Supporting Information

Highly Efficient Peterson Olefination Leading to Unsaturated Selenoamides and Their Characterization

Toshiaki Murai,* Akinori Fujishima, Chigusa Iwamoto and Shinzi Kato

Department of Chemistry, Faculty of Engineering, Gifu University,

Yanagido Gifu 501-1193 Japan

¹³C NMR Data of New Compounds

	Page		Page
¹³ C NMR Data of 1	S2	¹³ C NMR Data of 3a	S3
¹³ C NMR Data of 3b	S4	¹³ C NMR Data of 3c	S5
¹³ C NMR Data of 3d	S6	¹³ C NMR Data of 3f	S7
¹³ C NMR Data of 3g	S8	¹³ C NMR Data of 3j	S9
¹³ C NMR Data of 3k	S10	¹³ C NMR Data of 7a	S11
¹³ C NMR Data of 7b	S12	¹³ C NMR Data of 7c	S13
¹³ C NMR Data of 7d	S14	¹³ C NMR Data of 7e	S15
¹³ C NMR Data of 7f	S16	¹³ C NMR Data of 7g	S17
¹³ C NMR Data of 7h	S18	¹³ C NMR Data of 7i	S19
¹³ C NMR Data of 7j	S20	¹³ C NMR Data of 7k	S21
¹³ C NMR Data of 4	S22	¹³ C NMR Data of 5	S23

199.559

77.360
77.040
76.730

57.206
51.794
43.103

26.606
24.617

0.000
0.000
0.000
0.000
0.000

Me₃Si-

①

⑤⑥

Se

②

⑦

C=Se ③

ppm

19-DEC-1995 13:29:31.97
EXMOD: SINGL
IRMOD: BCM
OBNUC: 13C
OBFRQ: 100.40 MHz
OBSET: 138500.00 Hz
PW1: 4.75 usec
POINT: 32768
SAMP0: 32768
TIMES: 1000
SCANS: 101
DUMMY: 2
FREQU: 31948.88 Hz
FILTR: 15950 Hz
ACQTM: 1.0256 sec
DEADT: 16.76 usec
DELAY: 12.54 usec
PD: 2.0000 sec
ADBIT: 16
RGAIN: 23
IRNUC: 1H
IRFRQ: 399.65 MHz
IRSET: 134500.00 Hz
IRRPW: 46.0 usec
IRATN: 511
IRRNS: 0
IRBP1: 26
IRBP2: 6
BF: 2.00 Hz
T1: 0.00 %
T2: 0.00 %
T3: 90.00 %
T4: 100.00 %
XE: 26135.92 Hz
XS: 1041.30 Hz
REFVL: 77.05 ppm
DFILE: ALPHA
MENUF: K13C
SHMFL: TH5AT
LKSET: 61679.1 Hz
LKLEV: 200
LGAIN: 25
LKPHS: 26.72 deg
LKSIG: 784
CTEMP: 22.1 C
CSPED: 13 Hz
FIELD: -15403

Se ④ ⑤
Me₃Si ③ ⑥ ⑦

TI-019-1/13C

6-JUL-1998 19:23:43.31
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFREQ : 100.40 MHz
 OBSSET : 138500.00 Hz
 PW1 : 4.25 usec
 POINT : 32768
 SAMPD : 32768
 TIMES : 1000
 SCANS : 132
 DUMMY : 2
 FREQ : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 1.0256 sec
 DEADT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 2.0000 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFREQ : 399.65 MHz
 IRSSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 23572.64 Hz
 XS : 2583.27 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFILE : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 22
 LKPHS : 12.66 deg
 LKSIG : 546
 CTEMP : 25.2 C
 CSPED : 11 Hz
 FIELD : -15448

TI-026/13C

7-SEP-1998 13: 16: 52.34

DFILE : ALPHA
SFIL : GDAT

COMNT : TI-026/13C
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 32768
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 128
DUMMY : 2
ACQTM : 1.0256 sec
PD : 2.0000 sec
RGAIN : 23

PW1 : 4.25 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 138500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRRPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRNS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 23.4 C
CSPED : 12 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.98 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 23120.23 Hz
XS : 2554.02 Hz
operator

