

Supplementary Materials

Discovery of Natural Dimeric Naphthopyrones as Potential Cytotoxic Agents Through ROS-mediated Apoptotic Pathway

Kuo Xu ^{1,†}, Chuanlong Guo ^{1,2,†}, Jie Meng ^{1,4}, Haiying Tian ⁵, Shuju Guo ^{1,*} and Dayong Shi ^{1,3,*}

¹ Chinese Academy of Sciences Key Laboratory of Experimental Marine Biology, Institute of Oceanology, Chinese Academy of Sciences, Qingdao 266071, China; xukuoworld@126.com (K.X.); gcl_cpu@126.com (C.G.); mengjie@qibebt.ac.cn (J.M.)

² Department of Pharmacy, College of Chemical Engineering, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266042, China

³ State Key Laboratory of Microbial Technology, School of Life Science, Shandong University, No. 72 Binhai Road, Qingdao 266237, China

⁴ College of Resources and Environment, Qingdao Agricultural University, Qingdao 266109, China;

⁵ Technology Center, China Tobacco Henan Industrial Co., Ltd., Zhengzhou, 450000, China; 13623810925@126.com

* Correspondence: guoshuju@qdio.ac.cn (S.G.); shidayong@qdio.ac.cn (D.S.); Tel.: +86-532-82898741 (S.G.); +86-532-82898719 (D.S.)

† These authors contributed equally to this work.

Table of Contents

NO.	Contents	Page
Figure S1	The UV spectrum of 1 in MeOH	S4
Figure S2	The ECD spectrum of 1 in MeOH	S4
Figure S3	The HR-ESI-MS data of 1	S5
Figure S4	The IR spectrum (KBr) of 1	S5
Figure S5	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 1 in DMSO- <i>d</i> ₆	S6
Figure S6	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 1 in DMSO- <i>d</i> ₆	S6
Figure S7	The HSQC spectrum (600 MHz) of 1 in DMSO- <i>d</i> ₆	S7
Figure S8	The HMBC spectrum (600 MHz) of 1 in DMSO- <i>d</i> ₆	S7
Figure S9	The HR-ESI-MS data of 2	S8
Figure S10	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 2 in DMSO- <i>d</i> ₆	S8
Figure S11	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 2 in DMSO- <i>d</i> ₆	S9
Figure S12	The HR-ESI-MS data of 3	S9
Figure S13	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 3 in acetone- <i>d</i> ₆	S10
Figure S14	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 3 in acetone- <i>d</i> ₆	S10
Figure S15	The HR-ESI-MS data of 4	S11
Figure S16	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 4 in acetone- <i>d</i> ₆	S11
Figure S17	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 4 in acetone- <i>d</i> ₆	S12

Figure S18	The HR-ESI-MS data of 5	S12
Figure S19	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 5 in CDCl ₃	S13
Figure S20	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 5 in CDCl ₃	S13
Figure S21	The HR-ESI-MS data of 6	S14
Figure S22	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 6 in acetone- <i>d</i> ₆	S14
Figure S23	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 6 in acetone- <i>d</i> ₆	S15
Figure S24	The HR-ESI-MS data of 7	S15
Figure S25	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 7 in acetone- <i>d</i> ₆	S16
Figure S26	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 7 in acetone- <i>d</i> ₆	S16
Figure S27	The HR-ESI-MS data of 8	S17
Figure S28	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 8 in acetone- <i>d</i> ₆	S17
Figure S29	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 8 in acetone- <i>d</i> ₆	S18
Figure S30	The HR-ESI-MS data of 9	S18
Figure S31	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 9 in acetone- <i>d</i> ₆	S19
Figure S32	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 9 in acetone- <i>d</i> ₆	S19
Figure S33	The HR-ESI-MS data of 10	S20
Figure S34	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 10 in acetone- <i>d</i> ₆	S20
Figure S35	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 10 in acetone- <i>d</i> ₆	S21
Figure S36	The HR-ESI-MS data of 11	S21
Figure S37	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 11 in acetone- <i>d</i> ₆	S22
Figure S38	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 11 in acetone- <i>d</i> ₆	S22
Figure S39	The HR-ESI-MS data of 12	S23
Figure S40	The ECD spectrum of 12 in MeOH	S23
Figure S41	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 12 in acetone- <i>d</i> ₆	S24
Figure S42	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 12 in acetone- <i>d</i> ₆	S24
Figure S43	The HR-ESI-MS data of 13	S25
Figure S44	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 13 in acetone- <i>d</i> ₆	S25
Figure S45	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 13 in acetone- <i>d</i> ₆	S26
Figure S46	The HR-ESI-MS data of 14	S26
Figure S47	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 14 in DMSO- <i>d</i> ₆	S27
Figure S48	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 14 in DMSO- <i>d</i> ₆	S27
Figure S49	The HR-ESI-MS data of 15	S28
Figure S50	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 15 in acetone- <i>d</i> ₆	S28
Figure S51	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 15 in acetone- <i>d</i> ₆	S29
Figure S52	The HR-ESI-MS data of 16	S29

