Supporting Information

Synthesis and Vaccine Evaluation of the Tumor Associated Carbohydrate Antigen RM2 from Prostate Cancer

Hong-Yang Chuang^{†,‡}, Chien-Tai Ren[†], Chung-An Chao[†], Chung-Yi Wu[†], Sachin S

Shivatare^{†,§,‡}, Ting-Jen R. Cheng[†], Chung-Yi Wu^{†,*}, and Chi-Huey Wong^{†,‡,‡,*}

Current Data Parameters
 NAME 2011.03.30
 EXPNO 3
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20110330
 Time 8.52
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 20
 DS 0
 SWH 8389.262 Hz
 FIDRES 0.256020 Hz
 AQ 1.9530228 sec
 RG 32
 DW 59.600 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.1 K
 D1 2.00000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -0.80 dB
 PL1W 18.11971092 W
 SFO1 600.1536010 MHz

F2 - Processing parameters

SI 16384
 SF 600.1500185 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0 Hz
 GB 0
 PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME 2011.03.30
 EXPNO 4
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20110330
 Time_ 9.29
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 2180
 DS 0
 SWH 39370.078 Hz
 FIDRES 0.300370 Hz
 AQ 1.6646644 sec
 RG 7290
 DW 12.700 usec
 DE 6.00 usec
 TE 297.9 K
 D1 2.00000000 sec
 D11 0.03000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.50 usec
 PL1 2.80 dB
 PL1W 49.17097855 W
 SFO1 150.9251915 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 PCPD2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 PL12 17.18 dB
 PL13 20.18 dB
 PL2W 13.96854782 W
 PL12W 0.28850359 W
 PL13W 0.14459431 W
 SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9078413 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

159.60
 154.01
 138.62
 137.95
 133.33
 130.07
 130.04
 128.76
 128.21
 128.15
 114.10
 95.68
 86.21
 81.62
 79.63
 78.50
 75.16
 75.04
 74.68
 62.22
 56.88
 55.96
 21.34

ppm

Current Data Parameters
 NAME compound04
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20080630
 Time 20.24
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm BBO BB-1H
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 16
 DS 0
 SWH 6410.256 Hz
 FIDRES 0.195625 Hz
 AQ 2.5559540 sec
 RG 57
 DW 78.000 usec
 DE 6.00 usec
 TE 299.9 K
 D1 2.0000000 sec
 TD0 1

CHANNEL f1
 NUC1 1H
 P1 9.90 usec
 PL1 -2.00 dB
 SFO1 400.1328010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 400.1300041 MHz
 WDW EM
 SSB 0 Hz
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME compound04
 EXPNO 2
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20080629
 Time 17.16
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm PABBO BB-
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 1741
 DS 0
 SWH 36231.883 Hz
 FIDRES 0.276427 Hz
 AQ 1.8088436 sec
 RG 16400
 DW 13.800 usec
 DE 6.00 usec
 TE 298.3 K
 D1 2.0000000 sec
 d11 0.0300000 sec
 DELTA 1.8999998 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.00 usec
 PL1 3.80 dB
 SFO1 150.9244380 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 PCD2 80.00 usec
 PL2 -4.10 dB
 PL12 13.60 dB
 PL13 16.60 dB
 SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9078526 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 3.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME compound05
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20071005
 Time 9.11
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm PABBO BB-
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 60
 DS 0
 SWH 8389.262 Hz
 FIDRES 0.256020 Hz
 AQ 1.9530228 sec
 RG 64
 DW 59.600 usec
 DE 6.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.0000000 sec
 TD0 1

CHANNEL f1
 NUC1 1H
 P1 10.40 usec
 PL1 -3.00 dB
 SF01 600.1536010 MHz

F2 - Processing parameters

SI 16384
 SF 600.1500308 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0 Hz
 GB 0
 PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME compound06
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20080618
 Time 13.16
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm PABBO BB-
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 20
 DS 0
 SWH 8389.262 Hz
 FIDRES 0.256020 Hz
 AQ 1.9530228 sec
 RG 40.3
 DW 59.600 usec
 DE 6.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.0000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -4.00 dB
 SFO1 600.1536010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 16384
 SF 600.1500000 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0 Hz
 GB 0
 PC 1.00

7.4037
7.3917
7.3796
7.3676
7.3571
7.3451
7.3307
7.3166
7.3048
5.2390
5.2103
5.0126
4.9935
4.9745
4.8419
4.7282
4.7078
4.6883
4.5651
4.5455
4.5168
4.4971
4.3717
4.3668
3.9634
3.9251
3.9178
3.9127
3.7048
3.6928
3.6871
3.6803
3.6340
3.6209
3.6053
3.5192
3.4752
3.3087
3.2298
2.4021
1.6901
1.6205
1.5566
1.4053
1.3358

Current Data Parameters
 NAME compound06
 EXPNO 2
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20080622
 Time 9.27
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm PABBO BB-
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDC13
 NS 8400
 DS 0
 SWH 36231.883 Hz
 FIDRES 0.276427 Hz
 AQ 1.8088436 sec
 RG 14600
 DW 13.800 usec
 DE 6.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.00000000 sec
 d11 0.03000000 sec
 DELTA 1.89999998 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.00 usec
 PL1 3.80 dB
 SFO1 150.9244380 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 PCPD2 80.00 usec
 PL2 -4.10 dB
 PL12 13.60 dB
 PL13 16.60 dB
 SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9078380 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

29.78
 29.47
 28.00
 27.59
 23.45
 79.68
 77.43
 77.22
 77.01
 75.63
 75.04
 74.65
 74.12
 73.62
 73.57
 69.76
 69.67
 68.83
 67.22
 50.60
 50.29
 47.21
 46.26

156.79
 156.24
 138.59
 137.99
 136.95
 136.84
 128.60
 128.54
 128.51
 128.38
 128.28
 128.12
 127.98
 127.89
 127.75
 127.38
 127.31
 127.26
 103.81

ppm

2012.05.24-1 No. 5, 1H

Chemical structure of compound 10 is shown on the right. The structure is a complex molecule with multiple stereocenters and functional groups, including an acetate (OAc) group, a benzyloxycarbonyl (BnO-CO) group, and a benzyloxymethyl (BnO-CH2) group. The structure is drawn in a chair conformation, with the acetate group in an axial position and the benzyloxycarbonyl group in an equatorial position. The benzyloxymethyl group is also shown in an equatorial position.

NAME
 EXPNO 2
 PROCNO 1
 Date_ 20120524
 Time 8.13
 PROBHD 5 mm CPDPR13C
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 1276
 DS 0
 SWH 39062.500 Hz
 FIDRES 0.256024 Hz
 AQ 1.6777844 sec
 RG 3640
 DN 12.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.0000000 sec
 d11 0.0300000 sec
 T10 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.35 usec
 PL1 2.80 dB
 FWH 49.17097855 W
 SFO1 150.9051886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 P2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 FWH 17.18 dB
 PL3 0.18 dB
 FWH 0.2850359 W
 PL12 0.1455431 W
 SFO2 600.1524006 MHz
 ST 65536
 SF 150.9078547 MHz
 NON 0
 ASB 0
 GB 0
 PC 1.00

171.89
 170.64
 169.96
 169.93
 168.40
 156.62
 156.06
 155.16
 153.53
 138.87
 138.82
 138.19
 137.82
 137.74
 136.78
 136.69
 128.51
 128.45
 128.39
 128.35
 128.04
 127.84
 127.74
 127.61
 127.38
 127.16
 103.83
 101.81
 99.24
 95.38
 80.23
 79.85
 77.48
 75.78
 75.29
 75.21
 74.81
 74.55
 74.40
 73.70
 73.50
 73.46
 71.44
 69.63
 69.56
 68.78
 68.36
 67.07
 64.55
 63.02
 58.96
 58.11
 52.76
 50.45
 50.16
 47.06
 46.09
 36.46
 29.25
 27.82
 27.41
 24.62
 23.28
 23.22
 21.13
 20.71
 20.49

190 180 170 160 150 140 130 120 110 100 90 80 70 60 50 40 30 20 10 ppm

7.3115
7.2995
7.2792
7.2670
7.2542
7.2210
7.2089
7.1975
5.5698
4.5464
4.4476
4.4374
4.4262
4.4158
4.2838
4.2810
4.2676
4.2647
4.0754
4.0696
4.0580
4.0524
4.0465
4.0353
4.0314
4.0264
4.0207
4.0157
4.0099
4.0049
3.9945
3.9887
3.9838
3.9756
3.9725
3.9673
3.9538
3.9437
3.7583
3.6173
3.5998
3.5820
2.9169
2.9111
2.8972
2.8914
2.2904
2.2700
2.2689
2.2484
2.6195
2.6084
1.5972
1.5860
1.5739
1.5619
1.5507
1.4258
1.3626
1.3500
1.3370
1.3231
1.3102
1.2977
1.2796
0.8844
0.8720
0.8600
0.8481
0.8357

Current Data Parameters
NAME 2010-06-11
EXPNO 1
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20100611
Time 11.30
INSTRUM Spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zg30
TD 32768
SOLVENT CDCl3
NS 16
DS 0
SWH 8389.262 Hz
FIDRES 0.256020 Hz
AQ 1.9530228 sec
RG 10
DW 59.600 usec
DE 6.50 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 10.00 usec
PL1 -0.80 dB
PL1W 18.11971092 W
SFO1 600.1536010 MHz

F2 - Processing parameters
SI 16384
SF 600.1500533 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0 Hz
GB 0
PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME 20090704
 EXPNO 4
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20090704
 Time 20.14
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 222
 DS 0
 SWH 39370.078 Hz
 FIDRES 0.300370 Hz
 AQ 1.664664 sec
 RG 11.3
 DW 12.700 usec
 DE 6.00 usec
 TE 300.0 K
 D1 2.00000000 sec
 D11 0.03000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.00 usec
 PL1 5.10 dB
 PL1W 28.95401764 W
 SFO1 150.9251924 MHz
 ===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 PCPD2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 PL12 17.70 dB
 PL13 20.70 dB
 PL12W 13.96854782 W
 PL12N 0.25594768 W
 PL13W 0.12827770 W
 SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9078533 MHz
 NDW EM
 SSB 0
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

13.47
 13.49
 18.51
 24.97
 26.26
 31.93
 31.97
 31.99
 32.04
 38.08
 38.14

53.13
 57.66
 67.71
 67.75
 68.18
 68.22
 68.49
 73.29
 75.20
 76.00
 76.08
 76.13

99.23
 99.27

109.36

127.55
 128.03
 128.24
 138.08

159.66
 159.72
 167.82
 167.85

ppm

Current Data Parameters
 NAME 2011.04.03
 EXPNO 1
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20110403
 Time 12.21
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 26
 DS 0
 SWH 8389.262 Hz
 FIDRES 0.256020 Hz
 AQ 1.9530228 sec
 RG 18
 DW 59.600 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.0000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -0.80 dB
 PL1W 18.11971092 W
 SFO1 600.1536010 MHz

F2 - Processing parameters

SI 16384
 SF 600.1500262 MHz
 EM
 WDW 0
 SSB 0 Hz
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

Current Data Parameters
 NAME 2011.04.03
 EXPNO 2
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20110403
 Time 12.24
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zgpg30
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 4445
 DS 0
 SWH 39370.078 Hz
 FIDRES 0.300370 Hz
 AQ 1.6646644 sec
 RG 3250
 DW 12.700 usec
 DE 6.00 usec
 TE 298.1 K
 D1 2.00000000 sec
 D11 0.03000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.50 usec
 PL1 2.80 dB
 PL1W 49.17097855 W
 SFO1 150.9251915 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 FCPD2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 PL12 17.18 dB
 PL13 20.18 dB
 PL2W 13.96854782 W
 PL12W 0.28850359 W
 PL13W 0.14459431 W
 SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9078441 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0
 GB 0
 PC 1.00

2012.05.07
1

NAME	
SURFNO	
PROCHO	
Ch Loc.	
Time	
INSTRUM	
FROBND	
PULPNOG	
TO	
EQUALENT	
ing	
CS	
SWR	
PLATES	
AQ	
RGS	
LAP	
DE	
TE	
TOT	
TDO	
STACI	
P1	
P2	
PLAY	
SPOI	
81	
GF	
WTEM	
SSS	
LB	
GB	
MC	

1.30262
1.4127
1.9457
2.2743
2.5851
2.5919
3.4264
3.6600
3.6769
3.7635
3.7717
3.7778
3.7842
3.7952
3.8544
3.8624
3.8694
3.8717
4.0407
4.0437
4.0526
4.0555
4.1320
4.2982
4.3032
4.3142
4.3193
4.4326
4.4410
4.5094
4.5146
4.5465
4.5517
4.6929
4.7096
5.4092
5.4256
5.4420
5.4858
6.9994
7.0128
7.2401
7.2467
7.2563
7.2623
7.2638
7.2695
7.2790
7.2852
7.2971
7.3030
7.3102
7.3400
7.3535
7.4362
7.4491
7.4621
7.4621
7.5668
7.5793
8.0074
8.0095

2012.05.07-2 No. 4 13C

NAME 2012.05.07
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20120507
Time 8.36
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT CDCl3
NS 822
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.6771844 sec
RG 320
WDW 12.800 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 13C =====
NUC1 13C
PL 10.35 usec
PL1 2.00 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL12 17.18 dB
PL13 20.18 dB
PL1W 13.96854782 W
PL2W 0.24859437 W
PL3W 0.24859437 W
SFO2 600.1424006 MHz
SI 65536
SF 150.9078140 MHz
EN 0
NS 2.00 Hz
LB 0
GB 0
PC 1.00

168.70
165.34
159.80
138.25
137.99
133.61
133.18
129.93
129.79
129.24
128.73
128.62
128.56
128.05
128.00
127.86
127.85
109.15
99.97
87.21
77.59
76.92
76.27
75.70
75.36
75.18
73.79
73.66
73.62
69.62
68.95
68.71
68.60
58.25
53.50
36.53
27.14
24.72
21.32

4 (Alfa form) 2D COSY90 cosygpppqf (most routine used)

4 (Alfa form) 2D TOCSY dipsi2etgpsi (most routine used)

4 (Alfa form) 2D ROESY roesyphpp

4 (Alfa form) 2D HSQC-Echo hsqcetgpsisp2.2 (most routine used)

4 (Alfa form) 2D HMBC hmbcggplpndgf (most routine used)

4 (Alfa form) 13C dept90 give

Current Data Parameters
 NAME NO.35
 EXPNO 8
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20130524
 Time 17.47
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm CPTCI 1H-
 PULPROG dept90
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 200
 DS 8
 SWH 36231.883 Hz
 FIDRES 0.276427 Hz
 AQ 1.8088436 sec
 RG 2050
 DW 13.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 CNST2 145.0000000
 D1 2.00000000 sec
 D2 0.00344828 sec
 D12 0.00002000 sec
 TD0 4

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 9.65 usec
 P2 19.30 usec
 PL1 -1.82 dB
 PL1W 122.22216797 W
 SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 P3 8.00 usec
 P4 16.00 usec
 PCPD2 90.00 usec
 PL2 4.00 dB
 PL12 25.02 dB
 PL2W 6.09999990 W
 PL12W 0.04819753 W
 SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9028090 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 2.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