TI-016-1 13C

23-JUN-1998 15:13:27.55
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 138500.00 Hz
 PW1 : 4.25 usec
 POINT : 32768
 SAMPO : 32768
 TIMES : 1000
 SCANS : 52
 DUMMY : 2
 FREQ : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 1.0256 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 2.0000 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21618.73 Hz
 XS : 2822.14 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 22
 LKPHS : 12.66 deg
 LKSIG : 915
 CTEMP : 21.7 C
 CSPED : 13 Hz
 FIELD : -15438

TI-035/13C

28-SEP-1998 16:50:07.93

DFILE : ALPHA
SFIL : GDAT

COMNT : TI-03 / 13C
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 32768
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 103
DUMMY : 2
ACQTM : 1.0256 sec
PD : 2.0000 sec
RGAIN : 23
PW1 : 4.25 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 138500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRRS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 24.1 C
CSPED : 12 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.98 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 22009.71 Hz
XS : 2453.11 Hz
operator

TI-033/13C

22-SEP-1998 11:40:27.44
 DFILE : ALPHA
 SFILE : G0AT
 COMNT : TI-033/13C
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 POINT : 32768
 FREQU : 31948.88 Hz
 SCANS : 176
 DUMMY : 2
 ACQTM : 1.0256 sec
 PD : 2.0000 sec
 RGAIN : 23
 PW1 : 4.25 usec

OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 138500.00 Hz

IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRATN : 511
 IRRPW : 46.0 usec
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 IRANS : 0

ADBIT : 16
 CTEMP : 24.4 C
 CSPED : 11 Hz
 SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.98 Hz
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 REFVL : 77.00 ppm
 XE : 22617.13 Hz
 XS : 2236.17 Hz
 operator

TI-O15/13C

21-AUG-1998 16:28:58.80
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 138500.00 Hz
PW1 : 4.25 usec
POINT : 32768
SAMP0 : 32768
TIMES : 1000
SCANS : 175
DUMMY : 2
FREQU : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 1.0256 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 2.0000 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 21575.83 Hz
XS : 2670.04 Hz
REFVL : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 25
LKPHS : 12.66 deg
LKSIG : 695
CTEMP : 26.4 c
CSPED : 13 Hz
FIELD : -15468

TI-034/13C

24-SEP-1998 22:47:04.97
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 138500.00 Hz
 PW1 : 4.25 usec
 POINT : 32768
 SAMPO : 32768
 TIMES : 1000
 SCANS : 279
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 1.0256 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 2.0000 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21140.98 Hz
 XS : 3061.02 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 24
 LKPHS : 12.66 deg
 LKSIG : 1561
 CTEMP : 25.5 c
 CSPED : 11 Hz
 FIELD : -15388

TI-018-13c

25-JUN-1998 18:27:38.18
 EXMOD: SINGL
 IRMOD: BCM
 OBNUC: 13C
 OBFREQ: 100.40 MHz
 OBSSET: 138500.00 Hz
 PW1: 4.25 usec
 POINT: 32768
 SAMPD: 32768
 TIMES: 1000
 SCANS: 126
 DUMMY: 2
 FREQ: 31948.88 Hz
 FILTR: 15950 Hz
 ACQTM: 1.0256 sec
 DEATD: 16.76 usec
 DELAY: 12.54 usec
 PD: 2.0000 sec
 ADBIT: 16
 RGAIN: 23
 IRNUC: 1H
 IRFREQ: 399.65 MHz
 IRSET: 134500.00 Hz
 IRRPW: 46.0 usec
 IRATN: 511
 IRNS: 0
 IRBP1: 26
 IRBP2: 6
 BF: 2.00 Hz
 T1: 0.00 %
 T2: 0.00 %
 T3: 90.00 %
 T4: 100.00 %
 XE: 21575.83 Hz
 XS: 2670.04 Hz
 REFVL: 77.05 ppm
 DFIL: ALPHA
 MENUF: K13C
 SHMFL: TH5AT
 LKSET: 61679.1 Hz
 LKLEV: 200
 LGAIN: 22
 LKPHS: 12.66 deg
 LKSIG: 821
 CTEMP: 23.5 c
 CSPED: 10 Hz
 FIELD: -15433

AF017C

7-JUL-2000 08:53:57.54
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMP0 : 65536
TIMES : 20000
SCANS : 10308
DUMMY : 2
FREQU : 31948.88 Hz
FILTIR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRANS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 0.00 %
T4 : 90.00 %
XE : 100.00 %
XS : 21109.78 Hz
REFVL : 560.63 Hz
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 29
LKPHS : 46.41 deg
LKSIG : 2309
CTEMP : 24.7 C
CSPED : 13 Hz
FIELD : -15445