Figure S53	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 16 in acetone- <i>d</i> ₆	S30
Figure S54	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 16 in acetone- <i>d</i> ₆	S30
Figure S55	The HR-ESI-MS data of 17	S31
Figure S56	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 17 in acetone- <i>d</i> ₆	S31
Figure S57	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 17 in acetone- <i>d</i> ₆	S32
Figure S58	The HR-ESI-MS data of 18	S32
Figure S59	The ¹ H NMR spectrum (600 MHz) of 18 in acetone- <i>d</i> ₆	S33
Figure S60	The ¹³ C NMR spectrum (150 MHz) of 18 in acetone- <i>d</i> ₆	S33
—	General procedure for ECD calculations of compounds 1 and 12	S34–S36
—	Analytical HPLC spectra for all isolated compounds (1–18)	S37–S54

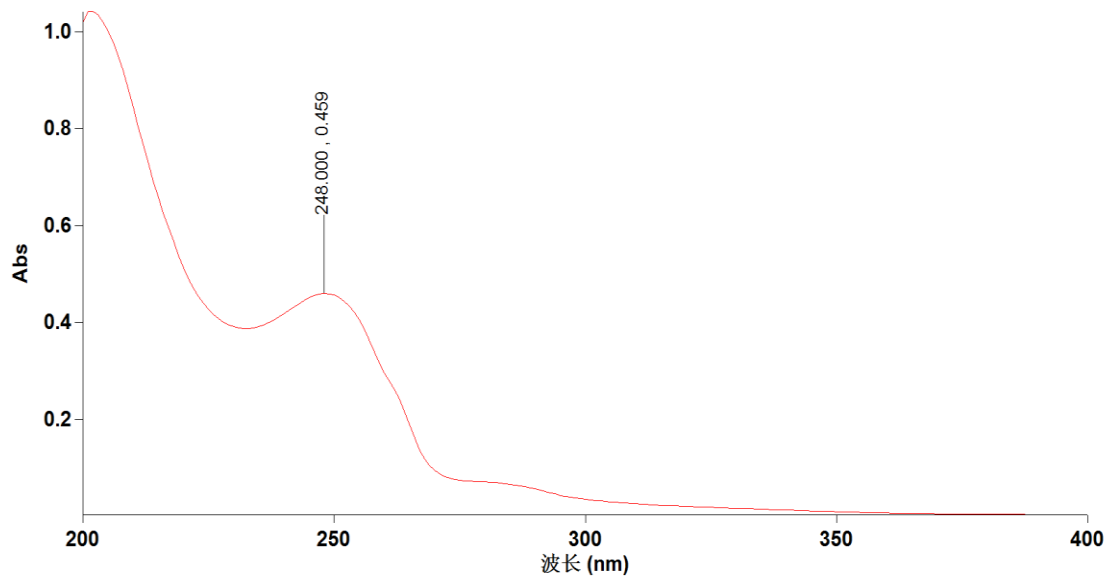


Figure S1. The UV spectrum of **1** in MeOH