4 (Alfa form) 13C dept135 Xf

Current Data Parameters
 NAME NO.35
 EXPNO 9
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20130524
 Time_ 18.00
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm CPTCI 1H-
 PULPROG dept135
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 200
 DS 8
 SWH 36231.883 Hz
 FIDRES 0.276427 Hz
 AQ 1.8088436 sec
 RG 2050
 DW 13.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 297.9 K
 CNST2 145.0000000
 D1 2.00000000 sec
 D2 0.0034828 sec
 D12 0.00002000 sec
 TD0 2

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 9.65 usec
 P2 19.30 usec
 PL1 -1.82 dB
 PL1W 122.22216797 W
 SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waitz16
 NUC2 1H
 P3 8.00 usec
 P4 16.00 usec
 PCPD2 90.00 usec
 PL2 4.00 dB
 PL12 25.02 dB
 PL2W 6.09999990 W
 PL12W 0.04819753 W
 SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9028090 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 2.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

87.06
 77.49
 76.81
 76.16
 75.52
 75.22
 74.98
 68.53
 68.46
 58.05
 53.33
 27.01
 24.57
 21.17

133.47
 132.96
 129.79
 129.66
 128.58
 128.46
 128.40
 127.88
 127.81
 127.72
 127.69

4.13
4.77

18.06
20.73
21.16
24.32
25.81
25.89
27.02
34.47

54.02
54.62
58.15
63.66
68.10
70.59
72.24
73.06
73.60
74.47
74.66
74.76
75.03
75.15
75.44
76.48
78.52
96.14
101.08
108.82
108.82
127.32
127.50
127.69
127.76
127.84
127.95
127.99
128.20
128.31
128.39
128.47
128.57
128.65
129.24
129.65
129.84
132.65
133.52
137.72
138.50
138.59
154.20
159.64
168.90
170.67

Current Data Parameters
NAME 20100209
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20100209
Time 11.04
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 82
DS 0
SWH 39370.078 Hz
FIDRES 0.300370 Hz
AQ 1.6646644 sec
RG 7290
DW 12.700 usec
DE 6.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.75 usec
PL1 3.00 dB
PL1W 46.95791626 W
SFO1 150.9251919 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL12 17.40 dB
PL13 20.40 dB
PL2W 13.96854782 W
PL12W 0.27425295 W
PL13W 0.13745207 W
SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 150.9078380 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.00

ppm

20

40

60

80

100

120

140

160

180

2012.10.10-1 No. 2 1H (left)

NAME 2012.10.10
EXPNO 1
PROCNO 1
Date_ 20121010
Time 7.30
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPTCL 1H-
PULPROG zg30
TD 32768
SOLVENT CDCl3
NS 24
DS 0
SWH 8370.536 Hz
FIDRES 0.255448 Hz
AQ 1.9573919 sec
RG 9
DM 59.733 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 8.40 usec
PL1 4.00 dB
PL1W 6.09999990 W
SF01 600.1336009 MHz
SI 16384
SF 600.1300182 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2012.10.04-1 No.20 1H

NAME 2012.10.04
EXPNO 1
PROCNO 1
F2 - 2012.10.04
F3 - 2012.10.04
F4 - 2012.10.04
F5 - 2012.10.04
F6 - 2012.10.04
F7 - 2012.10.04
F8 - 2012.10.04
F9 - 2012.10.04
F10 - 2012.10.04
F11 - 2012.10.04
F12 - 2012.10.04
F13 - 2012.10.04
F14 - 2012.10.04
F15 - 2012.10.04
F16 - 2012.10.04
F17 - 2012.10.04
F18 - 2012.10.04
F19 - 2012.10.04
F20 - 2012.10.04
F21 - 2012.10.04
F22 - 2012.10.04
F23 - 2012.10.04
F24 - 2012.10.04
F25 - 2012.10.04
F26 - 2012.10.04
F27 - 2012.10.04
F28 - 2012.10.04
F29 - 2012.10.04
F30 - 2012.10.04
F31 - 2012.10.04
F32 - 2012.10.04
F33 - 2012.10.04
F34 - 2012.10.04
F35 - 2012.10.04
F36 - 2012.10.04
F37 - 2012.10.04
F38 - 2012.10.04
F39 - 2012.10.04
F40 - 2012.10.04
F41 - 2012.10.04
F42 - 2012.10.04
F43 - 2012.10.04
F44 - 2012.10.04
F45 - 2012.10.04
F46 - 2012.10.04
F47 - 2012.10.04
F48 - 2012.10.04
F49 - 2012.10.04
F50 - 2012.10.04
F51 - 2012.10.04
F52 - 2012.10.04
F53 - 2012.10.04
F54 - 2012.10.04
F55 - 2012.10.04
F56 - 2012.10.04
F57 - 2012.10.04
F58 - 2012.10.04
F59 - 2012.10.04
F60 - 2012.10.04
F61 - 2012.10.04
F62 - 2012.10.04
F63 - 2012.10.04
F64 - 2012.10.04
F65 - 2012.10.04
F66 - 2012.10.04
F67 - 2012.10.04
F68 - 2012.10.04
F69 - 2012.10.04
F70 - 2012.10.04
F71 - 2012.10.04
F72 - 2012.10.04
F73 - 2012.10.04
F74 - 2012.10.04
F75 - 2012.10.04
F76 - 2012.10.04
F77 - 2012.10.04
F78 - 2012.10.04
F79 - 2012.10.04
F80 - 2012.10.04
F81 - 2012.10.04
F82 - 2012.10.04
F83 - 2012.10.04
F84 - 2012.10.04
F85 - 2012.10.04
F86 - 2012.10.04
F87 - 2012.10.04
F88 - 2012.10.04
F89 - 2012.10.04
F90 - 2012.10.04
F91 - 2012.10.04
F92 - 2012.10.04
F93 - 2012.10.04
F94 - 2012.10.04
F95 - 2012.10.04
F96 - 2012.10.04
F97 - 2012.10.04
F98 - 2012.10.04
F99 - 2012.10.04
F100 - 2012.10.04

2012.10.04-2 No.20 13C

NAME	2012.10.04
EXPNO	2
PROCNO	1
Date_	20121004
Time	12.47
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm CPDCH 13C
PULPROG	zgpg30
TD	131072
SOLVENT	CDCl3
NS	164
DS	0
SMH	39062.500 Hz
FIDRES	0.298023 Hz
AQ	1.6777844 sec
RG	3640
DW	12.800 use
DE	21.00 use
TE	298.0 K
D1	2.00000000 sec
D11	0.03000000 sec
TD0	1

===== CHANNEL f1 =====	
NUC1	13C
P1	11.00 use
PL1	2.80 dB
PL1W	49.17097855 W
SFO1	150.9251886 MHz
===== CHANNEL f2 =====	
CPDPRG2	waltz16
NUC2	1H
PCPD2	80.00 use
PL2	0.33 dB
PL12	17.40 dB
PL13	20.40 dB
PL12W	13.96854782 W
PL12W	0.27425295 W
PL13W	0.13745207 W
SFO2	600.1524006 MHz
SI	65536
SF	150.9078380 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	2.00 Hz
GB	0
PC	1.00

2012.07.23-2 No. 22 13C (left hand)

NAME	2012.07.23
EXPNO	2
PROCNO	1
Date_	20120723
Time	8.12
INSTRUM	spec
PROBHD	5 mm CPTCI 1H-
PULPROG	zgpg30
TD	131072
SOLVENT	CDCl3
NS	7766
DS	0
SWH	39062.500 Hz
FIDRES	0.298023 Hz
AQ	1.6777716 sec
RG	2050
DW	12.800 usec
DE	21.00 usec
TE	298.0 K
D1	2.00000000 sec
D11	0.03000000 sec
TD0	1

===== CHANNEL f1 =====	
NUC1	13C
P1	9.60 usec
PL1	-1.82 dB
PL1W	122.22216797 W
SFO1	150.9201581 MHz

===== CHANNEL f2 =====	
CPDPRG2	waltz16
NUC2	1H
PCPD2	90.00 usec
PL2	4.00 dB
PL12	24.90 dB
PL13	27.90 dB
PL2W	6.09999990 W
PL12W	0.04958267 W
PL13W	0.02485020 W
SFO2	600.1324005 MHz
SI	65536
SF	150.9028120 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	2.00 Hz
GB	0
PC	1.00

[illegible]

2012.06.21-4 No. 24 13C

172.02
171.82
170.89
170.69
170.18
170.07
169.99
169.89
168.37
168.06
153.65
153.47
139.38
139.05
138.28
138.14
137.89
129.78
128.84
128.75
128.66
128.49
128.45
128.39
128.19
128.10
127.99
127.97
127.89
127.79
127.76
127.47
127.32
127.13
126.59
103.84
100.39
99.36
97.53
96.21
79.13
75.94
75.16
75.07
74.96
74.95
74.82
74.59
74.16
73.63
73.51
72.96
71.32
70.88
69.02
68.51
68.05
67.09
66.20
63.51
62.66
59.06
58.89
52.85
52.77
24.68
21.32
21.18
21.15
20.82
20.78

Chemical structure diagram showing a complex molecule labeled 24. The structure features multiple sugar rings (pyranose) linked by various protecting groups and functional moieties. Key components include:

- A central pyranose ring substituted with a benzoyl group (OBz), a benzyloxymethyl group (BOM), and a benzoate ester (CO₂Me).
- A side chain containing a trocaterone derivative (NH Troc) linked via an ether bond.
- Another pyranose ring substituted with a benzoyl group (OBz), a benzyloxymethyl group (BOM), and a benzoate ester (CO₂Me).
- A terminal pyranose ring substituted with a benzoyl group (OBz), a benzyloxymethyl group (BOM), and a benzoate ester (CO₂Me).
- A long aliphatic chain ending in a trocaterone derivative (Troch). The chain includes a benzyl group (Bn) and a trocaterone moiety (Troch).

2012.05.18

[illegible]

2012.05.18-3

```

NAME          2012.05.18
EXPNO         3
PROCNO        1
Date_         20120518
Time         17.52
INSTRUM       spect
PROBHD        5 mm CPCH 13C
PULPROG       zgpg30
TD            131072
SOLVENT       CDCl3
NS            557
DS            4
SWH           39062.500 Hz
FIDRES        0.298023 Hz
AQ            1.6777844 sec
RG            3640
DM            12.800 usec
DE            21.00 usec
TE            298.0 K
D3            2.0000000 sec
D11           0.0300000 sec
TD0           1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1          13C
P1            10.35 usec
PL1           -1.50 dB
PL12          19.00 dB
PL1W          49.17097850 W
SFO1          150.9251886 MHz
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2       waltz16
NUC2          1H
PCPD2         80.00 usec
PL2           -1.50 dB
PL12          19.00 dB
PL13          20.18 dB
PL2W          13.96854782 W
PL12W         0.28850359 W
PL13W         0.14459431 W
SFO2          600.1524006 MHz
PCPD2         80.00 usec
SP            150.9078343 MHz
MDW           0
SSB           0
LB            2.00 Hz
GB            0
PC            1.00

```

190 180 170 160 150 140 130 120 110 100 90 80 70 60 50 40 30 20 10 ppm

F2 - Acquisition Parameters

F2 - Acquisition Parameters	
Date_	20110402
Time	17.14
INSTRUM	Spect
PROBHD	5 mm CPDCH 13C
PULPROG	zg30
TD	32768
SOLVENT	CDCl3
NS	33
DS	0
SSWH	8389.262 Hz
FFIDRES	0.256020 Hz
AQ	1.9530228 sec
RG	8
DW	59.600 usec
DE	21.00 usec
TE	298.0 K
DL1	2.00000000 sec
DD0	1

```
----- CHANNEL f1 -----
NUC1      1H
P1        10.00 usec
PL1       -0.80 dB
PL1W      18.11971092 W
SF01      600.1536010 MHz
```

```
F2 - Processing parameters
SI      16384
SF      600.150349 MHz
WDW      EM
SSB      0
LB      0 Hz
GB      0
PC      1.00
```

50.00
20.72
23.21
23.27
27.39
27.80
29.24
46.05
47.02
50.11
50.41
58.59
62.91
67.03
67.06
68.76
69.55
69.62
72.76
73.44
74.31
74.51
74.66
74.72
75.56
76.14
76.81
77.02
77.23
77.46
79.52
80.77
95.16
101.70
103.77
127.07
127.15
127.23
127.29
127.43
127.71
127.79
128.03
128.30
128.34
128.43
128.49
128.55
136.65
136.75
137.67
137.78
138.60
138.70
155.55
156.05
156.61
170.60

Current Data Parameters
NAME 2011.04.02
EXPNO 3
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20110402
Time 17.31
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 1900
DS 0
SWH 39370.078 Hz
FIDRES 0.300370 Hz
AQ 1.6646644 sec
RG 2890
DW 12.700 usec
DE 6.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251915 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL12 17.18 dB
PL13 20.18 dB
PL1W 13.96854782 W
PL12W 0.28850359 W
PL13W 0.14459431 W
SFO2 600.1539010 MHz

F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 150.9078583 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0
GB 0
PC 1.00

180 160 140 120 100 80 60 40 20 ppm

Chemical structure of compound 26, a complex oligosaccharide derivative. The structure shows a central glucose core with various protecting groups and functional groups, including TBSO, TrocHN, MeOOC, HNO, OBz, NHTrac, OAc, OBn, and a long chain ending in Bn and Ncbz.

NAME
 EXPR0
 PROCNO 1
 Date 20101009
 Time 17.04
 INSTRUM spect
 PROBD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zg30
 TD 32768
 SOLVENT D2O
 NS 141
 DS 0
 SMH 8389.162 Hz
 FIDRES 0.256020 Hz
 AQ 1.9530624 sec
 RG 655
 DN 59.600 usec
 DE 56.50 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.00000000 sec
 TDO 1
 ===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -0.80 dB
 PL1M 18.11971092 N
 SF01 600.1536010 MHz
 SI 16384
 SF 600.1499417 MHz
 EM 0
 SSB 0
 GB 0
 PC 1.00

NAME 2010.10.09
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20101009
Time 17.15
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 17000
DS 0
SWH 39370.078 Hz
FIDRES 0.300370 Hz
AQ 1.6646771 sec
RG 13000
DW 12.700 usec
DE 6.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251919 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL12 17.18 dB
PL13 20.18 dB
PL1W 13.96850782 W
PL2W 0.28850359 W
PL3W 0.14459431 W
SFO2 600.1539010 MHz
SI 65536
SF 150.9078380 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.00

175.02
174.90
173.40
102.78
102.72
100.10
82.50
74.71
74.05
73.48
72.46
71.67
70.23
69.70
69.54
68.22
68.16
68.11
62.72
62.50
60.95
55.58
51.81
40.03
29.88
28.36
22.25
21.11
21.94

[illegible]

2011.09.30-4 No.28 13C

2011.09.30

NAME

EXPNO

PROCNO

Date_

Time

INSTRUM

PROBHD

PULPROG

TD

SOLVENT

NS

DS

SWH

FIDRES

AQ

RG

DM

DE

TE

DL

DL1

TD0

===== CHANNEL f1 =====

NUC1

PL1

PL1W

SFO1

===== CHANNEL f2 =====

CHRG22

NUC2

PCPD2

PL12

PL13

PL14

PL15

PL16

SFO2

SI

SF

MDM

SSB

GB

PC

174.9899
174.8891
173.3970

103.3813
102.7069
102.4141
100.1494
82.5351
81.6495
75.2285
74.7442
73.6722
72.4677
72.4363
71.6704
70.6372
69.8880
69.6824
68.5160
68.3201
68.2770
68.1751
68.0980
62.8102
62.5365
60.9950
54.7276
51.7954
40.0300
39.3019