AF042C

29-SEP-2000 08:46:52.10
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMP0 : 65536
TIMES : 1000000
SCANS : 10755
DUMMY : 2
FREQ : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 21109.78 Hz
XS : 557.21 Hz
REFVL : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 26
LKPHS : 46.41 deg
LKSIG : 1267
CTEMP : 23.2 C
CSPED : 11 Hz
FIELD : -15435

AF027C

27-JUL-2000 08:24:50.34
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 20000
 SCANS : 9349
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEADT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRANS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21109.78 Hz
 XS : 558.68 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFILE : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 200
 LGAIN : 25
 LKPHS : 46.41 deg
 LKSIG : 1297
 CTEMP : 25.3 c
 CSPED : 12 Hz
 FIELD : -15449

AF025C

19-JUL-2000 09:13:09.99
EXMOD: SINGL
IRMOD: BCM
OBNUC: 13C
OBFRQ: 100.40 MHz
OBSET: 135500.00 Hz
PW1: 4.10 usec
POINT: 65536
SAMP0: 65536
TIMES: 30000
SCANS: 11995
DUMMY: 2
FREQ0: 31948.88 Hz
FILTR: 15950 Hz
ACQTM: 2.0513 sec
DEADT: 16.76 usec
DELAY: 12.54 usec
PD: 1.5817 sec
ADBIT: 16
RGAIN: 23
IRNUC: 1H
IRFRQ: 399.65 MHz
IRSET: 134500.00 Hz
IRRPW: 46.0 usec
IRATN: 511
IRRNS: 0
IRBP1: 26
IRBP2: 6
BF: 2.00 Hz
T1: 0.00 %
T2: 0.00 %
T3: 90.00 %
T4: 100.00 %
XE: 26136.40 Hz
XS: -1956.59 Hz
REFVL: 77.05 ppm
DFILE: ALPHA
MENUF: K13C
SHMFL: TH5AT
LKSET: 61679.1 Hz
LKLEV: 200
LGAIN: 26
LKPHS: 46.41 deg
LKSIG: 1659
CTEMP: 25.0 c
CSPED: 11 Hz
FIELD: -15449

AF-010/13C

30-MAY-2000 08:53:37.45
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMP0 : 65536
TIMES : 12000
SCANS : 10962
DUMMY : 2
FREQ : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRRS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 21109.78 Hz
XS : 553.31 Hz
REFV : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 24
LKPHS : 47.81 deg
LKSIG : 961
CTEMP : 23.3 c
CSPED : 13 Hz
FIELD : -15448

AF021C

915

28-SEP-2000 21:40:56.77
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMP0 : 65536
TIMES : 1000
SCANS : 299
DUMMY : 2
FREQ : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRRPW : 46.0 usec
IRATN : 511
IRNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 21109.78 Hz
XS : 558.19 Hz
REFVL : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 200
LGAIN : 22
LKPHS : 46.41 deg
LKSIG : 639
CTEMP : 24.3 C
CSPED : 11 Hz
FIELD : -15437

AF103/13C

30-JAN-2002 19:38:24.61
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 10000
 SCANS : 149
 DUMMY : 1
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 3.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21109.78 Hz
 XS : 561.60 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 220
 LGAIN : 23
 LKPHS : 42.19 deg
 LKSIG : 796
 CTEMP : 22.8 C
 CSPED : 14 Hz
 FIELD : -2358

AF 120C

191.998
146.932
146.088
143.314
139.202
134.187
133.169
132.839
131.816
127.034
124.192

77.365
77.050
76.730
57.977
51.760
26.295
24.035

31-JUL-2001 12:34:53.18

DFILE : ALPHA
SFILE : GDAT

COMNT : AF 120C
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 65536
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 116
DUMMY : 2
ACQTM : 2.0513 sec
PD : 1.5817 sec
RGAIN : 23

PW1 : 4.10 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRRPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRANS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 22.5 c
CSPED : 10 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.49 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 21109.78 Hz
XS : 559.65 Hz

operator

AF136C

22-OCT-2001 12:35:11.08
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMPO : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 100
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRRNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21109.78 Hz
 XS : 556.24 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 220
 LGAIN : 22
 LKPHS : 42.19 deg
 LKSIG : 915
 CTEMP : 22.9 c
 CSPED : 11 Hz
 FIELD : -3287

