Supplementary Information

$^1$H- and $^{13}$C-NMR, ESI-MS spectra and HPLC chromatogram
# 國立交通大學應用化學系

## 元素分析儀 Heraeus CHN-O Rapid 服務報告書

使用者姓名：張凱翔  
中心編號：980357  
服務單位：清大原科 俞錦山實驗室  樣品名稱或代號：CK809  
收件日期：98 年 3 月 24 日 完成日期：98 年 3 月 26 日

### 分析結果

<table>
<thead>
<tr>
<th>實驗值</th>
<th>N%</th>
<th>C%</th>
<th>H%</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>1.</td>
<td>8.10</td>
<td>72.85</td>
<td>8.49</td>
</tr>
<tr>
<td>2.</td>
<td>8.21</td>
<td>72.74</td>
<td>9.09</td>
</tr>
<tr>
<td>3.</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>4.</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>推測值</td>
<td>8.24</td>
<td>73.05</td>
<td>9.29</td>
</tr>
</tbody>
</table>

### 本日所使用之 Standard：A

<table>
<thead>
<tr>
<th>(A) Acetanilide</th>
<th>(B) Atropin</th>
<th>(C) N-Anilin</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>N%</td>
<td>C%</td>
<td>H%</td>
</tr>
<tr>
<td>理論值：10.36</td>
<td>71.09</td>
<td>6.71</td>
</tr>
<tr>
<td>測出值：10.42</td>
<td>70.86</td>
<td>6.55</td>
</tr>
</tbody>
</table>

### 備註

費用核算：NCH：800 元  
報告日期：98 年 3 月 27 日

儀器負責人簽章：_  
技術員簽章：_
國立交通大學應用化學系
元素分析儀 Heraeus CHN-O Rapid 服務報告書

使用者姓名：張凱翔

中心編號：980530

服務單位：清大理科 俞勤山實驗室 樣品名稱或代號：CKS11

收件日期：98 年 5 月 14 日 完成日期：98 年 5 月 18 日

分析結果：

<table>
<thead>
<tr>
<th></th>
<th>N%</th>
<th>C%</th>
<th>H%</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>1.</td>
<td>16.03</td>
<td>69.96</td>
<td>8.24</td>
</tr>
<tr>
<td>2.</td>
<td>15.83</td>
<td>69.40</td>
<td>8.53</td>
</tr>
<tr>
<td>推測值</td>
<td>15.72</td>
<td>69.63</td>
<td>8.67</td>
</tr>
</tbody>
</table>

本日所使用之 Standard：A

<table>
<thead>
<tr>
<th>(A)Acetanilide</th>
<th>(B)Atropin</th>
<th>(C)N-Anilin</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>N%</td>
<td>C%</td>
<td>H%</td>
</tr>
<tr>
<td>理論值：</td>
<td>10.36</td>
<td>71.09</td>
</tr>
<tr>
<td>測出值：</td>
<td>10.34</td>
<td>71.01</td>
</tr>
</tbody>
</table>

備註：

費用核算：NCH：800 元

報告日期：98 年 5 月 19 日

儀器負責人簽章：

技術員簽章：

技士李薇明

\[
\text{C}_{13}H_{27} \text{N}_3 \text{OBN} \quad \text{N}_3 \text{OBN}
\]
\[ \text{Diagram of molecular structure with labels: } \text{O, OBn, BnO, N3, OBn, C13H27} \]
国立交通大學應用化學系
元素分析儀 Heraeus CHN-O Rapid 服務報告書

使用者姓名：廖國廷  中心編號：980529
服務單位：清大原料 烏鎮實驗室 樣品名稱或代號：SO8A
收件日期：98年5月14日 完成日期：98年5月18日

分析結果：

<table>
<thead>
<tr>
<th>實驗值</th>
<th>N%</th>
<th>C%</th>
<th>H%</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>1.</td>
<td>8.66</td>
<td>72.11</td>
<td>7.42</td>
</tr>
<tr>
<td>2.</td>
<td>8.46</td>
<td>71.79</td>
<td>7.27</td>
</tr>
<tr>
<td>3.</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>4.</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>推測值</td>
<td>8.69</td>
<td>72.02</td>
<td>7.71</td>
</tr>
</tbody>
</table>

本日所使用之 Standard：A
(A) Acetanilide  (B) Atropin  (C) N-Anilin

<table>
<thead>
<tr>
<th>理論值</th>
<th>N%</th>
<th>C%</th>
<th>H%</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>N%</td>
<td>10.36</td>
<td>71.09</td>
<td>6.71</td>
</tr>
<tr>
<td>潤出值</td>
<td>10.34</td>
<td>71.01</td>
<td>7.09</td>
</tr>
</tbody>
</table>

備註：

費用核算：NCH：800元
報告日期：98年5月19日

儀器負責人簽章：技術員簽章：

14α
CLWphysph11
2010090313  60 (3.110) Cn (Cen,3, 80.00, Ht); Sm (SG, 2x0.75); Sb (3,40.00 ); Cm (60:62-7:19) Scan ES+
3.76e7

101.0 4.995e5
102.1 8.586e6
103.2 4.086e5
107.0 7.572e5
114.1 1.361e6
118.1 4.669e5
126.0 5.419e6
130.2 1.065e7
131.2 9.776e5
172.3 8.613e5
205.2 5.447e5
269.2 3.542e6
270.2 3.022e6
301.2 4.321e5
463.4 3.758e7
464.4 1.177e7
465.4 2.025e6
485.3 2.978e6
486.4 9.812e6
497.3 1.221e6
498.3 1.484e5
499.3 4.683e5
Figure 2. Chromatogram for the mixtures of amide compound 18 after purification with column chromatography.

Figure 3. HPLC chromatogram derived from the reinjection of the collected fraction shown in Fig. 1.
2010081711 20 (1.037) Cn (C

No | Mass     | Inten | %BPI | %TIC  
---|----------|-------|------|-------
1: | 136.1    | 5.21e4| 10.30| 2.04  
2: | 419.5    | 1.05e5| 20.73| 4.10  
3: | 465.7    | 1.56e4| 3.09  | 0.61  
4: | 493.4    | 9.40e4| 18.59 | 3.68  
5: | 494.3    | 2.68e4| 5.30  | 1.05  
6: | 507.4    | 7.31e4| 14.44 | 2.86  
7: | 508.4    | 1.22e4| 2.41  | 0.48  
8: | 799.6    | 9.63e4| 19.04 | 3.77  
9: | 800.6    | 5.56e4| 10.99 | 2.18  
10:| 818.6    | 1.72e4| 3.40  | 0.67  
11:| 819.0    | 1.80e4| 3.56  | 0.71  
12:| 819.7    | 1.31e4| 2.60  | 0.51  
13:| 821.6    | 5.06e5| 100.00| 19.79 
14:| 822.6    | 2.53e5| 50.09 | 9.91  
15:| 823.6    | 5.73e4| 11.33 | 2.24  
16:| 835.5    | 1.02e4| 2.03  | 0.40  
17:| 855.5    | 1.78e4| 3.51  | 0.70  
18:| 883.6    | 1.78e4| 3.51  | 0.70  
19:| 889.6    | 1.18e4| 2.34  | 0.46  

C14H29 OH

OH

NH

O

OH

O

NH

OH

C14H29
Figure 4. HPLC Chromatogram for the mixtures of amide compound 19 obtained from purification through column chromatography.