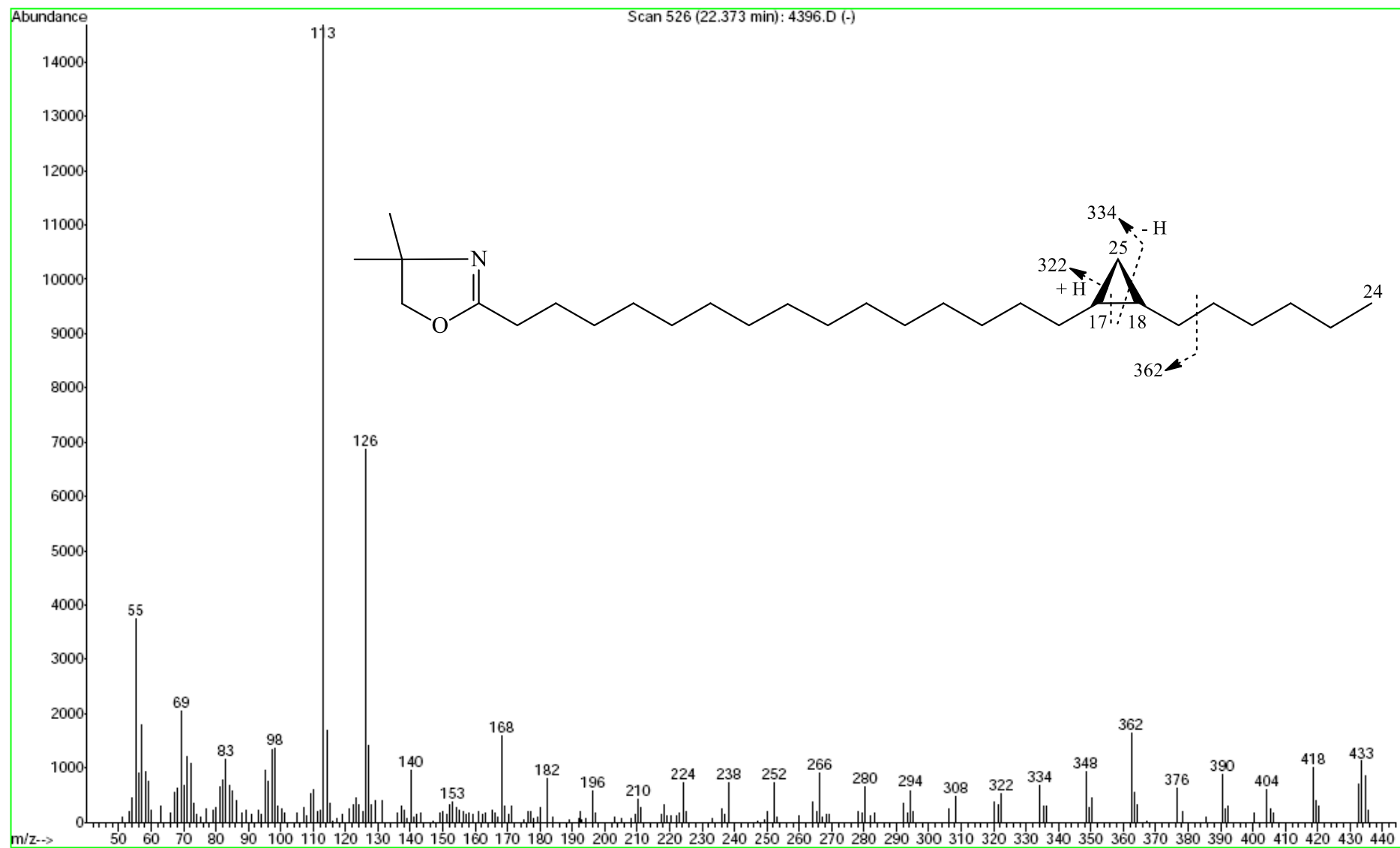


Рис. S13. Масс-спектр 4,4-диметилксазолинового производного *цис*-17,18-метилен-тетракозановой кислоты, 433 $[M]^+$.