2011-09-28

NAME	2013.09.28
EXPNO	1
PROCNO	1
DATE_	2010928
TIME	11:55
INSTRUM	1D
PROBHD	5 mm CPDCH 150
PULPROG	zgpg30
PCPDPRG2	zgpg30
TD	32768
DELTA	0.00000000
RG	56
NS	0
DS	0
SWH	8389.262 Hz
F2	0.2500000 Hz
PRGNAME	1.953084 sec
RG	0.91
WID	39.83000000
DELTA	0.00000000
TE	298.2 K
TD	2.00000000 sec
RG	1

NAME 2011.09.28
 EXPNO 10
 PROCNO 1
 Date_ 20110921
 Time 12:23
 INSTRUM spect
 PROBM 5 mm CPOCH 13C
 PULPROG zgpg30
 TD 131046
 SOLVENT D2O
 NS 1910
 DS 4
 SWH 19062.500 Hz
 FIDRES 0.298082 Hz
 AQ 1.6774516 sec
 RG 3640
 IN 12.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 T1 0.000000 sec
 D11 0.03000000 sec
 TDO 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.38 usec
 PL1 49.17000000 dB
 FLLW 18.00 dB
 SFO1 150.9251897 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPOPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 P2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 PL12 1.00 dB
 PL13 20.18 dB
 PL2W 13.96854782 W
 PL12W 0.28850359 W
 PL13W 0.14459431 W
 SFO2 600.1524006 MHz
 SI 65536
 SF 150.9078380 MHz
 SSF 0
 SSB 0
 LB 2.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

173.3968
 174.9685
 174.8481
 103.0311
 102.7144
 102.5513
 102.4993
 100.1640
 82.5500
 81.1430
 75.9151
 74.7739
 74.7452
 74.2671
 73.6555
 72.4685
 72.3182
 71.6712
 70.8944
 70.6174
 69.8832
 69.6801
 68.2990
 68.1797
 68.1403
 68.0958
 67.7834
 62.8556
 62.5251
 61.0056
 60.5903
 54.7387
 52.6623
 51.7910
 40.0212
 39.3046
 28.1067
 26.3459
 22.3400
 22.2275
 22.0134
 21.9710

NAME 2010.10.23
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 Date_ 20101023
 Time 17.24
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm CPDCH 13C
 PULPROG zgpg30
 TD 32768
 SOLVENT D2O
 NS 80
 DS 0
 SWH 8389.262 Hz
 FIDRES 0.2530824 Hz
 AQ 1.9535824 sec
 RG 1113
 DM 59.600 usec
 DE 6.50 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.00000000 sec
 TDO 1
 CHANNEL f1
 MUC1 1H
 P1 10.00 usec
 PL1 -0.80 dB
 PL1M 18.11971092 N
 SE01 600.1536010 MHz
 SI 16384
 SF 600.1499407 MHz
 MDW EM
 SSB 0
 LB 0.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

NAME 2010.10.23
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20101024
Time 11:26
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 21150
DS 0
SWH 39370.078 Hz
FIDRES 0.300370 Hz
AQ 1.6646771 sec
RG 13000
DM 12.700 usec
DE 6.00 usec
TE 298.1 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 M
SF01 150.9251919 MHz
===== CHANNEL f2 =====
PCPDG2 waitz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL12 17.18 dB
PL13 20.18 dB
PL1W 13.96854782 M
PL12W 0.28850359 M
PL13W 0.14452431 M
SF02 600.152416 MHz
SF 150.9078380 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 3.00 Hz
GB 0
PC 1.00

103.3851
102.6745
102.3303
100.1390
99.5580
82.4746
81.8124
75.5508
75.0389
74.7381
73.6914
72.7206
72.4462
71.7795
71.6493
69.8536
69.6698
69.0454
68.3482
68.2916
68.1681
68.0885
67.9884
67.1927
62.8295
62.5075
62.3797
60.9974
54.6119
51.7805
51.5834
40.0159
39.7223
39.2944
30.1656
28.0828
26.3163
22.2695
22.0127
21.9617

174.9547
174.9025
174.8221
173.8632
173.3981

NAME 2011.12.21
 EXPNO 1
 PROCNO 1
 F2 - 1
 F3 - 1
 F4 - 1
 F5 - 1
 F6 - 1
 F7 - 1
 F8 - 1
 F9 - 1
 F10 - 1
 F11 - 1
 F12 - 1
 F13 - 1
 F14 - 1
 F15 - 1
 F16 - 1
 F17 - 1
 F18 - 1
 F19 - 1
 F20 - 1
 F21 - 1
 F22 - 1
 F23 - 1
 F24 - 1
 F25 - 1
 F26 - 1
 F27 - 1
 F28 - 1
 F29 - 1
 F30 - 1
 F31 - 1
 F32 - 1
 F33 - 1
 F34 - 1
 F35 - 1
 F36 - 1
 F37 - 1
 F38 - 1
 F39 - 1
 F40 - 1
 F41 - 1
 F42 - 1
 F43 - 1
 F44 - 1
 F45 - 1
 F46 - 1
 F47 - 1
 F48 - 1
 F49 - 1
 F50 - 1
 F51 - 1
 F52 - 1
 F53 - 1
 F54 - 1
 F55 - 1
 F56 - 1
 F57 - 1
 F58 - 1
 F59 - 1
 F60 - 1
 F61 - 1
 F62 - 1
 F63 - 1
 F64 - 1
 F65 - 1
 F66 - 1
 F67 - 1
 F68 - 1
 F69 - 1
 F70 - 1
 F71 - 1
 F72 - 1
 F73 - 1
 F74 - 1
 F75 - 1
 F76 - 1
 F77 - 1
 F78 - 1
 F79 - 1
 F80 - 1
 F81 - 1
 F82 - 1
 F83 - 1
 F84 - 1
 F85 - 1
 F86 - 1
 F87 - 1
 F88 - 1
 F89 - 1
 F90 - 1
 F91 - 1
 F92 - 1
 F93 - 1
 F94 - 1
 F95 - 1
 F96 - 1
 F97 - 1
 F98 - 1
 F99 - 1
 F100 - 1

No 31 13C

174.9537
174.8942
174.8200
174.0208

102.8862
102.7272
102.6735
102.3789
101.3472
82.2686
81.9990
76.7163
75.1300
74.6378
74.4064
73.9653
72.9424
72.2229
71.1134
69.9168
69.5690
68.6051
68.3501
68.2105
67.9237
67.6969
62.7051
61.0980
60.8495
60.4614
54.5634
52.2769
51.5007
39.3213
37.1346
28.1186
26.4942
26.4532
22.5207
22.2744
22.0374
21.9817

NAME EXPNO 2011.12.21
PROCNO 1
Date_ 20111221
Time 12.48
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDPRG2
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 3571
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.452511 Hz
AQ 1.677784 sec
RG 3640
DM 12.800 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.0000000 sec
D11 0.0300000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251891 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL2W 17.180000 W
PL3 20.18 dB
PL3W 13.96854702 W
PL12W 0.28850359 W
PL13W 0.14459431 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078184 MHz
WFM 0
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2012.01.12
CHEN
SHEN

1.4866
1.4991
1.6766
1.6900
1.7027
1.7178
1.7320
1.9308
2.0403
2.0526
3.0177
3.0302
3.0427
3.3702
3.5241
3.5593
3.5747
3.5892
3.5939
3.6085
3.6225
3.6330
3.6398
3.6481
3.6537
3.6636
3.6741
3.6939
3.6978
3.7110
3.7167
3.7287
3.7344
3.7527
3.7716
3.7849
3.7986
3.8077
3.8182
3.8381
3.8520
3.8693
3.8851
3.9020
3.9095
3.9139
3.9277
3.9423
3.9449
3.9634
4.1132
4.1838
4.1880
4.3981
4.4114
4.5373
4.5505
4.7275
4.7352
4.7412

```

***** CHANNEL #1 *****
MFC1
PI 16.00 usec
Fid -1.80 dB
FidW 16.11571052 W
SPW1 600.134010 MHz
SI 16384
ZF 600.1489331 MHz
EM
SIN 0
LW 0.00 MHz
CRS 0
FC 1.00

```

2012.01.11-3 No 1 13C

174.9609
174.8205
174.0350
173.4052

102.9015
102.6984
102.4016
101.3770
100.1832
82.5152
81.7415
76.7672
74.7623
74.6352
74.4365
74.0122
73.6946
72.9541
72.4708
72.2245
71.6665
71.1867
69.8664
69.6917
69.5746
68.6372
68.3547
68.3271
68.2135
68.1087
67.9590
67.7561
62.9297
62.7177
62.5378
61.1007
61.0342
60.4712
54.5855
52.3108
51.8103
51.5229
40.0335
39.3237
37.1528
28.1023
26.3350
22.5435
22.3064
22.0308
21.9951

NAME 2012.01.11
EXPNO 3
PROCNO 1
Date_ 20120111
Time 11.15
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131046
F2 13.046
SOLVENT NSI
DS 2916
SHR 0
39062.500 Hz
FIDRES 0.298082 Hz
AQ 1.6774516 sec
RG 3640
RW 12.800 usec
DS 2.000 usec
WB 20.000 usec
F2 13.046
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.50 usec
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251891 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.33 dB
PL2W 17.18 dB
PL3 20.18 dB
PL3W 13.96854782 W
PL4W 0.28850337 W
PL5W 0.14425168 W
SFO2 600.1324006 MHz
SI 65536
SF 150.9078380 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

NO.1 @ 2D TOCSY dipsi2etgpsi (most routine used)

The chemical structure of compound 1 is a branched oligosaccharide. It features a central glucose unit (Glc) in its chair conformation. Attached to this core are several side chains: a long alkyl chain (CH₂)₁₂COOH, a carboxylic acid group (COOH), and various other sugar units including mannose (Man), galactose (Gal), and fucose (Fuc). The structure is highly branched, with multiple glycosidic linkages connecting the different sugar units.

NO.1 @ 2D HSQC-Echo hsqcetgpsisp2.2 (most routine used)

NO.1 @ 2D HMBC hmbcgplpndgf (most routine used)

RM2 (deportected) @ 13C dept90

```

Current Data Parameters
NAME      RM2 (deportected)
EXPNO     7
PROCNO    1

F2 - Acquisition Parameters
Date_     20130510
Time      14.45
INSTRUM   spect
PROBHD    5 mm CPTCL 1H-
PULPROG   dept90
TD        131072
SOLVENT   D2O
NS        200
DS        8
SWH        36231.883 Hz
FIDRES     0.276427 Hz
AQ         1.8088436 sec
RG         2050
DW         13.800 usec
DE         21.00 usec
TE         298.0 K
CNST2     145.0000000
D1         2.00000000 sec
D2         0.0034828 sec
D12        0.0000200 sec
TD0        4

===== CHANNEL f1 =====
NUC1       13C
P1         9.65 usec
P2         19.30 usec
PL1        -1.82 dB
PL1W       122.2216797 W
SFO1       150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2    waltz16
NUC2       1H
P3         8.80 usec
P4         17.60 usec
PCPD2      90.00 usec
PL2        4.00 dB
PL12       24.29 dB
PL12W      6.09999990 W
PL12W      0.05700105 W
SFO2       600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
SI         65536
SF         150.9023950 MHz
WDW        EM
SSB        0
LB         2.00 Hz
GB         0
PC         1.00
  
```

No. 1 @ 13C dept135

Current Data Parameters
NAME RM2(deprotected)
EXPNO 8
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters

Date_ 20130510
Time 14.59
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPTCI 1H-
PULPROG dept135
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 200
DS 8
SWH 36231.883 Hz
FIDRES 0.276427 Hz
AQ 1.8088436 sec
RG 2050
DW 13.800 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
CNST2 145.0000000
D1 2.00000000 sec
D2 0.00344828 sec
D12 0.00002000 sec
TD0 2

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.65 usec
P2 19.30 usec
PL1 -1.82 dB
PLW 122.22216797 W
SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
P3 8.80 usec
P4 17.60 usec
PCPD2 90.00 usec
PL2 4.00 dB
PL12 24.20 dB
PL2W 6.09999990 W
PL12W 0.05831897 W
SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing Parameters
SI 65536
SF 150.9023950 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

NAME
 EXPNO 4
 DATE_ 20120901
 Time 14.54
 PROBNM 5 mm CBOC1 13C
 PULPROG zgpg30
 C1 13C
 SOLVENT DMSO
 NS 32
 DS 4
 SWH 8189.262 MHz
 FIDRES 0.254010 Hz
 AQ 1.3535814 sec
 RG 327.5
 DWT 55.600 usec
 DE 21.00 usec
 TE 300.2 K
 D1 1.00 sec
 D11 2.0000000 sec
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 16.00 usec
 PL1 -2.00 dB
 FREQ 101.626130 MHz
 PC 16.1197022 W
 PWD 605.133320 MHz
 ST 40.00 dB
 ZF 605.1499417 MHz
 MAG 1.00
 PHA 0.00 Hz
 OR 0
 PC 1.00

2012.09.01-4 disaccharide (deprotected) 1H

4.4883
 3.9667
 3.9577
 3.9486
 3.9069
 3.9031
 3.8967
 3.8913
 3.8881
 3.8804
 3.8711
 3.8677
 3.8487
 3.8319
 3.8150
 3.7600
 3.7436
 3.7204
 3.7182
 3.7129
 3.7010
 3.6929
 3.6855
 3.6713
 3.6634
 3.6526
 3.6430
 3.6323
 3.6149
 3.6078
 3.6053
 3.5932
 3.5908
 3.5295
 3.5229
 3.5197
 3.5114
 3.4955
 3.0189
 3.0063
 2.9936
 2.7660
 2.7582
 2.7452
 2.7375
 2.0481
 2.0430
 1.7409
 1.7206
 1.7003
 1.6875
 1.6748
 1.6215
 1.6098
 1.5980
 1.4311
 1.4221
 1.4189
 1.4097
 1.3969

NAME 2012.09.01
 EXPTNO 1
 PROCNO 1
 Date_ 20120901
 Time 14.49
 INSTRUM spect
 PULPROG 5 mm CPMCH 13C
 F2PROG zgpg30
 TO 131.072
 SOLVENT D2O
 NS 4246
 DS 0
 SWH 39062.500 Hz
 FIDRES 0.425821 Hz
 AQ 1.677864 sec
 RG 3640
 DW 12.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 D1 2.00000000 sec
 D11 0.03000000 sec
 TSD 1

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 10.35 usec
 PL1 2.80 dB
 PL1W 49.17097855 W
 SF01 150.3251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 P2 80.00 usec
 PL2 0.33 dB
 PL2W 17.18 dB
 PL2W 17.18 dB
 PL2W 17.18 dB
 PL2W 13.96064762 W
 PL12W 0.28850359 W
 PL13W 0.14459431 W
 SF02 600.1524006 MHz
 SI 65536
 SF 150.9078380 MHz
 WALTZ 2
 LAM 2.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

2012.09.01-3 disaccharide (deprotected) 13C

2012.12.29-3 Tri-Glucose (deprotection) 1H (left)

NAME 2012.12.29
EXPNO 3
PROCNO 1
Date_ 20121229
Time 15.10
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm PABBO BB-
PULPROG zg30
TD 32768
SOLVENT D2O
NS 36
DS 0
SWH 8370.536 Hz
FIDRES 0.255448 Hz
AQ 1.9573919 sec
RG 50.8
DW 59.733 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
D1 2.00000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 9.10 usec
PL1 -4.00 dB
PL1W 38.48839951 W
SFO1 600.1336009 MHz
SI 16384
SF 600.1299383 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2012.12.29-4 Tri-Glucose (deprotection) (left) ¹³C

