推测并验证了反应机理:

(II) 是一种重要的化合物, 可用作杀虫剂、杀菌剂和除草剂。前人的制备方法, 或是原料难得, 或是难以分离, 都不是太佳。虽然反应 (1) 也生成 (II), 但产率低, 提纯困难。根据推测的反应机理推断, (II) 的生成可能主要是通过 (4) 进行的。因此, 直接用 PhNCS, Na₂S 和 n-C₄H₉Br 作原料进行了反应, 结果得到了 (II):

反应 (5) 产率高, 选择性好, 纯化特别容易。换用各种溴代烷进行了该反应。当烷基为 n-C₃H₇, i-C₃H₇, i-C₄H₉ 和 S-C₄H₉ 时, 产率为 70—80%。当烷基为 n-C₄H₉, n-C₄H₁₁, n-C₆H₁₃ 和 n-C₈H₁₇ 时, 产率高于 90%。

(I) 和 (II) 用 IR、NMR 和 MS 作了结构鉴定, 其余产物用 IR 和 GC 作了结构鉴定。

赵世开 马兆兰 邹多秀 曾宪谋 顾以健
(中国科学院大连化学物理研究所)

完全未知混合物的计算机分离和鉴定

在完全未知的多成份混合物中, 欲使其各纯化学成分间相互分离, 并对各纯化学成分进行鉴定是化学工作者经常遇到的, 也是十分重要的问题。以下讨论即是结合化合物的光谱特征, 利用计算机对混合物进行分离和鉴定。有可能在一定范围内避免冗长繁杂的化学分离过程。这种利用计算机对于混合物的分离方法可适用于中草药成份、人工合成物、环境污染监测等方面的应用。

1. 数学模型

根据比尔定律和光谱的加和性, 任一波长处混合物的光谱都是该处所有各纯成份光谱的线性组合, 即有如下表达式:

$$A_m(\lambda_i) = \sum_{l=1}^k C_{lm} X_l(\lambda_i), \quad (1)$$

$$i = 1, 2, \dots, N; m = 1, 2, \dots, M,$$

此处 $A_m(\lambda_i)$: 在波长 λ_i 处的混合物光谱吸光度值;
 M : 利用色谱改变混合物中各成份间相对浓度的次数;
 N : 在确定的某光谱范围内的测定点数;
 C_{lm} : 成份 l 的浓度;
 $X_l(\lambda_i)$: 在 λ_i 处成份的光度系数;
 k : 在混合物中计算成份数。

现在的问题是, 已知 N 、 M 和 $A_m(\lambda_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N; m = 1, 2, \dots, M$), 要求根据 (1) 计算出 k 和 $X_l(\lambda_i)$ ($l = 1, 2, \dots, k; i = 1, 2, \dots, N$)。

2. 计算过程

设 $N \times M$ 矩阵 $A = (A_m(\lambda_i), i = 1, 2, \dots, N; m = 1, 2, \dots, M)$ 。

N 向量 $X_i = (X_l(\lambda_i), l = 1, 2, \dots, k)$ 。

$N \times k$ 矩阵 $X = (X_i, i = 1, 2, \dots, N)$, 线性子空间 $\mathcal{L}(A)$ 即为混合物子空间, 显然 $\mathcal{L}(A) = \mathcal{L}(X)$ 。则 (1) 式即可写成:

$$A = XC, \quad (2)$$

其中 $k \times M$ 矩阵 $C = (C_{lm}, l = 1, 2, \dots, k; m = 1, 2, \dots, M)$ 。

(i) 求 $\mathcal{L}(A)$ 的维数 k 并找出 $\mathcal{L}(A)$ 中的一组规范正交基 $V = (V_1, V_2, \dots, V_k)$, 显然有

$$\mathcal{L}(A) = \mathcal{L}(X) = \mathcal{L}(V).$$

(ii) 利用最优化方法, 找出一组向量, 它是 $\mathcal{L}(V)$ 中的单峰光谱, 可表示为

$$f_j(\lambda_i, x_j, h_j, w_j); i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, k,$$

此处 X_j, h_j, w_j 分别为单峰光谱的峰位置, 基线高和半峰宽。

设 $N \times k$ 矩阵

$$F = [f_j(\lambda_i, x_j, h_j, w_j); i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, k].$$

这样, X 可表示为

$$X = FH \quad (H \text{ 为 } k \times k \text{ 的未知矩阵}). \quad (3)$$

(iii) 利用最优化方法依次解如下矩阵方程:

$$\begin{cases} FR = A, \\ R \geq 0, \end{cases} \quad (4) \quad \begin{cases} HC = R, \\ H \geq 0; C \geq 0. \end{cases} \quad (5)$$