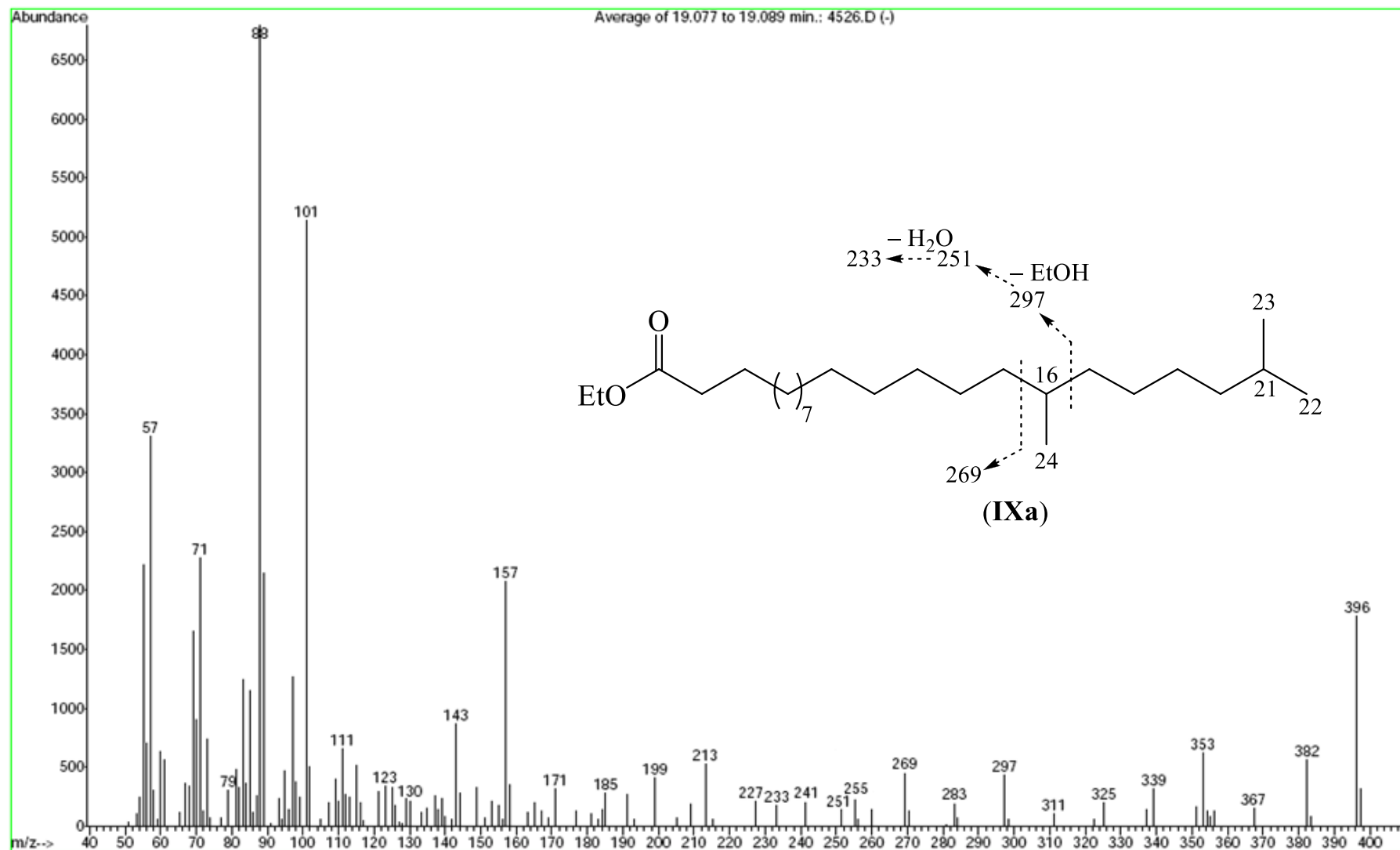


Рис. S14. Масс-спектр этилового эфира 16,21-диметилдокозановой кислоты (**IXa**), 396 $[M]^+$. Пик при m/z 382 $[M]^+$ – примесь этилового эфира кислоты 23:0.