NAME 2012.12.29
EXPNO 4
PROCNO 1
Date_ 20121229
Time 15.13
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm PABBO BB-
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 13599
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.677716 sec
RG 2050
DW 12.800 usec
DE 21.00 usec
TE 298.3 K
D1 2.00000000 sec
D11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 ¹³C
P1 10.10 usec
PL1 3.00 dB
PL1W 40.28561401 W
SF01 150.9201571 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 ¹H
PCPD2 90.00 usec
PL2 -4.00 dB
PL12 14.40 dB
PL13 17.40 dB
PL12W 38.48839951 W
PL12W 0.55632669 W
PL13W 0.27882382 W
SF02 600.1324005 MHz
SI 65536
SF 150.9028090 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

174.99
174.78
173.41
102.22
102.17
100.02
86.16
75.34
74.22
73.41
72.46
72.35
71.72
70.06
69.96
68.56
68.27
68.21
63.16
62.57
60.85
55.60
51.84
40.03
39.35
28.14
26.46
22.20
22.02

NAME
EXPNO
PROCNO
Date_

2012.04.13-1 RMTL 1H

1.4287
1.4405
1.5634
1.5763
1.5886
1.6518
1.6643
2.0443
2.0494
2.0564
2.0580
2.5529
2.5639
2.5753
2.7910
2.8022
3.2309
3.2423
3.5759
3.5895
3.6076
3.6542
3.6632
3.6717
3.6827
3.7000
3.7059
3.7092
3.7145
3.7187
3.7252
3.7346
3.7461
3.7549
3.7621
3.7690
3.7719
3.7749
3.7884
3.7940
3.8044
3.8133
3.8236
3.8297
3.8468
3.8747
3.8872
3.8923
3.9036
3.9123
3.9183
3.9259
3.9307
3.9375
4.1693
4.3913
4.7364

2012.04.13

1

20120413

19.41

INSTRUM

5 mm CPTCI 1H-

PROBHD

32768

TD

D2O

60

DS

8370.536 Hz

0.255448 Hz

1.9573919 sec

RG

718

59.733 usec

21.00 usec

297.9 K

DI

2.00000000 sec

TD0

1

===== CHANNEL f1 =====

NUC1 1H

F1 7.95 usec

PL1 4.00 dB

PL1W 6.09999990 W

SFO1 600.1336009 MHz

SI 16384

SF 600.1299429 MHz

WDW EM

SSB 0

LB 0.00 Hz

GB 0

FC 1.00

9.5 9.0 8.5 8.0 7.5 7.0 6.5 6.0 5.5 5.0 4.5 4.0 3.5 3.0 2.5 2.0 1.5 1.0 0.5 ppm

2.17
1.10
1.00
3.25
1.31
39.98
0.93
2.04
1.84
1.16
1.04
1.89
13.09
1.15
1.15
2.30
2.16
2.85

2012.05.08-2 RMTL 13C

NAME
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20120509
Time 11:59
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT D2O
NS 4376
DS 4
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.258023 Hz
AQ 1.6777844 sec
RG 3640
DN 12.800 usec
DE 21.00 usec
TE 300.2 K
D1 2.0000000 sec
D11 0.0300000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 usec
PL1 0.10 dB
FLLW 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CFDPRG2 waitz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 usec
PL2 0.10 dB
PL12 17.18 dB
PL13 20.18 dB
PL2M 13.96884782 W
PL12M 0.28850359 W
PL13M 0.14459431 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078336 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2013.05.17-1 9-Bn-7,8-diAc-N,O-oxiane-1-Thiophenol-sialic acid 1H

2013.05.17-2 9-Bn-7,8-diAc-N,O-oxiane-1-Thiolphenol-sialic acid

NAME 2013.05.17
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20130517
Time 8.45
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 105
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.6777844 sec
RG 3640
DE 12.800 use
TE 298.0 K
D1 2.0000000 sec
D11 0.0300000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 use
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 use
PL2 0.33 dB
PL12 16.50 dB
PL13 19.50 dB
PL12W 13.96854782 W
PL13W 0.33740479 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078404 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2013.05.23-1 Neu-9-Bn-7,8-diAc-5N,40-oxalindine-2-dibutylphosphate

No. 31

[illegible]

2013.05.23-2 Neu-9-Bn-7,8-diAc-5N,4O-oxalindine-2-dibutylphosphate

No. 31

NAME 2013.05.23
EXPNO 2
PROCNO 1
Date_ 20130523
Time 12.15
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDC13
NS 129
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.6777844 s
RG 3640
DN 12.800 us
DE 21.00 us
TE 298.0 K
D1 2.00000000 s
D11 0.03000000 s
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 us
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 us
PL2 0.33 dB
PL12 16.50 dB
PL13 19.50 dB
PL2W 13.96854782 W
PL12W 0.33740479 W
PL13W 0.16910298 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078093 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

180 160 140 120 100 80 60 40 20 ppm

2013.05.20-1 Neu-9-Bn-7,8-acetonide-5NAc, 40-oxalindine-2-dibutylphosphate 1: NO. 24.

NAME
EXPNO
PROCNO
F2
F3
F4
F5
F6
F7
F8
F9
F10
F11
F12
F13
F14
F15
F16
F17
F18
F19
F20
F21
F22
F23
F24
F25
F26
F27
F28
F29
F30
F31
F32
F33
F34
F35
F36
F37
F38
F39
F40
F41
F42
F43
F44
F45
F46
F47
F48
F49
F50
F51
F52
F53
F54
F55
F56
F57
F58
F59
F60
F61
F62
F63
F64
F65
F66
F67
F68
F69
F70
F71
F72
F73
F74
F75
F76
F77
F78
F79
F80
F81
F82
F83
F84
F85
F86
F87
F88
F89
F90
F91
F92
F93
F94
F95
F96
F97
F98
F99
F100
F101
F102
F103
F104
F105
F106
F107
F108
F109
F110
F111
F112
F113
F114
F115
F116
F117
F118
F119
F120
F121
F122
F123
F124
F125
F126
F127
F128
F129
F130
F131
F132
F133
F134
F135
F136
F137
F138
F139
F140
F141
F142
F143
F144
F145
F146
F147
F148
F149
F150
F151
F152
F153
F154
F155
F156
F157
F158
F159
F160
F161
F162
F163
F164
F165
F166
F167
F168
F169
F170
F171
F172
F173
F174
F175
F176
F177
F178
F179
F180
F181
F182
F183
F184
F185
F186
F187
F188
F189
F190
F191
F192
F193
F194
F195
F196
F197
F198
F199
F200
F201
F202
F203
F204
F205
F206
F207
F208
F209
F210
F211
F212
F213
F214
F215
F216
F217
F218
F219
F220
F221
F222
F223
F224
F225
F226
F227
F228
F229
F230
F231
F232
F233
F234
F235
F236
F237
F238
F239
F240
F241
F242
F243
F244
F245
F246
F247
F248
F249
F250
F251
F252
F253
F254
F255
F256
F257
F258
F259
F260
F261
F262
F263
F264
F265
F266
F267
F268
F269
F270
F271
F272
F273
F274
F275
F276
F277
F278
F279
F280
F281
F282
F283
F284
F285
F286
F287
F288
F289
F290
F291
F292
F293
F294
F295
F296
F297
F298
F299
F300
F301
F302
F303
F304
F305
F306
F307
F308
F309
F310
F311
F312
F313
F314
F315
F316
F317
F318
F319
F320
F321
F322
F323
F324
F325
F326
F327
F328
F329
F330
F331
F332
F333
F334
F335
F336
F337
F338
F339
F340
F341
F342
F343
F344
F345
F346
F347
F348
F349
F350
F351
F352
F353
F354
F355
F356
F357
F358
F359
F360
F361
F362
F363
F364
F365
F366
F367
F368
F369
F370
F371
F372
F373
F374
F375
F376
F377
F378
F379
F380
F381
F382
F383
F384
F385
F386
F387
F388
F389
F390
F391
F392
F393
F394
F395
F396
F397
F398
F399
F400
F401
F402
F403
F404
F405
F406
F407
F408
F409
F410
F411
F412
F413
F414
F415
F416
F417
F418
F419
F420
F421
F422
F423
F424
F425
F426
F427
F428
F429
F430
F431
F432
F433
F434
F435
F436
F437
F438
F439
F440
F441
F442
F443
F444
F445
F446
F447
F448
F449
F450
F451
F452
F453
F454
F455
F456
F457
F458
F459
F460
F461
F462
F463
F464
F465
F466
F467
F468
F469
F470
F471
F472
F473
F474
F475
F476
F477
F478
F479
F480
F481
F482
F483
F484
F485
F486
F487
F488
F489
F490
F491
F492
F493
F494
F495
F496
F497
F498
F499
F500
F501
F502
F503
F504
F505
F506
F507
F508
F509
F510
F511
F512
F513
F514
F515
F516
F517
F518
F519
F520
F521
F522
F523
F524
F525
F526
F527
F528
F529
F530
F531
F532
F533
F534
F535
F536
F537
F538
F539
F540
F541
F542
F543
F544
F545
F546
F547
F548
F549
F550
F551
F552
F553
F554
F555
F556
F557
F558
F559
F560
F561
F562
F563
F564
F565
F566
F567
F568
F569
F570
F571
F572
F573
F574
F575
F576
F577
F578
F579
F580
F581
F582
F583
F584
F585
F586
F587
F588
F589
F590
F591
F592
F593
F594
F595
F596
F597
F598
F599
F600
F601
F602
F603
F604
F605
F606
F607
F608
F609
F610
F611
F612
F613
F614
F615
F616
F617
F618
F619
F620
F621
F622
F623
F624
F625
F626
F627
F628
F629
F630
F631
F632
F633
F634
F635
F636
F637
F638
F639
F640
F641
F642
F643
F644
F645
F646
F647
F648
F649
F650
F651
F652
F653
F654
F655
F656
F657
F658
F659
F660
F661
F662
F663
F664
F665
F666
F667
F668
F669
F670
F671
F672
F673
F674
F675
F676
F677
F678
F679
F680
F681
F682
F683
F684
F685
F686
F687
F688
F689
F690
F691
F692
F693
F694
F695
F696
F697
F698
F699
F700
F701
F702
F703
F704
F705
F706
F707
F708
F709
F710
F711
F712
F713
F714
F715
F716
F717
F718
F719
F720
F721
F722
F723
F724
F725
F726
F727
F728
F729
F730
F731
F732
F733
F734
F735
F736
F737
F738
F739
F740
F741
F742
F743
F744
F745
F746
F747
F748
F749
F750
F751
F752
F753
F754
F755
F756
F757
F758
F759
F760
F761
F762
F763
F764
F765
F766
F767
F768
F769
F770
F771
F772
F773
F774
F775
F776
F777
F778
F779
F780
F781
F782
F783
F784
F785
F786
F787
F788
F789
F790
F791
F792
F793
F794
F795
F796
F797
F798
F799
F800
F801
F802
F803
F804
F805
F806
F807
F808
F809
F810
F811
F812
F813
F814
F815
F816
F817
F818
F819
F820
F821
F822
F823
F824
F825
F826
F827
F828
F829
F830
F831
F832
F833
F834
F835
F836
F837
F838
F839
F840
F841
F842
F843
F844
F845
F846
F847
F848
F849
F850
F851
F852
F853
F854
F855
F856
F857
F858
F859
F860
F861
F862
F863
F864
F865
F866
F867
F868
F869
F870
F871
F872
F873
F874
F875
F876
F877
F878
F879
F880
F881
F882
F883
F884
F885
F886
F887
F888
F889
F890
F891
F892
F893
F894
F895
F896
F897
F898
F899
F900
F901
F902
F903
F904
F905
F906
F907
F908
F909
F910
F911
F912
F913
F914
F915
F916
F917
F918
F919
F920
F921
F922
F923
F924
F925
F926
F927
F928
F929
F930
F931
F932
F933
F934
F935
F936
F937
F938
F939
F940
F941
F942
F943
F944
F945
F946
F947
F948
F949
F950
F951
F952
F953
F954
F955
F956
F957
F958
F959
F960
F961
F962
F963
F964
F965
F966
F967
F968
F969
F970
F971
F972
F973
F974
F975
F976
F977
F978
F979
F980
F981
F982
F983
F984
F985
F986
F987
F988
F989
F990
F991
F992
F993
F994
F995
F996
F997
F998
F999
F1000
F1001
F1002
F1003
F1004
F1005
F1006
F1007
F1008
F1009
F1010
F1011
F1012
F1013
F1014
F1015
F1016
F1017
F1018
F1019
F1020
F1021
F1022
F1023
F1024
F1025
F1026
F1027
F1028
F1029
F1030
F1031
F1032
F1033
F1034
F1035
F1036
F1037
F1038
F1039
F1040
F1041
F1042
F1043
F1044
F1045
F1046
F1047
F1048
F1049
F1050
F1051
F1052
F1053
F1054
F1055
F1056
F1057
F1058
F1059
F1060
F1061
F1062
F1063
F1064
F1065
F1066
F1067
F1068
F1069
F1070
F1071
F1072
F1073
F1074
F1075
F1076
F1077
F1078
F1079
F1080
F1081
F1082
F1083
F1084
F1085
F1086
F1087
F1088
F1089
F1090
F1091
F1092
F1093
F1094
F1095
F1096
F1097
F1098
F1099
F1100
F1101
F1102
F1103
F1104
F1105
F1106
F1107
F1108
F1109
F1110
F1111
F1112
F1113
F1114
F1115
F1116
F1117
F1118
F1119
F1120
F1121
F1122
F1123
F1124
F1125
F1126
F1127
F1128
F1129
F1130
F1131
F1132
F1133
F1134
F1135
F1136
F1137
F1138
F1139
F1140
F1141
F1142
F1143
F1144
F1145
F1146
F1147
F1148
F1149
F1150
F1151
F1152
F1153
F1154
F1155
F1156
F1157
F1158
F1159
F1160
F1161
F1162
F1163
F1164
F1165
F1166
F1167
F1168
F1169
F1170
F1171
F1172
F1173
F1174
F1175
F1176
F1177
F1178
F1179
F1180
F1181
F1182
F1183
F1184
F1185
F1186
F1187
F1188
F1189
F1190
F1191
F1192
F1193
F1194
F1195
F1196
F1197
F1198
F1199
F1200
F1201
F1202
F1203
F1204
F1205
F1206
F1207
F1208
F1209
F1210
F1211
F1212
F1213
F1214
F1215
F1216
F1217
F1218
F1219
F1220
F1221
F1222
F1223
F1224
F1225
F1226
F1227
F1228
F1229
F1230
F1231
F1232
F1233
F1234
F1235
F1236
F1237
F1238
F1239
F1240
F1241
F1242
F1243
F1244
F1245
F1246
F1247
F1248
F1249
F1250
F1251
F1252
F1253
F1254
F1255
F1256
F1257
F1258
F1259
F1260
F1261
F1262
F1263
F1264
F1265
F1266
F1267
F1268
F1269
F1270
F1271
F1272
F1273
F1274
F1275
F1276
F1277
F1278
F1279
F1280
F1281
F1282
F1283
F1284
F1285
F1286
F1287
F1288
F1289
F1290
F1291
F1292
F1293
F1294
F1295
F1296
F1297
F1298
F1299
F1300
F1301
F1302
F1303
F1304
F1305
F1306
F1307
F1308
F1309
F1310
F1311
F1312
F1313
F1314
F1315
F1316
F1317
F1318
F1319
F1320
F1321
F1322
F1323
F1324
F1325
F1326
F1327
F1328
F1329
F1330
F1331
F1332
F1333
F1334
F1335
F1336
F1337
F1338
F1339
F1340
F1341
F1342
F1343
F1344
F1345
F1346
F1347
F1348
F1349
F1350
F1351
F1352
F1353
F1354
F1355
F1356
F1357
F1358
F1359
F1360
F1361
F1362
F1363
F1364
F1365
F1366
F1367
F1368
F1369
F1370
F1371
F1372
F1373
F1374
F1375
F1376
F1377
F1378
F1379
F1380
F1381
F1382
F1383
F1384
F1385
F1386
F1387
F1388
F1389
F1390
F1391
F1392
F1393
F1394
F1395
F1396
F1397
F1398
F1399
F1400
F1401
F1402
F1403
F1404
F1405
F1406
F1407
F1408
F1409
F1410
F1411
F1412
F1413
F1414
F1415
F1416
F1417
F1418
F1419
F1420
F1421
F1422
F1423
F1424
F1425
F1426
F1427
F1428
F1429
F1430
F1431
F1432
F1433
F1434
F1435
F1436
F1437
F1438
F1439
F1440
F1441
F1442
F1443
F1444
F1445
F1446
F1447
F1448
F1449
F1450
F1451
F1452
F1453
F1454
F1455
F1456
F1457
F1458
F1459
F1460
F1461
F1462
F1463
F1464
F1465
F1466
F1467
F1468
F1469
F1470
F1471
F1472
F1473
F1474
F1475
F1476
F1477
F1478
F1479
F1480
F1481
F1482
F1483
F1484
F1485
F1486
F1487
F1488
F1489
F1490
F1491
F1492
F1493
F1494
F1495
F1496
F1497
F1498
F1499
F1500
F1501
F1502
F1503
F1504
F1505
F1506
F1507
F1508
F1509
F1510
F1511
F1512
F1513
F1514
F1515
F1516
F1517
F1518
F1519
F1520
F1521
F1522
F1523
F1524
F1525
F1526
F1527
F1528
F1529
F1530
F1531
F1532
F1533
F1534
F1535
F1536
F1537
F1538
F1539
F1540
F1541
F1542
F1543
F1544
F1545
F1546
F1547
F1548
F1549
F1550
F1551
F1552
F1553
F1554
F1555
F1556
F1557
F1558
F1559
F1560
F1561
F1562
F1563
F1564
F1565
F1566
F1567
F1568
F1569
F1570
F1571
F1572
F1573
F1574
F1575
F1576
F1577
F1578
F1579
F1580
F1581
F1582
F1583
F1584
F1585
F1586
F1587
F1588
F1589
F1590
F1591
F1592
F1593
F1594
F1595
F1596
F1597
F1598
F1599
F1600
F1601
F1602
F1603
F1604
F1605
F1606
F1607
F1608
F1609
F1610
F1611
F1612
F1613
F1614
F1615
F1616
F1617
F1618
F1619
F1620
F1621
F1622
F1623
F1624
F1625
F1626
F1627
F1628
F1629
F1630
F1631
F1632
F1633
F1634
F1635
F1636
F1637
F1638
F1639
F1640
F1641
F1642
F1643
F1644
F1645
F1646
F1647
F1648
F1649
F1650
F1651
F1652
F1653
F1654
F1655
F1656
F1657
F1658
F1659
F1660
F1661
F1662
F1663
F1664
F1665
F1666
F1667
F1668
F1669
F1670
F1671
F1672
F1673
F1674
F1675
F1676
F1677
F1678
F1679
F1680
F1681
F1682
F1683
F1684
F1685
F1686
F1687
F1688
F1689
F1690
F1691
F1692
F1693
F1694
F1695
F1696
F1697
F1698
F1699
F1700
F1701
F1702
F1703
F1704
F1705
F1706
F1707
F1708
F1709
F1710
F1711
F1712
F1713
F1714
F1715
F1716
F1717
F1718
F1719
F1720
F1721
F1722
F1723
F1724
F1725
F1726
F1727
F1728
F1729
F1730
F1731
F1732
F1733
F1734
F1735
F1736
F1737
F1738
F1739
F1740
F1741
F1742
F1743
F1744
F1745
F1746
F1747
F1748
F1749
F1750
F1751
F1752
F1753
F1754
F1755
F1756
F1757
F1758
F1759
F1760
F1761
F1762
F1763
F1764
F1765
F1766
F1767
F1768
F1769
F1770
F1771
F1772
F1773
F1774
F1775
F1776
F1777
F1778
F1779
F1780
F1781
F1782
F1783
F1784
F1785
F1786
F1787
F1788
F1789
F1790
F1791
F1792
F1793
F1794
F1795
F1796
F1797
F1798
F1799
F1800
F1801
F1802
F1803
F1804
F1805
F1806
F1807
F1808
F1809
F1810
F1811
F1812
F1813
F1814
F1815
F1816
F1817
F1818
F1819
F1820
F1821
F1822
F1823
F1824
F1825
F1826
F1827
F1828
F1829
F1830
F1831
F1832
F1833
F1834
F1835
F1836
F1837
F1838
F1839
F1840
F1841
F1842
F1843
F1844
F1845
F1846
F1847
F1848
F1849
F1850
F1851
F1852
F1853
F1854
F1855
F1856
F1857
F1858
F1859
F1860
F1861
F1862
F1863
F1864
F1865
F1866
F1867
F1868
F1869
F1870
F1871
F1872
F1873
F1874
F1875
F1876
F1877
F1878
F1879
F1880
F1881
F1882
F1883
F1884
F1885
F1886
F1887
F1888
F1889
F1890
F1891
F1892
F1893
F1894
F1895
F1896
F1897
F1898
F1899
F1900
F1901
F1902
F1903
F1904
F1905
F1906
F1907
F1908
F1909
F