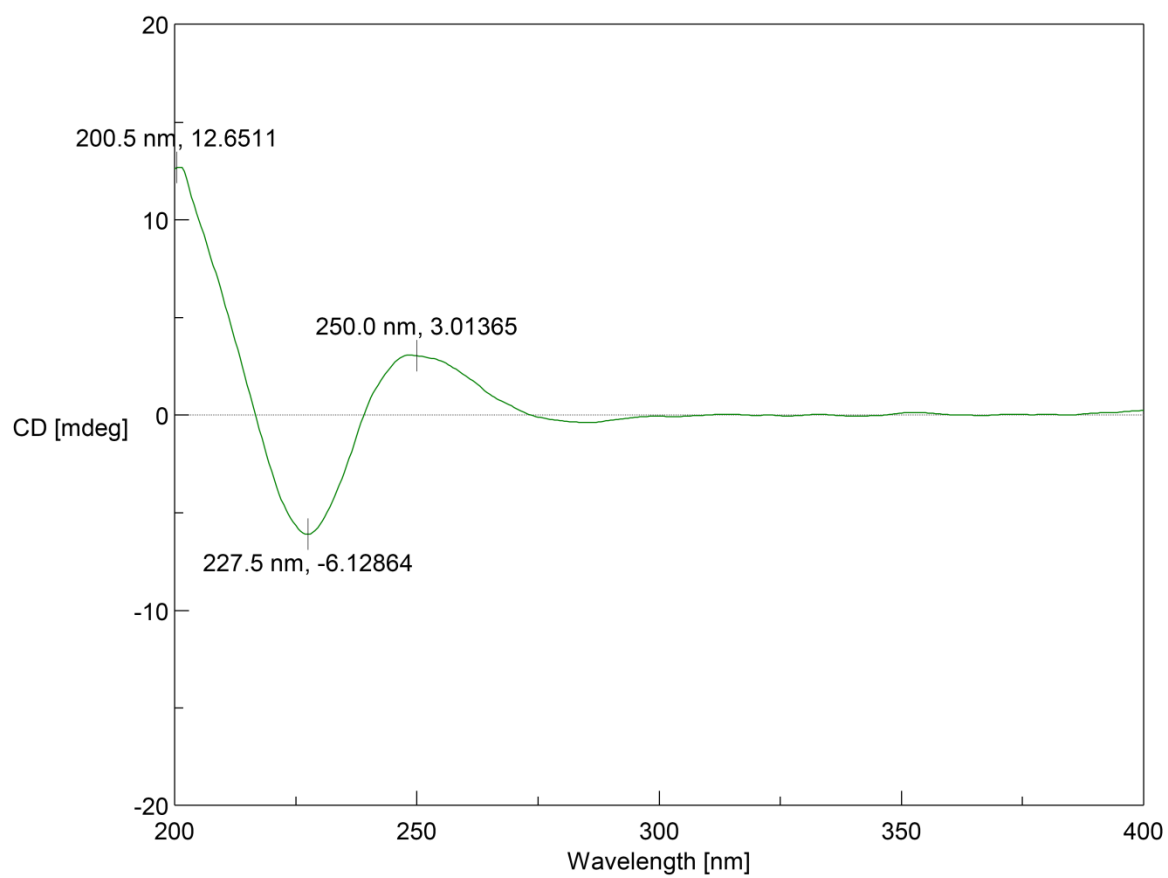


Figure S2. The ECD spectrum of **1** in MeOH

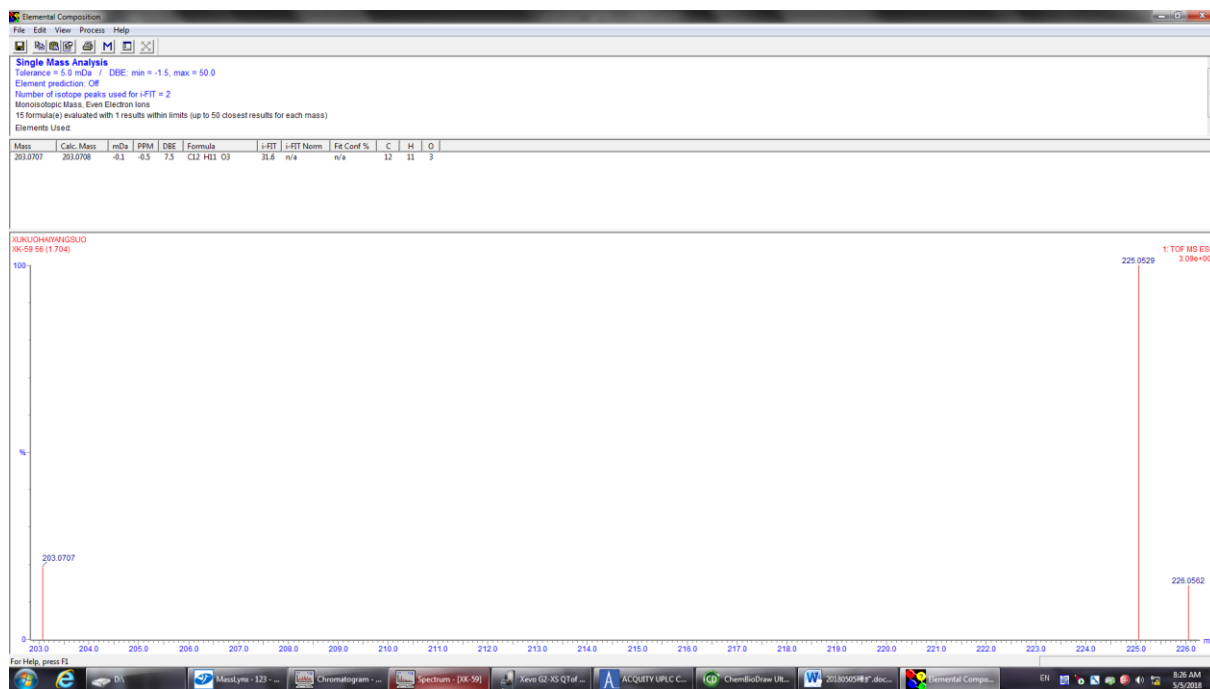


Figure S3. The HR-ESI-MS data of **1**

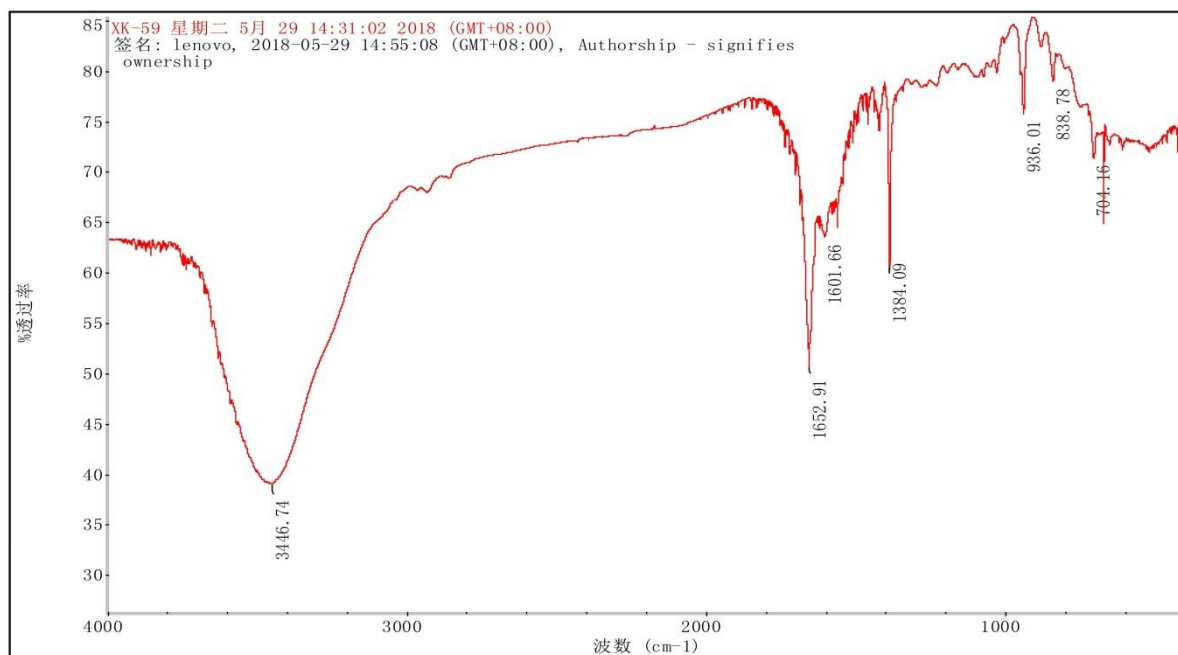


Figure S4. The IR spectrum (KBr) of **1**

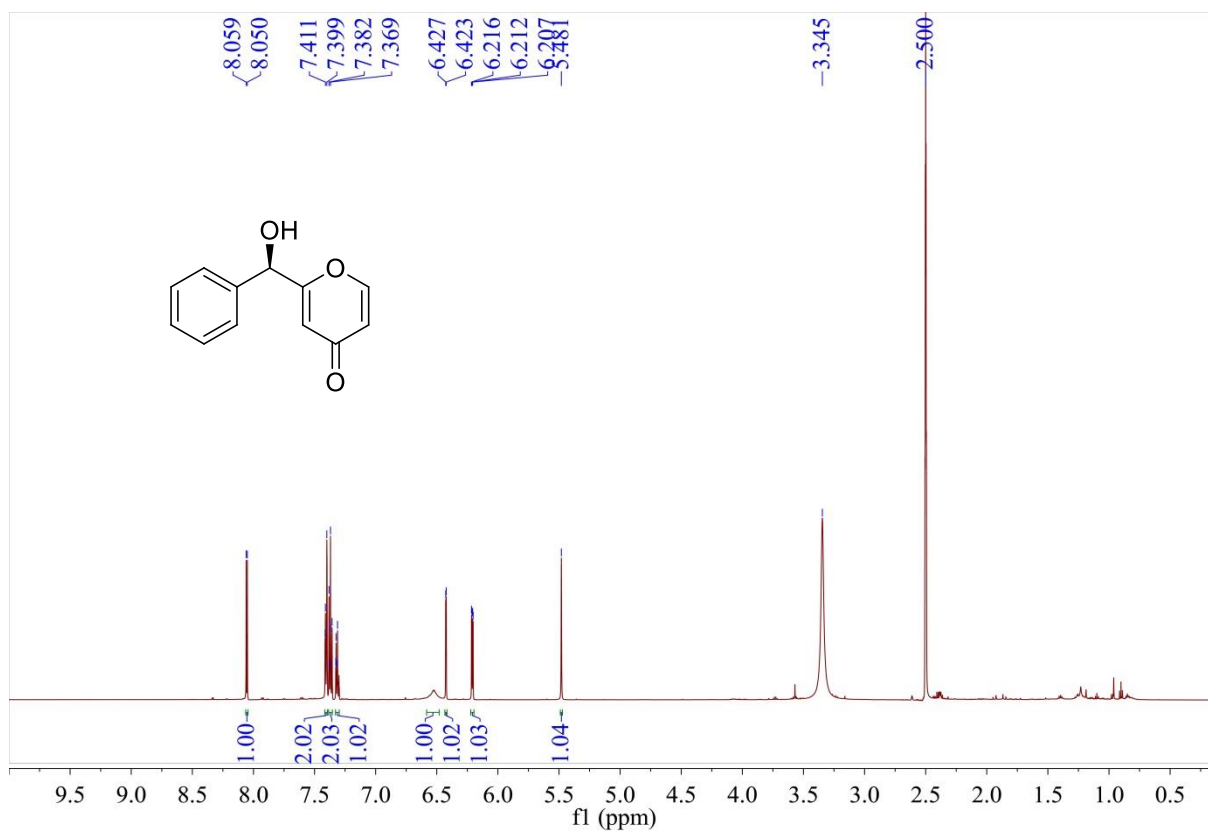


Figure S5. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **1** in $\text{DMSO-}d_6$