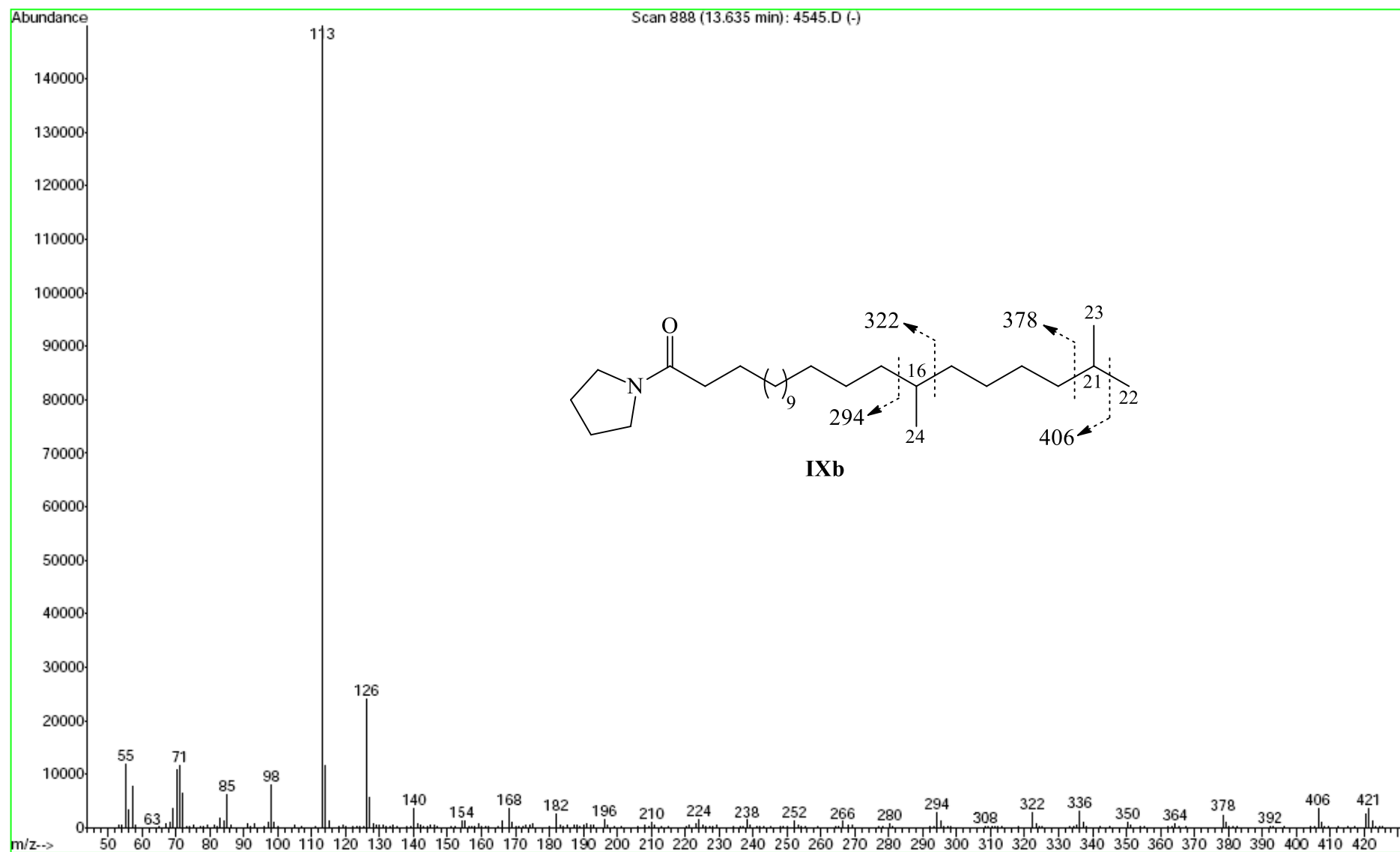


Рис. S15. Масс-спектр пирролидида 16,21-диметилдокозановой кислоты (**IXb**), 421 $[M]^+$.