2013.05.20-2 Neu-9-Bn-7,8-acetonide-5Nac,40-oxalindine-2-dibutylphosphat

NAME	2013.05.20
EXPNO	2
PROCNO	1
Date_	20130520
Time	11.15
INSTRUM	spect
PROBHD	5 mm CPOCH 13C
PULPROG	zgpg30
TD	131072
SOLVENT	CDCl3
NS	79
DS	0
SWH	39062.500 Hz
FIDRES	0.298023 Hz
AQ	1.6777844 sec
RG	3640
DW	12.800 usec
DE	21.00 usec
TE	298.0 K
D1	2.00000000 sec
D11	0.03000000 sec
TD0	1

===== CHANNEL f1 =====	
NUC1	13C
P1	10.35 usec
PL1	2.80 dB
PL1W	49.17097855 W
SFO1	150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====	
CPDPRG2	waltz16
NUC2	1H
PCPD2	80.00 usec
PL2	0.33 dB
PL12	16.50 dB
PL13	19.50 dB
PL2W	13.96854782 W
PL12W	0.33740479 W
PL13W	0.16910298 W
SFO2	600.1524006 MHz
SI	65536
SF	150.9078092 MHz
WDW	EM
SSB	0
LB	2.00 Hz
GB	0
PC	1.00

172.84
165.69
153.97
138.27
128.62
128.48
127.94
109.52
100.11
100.08
76.41
76.37
75.83
74.54
73.54
69.00
68.57
68.54
68.53
68.50
59.87
53.59
35.60
32.40
32.39
32.36
32.35
26.90
26.40
25.80
25.23
18.87
18.83
13.78
13.73

2013.05.22-7 Neu-7,8,9-triAc-5NAc,40-oxalindine-2-dibutylphosphate
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (point2) (part2)