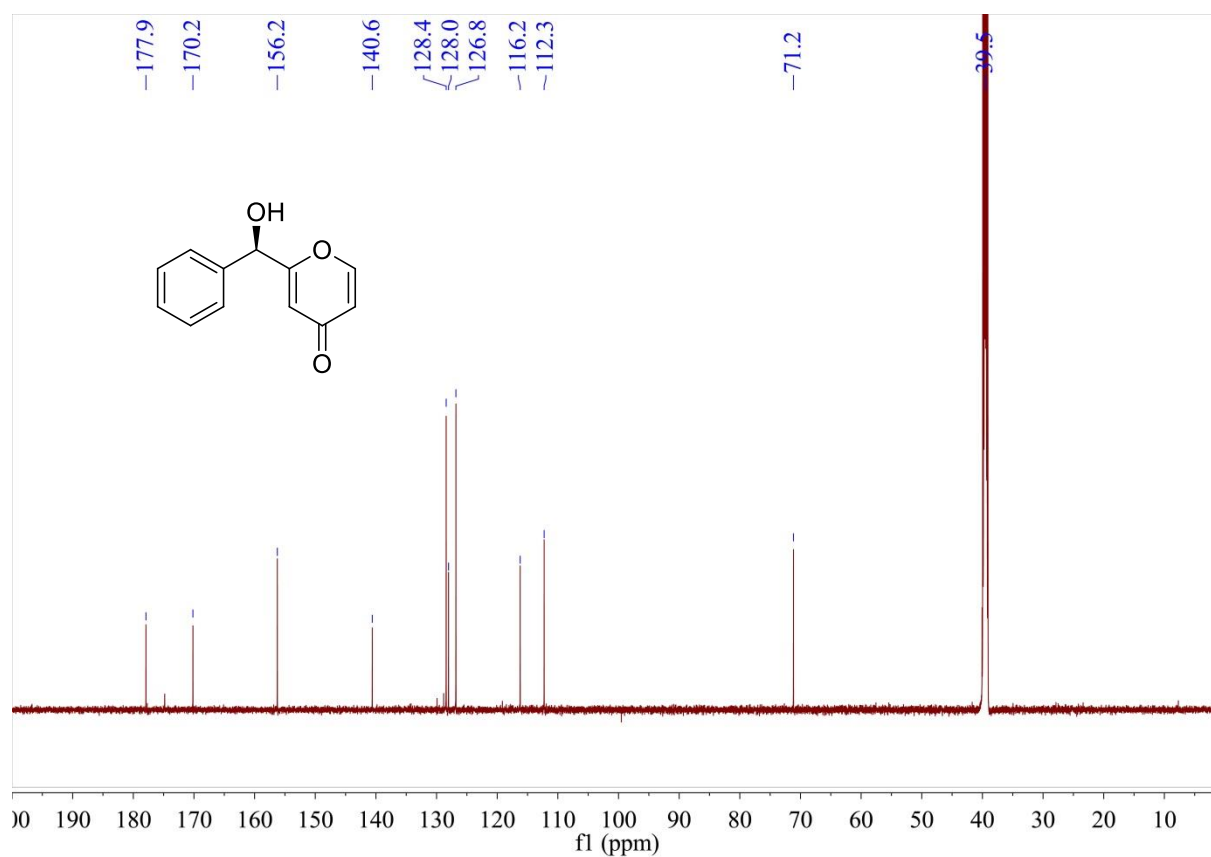


Figure S6. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **1** in $\text{DMSO-}d_6$