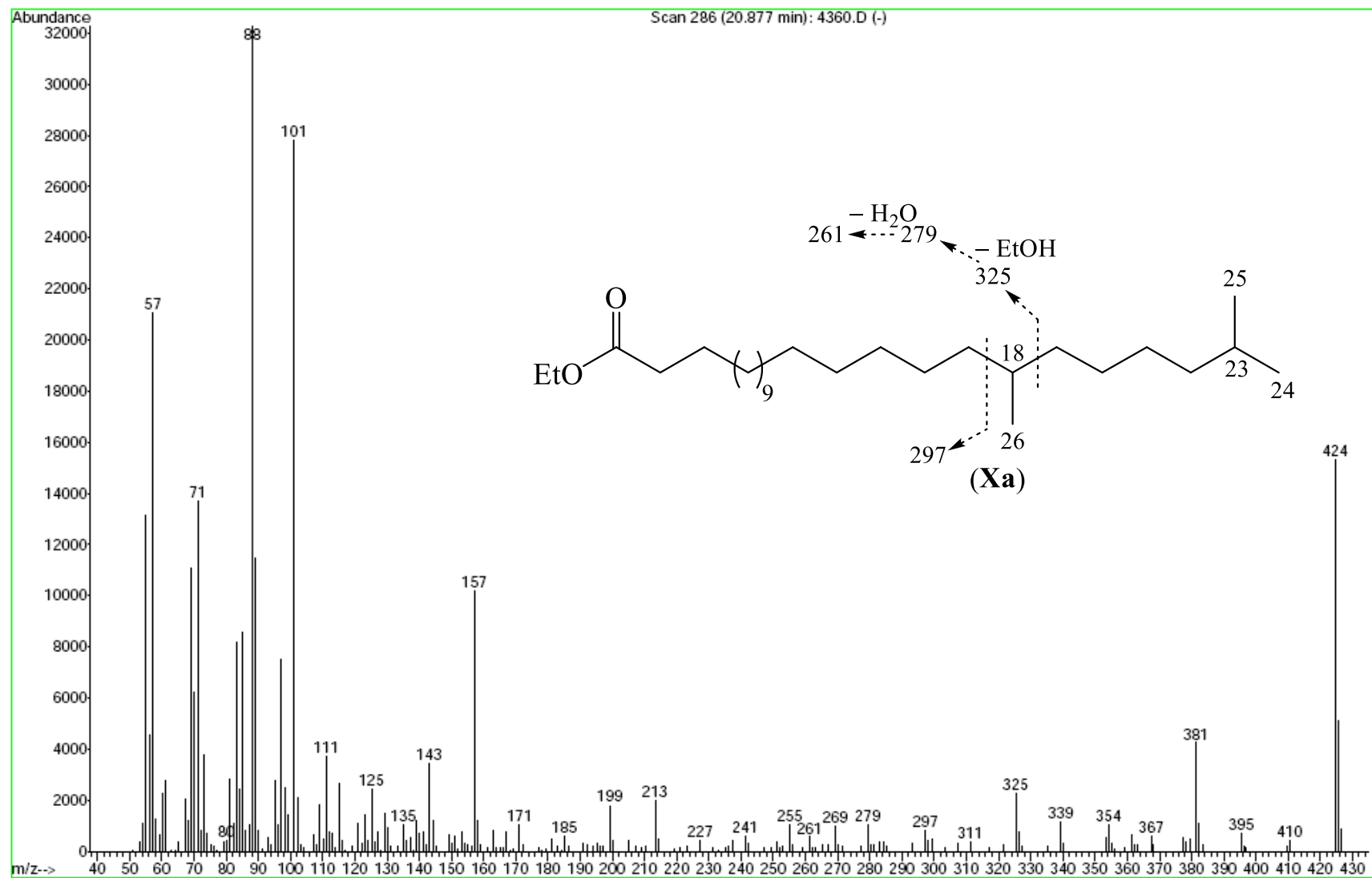


Рис. S16. Масс-спектр этилового эфира 18,23-диметилтетракозановой кислоты (**Xa**), 424 $[M]^+$. Пик при m/z 410 $[M]^+$ – примесь этилового эфира кислоты 25:0.