NAME
EXPNO
PROCNO
F2
F3
F4
F5
F6
F7
F8
F9
F10
F11
F12
F13
F14
F15
F16
F17
F18
F19
F20
F21
F22
F23
F24
F25
F26
F27
F28
F29
F30
F31
F32
F33
F34
F35
F36
F37
F38
F39
F40
F41
F42
F43
F44
F45
F46
F47
F48
F49
F50
F51
F52
F53
F54
F55
F56
F57
F58
F59
F60
F61
F62
F63
F64
F65
F66
F67
F68
F69
F70
F71
F72
F73
F74
F75
F76
F77
F78
F79
F80
F81
F82
F83
F84
F85
F86
F87
F88
F89
F90
F91
F92
F93
F94
F95
F96
F97
F98
F99
F100
F101
F102
F103
F104
F105
F106
F107
F108
F109
F110
F111
F112
F113
F114
F115
F116
F117
F118
F119
F120
F121
F122
F123
F124
F125
F126
F127
F128
F129
F130
F131
F132
F133
F134
F135
F136
F137
F138
F139
F140
F141
F142
F143
F144
F145
F146
F147
F148
F149
F150
F151
F152
F153
F154
F155
F156
F157
F158
F159
F160
F161
F162
F163
F164
F165
F166
F167
F168
F169
F170
F171
F172
F173
F174
F175
F176
F177
F178
F179
F180
F181
F182
F183
F184
F185
F186
F187
F188
F189
F190
F191
F192
F193
F194
F195
F196
F197
F198
F199
F200
F201
F202
F203
F204
F205
F206
F207
F208
F209
F210
F211
F212
F213
F214
F215
F216
F217
F218
F219
F220
F221
F222
F223
F224
F225
F226
F227
F228
F229
F230
F231
F232
F233
F234
F235
F236
F237
F238
F239
F240
F241
F242
F243
F244
F245
F246
F247
F248
F249
F250
F251
F252
F253
F254
F255
F256
F257
F258
F259
F260
F261
F262
F263
F264
F265
F266
F267
F268
F269
F270
F271
F272
F273
F274
F275
F276
F277
F278
F279
F280
F281
F282
F283
F284
F285
F286
F287
F288
F289
F290
F291
F292
F293
F294
F295
F296
F297
F298
F299
F300
F301
F302
F303
F304
F305
F306
F307
F308
F309
F310
F311
F312
F313
F314
F315
F316
F317
F318
F319
F320
F321
F322
F323
F324
F325
F326
F327
F328
F329
F330
F331
F332
F333
F334
F335
F336
F337
F338
F339
F340
F341
F342
F343
F344
F345
F346
F347
F348
F349
F350
F351
F352
F353
F354
F355
F356
F357
F358
F359
F360
F361
F362
F363
F364
F365
F366
F367
F368
F369
F370
F371
F372
F373
F374
F375
F376
F377
F378
F379
F380
F381
F382
F383
F384
F385
F386
F387
F388
F389
F390
F391
F392
F393
F394
F395
F396
F397
F398
F399
F400
F401
F402
F403
F404
F405
F406
F407
F408
F409
F410
F411
F412
F413
F414
F415
F416
F417
F418
F419
F420
F421
F422
F423
F424
F425
F426
F427
F428
F429
F430
F431
F432
F433
F434
F435
F436
F437
F438
F439
F440
F441
F442
F443
F444
F445
F446
F447
F448
F449
F450
F451
F452
F453
F454
F455
F456
F457
F458
F459
F460
F461
F462
F463
F464
F465
F466
F467
F468
F469
F470
F471
F472
F473
F474
F475
F476
F477
F478
F479
F480
F481
F482
F483
F484
F485
F486
F487
F488
F489
F490
F491
F492
F493
F494
F495
F496
F497
F498
F499
F500
F501
F502
F503
F504
F505
F506
F507
F508
F509
F510
F511
F512
F513
F514
F515
F516
F517
F518
F519
F520
F521
F522
F523
F524
F525
F526
F527
F528
F529
F530
F531
F532
F533
F534
F535
F536
F537
F538
F539
F540
F541
F542
F543
F544
F545
F546
F547
F548
F549
F550
F551
F552
F553
F554
F555
F556
F557
F558
F559
F560
F561
F562
F563
F564
F565
F566
F567
F568
F569
F570
F571
F572
F573
F574
F575
F576
F577
F578
F579
F580
F581
F582
F583
F584
F585
F586
F587
F588
F589
F590
F591
F592
F593
F594
F595
F596
F597
F598
F599
F600
F601
F602
F603
F604
F605
F606
F607
F608
F609
F610
F611
F612
F613
F614
F615
F616
F617
F618
F619
F620
F621
F622
F623
F624
F625
F626
F627
F628
F629
F630
F631
F632
F633
F634
F635
F636
F637
F638
F639
F640
F641
F642
F643
F644
F645
F646
F647
F648
F649
F650
F651
F652
F653
F654
F655
F656
F657
F658
F659
F660
F661
F662
F663
F664
F665
F666
F667
F668
F669
F670
F671
F672
F673
F674
F675
F676
F677
F678
F679
F680
F681
F682
F683
F684
F685
F686
F687
F688
F689
F690
F691
F692
F693
F694
F695
F696
F697
F698
F699
F700
F701
F702
F703
F704
F705
F706
F707
F708
F709
F710
F711
F712
F713
F714
F715
F716
F717
F718
F719
F720
F721
F722
F723
F724
F725
F726
F727
F728
F729
F730
F731
F732
F733
F734
F735
F736
F737
F738
F739
F740
F741
F742
F743
F744
F745
F746
F747
F748
F749
F750
F751
F752
F753
F754
F755
F756
F757
F758
F759
F760
F761
F762
F763
F764
F765
F766
F767
F768
F769
F770
F771
F772
F773
F774
F775
F776
F777
F778
F779
F780
F781
F782
F783
F784
F785
F786
F787
F788
F789
F790
F791
F792
F793
F794
F795
F796
F797
F798
F799
F800
F801
F802
F803
F804
F805
F806
F807
F808
F809
F810
F811
F812
F813
F814
F815
F816
F817
F818
F819
F820
F821
F822
F823
F824
F825
F826
F827
F828
F829
F830
F831
F832
F833
F834
F835
F836
F837
F838
F839
F840
F841
F842
F843
F844
F845
F846
F847
F848
F849
F850
F851
F852
F853
F854
F855
F856
F857
F858
F859
F860
F861
F862
F863
F864
F865
F866
F867
F868
F869
F870
F871
F872
F873
F874
F875
F876
F877
F878
F879
F880
F881
F882
F883
F884
F885
F886
F887
F888
F889
F890
F891
F892
F893
F894
F895
F896
F897
F898
F899
F900
F901
F902
F903
F904
F905
F906
F907
F908
F909
F910
F911
F912
F913
F914
F915
F916
F917
F918
F919
F920
F921
F922
F923
F924
F925
F926
F927
F928
F929
F930
F931
F932
F933
F934
F935
F936
F937
F938
F939
F940
F941
F942
F943
F944
F945
F946
F947
F948
F949
F950
F951
F952
F953
F954
F955
F956
F957
F958
F959
F960
F961
F962
F963
F964
F965
F966
F967
F968
F969
F970
F971
F972
F973
F974
F975
F976
F977
F978
F979
F980
F981
F982
F983
F984
F985
F986
F987
F988
F989
F990
F991
F992
F993
F994
F995
F996
F997
F998
F999
F1000
F1001
F1002
F1003
F1004
F1005
F1006
F1007
F1008
F1009
F1010
F1011
F1012
F1013
F1014
F1015
F1016
F1017
F1018
F1019
F1020
F1021
F1022
F1023
F1024
F1025
F1026
F1027
F1028
F1029
F1030
F1031
F1032
F1033
F1034
F1035
F1036
F1037
F1038
F1039
F1040
F1041
F1042
F1043
F1044
F1045
F1046
F1047
F1048
F1049
F1050
F1051
F1052
F1053
F1054
F1055
F1056
F1057
F1058
F1059
F1060
F1061
F1062
F1063
F1064
F1065
F1066
F1067
F1068
F1069
F1070
F1071
F1072
F1073
F1074
F1075
F1076
F1077
F1078
F1079
F1080
F1081
F1082
F1083
F1084
F1085
F1086
F1087
F1088
F1089
F1090
F1091
F1092
F1093
F1094
F1095
F1096
F1097
F1098
F1099
F1100
F1101
F1102
F1103
F1104
F1105
F1106
F1107
F1108
F1109
F1110
F1111
F1112
F1113
F1114
F1115
F1116
F1117
F1118
F1119
F1120
F1121
F1122
F1123
F1124
F1125
F1126
F1127
F1128
F1129
F1130
F1131
F1132
F1133
F1134
F1135
F1136
F1137
F1138
F1139
F1140
F1141
F1142
F1143
F1144
F1145
F1146
F1147
F1148
F1149
F1150
F1151
F1152
F1153
F1154
F1155
F1156
F1157
F1158
F1159
F1160
F1161
F1162
F1163
F1164
F1165
F1166
F1167
F1168
F1169
F1170
F1171
F1172
F1173
F1174
F1175
F1176
F1177
F1178
F1179
F1180
F1181
F1182
F1183
F1184
F1185
F1186
F1187
F1188
F1189
F1190
F1191
F1192
F1193
F1194
F1195
F1196
F1197
F1198
F1199
F1200
F1201
F1202
F1203
F1204
F1205
F1206
F1207
F1208
F1209
F1210
F1211
F1212
F1213
F1214
F1215
F1216
F1217
F1218
F1219
F1220
F1221
F1222
F1223
F1224
F1225
F1226
F1227
F1228
F1229
F1230
F1231
F1232
F1233
F1234
F1235
F1236
F1237
F1238
F1239
F1240
F1241
F1242
F1243
F1244
F1245
F1246
F1247
F1248
F1249
F1250
F1251
F1252
F1253
F1254
F1255
F1256
F1257
F1258
F1259
F1260
F1261
F1262
F1263
F1264
F1265
F1266
F1267
F1268
F1269
F1270
F1271
F1272
F1273
F1274
F1275
F1276
F1277
F1278
F1279
F1280
F1281
F1282
F1283
F1284
F1285
F1286
F1287
F1288
F1289
F1290
F1291
F1292
F1293
F1294
F1295
F1296
F1297
F1298
F1299
F1300
F1301
F1302
F1303
F1304
F1305
F1306
F1307
F1308
F1309
F1310
F1311
F1312
F1313
F1314
F1315
F1316
F1317
F1318
F1319
F1320
F1321
F1322
F1323
F1324
F1325
F1326
F1327
F1328
F1329
F1330
F1331
F1332
F1333
F1334
F1335
F1336
F1337
F1338
F1339
F1340
F1341
F1342
F1343
F1344
F1345
F1346
F1347
F1348
F1349
F1350
F1351
F1352
F1353
F1354
F1355
F1356
F1357
F1358
F1359
F1360
F1361
F1362
F1363
F1364
F1365
F1366
F1367
F1368
F1369
F1370
F1371
F1372
F1373
F1374
F1375
F1376
F1377
F1378
F1379
F1380
F1381
F1382
F1383
F1384
F1385
F1386
F1387
F1388
F1389
F1390
F1391
F1392
F1393
F1394
F1395
F1396
F1397
F1398
F1399
F1400
F1401
F1402
F1403
F1404
F1405
F1406
F1407
F1408
F1409
F1410
F1411
F1412
F1413
F1414
F1415
F1416
F1417
F1418
F1419
F1420
F1421
F1422
F1423
F1424
F1425
F1426
F1427
F1428
F1429
F1430
F1431
F1432
F1433
F1434
F1435
F1436
F1437
F1438
F1439
F1440
F1441
F1442
F1443
F1444
F1445
F1446
F1447
F1448
F1449
F1450
F1451
F1452
F1453
F1454
F1455
F1456
F1457
F1458
F1459
F1460
F1461
F1462
F1463
F1464
F1465
F1466
F1467
F1468
F1469
F1470
F1471
F1472
F1473
F1474
F1475
F1476
F1477
F1478
F1479
F1480
F1481
F1482
F1483
F1484
F1485
F1486
F1487
F1488
F1489
F1490
F1491
F1492
F1493
F1494
F1495
F1496
F1497
F1498
F1499
F1500
F1501
F1502
F1503
F1504
F1505
F1506
F1507
F1508
F1509
F1510
F1511
F1512
F1513
F1514
F1515
F1516
F1517
F1518
F1519
F1520
F1521
F1522
F1523
F1524
F1525
F1526
F1527
F1528
F1529
F1530
F1531
F1532
F1533
F1534
F1535
F1536
F1537
F1538
F1539
F1540
F1541
F1542
F1543
F1544
F1545
F1546
F1547
F1548
F1549
F1550
F1551
F1552
F1553
F1554
F1555
F1556
F1557
F1558
F1559
F1560
F1561
F1562
F1563
F1564
F1565
F1566
F1567
F1568
F1569
F1570
F1571
F1572
F1573
F1574
F1575
F1576
F1577
F1578
F1579
F1580
F1581
F1582
F1583
F1584
F1585
F1586
F1587
F1588
F1589
F1590
F1591
F1592
F1593
F1594
F1595
F1596
F1597
F1598
F1599
F1600
F1601
F1602
F1603
F1604
F1605
F1606
F1607
F1608
F1609
F1610
F1611
F1612
F1613
F1614
F1615
F1616
F1617
F1618
F1619
F1620
F1621
F1622
F1623
F1624
F1625
F1626
F1627
F1628
F1629
F1630
F1631
F1632
F1633
F1634
F1635
F1636
F1637
F1638
F1639
F1640
F1641
F1642
F1643
F1644
F1645
F1646
F1647
F1648
F1649
F1650
F1651
F1652
F1653
F1654
F1655
F1656
F1657
F1658
F1659
F1660
F1661
F1662
F1663
F1664
F1665
F1666
F1667
F1668
F1669
F1670
F1671
F1672
F1673
F1674
F1675
F1676
F1677
F1678
F1679
F1680
F1681
F1682
F1683
F1684
F1685
F1686
F1687
F1688
F1689
F1690
F1691
F1692
F1693
F1694
F1695
F1696
F1697
F1698
F1699
F1700
F1701
F1702
F1703
F1704
F1705
F1706
F1707
F1708
F1709
F1710
F1711
F1712
F1713
F1714
F1715
F1716
F1717
F1718
F1719
F1720
F1721
F1722
F1723
F1724
F1725
F1726
F1727
F1728
F1729
F1730
F1731
F1732
F1733
F1734
F1735
F1736
F1737
F1738
F1739
F1740
F1741
F1742
F1743
F1744
F1745
F1746
F1747
F1748
F1749
F1750
F1751
F1752
F1753
F1754
F1755
F1756
F1757
F1758
F1759
F1760
F1761
F1762
F1763
F1764
F1765
F1766
F1767
F1768
F1769
F1770
F1771
F1772
F1773
F1774
F1775
F1776
F1777
F1778
F1779
F1780
F1781
F1782
F1783
F1784
F1785
F1786
F1787
F1788
F1789
F1790
F1791
F1792
F1793
F1794
F1795
F1796
F1797
F1798
F1799
F1800
F1801
F1802
F1803
F1804
F1805
F1806
F1807
F1808
F1809
F1810
F1811
F1812
F1813
F1814
F1815
F1816
F1817
F1818
F1819
F1820
F1821
F1822
F1823
F1824
F1825
F1826
F1827
F1828
F1829
F1830
F1831
F1832
F1833
F1834
F1835
F1836
F1837
F1838
F1839
F1840
F1841
F1842
F1843
F1844
F1845
F1846
F1847
F1848
F1849
F1850
F1851
F1852
F1853
F1854
F1855
F1856
F1857
F1858
F1859
F1860
F1861
F1862
F1863
F1864
F1865
F1866
F1867
F1868
F1869
F1870
F1871
F1872
F1873
F1874
F1875
F1876
F1877
F1878
F1879
F1880
F1881
F1882
F1883
F1884
F1885
F1886
F1887
F1888
F1889
F1890
F1891
F1892
F1893
F1894
F1895
F1896
F1897
F1898
F1899
F1900
F1901
F1902
F1903
F1904
F1905
F1906

S6 (Alfa form) 2D COSY90 cosygpppqf (most routine used)

S6 (Alfa form) 2D HSQC-Echo hsqcetgpsisp2.2 (most routine used)

S6 (Alfa form) 2D HMBC hmbcglpndgf (most routine used)

Current Data Parameters
 NAME NO.34-2
 EXPNO 6
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20130524
 Time_ 11.36
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm CPTCI LH-
 PULPROG dept90
 TD 131072
 SOLVENT CDCl3
 NS 400
 DS 8
 SWH 36231.883 Hz
 FIDRES 0.276427 Hz
 AQ 1.8088436 sec
 RG 2050
 DW 13.800 usec
 DE 21.00 usec
 TE 298.0 K
 CNST2 145.0000000
 D1 2.00000000 sec
 D2 0.00344828 sec
 D12 0.00002000 sec
 TD0 4

===== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 9.65 usec
 P2 19.30 usec
 PL1 -1.82 dB
 PL1W 122.22216797 W
 SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 P3 7.90 usec
 P4 15.80 usec
 PCPD2 90.00 usec
 PL2 4.00 dB
 PL12 25.13 dB
 PL2W 6.09999990 W
 PL12W 0.04700010 W
 SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 150.9027864 MHz
 WDW EN
 SSB 0
 LB 2.00 Hz
 GB 0
 PC 1.00

S6(Alfa form) 13C dept90 give

133.43
 133.40
 130.31
 129.72
 129.57
 128.92
 127.86
 127.80

87.08
 76.70
 75.67
 75.34
 75.11
 71.66
 69.17
 68.70
 67.66
 58.94

S6(Alfa form) 13C dept135 XI

133.43
133.40
130.31
129.72
128.67
128.52
127.86
127.80

87.08
76.70
75.67
75.34
75.11
71.66
71.17
69.17
68.70
67.66
58.94
53.41

24.72
21.42
21.30
20.92
20.30

Current Data Parameters
NAME NO.34-2
EXPNO 7
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20130524
Time 12.02
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPTCI 1H-
PULPROG dept135
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 400
DS 8
SWH 36231.883 Hz
FIDRES 0.276427 Hz
AQ 1.8088436 sec
RG 2050
DW 13.800 usec
DE 21.00 usec
TE 298.0 K
CNS12 145.0000000
D1 2.00000000 sec
D2 0.00344828 sec
D12 0.00002000 sec
TD0 4

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.65 usec
P2 19.30 usec
PL1 -1.82 dB
PL1W 122.22216797 W
SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
P3 7.90 usec
P4 15.80 usec
PCPD2 90.00 usec
PL2 4.00 dB
PL12 25.13 dB
PL2W 6.09999990 W
PL12W 0.04700010 W
SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 150.9027864 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

EXPNO	2013.05.22
PROCESSED	2013.05.22
DATE_	20130522
TIME	15.50
FILE	20130522
PROBHD	5 mm CPMAS 1H/13
PULPROG	zgpg30
PCPDPRG2	zgpg30
PCPDPRG3	zgpg30
PCPDPRG4	zgpg30
PCPDPRG5	zgpg30
PCPDPRG6	zgpg30
PCPDPRG7	zgpg30
PCPDPRG8	zgpg30
PCPDPRG9	zgpg30
PCPDPRG10	zgpg30
PCPDPRG11	zgpg30
PCPDPRG12	zgpg30
PCPDPRG13	zgpg30
PCPDPRG14	zgpg30
PCPDPRG15	zgpg30
PCPDPRG16	zgpg30
PCPDPRG17	zgpg30
PCPDPRG18	zgpg30
PCPDPRG19	zgpg30
PCPDPRG20	zgpg30
PCPDPRG21	zgpg30
PCPDPRG22	zgpg30
PCPDPRG23	zgpg30
PCPDPRG24	zgpg30
PCPDPRG25	zgpg30
PCPDPRG26	zgpg30
PCPDPRG27	zgpg30
PCPDPRG28	zgpg30
PCPDPRG29	zgpg30
PCPDPRG30	zgpg30
PCPDPRG31	zgpg30
PCPDPRG32	zgpg30
PCPDPRG33	zgpg30
PCPDPRG34	zgpg30
PCPDPRG35	zgpg30
PCPDPRG36	zgpg30
PCPDPRG37	zgpg30
PCPDPRG38	zgpg30
PCPDPRG39	zgpg30
PCPDPRG40	zgpg30
PCPDPRG41	zgpg30
PCPDPRG42	zgpg30
PCPDPRG43	zgpg30
PCPDPRG44	zgpg30
PCPDPRG45	zgpg30
PCPDPRG46	zgpg30
PCPDPRG47	zgpg30
PCPDPRG48	zgpg30
PCPDPRG49	zgpg30
PCPDPRG50	zgpg30
PCPDPRG51	zgpg30
PCPDPRG52	zgpg30
PCPDPRG53	zgpg30
PCPDPRG54	zgpg30
PCPDPRG55	zgpg30
PCPDPRG56	zgpg30
PCPDPRG57	zgpg30
PCPDPRG58	zgpg30
PCPDPRG59	zgpg30
PCPDPRG60	zgpg30
PCPDPRG61	zgpg30
PCPDPRG62	zgpg30
PCPDPRG63	zgpg30
PCPDPRG64	zgpg30
PCPDPRG65	zgpg30
PCPDPRG66	zgpg30
PCPDPRG67	zgpg30
PCPDPRG68	zgpg30
PCPDPRG69	zgpg30
PCPDPRG70	zgpg30
PCPDPRG71	zgpg30
PCPDPRG72	zgpg30
PCPDPRG73	zgpg30
PCPDPRG74	zgpg30
PCPDPRG75	zgpg30
PCPDPRG76	zgpg30
PCPDPRG77	zgpg30
PCPDPRG78	zgpg30
PCPDPRG79	zgpg30
PCPDPRG80	zgpg30
PCPDPRG81	zgpg30
PCPDPRG82	zgpg30
PCPDPRG83	zgpg30
PCPDPRG84	zgpg30
PCPDPRG85	zgpg30
PCPDPRG86	zgpg30
PCPDPRG87	zgpg30
PCPDPRG88	zgpg30
PCPDPRG89	zgpg30
PCPDPRG90	zgpg30
PCPDPRG91	zgpg30
PCPDPRG92	zgpg30
PCPDPRG93	zgpg30
PCPDPRG94	zgpg30
PCPDPRG95	zgpg30
PCPDPRG96	zgpg30
PCPDPRG97	zgpg30
PCPDPRG98	zgpg30
PCPDPRG99	zgpg30
PCPDPRG100	zgpg30
PCPDPRG101	zgpg30
PCPDPRG102	zgpg30
PCPDPRG103	zgpg30
PCPDPRG104	zgpg30
PCPDPRG105	zgpg30
PCPDPRG106	zgpg30
PCPDPRG107	zgpg30
PCPDPRG108	zgpg30
PCPDPRG109	zgpg30
PCPDPRG110	zgpg30
PCPDPRG111	zgpg30
PCPDPRG112	zgpg30
PCPDPRG113	zgpg30
PCPDPRG114	zgpg30
PCPDPRG115	zgpg30
PCPDPRG116	zgpg30
PCPDPRG117	zgpg30
PCPDPRG118	zgpg30
PCPDPRG119	zgpg30
PCPDPRG120	zgpg30
PCPDPRG121	zgpg30
PCPDPRG122	zgpg30
PCPDPRG123	zgpg30
PCPDPRG124	zgpg30
PCPDPRG125	zgpg30
PCPDPRG126	zgpg30
PCPDPRG127	zgpg30
PCPDPRG128	zgpg30
PCPDPRG129	zgpg30
PCPDPRG130	zgpg30
PCPDPRG131	zgpg30
PCPDPRG132	zgpg30
PCPDPRG133	zgpg30
PCPDPRG134	zgpg30

2013.05.22-3 Neu-7,8,9-triAc-5NAc,40-oxalindine-2-dibutylphosphate
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (point1)

NAME 2013.05.22
EXPNO 3
PROCNO 1
Date_ 20130522
Time 15.02
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDC13
NS 94
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.6777844 se
RG 3640
DW 12.800 us
DE 21.00 us
TE 298.0 K
D1 2.0000000 se
D11 0.0300000 se
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 us
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 us
PL2 0.33 dB
PL12 16.50 dB
PL13 19.50 dB
PL2W 13.96854782 W
PL12W 0.33740479 W
PL13W 0.16910298 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078105 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

Chemical structure of S6 (β form) is shown. It is a complex molecule featuring a central sugar ring with various substituents: an OBz group, a STol group, an OBn group, a HO group, an OAc group, an AcN group, a COOMe group, and an AcO group. The structure is labeled S6 (β form).