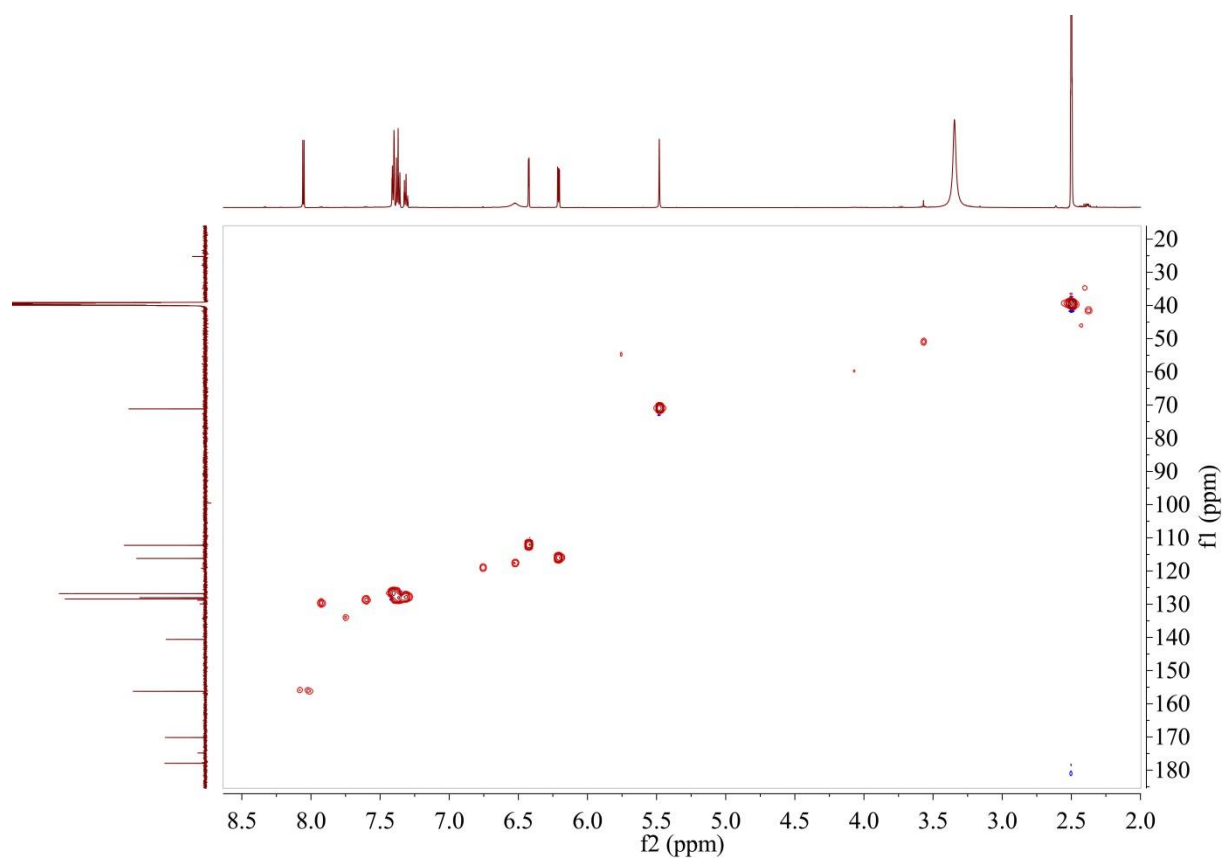


Figure S7. The HSQC spectrum (600 MHz) of **1** in DMSO-*d*₆

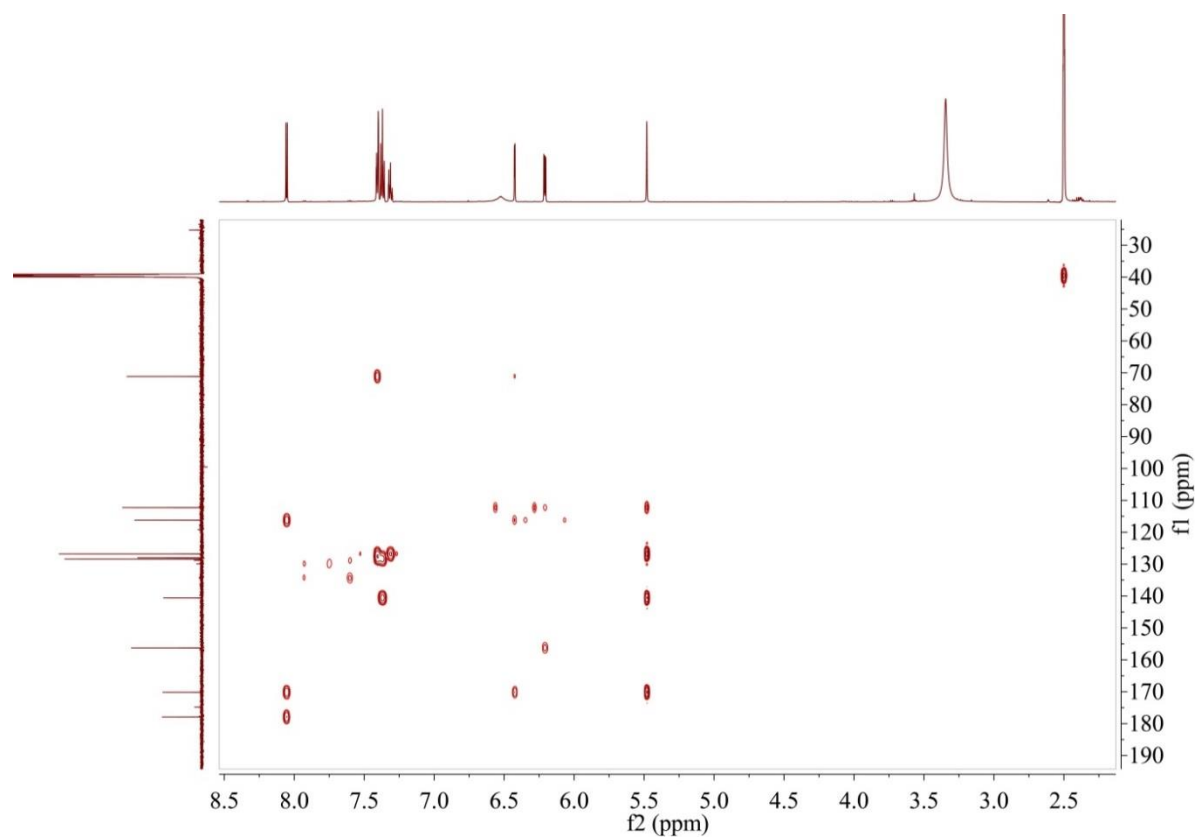


Figure S8. The HMBC spectrum (600 MHz) of **1** in DMSO-*d*₆