3. 利用 FORTRAN 语言编写程序, 主要子程

序有 6 个。

胡鑫尧 汪国柄 谭泽光 朱蓉隼 宋烈侠

(清华大学化学化工系、应用数学系, 北京)

烟草花叶病毒

T₇₃ 单克隆抗体杂交瘤细胞株的建立

七十年代中期发展起来的用杂交瘤制备单克隆抗体 (McAb) 的技术已广泛应用于医学、生物学和农业各个领域。我国在农业研究领域内尚无建成杂交瘤细胞株的报道。

农牧渔业部植物检疫实验所与中国预防医学中心病毒研究所、中国医学科学院基础所、中国科学院微生物研究所和新疆兽医研究所协作, 用烟草花叶病毒 (TMV) 免疫的 BALB/C 鼠脾细胞与 Sp 2/0 鼠骨髓瘤细胞融合, 获得 10 株能稳定传代并分泌 TMV 单克隆抗体的杂交瘤细胞株。其中以 T₇₃ McAb 与 TMV 的滴度高达 1/655960。杂交瘤细胞染色体平均 93 个。组织培养上清与 IgM 抗体的免疫双扩散试验产生单一的沉淀线, 证明 T₇₃ McAb 属于 IgM 亚类。T₇₃ McAb 与马铃薯 X、Y 病毒、白三叶草花叶病毒、黄瓜花叶病毒、芜菁花叶病毒、大豆花叶病毒、玉米矮花叶病毒、烟草坏死病毒等病毒无交叉反应; 与 TMV 的 9 个毒株 (即 TMV-S、W、O、1、1·2、H₁、H₂、NL₁、NB₁) 均有反应, 是属于种特性杂交瘤细胞株, 这在检疫上有更重要意义, 毒株间 ELISA 滴度有差异, 强毒弱毒有明显的区别。TMV 的兔免疫抗血清可阻断 T₇₃ McAb 对 TMV 抗原的

反应。T₇₃ McAb 腹水稀释 10⁻⁶ 仍可以中和 TMV 对枯斑寄主烟的侵染性, 其中和滴度为 10⁻⁶, 其稀释成 1/650000 仍能很好地与 TMV 产生免疫电泳反应。综合上述试验表明: T₇₃ 杂交瘤细胞株所分泌的抗体是针对 TMV 的特异性 McAb。

这是我国建立的第一个能分泌抗植物病毒 McAb 的鼠淋巴细胞杂交瘤株, 在农业生产和基础研究上都有重要意义, 尤其在植物检疫的诊断、鉴定上将发挥更大作用。这一成果延伸, 将很快建立起 TMV 株系特异性的 McAb, 作为株系鉴定、抗病育种和制备疫苗的重要手段。

致谢: 此项工作是在农牧渔业部植物检疫实验所季良研究员指导下进行, 并审定文稿, 在此致谢。

¹张成良 ¹张作芳 ¹阙晓枫 ¹陈京 ¹宋淑敏
¹胡伟贞 ²田波 ²张秀华 ³谷登峰 ¹陈伯权

⁵孙月英 ¹吴美英 ¹周国芳 ⁵王树惠

(¹农牧渔业部植物检疫实验所 ²中国科学院微生物研究所 ³新疆兽医研究所 ⁴中国预防医学中心病毒研究所 ⁵中国医学科学院基础医学研究所)

微生物氧化十八烯-(9)-一酸生成

1, 18-十八烯-(9)-二酸研究

1, 18-十八烯-(9)-二酸是某些植物的次生代谢产物, 在合成塑料、涂料及香料等方面有广泛用途。由于该酸有一个不饱和双键, 所以用化学合成法获得该 α, ω -二酸是比较困难的。我们在研究中发现一株 *Candida tropicalis* 多倍体突变种能选择性地氧化十八烯-(9)-一酸的甲基末端, 生成 1, 18-十八烯-(9)-二酸。经过试验, 发酵 120 小时后, 加硫酸酸化至 pH 1~2, 用乙醚提取得 1, 18-十八烯-(9)-二酸产量可达 30 克/升。大大超过文献报道 1.66 克/升的水平, 转化率为 40% 左右。经气相色谱-质谱、红

外光谱及臭氧裂解反应分析, 该发酵产物的化学性状与文献报道相符。

我们还发现, 该 *Candida tropicalis* 多倍体突变种尚能选择性地氧化含有两个或三个不饱和双键的十八碳一酸的甲基末端, 生成相应碳数的 α, ω -多烯二酸, 而对于不饱和双键均不氧化或断裂。指出该多倍体突变种可能具有应用于生产的重要经济价值。

焦瑞身 徐可仁 姚佩华 白沂涛

夏国兴 陈桂香 沈永强

(中国科学院上海植物生理研究所)