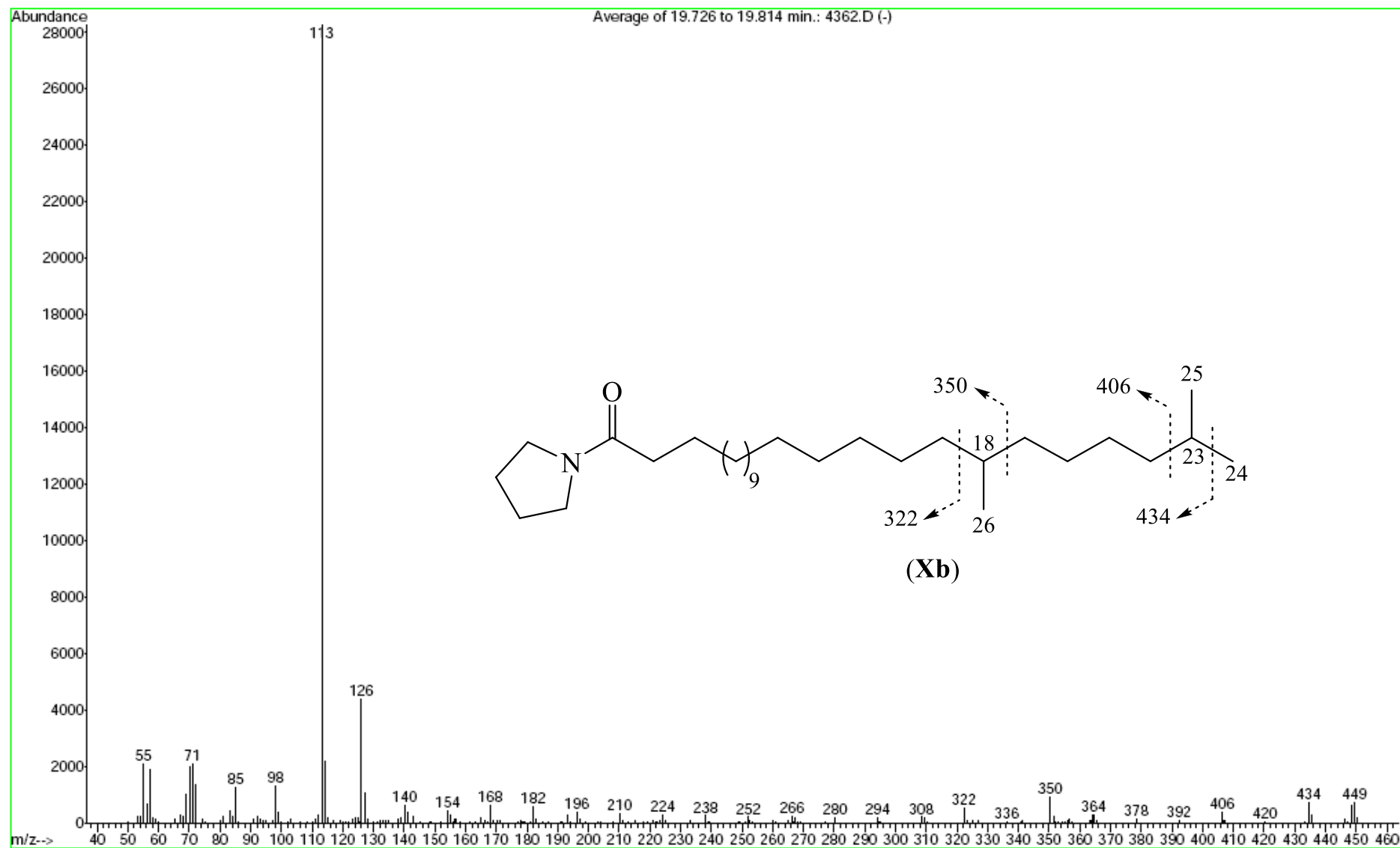


Рис. S17. Масс-спектр пирролидида 18,23-диметилтетракозановой кислоты (**Xb**), 449 $[M]^+$.