9-NOV-2001 09:26:30.18
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 135500.00 Hz
 PW1 : 4.10 usec
 POINT : 65536
 SAMP0 : 65536
 TIMES : 1000
 SCANS : 73
 DUMMY : 2
 FREQU : 31948.88 Hz
 FILTR : 15950 Hz
 ACQTM : 2.0513 sec
 DEAT : 16.76 usec
 DELAY : 12.54 usec
 PD : 1.5817 sec
 ADBIT : 16
 RGAIN : 23
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRRPW : 46.0 usec
 IRATN : 511
 IRBNS : 0
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 XE : 21109.78 Hz
 XS : 545.03 Hz
 REFVL : 77.05 ppm
 DFIL : ALPHA
 MENUF : K13C
 SHMFL : TH5AT
 LKSET : 61679.1 Hz
 LKLEV : 220
 LGAIN : 23
 LKPHS : 42.19 deg
 LKSIG : 1284
 CTEMP : 22.2 C
 CSPED : 10 Hz
 FIELD : -3081

AF135C

23-OCT-2001 20:43:10.91
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 135500.00 Hz
PW1 : 4.10 usec
POINT : 65536
SAMP0 : 65536
TIMES : 1000
SCANS : 201
DUMMY : 2
FREQU : 31948.88 Hz
FILTR : 15950 Hz
ACQTM : 2.0513 sec
DEADT : 16.76 usec
DELAY : 12.54 usec
PD : 1.5817 sec
ADBIT : 16
RGAIN : 23
IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRRPW : 45.0 usec
IRATN : 511
IRRNS : 0
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
XE : 21109.78 Hz
XS : 558.68 Hz
REFVL : 77.05 ppm
DFILE : ALPHA
MENUF : K13C
SHMFL : TH5AT
LKSET : 61679.1 Hz
LKLEV : 220
LGAIN : 22
LKPHS : 42.19 deg
LKSIG : 0
CTEMP : 21.0 C
CSPED : 13 Hz
FIELD : -3027

ETHYLBENZENE T1-020-13C

29-JUL-1998 16:37:39.82
DFILE : ALPHA
SFIL : GDAT
COMT : ETHYLBENZENE
EXMOD : SINGL
IRMOD : BCM
POINT : 32768
FREQ : 31948.88 Hz
SCANS : 85
DUMMY : 2
ACQTM : 1.0256 sec
PD : 2.0000 sec
RGAIN : 23
PW1 : 4.25 usec

OBNUC : 13C
OBFRQ : 100.40 MHz
OBSET : 138500.00 Hz

IRNUC : 1H
IRFRQ : 399.65 MHz
IRSET : 134500.00 Hz
IRATN : 511
IRPW : 46.0 usec
IRBP1 : 26
IRBP2 : 6
IRNS : 0

ADBIT : 16
CTEMP : 25.3 C
CSPED : 12 Hz
SLVNT : CDCL3

RESOL : 0.98 Hz
BF : 2.00 Hz
T1 : 0.00 %
T2 : 0.00 %
T3 : 90.00 %
T4 : 100.00 %
REFVL : 77.05 ppm
XE : 24483.29 Hz
XS : 3689.90 Hz
operator

Messing

TI-022-C/13C

24-AUG-1998 14:21:41.73
 DFILE : ALPHA
 SFIL : GDAT
 COMNT : TI-022-C/13C
 EXMOD : SINGL
 IRMOD : BCM
 POINT : 32768
 FREQU : 31948.88 Hz
 SCANS : 248
 DUMMY : 2
 ACQTM : 1.0256 sec
 PD : 2.0000 sec
 RGAIN : 23
 PW1 : 4.25 usec

OBNUC : 13C
 OBFRQ : 100.40 MHz
 OBSET : 138500.00 Hz
 IRNUC : 1H
 IRFRQ : 399.65 MHz
 IRSET : 134500.00 Hz
 IRATN : 511
 IRRPW : 46.0 usec
 IRBP1 : 26
 IRBP2 : 6
 IRNS : 0
 ADBIT : 16
 CTEMP : 26.2 c
 CSPED : 11 Hz
 SLVNT : CDCL3
 RESOL : 0.98 Hz
 BF : 2.00 Hz
 T1 : 0.00 %
 T2 : 0.00 %
 T3 : 90.00 %
 T4 : 100.00 %
 REFVL : 77.05 ppm
 XE : 21705.51 Hz
 XS : 3212.63 Hz
 operator