No.34-1 2D HSQC-Echo hsqcetgpsisp2.2 (most routine used)

No.34-1 2D HMBC hmbcgglpndqf (most routine used)

No.34-1 13C dept90 give XH or

133.86
133.88
133.91
129.77
128.81
128.62
127.97
127.90

86.49
77.97
77.25
75.18
74.35
72.61
72.51
70.40
68.88
68.78
59.26

Current Data Parameters
NAME NO.34-1
EXPNO 6
PROCNO 1
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20130523
Time 17.04
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPTCI 1H-
PULPROG dept90
TD 131072
SOLVENT CDC13
NS 400
DS 8
SWH 36231.883 Hz
FIDRES 0.276427 Hz
AQ 1.8088436 sec
RG 2050
DW 13.800 usec
DE 21.00 usec
TE 297.9 K
CNST2 145.0000000
D1 2.00000000 sec
D2 0.00344828 sec
D12 0.00002000 sec
TD0 4

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.65 usec
P2 19.30 usec
PL1 -1.82 dB
PL1W 122.22216797 W
SFO1 150.9201552 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
P3 8.70 usec
P4 17.40 usec
PCPD2 90.00 usec
PL2 4.00 dB
PL12 24.29 dB
PL2W 6.09999990 W
PL12W 0.05700105 W
SFO2 600.1324005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 65536
SF 150.9027810 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

2013.05.20-10 Neu-9-Bn-7,8-acetonide-5NAc,40-oxalindine-2-dibutylphosphate N_{0.37}
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (part 2)

NO. 7 /

2013.05.20-11 Neu-9-Bn-7,8-acetonide-5NAc,40-oxalindine-2-dibutylphosphat
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (part 2)

NAME 2013.05.20
EXPNO 11
PROCNO 1
Date_ 20130521
Time 19.15
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 68
DS 0
SWH 39062.500 Hz
FIDRES 0.298023 Hz
AQ 1.6777844 sec
RG 3640
DW 12.800 use
DE 21.00 use
TE 298.0 K
D1 2.0000000 sec
D11 0.0300000 sec
TDO 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 use
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 use
PL2 0.33 dB
PL12 16.50 dB
PL13 19.50 dB
PL2W 13.96854782 W
PL12W 0.33740479 W
PL13W 0.16910298 W
SFO2 600.1524006 MHz
SI 65536
SF 150.9078188 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz
GB 0
PC 1.00

172.80
169.16
165.37
153.92
138.22
138.17
138.10
133.54
133.20
129.91
129.82
129.77
129.13
128.69
128.55
128.01
127.91
127.84
108.52
98.25
87.17
76.84
76.31
75.99
75.47
74.57
73.77
73.52
69.56
69.39
68.64
68.17
60.12
53.47
36.31
27.35
25.22
24.71
21.29

180 160 140 120 100 80 60 40 20 ppm

S8 (Alfa form) 2D HSQC-Echo hsqcetgpsisp2.2 (most routine used)

S8 (Alfa form) 2D HMBC hmbcglpndgf (most routine used)

2013.05.20-15 Neu-9-Bn-7,8-acetonide-5NAc,4O-oxalindine-2-dibutylphospha
+2-Bz-6-Bn-3,4-diol-1-Thiocresol-galactose (DEPT 90)

NAME 2013.05.20
EXPNO 15
PROCNO 1
Date_ 20130523
Time 14.53
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG dept90
TD 131072
SOLVENT CDC13
NS 100
DS 8
SWH 36231.883 Hz
FIDRES 0.276427 Hz
AQ 1.8088574 se
RG 4100
DW 13.800 us
DE 21.00 us
TE 300.0 K
CNST2 145.0000000
D1 2.00000000 se
D2 0.00344828 se
D12 0.00002000 se
TD0 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 us
P2 20.70 us
PL1 2.80 dB
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 MH
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
P3 11.80 us
P4 23.60 us
PCPD2 80.00 us
PL2 0.33 dB
PL12 16.50 dB
PL12W 13.96854782 W
PL12W 0.33740479 W
SFO2 600.1524006 MH
SI 65536
SF 150.9078380 MH
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 Hz

127.72
127.78
127.88
127.88
128.42
128.56
128.56
129.64
129.78
133.07
133.41
133.41
87.04
77.28
76.71
76.18
75.86
75.35
74.44
68.51
68.04
59.99

[illegible]

2013.05.23-26 Neu-9-Bn-7,8-diAc-5NH,4O-oxalindine-2-dibutylphosphate
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (point 1) (part 3)

NAME	2013.05.23
EXPNO	26
PROCNO	1
Date_	20130530
Time	11.45
INSTRUM	5 mm CPDCH 13C
PROBHD	zgpg30
PULPROG	131072
TD	CDC13
SOLVENT	60
NS	0
DS	39062.500 Hz
SWH	0.298023 Hz
FIDRES	1.6777844 se
AQ	3640
RG	12.800 us
DW	21.00 us
DE	298.0 K
TE	2.00000000 se
D1	0.03000000 se
D11	1
TD0	

===== CHANNEL f1 =====	
NUC1	13C
P1	10.35 us
PL1	2.80 dB
PL1W	49.17097855 W
SFO1	150.9251886 MH

===== CHANNEL f2 =====	
CPDPRG2	waltz16
NUC2	1H
PCPD2	80.00 us
PL2	0.33 dB
PL12	16.50 dB
PL13	19.50 dB
PL2W	13.96854782 W
PL12W	0.33740479 W
PL13W	0.16910298 W
SFO2	600.1524006 MH
SI	65536
SF	150.9078410 MH
WDW	EM
SSB	0
LB	2.00 Hz
GB	0
PC	1.00

DATE	DESCRIPTION	AMOUNT	BALANCE
2011-01-01	OPENING BALANCE	100.00	100.00
2011-01-15	PAYROLL	15.00	85.00
2011-01-20	RENT	20.00	65.00
2011-02-01	SALES	50.00	115.00
2011-02-10	PAYROLL	15.00	100.00
2011-02-20	RENT	20.00	80.00
2011-03-01	SALES	60.00	140.00
2011-03-15	PAYROLL	15.00	125.00
2011-03-20	RENT	20.00	105.00
2011-04-01	SALES	70.00	175.00
2011-04-15	PAYROLL	15.00	160.00
2011-04-20	RENT	20.00	140.00
2011-05-01	SALES	80.00	220.00
2011-05-15	PAYROLL	15.00	205.00
2011-05-20	RENT	20.00	185.00
2011-06-01	SALES	90.00	275.00
2011-06-15	PAYROLL	15.00	260.00
2011-06-20	RENT	20.00	240.00
2011-07-01	SALES	100.00	340.00
2011-07-15	PAYROLL	15.00	325.00
2011-07-20	RENT	20.00	305.00
2011-08-01	SALES	110.00	415.00
2011-08-15	PAYROLL	15.00	400.00
2011-08-20	RENT	20.00	380.00
2011-09-01	SALES	120.00	500.00
2011-09-15	PAYROLL	15.00	485.00
2011-09-20	RENT	20.00	465.00
2011-10-01	SALES	130.00	595.00
2011-10-15	PAYROLL	15.00	580.00
2011-10-20	RENT	20.00	560.00
2011-11-01	SALES	140.00	700.00
2011-11-15	PAYROLL	15.00	685.00
2011-11-20	RENT	20.00	665.00
2011-12-01	SALES	150.00	815.00
2011-12-15	PAYROLL	15.00	800.00
2011-12-20	RENT	20.00	780.00
2012-01-01	CLOSING BALANCE		780.00

2013.05.23-20 Neu-9-Bn-7,8-diAc-5NH,40-oxalindine-2-dibutylphosphate
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocol-sol-galactose (point 2) (part 2)

NAME 2013.05.23
EXPNO 20
PROCNO 1
Date_ 20130529
Time 11.53
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm CPDCH 13C
PULPROG zgpg30
TD 131072
SOLVENT CDCl3
NS 639
DS 0
SWH 39062.500 H
FIDRES 0.298023 H
AQ 1.6777844 s
RG 3640
DW 12.800 u
DE 21.00 u
TE 298.0 K
D1 2.0000000 s
D11 0.0300000 s
TD0 1
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 10.35 u
PL1 2.80 d
PL1W 49.17097855 W
SFO1 150.9251886 M
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 80.00 u
PL2 0.33 d
PL12 16.50 d
PL13 19.50 d
PL2W 13.96854782 W
PL12W 0.33740479 W
PL13W 0.16910298 W
SFO2 600.1524006 M
SI 65536
SF 150.9078392 M
WDW EM
SSB 0
LB 2.00 H
GB 0
PC 1.00

Crude NMR Spectra of Compounds 13, S6, 4, S7, and S8

trisaccharide (one-pot) (crude)

```

===== CHANGES =====
1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120
121
122
123
124
125
126
127
128
129
130
131
132
133
134
135
136
137
138
139
140
141
142
143
144
145
146
147
148
149
150
151
152
153
154
155
156
157
158
159
160
161
162
163
164
165
166
167
168
169
170
171
172
173
174
175
176
177
178
179
180
181
182
183
184
185
186
187
188
189
190
191
192
193
194
195
196
197
198
199
200
201
202
203
204
205
206
207
208
209
210
211
212
213
214
215
216
217
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227
228
229
230
231
232
233
234
235
236
237
238
239
240
241
242
243
244
245
246
247
248
249
250
251
252
253
254
255
256
257
258
259
260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272
273
274
275
276
277
278
279
280
281
282
283
284
285
286
287
288
289
290
291
292
293
294
295
296
297
298
299
300
301
302
303
304
305
306
307
308
309
310
311
312
313
314
315
316
317
318
319
320
321
322
323
324
325
326
327
328
329
330
331
332
333
334
335
336
337
338
339
340
341
342
343
344
345
346
347
348
349
350
351
352
353
354
355
356
357
358
359
360
361
362
363
364
365
366
367
368
369
370
371
372
373
374
375
376
377
378
379
380
381
382
383
384
385
386
387
388
389
390
391
392
393
394
395
396
397
398
399
400
401
402
403
404
405
406
407
408
409
410
411
412
413
414
415
416
417
418
419
420
421
422
423
424
425
426
427
428
429
430
431
432
433
434
435
436
437
438
439
440
441
442
443
444
445
446
447
448
449
450
451
452
453
454
455
456
457
458
459
460
461
462
463
464
465
466
467
468
469
470
471
472
473
474
475
476
477
478
479
480
481
482
483
484
485
486
487
488
489
490
491
492
493
494
495
496
497
498
499
500
501
502
503
504
505
506
507
508
509
510
511
512
513
514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526
527
528
529
530
531
532
533
534
535
536
537
538
539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549
550
551
552
553
554
555
556
557
558
559
560
561
562
563
564
565
566
567
568
569
570
571
572
573
574
575
576
577
578
579
580
581
582
583
584
585
586
587
588
589
590
591
592
593
594
595
596
597
598
599
600
601
602
603
604
605
606
607
608
609
610
611
612
613
614
615
616
617
618
619
620
621
622
623
624
625
626
627
628
629
630
631
632
633
634
635
636
637
638
639
640
641
642
643
644
645
646
647
648
649
650
651
652
653
654
655
656
657
658
659
660
661
662
663
664
665
666
667
668
669
670
671
672
673
674
675
676
677
678
679
680
681
682
683
684
685
686
687
688
689
690
691
692
693
694
695
696
697
698
699
700
701
702
703
704
705
706
707
708
709
710
711
712
713
714
715
716
717
718
719
720
721
722
723
724
725
726
727
728
729
730
731
732
733
734
735
736
737
738
739
740
741
742
743
744
745
746
747
748
749
750
751
752
753
754
755
756
757
758
759
760
761
762
763
764
765
766
767
768
769
770
771
772
773
774
775
776
777
778
779
780
781
782
783
784
785
786
787
788
789
790
791
792
793
794
795
796
797
798
799
800
801
802
803
804
805
806
807
808
809
810
811
812
813
814
815
816
817
818
819
820
821
822
823
824
825
826
827
828
829
830
831
832
833
834
835
836
837
838
839
840
841
842
843
844
845
846
847
848
849
850
851
852
853
854
855
856
857
858
859
860
861
862
863
864
865
866
867
868
869
870
871
872
873
874
875
876
877
878
879
880
881
882
883
884
885
886
887
888
889
890
891
892
893
894
895
896
897
898
899
900
901
902
903
904
905
906
907
908
909
910
911
912
913
914
915
916
917
918
919
920
921
922
923
924
925
926
927
928
929
930
931
932
933
934
935
936
937
938
939
940
941
942
943
944
945
946
947
948
949
950
951
952
953
954
955
956
957
958
959
960
961
962
963
964
965
966
967
968
969
970
971
972
973
974
975
976
977
978
979
980
981
982
983
984
985
986
987
988
989
990
991
992
993
994
995
996
997
998
999
1000
1001
1002
1003
1004
1005
1006
1007
1008
1009
1010
1011
1012
1013
1014
1015
1016
1017
1018
1019
1020
1021
1022
1023
1024
1025
1026
1027
1028
1029
1030
1031
1032
1033
1034
1035
1036
1037
1038
1039

```

Neu-9-Bn-7,8-diAc-5NH,40-oxalindine-2-dibutylphosphate
+2-Bz-6-Bn-3,4-diOH-1-Thiocresol-galactose (crude)