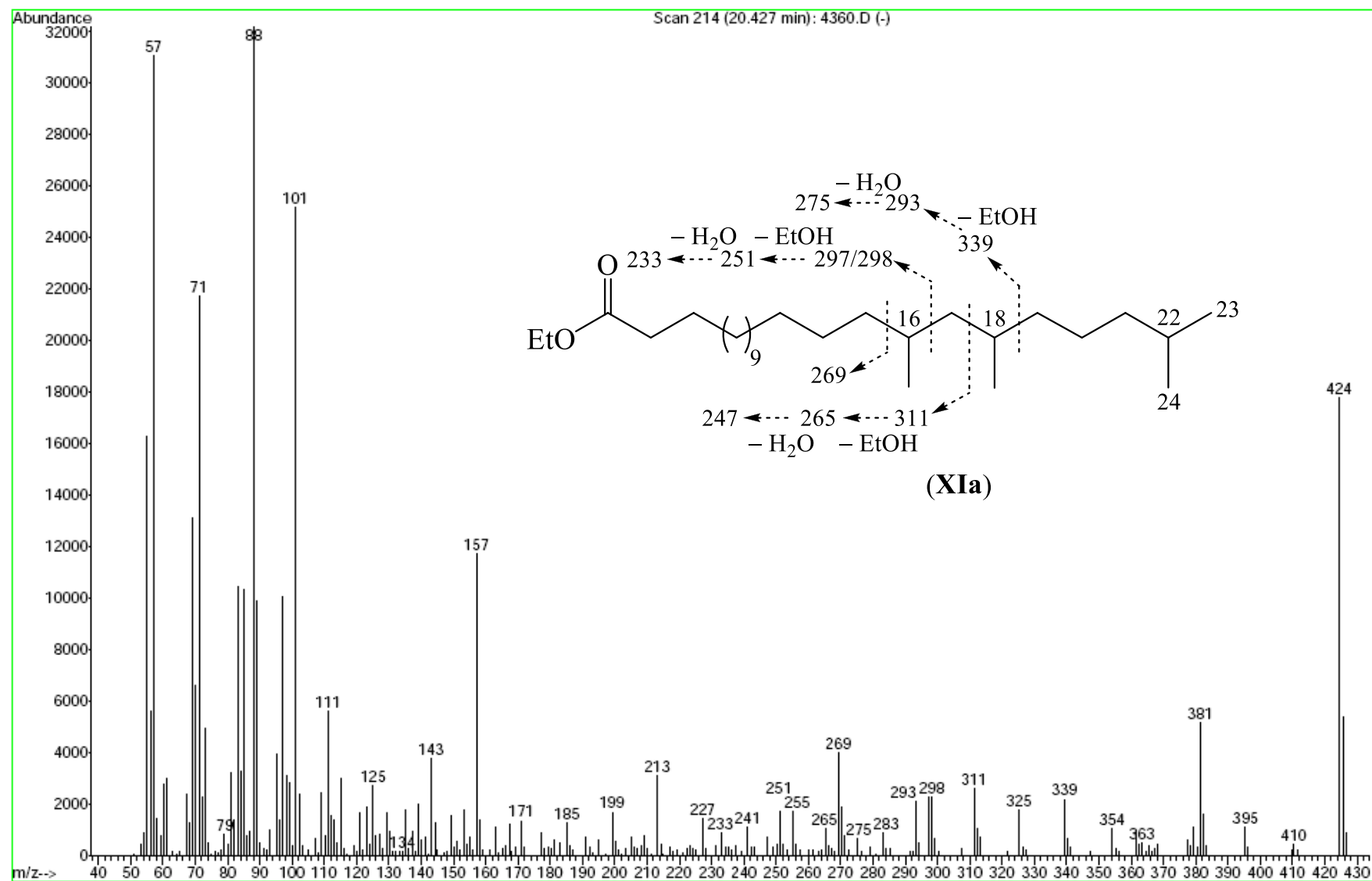


Рис. S18. Масс-спектр этилового эфира 16,18,22-триметилтрикозановой кислоты (XIa), 424 $[M]^+$.