NAME
EXPNO
PROCNO
Time
Date_
Time
PULPROG
PCPDPRG
TD
F2
F3
F4
F5
F6
F7
F8
F9
F10
F11
F12
F13
F14
F15
F16
F17
F18
F19
F20
F21
F22
F23
F24
F25
F26
F27
F28
F29
F30
F31
F32
F33
F34
F35
F36
F37
F38
F39
F40
F41
F42
F43
F44
F45
F46
F47
F48
F49
F50
F51
F52
F53
F54
F55
F56
F57
F58
F59
F60
F61
F62
F63
F64
F65
F66
F67
F68
F69
F70
F71
F72
F73
F74
F75
F76
F77
F78
F79
F80
F81
F82
F83
F84
F85
F86
F87
F88
F89
F90
F91
F92
F93
F94
F95
F96
F97
F98
F99
F100
F101
F102
F103
F104
F105
F106
F107
F108
F109
F110
F111
F112
F113
F114
F115
F116
F117
F118
F119
F120
F121
F122
F123
F124
F125
F126
F127
F128
F129
F130
F131
F132
F133
F134
F135
F136
F137
F138
F139
F140
F141
F142
F143
F144
F145
F146
F147
F148
F149
F150
F151
F152
F153
F154
F155
F156
F157
F158
F159
F160
F161
F162
F163
F164
F165
F166
F167
F168
F169
F170
F171
F172
F173
F174
F175
F176
F177
F178
F179
F180
F181
F182
F183
F184
F185
F186
F187
F188
F189
F190
F191
F192
F193
F194
F195
F196
F197
F198
F199
F200
F201
F202
F203
F204
F205
F206
F207
F208
F209
F210
F211
F212
F213
F214
F215
F216
F217
F218
F219
F220
F221
F222
F223
F224
F225
F226
F227
F228
F229
F230
F231
F232
F233
F234
F235
F236
F237
F238
F239
F240
F241
F242
F243
F244
F245
F246
F247
F248
F249
F250
F251
F252
F253
F254
F255
F256
F257
F258
F259
F260
F261
F262
F263
F264
F265
F266
F267
F268
F269
F270
F271
F272
F273
F274
F275
F276
F277
F278
F279
F280
F281
F282
F283
F284
F285
F286
F287
F288
F289
F290
F291
F292
F293
F294
F295
F296
F297
F298
F299
F300
F301
F302
F303
F304
F305
F306
F307
F308
F309
F310
F311
F312
F313
F314
F315
F316
F317
F318
F319
F320
F321
F322
F323
F324
F325
F326
F327
F328
F329
F330
F331
F332
F333
F334
F335
F336
F337
F338
F339
F340
F341
F342
F343
F344
F345
F346
F347
F348
F349
F350
F351
F352
F353
F354
F355
F356
F357
F358
F359
F360
F361
F362
F363
F364
F365
F366
F367
F368
F369
F370
F371
F372
F373
F374
F375
F376
F377
F378
F379
F380
F381
F382
F383
F384
F385
F386
F387
F388
F389
F390
F391
F392
F393
F394
F395
F396
F397
F398
F399
F400
F401
F402
F403
F404
F405
F406
F407
F408
F409
F410
F411
F412
F413
F414
F415
F416
F417
F418
F419
F420
F421
F422
F423
F424
F425
F426
F427
F428
F429
F430
F431
F432
F433
F434
F435
F436
F437
F438
F439
F440
F441
F442
F443
F444
F445
F446
F447
F448
F449
F450
F451
F452
F453
F454
F455
F456
F457
F458
F459
F460
F461
F462
F463
F464
F465
F466
F467
F468
F469
F470
F471
F472
F473
F474
F475
F476
F477
F478
F479
F480
F481
F482
F483
F484
F485
F486
F487
F488
F489
F490
F491
F492
F493
F494
F495
F496
F497
F498
F499
F500
F501
F502
F503
F504
F505
F506
F507
F508
F509
F510
F511
F512
F513
F514
F515
F516
F517
F518
F519
F520
F521
F522
F523
F524
F525
F526
F527
F528
F529
F530
F531
F532
F533
F534
F535
F536
F537
F538
F539
F540
F541
F542
F543
F544
F545
F546
F547
F548
F549
F550
F551
F552
F553
F554
F555
F556
F557
F558
F559
F560
F561
F562
F563
F564
F565
F566
F567
F568
F569
F570
F571
F572
F573
F574
F575
F576
F577
F578
F579
F580
F581
F582
F583
F584
F585
F586
F587
F588
F589
F590
F591
F592
F593
F594
F595
F596
F597
F598
F599
F600
F601
F602
F603
F604
F605
F606
F607
F608
F609
F610
F611
F612
F613
F614
F615
F616
F617
F618
F619
F620
F621
F622
F623
F624
F625
F626
F627
F628
F629
F630
F631
F632
F633
F634
F635
F636
F637
F638
F639
F640
F641
F642
F643
F644
F645
F646
F647
F648
F649
F650
F651
F652
F653
F654
F655
F656
F657
F658
F659
F660
F661
F662
F663
F664
F665
F666
F667
F668
F669
F670
F671
F672
F673
F674
F675
F676
F677
F678
F679
F680
F681
F682
F683
F684
F685
F686
F687
F688
F689
F690
F691
F692
F693
F694
F695
F696
F697
F698
F699
F700
F701
F702
F703
F704
F705
F706
F707
F708
F709
F710
F711
F712
F713
F714
F715
F716
F717
F718
F719
F720
F721
F722
F723
F724
F725
F726
F727
F728
F729
F730
F731
F732
F733
F734
F735
F736
F737
F738
F739
F740
F741
F742
F743
F744
F745
F746
F747
F748
F749
F750
F751
F752
F753
F754
F755
F756
F757
F758
F759
F760
F761
F762
F763
F764
F765
F766
F767
F768
F769
F770
F771
F772
F773
F774
F775
F776
F777
F778
F779
F780
F781
F782
F783
F784
F785
F786
F787
F788
F789
F790
F791
F792
F793
F794
F795
F796
F797
F798
F799
F800
F801
F802
F803
F804
F805
F806
F807
F808
F809
F810
F811
F812
F813
F814
F815
F816
F817
F818
F819
F820
F821
F822
F823
F824
F825
F826
F827
F828
F829
F830
F831
F832
F833
F834
F835
F836
F837
F838
F839
F840
F841
F842
F843
F844
F845
F846
F847
F848
F849
F850
F851
F852
F853
F854
F855
F856
F857
F858
F859
F860
F861
F862
F863
F864
F865
F866
F867
F868
F869
F870
F871
F872
F873
F874
F875
F876
F877
F878
F879
F880
F881
F882
F883
F884
F885
F886
F887
F888
F889
F890
F891
F892
F893
F894
F895
F896
F897
F898
F899
F900
F901
F902
F903
F904
F905
F906
F907
F908
F909
F910
F911
F912
F913
F914
F915
F916
F917
F918
F919
F920
F921
F922
F923
F924
F925
F926
F927
F928
F929
F930
F931
F932
F933
F934
F935
F936
F937
F938
F939
F940
F941
F942
F943
F944
F945
F946
F947
F948
F949
F950
F951
F952
F953
F954
F955
F956
F957
F958
F959
F960
F961
F962
F963
F964
F965
F966
F967
F968
F969
F970
F971
F972
F973
F974
F975
F976
F977
F978
F979
F980
F981
F982
F983
F984
F985
F986
F987
F988
F989
F990
F991
F992
F993
F994
F995
F996
F997
F998
F999
F1000
F1001
F1002
F1003
F1004
F1005
F1006
F1007
F1008
F1009
F1010
F1011
F1012
F1013
F1014
F1015
F1016
F1017
F1018
F1019
F1020
F1021
F1022
F1023
F1024
F1025
F1026
F1027
F1028
F1029
F1030
F1031
F1032
F1033
F1034
F1035
F1036
F1037
F1038
F1039
F1040
F1041
F1042
F1043
F1044
F1045
F1046
F1047
F1048
F1049
F1050
F1051
F1052
F1053
F1054
F1055
F1056
F1057
F1058
F1059
F1060
F1061
F1062
F1063
F1064
F1065
F1066
F1067
F1068
F1069
F1070
F1071
F1072
F1073
F1074
F1075
F1076
F1077
F1078
F1079
F1080
F1081
F1082
F1083
F1084
F1085
F1086
F1087
F1088
F1089
F1090
F1091
F1092
F1093
F1094
F1095
F1096
F1097
F1098
F1099
F1100
F1101
F1102
F1103
F1104
F1105
F1106
F1107
F1108
F1109
F1110
F1111
F1112
F1113
F1114
F1115
F1116
F1117
F1118
F1119
F1120
F1121
F1122
F1123
F1124
F1125
F1126
F1127
F1128
F1129
F1130
F1131
F1132
F1133
F1134
F1135
F1136
F1137
F1138
F1139
F1140
F1141
F1142
F1143
F1144
F1145
F1146
F1147
F1148
F1149
F1150
F1151
F1152
F1153
F1154
F1155
F1156
F1157
F1158
F1159
F1160
F1161
F1162
F1163
F1164
F1165
F1166
F1167
F1168
F1169
F1170
F1171
F1172
F1173
F1174
F1175
F1176
F1177
F1178
F1179
F1180
F1181
F1182
F1183
F1184
F1185
F1186
F1187
F1188
F1189
F1190
F1191
F1192
F1193
F1194
F1195
F1196
F1197
F1198
F1199
F1200
F1201
F1202
F1203
F1204
F1205
F1206
F1207
F1208
F1209
F1210
F1211
F1212
F1213
F1214
F1215
F1216
F1217
F1218
F1219
F1220
F1221
F1222
F1223
F1224
F1225
F1226
F1227
F1228
F1229
F1230
F1231
F1232
F1233
F1234
F1235
F1236
F1237
F1238
F1239
F1240
F1241
F1242
F1243
F1244
F1245
F1246
F1247
F1248
F1249
F1250
F1251
F1252
F1253
F1254
F1255
F1256
F1257
F1258
F1259
F1260
F1261
F1262
F1263
F1264
F1265
F1266
F1267
F1268
F1269
F1270
F1271
F1272
F1273
F1274
F1275
F1276
F1277
F1278
F1279
F1280
F1281
F1282
F1283
F1284
F1285
F1286
F1287
F1288
F1289
F1290
F1291
F1292
F1293
F1294
F1295
F1296
F1297
F1298
F1299
F1300
F1301
F1302
F1303
F1304
F1305
F1306
F1307
F1308
F1309
F1310
F1311
F1312
F1313
F1314
F1315
F1316
F1317
F1318
F1319
F1320
F1321
F1322
F1323
F1324
F1325
F1326
F1327
F1328
F1329
F1330
F1331
F1332
F1333
F1334
F1335
F1336
F1337
F1338
F1339
F1340
F1341
F1342
F1343
F1344
F1345
F1346
F1347
F1348
F1349
F1350
F1351
F1352
F1353
F1354
F1355
F1356
F1357
F1358
F1359
F1360
F1361
F1362
F1363
F1364
F1365
F1366
F1367
F1368
F1369
F1370
F1371
F1372
F1373
F1374
F1375
F1376
F1377
F1378
F1379
F1380
F1381
F1382
F1383
F1384
F1385
F1386
F1387
F1388
F1389
F1390
F1391
F1392
F1393
F1394
F1395
F1396
F1397
F1398
F1399
F1400
F1401
F1402
F1403
F1404
F1405
F1406
F1407
F1408
F1409
F1410
F1411
F1412
F1413
F1414
F1415
F1416
F1417
F1418
F1419
F1420
F1421
F1422
F1423
F1424
F1425
F1426
F1427
F1428
F1429
F1430
F1431
F1432
F1433
F1434
F1435
F1436
F1437
F1438
F1439
F1440
F1441
F1442
F1443
F1444
F1445
F1446
F1447
F1448
F1449
F1450
F1451
F1452
F1453
F1454
F1455
F1456
F1457
F1458
F1459
F1460
F1461
F1462
F1463
F1464
F1465
F1466
F1467
F1468
F1469
F1470
F1471
F1472
F1473
F1474
F1475
F1476
F1477
F1478
F1479
F1480
F1481
F1482
F1483
F1484
F1485
F1486
F1487
F1488
F1489
F1490
F1491
F1492
F1493
F1494
F1495
F1496
F1497
F1498
F1499
F1500
F1501
F1502
F1503
F1504
F1505
F1506
F1507
F1508
F1509
F1510
F1511
F1512
F1513
F1514
F1515
F1516
F1517
F1518
F1519
F1520
F1521
F1522
F1523
F1524
F1525
F1526
F1527
F1528
F1529
F1530
F1531
F1532
F1533
F1534
F1535
F1536
F1537
F1538
F1539
F1540
F1541
F1542
F1543
F1544
F1545
F1546
F1547
F1548
F1549
F1550
F1551
F1552
F1553
F1554
F1555
F1556
F1557
F1558
F1559
F1560
F1561
F1562
F1563
F1564
F1565
F1566
F1567
F1568
F1569
F1570
F1571
F1572
F1573
F1574
F1575
F1576
F1577
F1578
F1579
F1580
F1581
F1582
F1583
F1584
F1585
F1586
F1587
F1588
F1589
F1590
F1591
F1592
F1593
F1594
F1595
F1596
F1597
F1598
F1599
F1600
F1601
F1602
F1603
F1604
F1605
F1606
F1607
F1608
F1609
F1610
F1611
F1612
F1613
F1614
F1615
F1616
F1617
F1618
F1619
F1620
F1621
F1622
F1623
F1624
F1625
F1626
F1627
F1628
F1629
F1630
F1631
F1632
F1633
F1634
F1635
F1636
F1637
F1638
F1639
F1640
F1641
F1642
F1643
F1644
F1645
F1646
F1647
F1648
F1649
F1650
F1651
F1652
F1653
F1654
F1655
F1656
F1657
F1658
F1659
F1660
F1661
F1662
F1663
F1664
F1665
F1666
F1667
F1668
F1669
F1670
F1671
F1672
F1673
F1674
F1675
F1676
F1677
F1678
F1679
F1680
F1681
F1682
F1683
F1684
F1685
F1686
F1687
F1688
F1689
F1690
F1691
F1692
F1693
F1694
F1695
F1696
F1697
F1698
F1699
F1700
F1701
F1702
F1703
F1704
F1705
F1706
F1707
F1708
F1709
F1710
F1711
F1712
F1713
F1714
F1715
F1716
F1717
F1718
F1719
F1720
F1721
F1722
F1723
F1724
F1725
F1726
F1727
F1728
F1729
F1730
F1731
F1732
F1733
F1734
F1735
F1736
F1737
F1738
F1739
F1740
F1741
F1742
F1743
F1744
F1745
F1746
F1747
F1748
F1749
F1750
F1751
F1752
F1753
F1754
F1755
F1756
F1757
F1758
F1759
F1760
F1761
F1762
F1763
F1764
F1765
F1766
F1767
F1768
F1769
F1770
F1771
F1772
F1773
F1774
F1775
F1776
F1777
F1778
F1779
F1780
F1781
F1782
F1783
F1784
F1785
F1786
F1787
F1788
F1789
F1790
F1791
F1792
F1793
F1794
F1795
F1796
F1797
F1798
F1799
F1800
F1801
F1802
F1803
F1804
F1805
F1806
F1807
F1808
F1809
F1810
F1811
F1812
F1813
F1814
F1815
F1816
F1817
F1818
F1819
F1820
F1821
F1822
F1823
F1824
F1825
F1826
F1827
F1828
F1829
F1830
F1831
F1832
F1833
F1834
F1835
F1836
F1837
F1838
F1839
F1840
F1841
F1842
F1843
F1844
F1845
F1846
F1847
F1848
F1849
F1850
F1851
F1852
F1853
F1854
F1855
F1856
F1857
F1858
F1859
F1860
F1861
F1862
F1863
F1864
F1865
F1866
F1867
F1868
F1869
F1870
F1871
F1872
F1873
F1874
F1875
F1876
F1877
F1878
F1879
F1880
F1881
F1882
F1883
F1884
F1885
F1886
F1887
F1888
F1889
F1890
F1891
F1892
F1893
F1894
F1895
F1896
F1897
F1898
F1899
F1900
F1901
F1902
F1903
F1904
F19

[illegible]