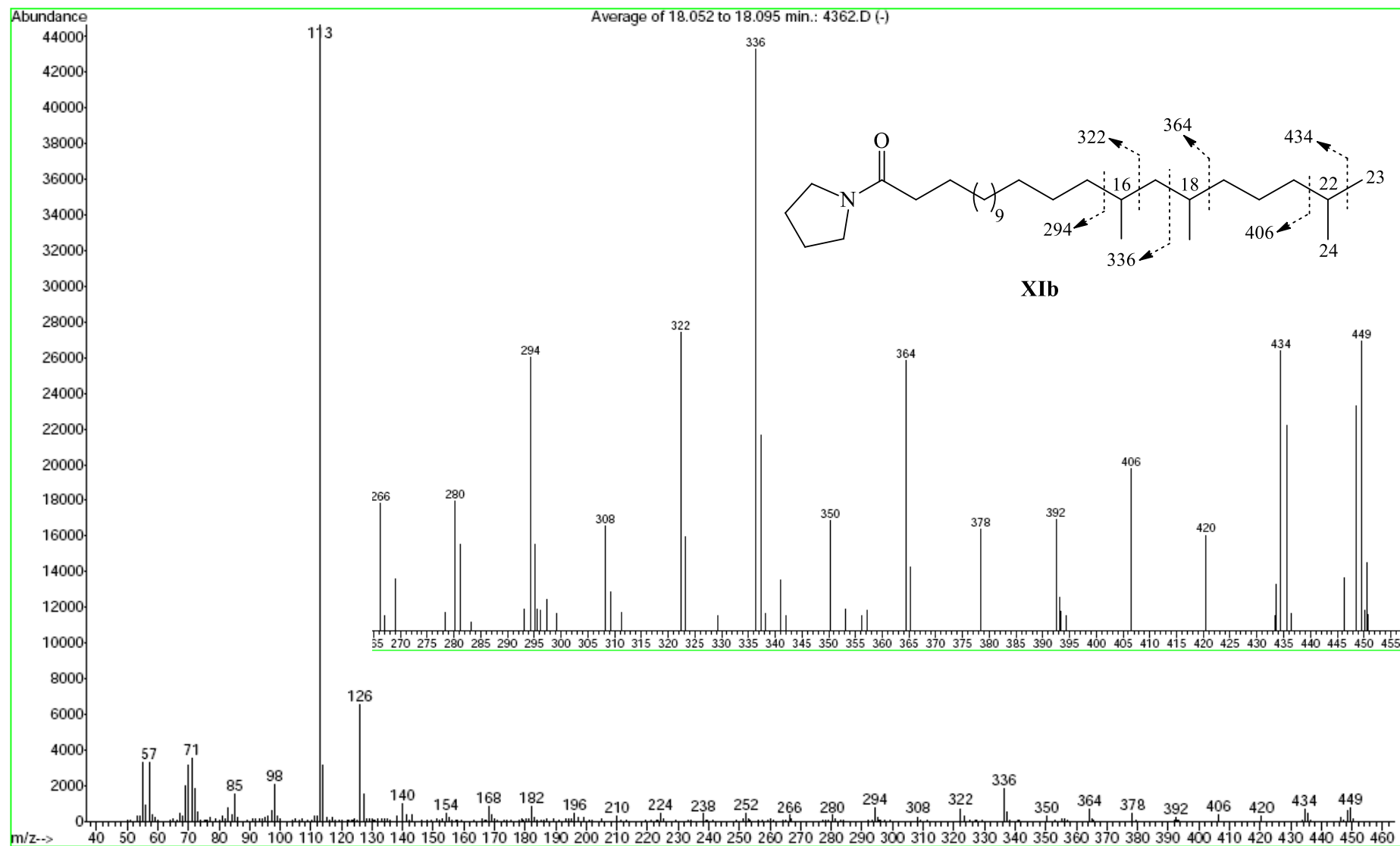


Рис. S19. Масс-спектр пирролидида 16,18,22-триметилтрикозановой кислоты (**XIb**), 449 [M]⁺.

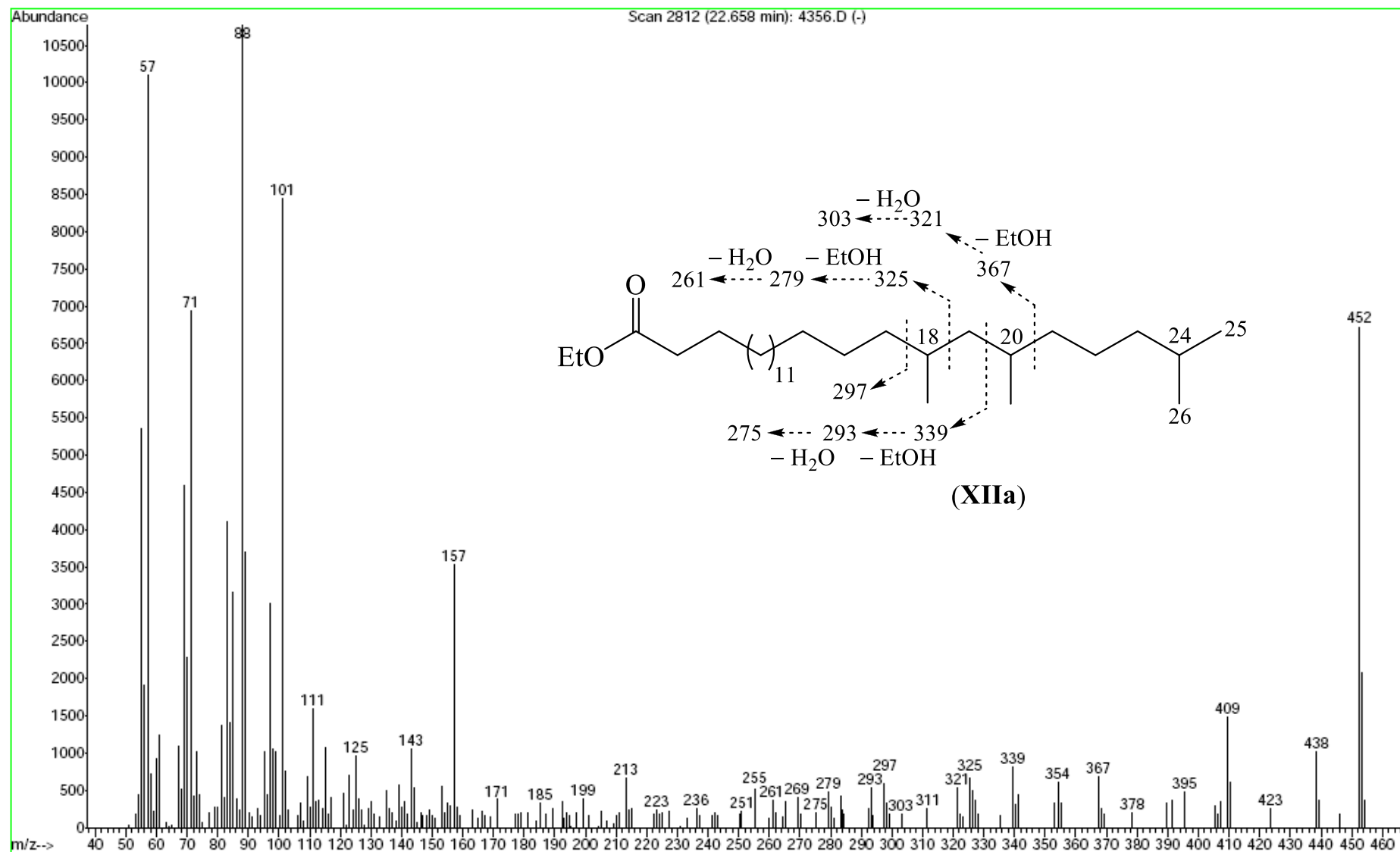


Рис. S20. Масс-спектр этилового эфира 18,20,24-триметилпентакозановой кислоты (XIIa), 452 $[M]^+$.

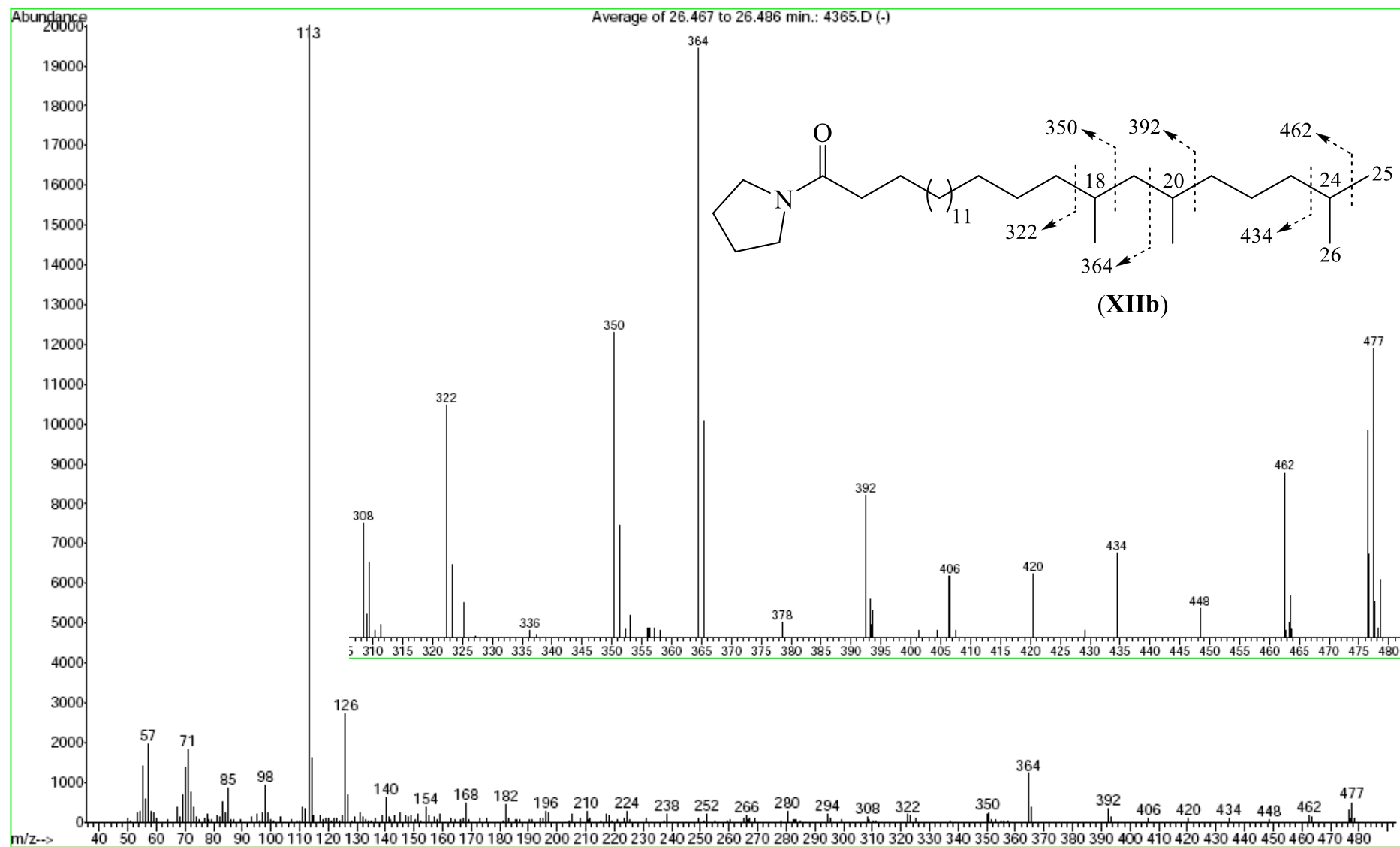


Рис. S21. Масс-спектр пирролидида 18,20,24-триметилпентакозановой кислоты (XIIb), 477 $[M]^+$.