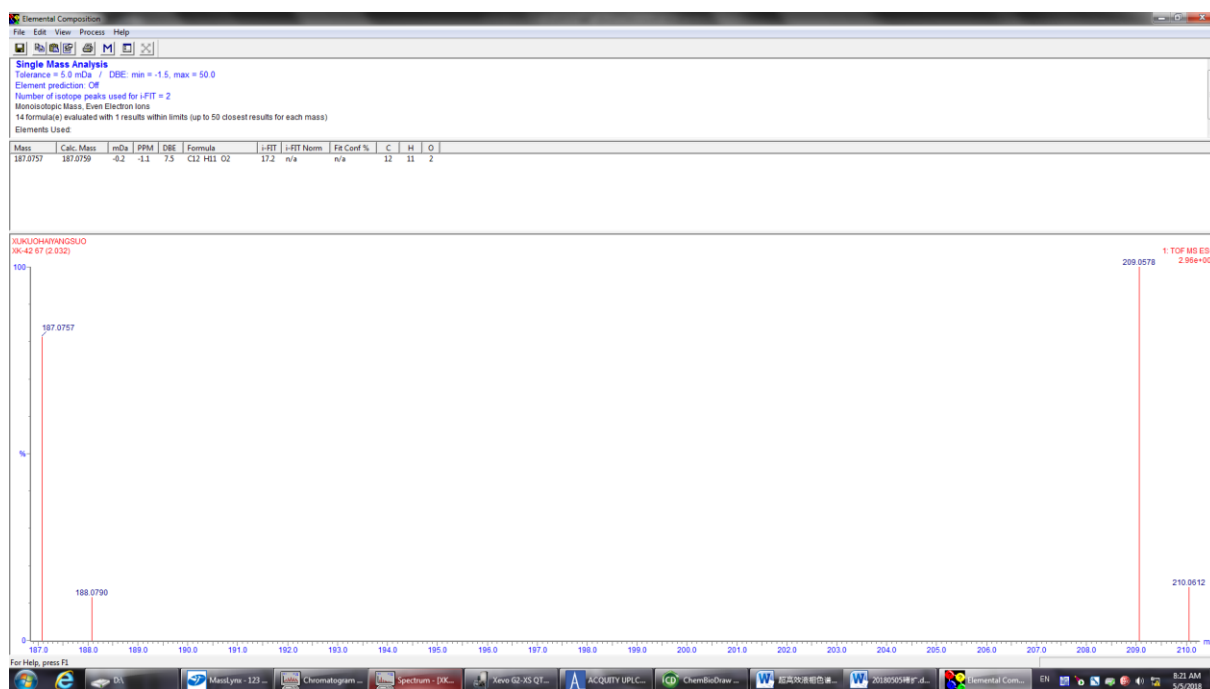


Figure S9. The HR-ESI-MS data of **2**

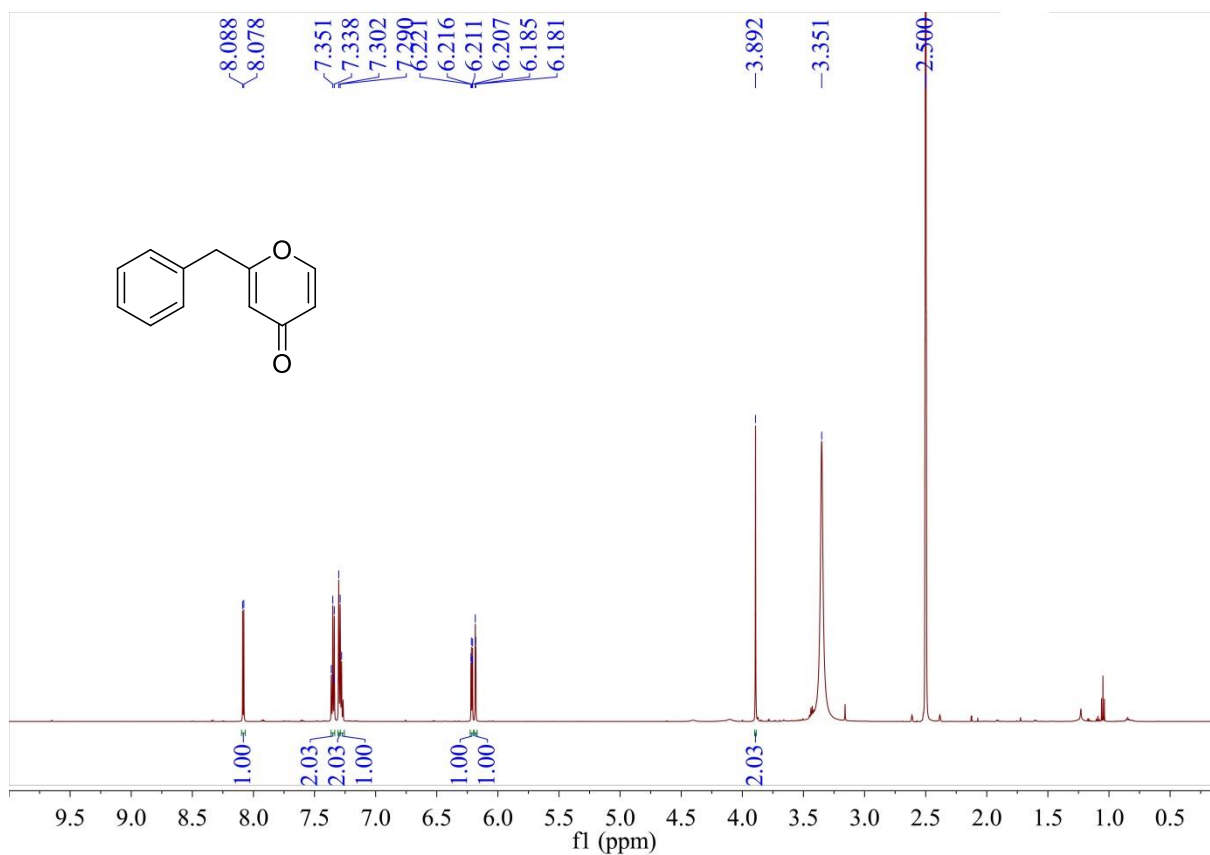


Figure S10. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **2** in $\text{DMSO-}d_6$

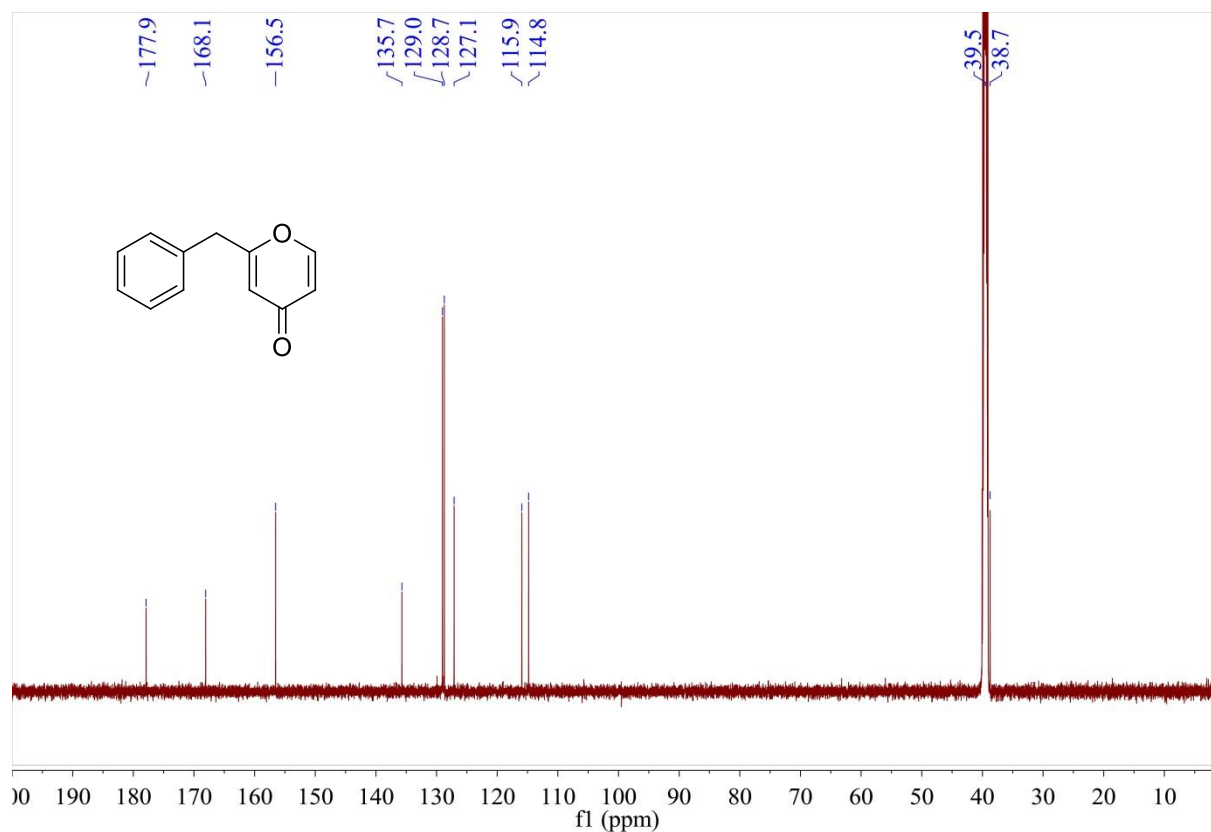


Figure S11. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **2** in $\text{DMSO-}d_6$

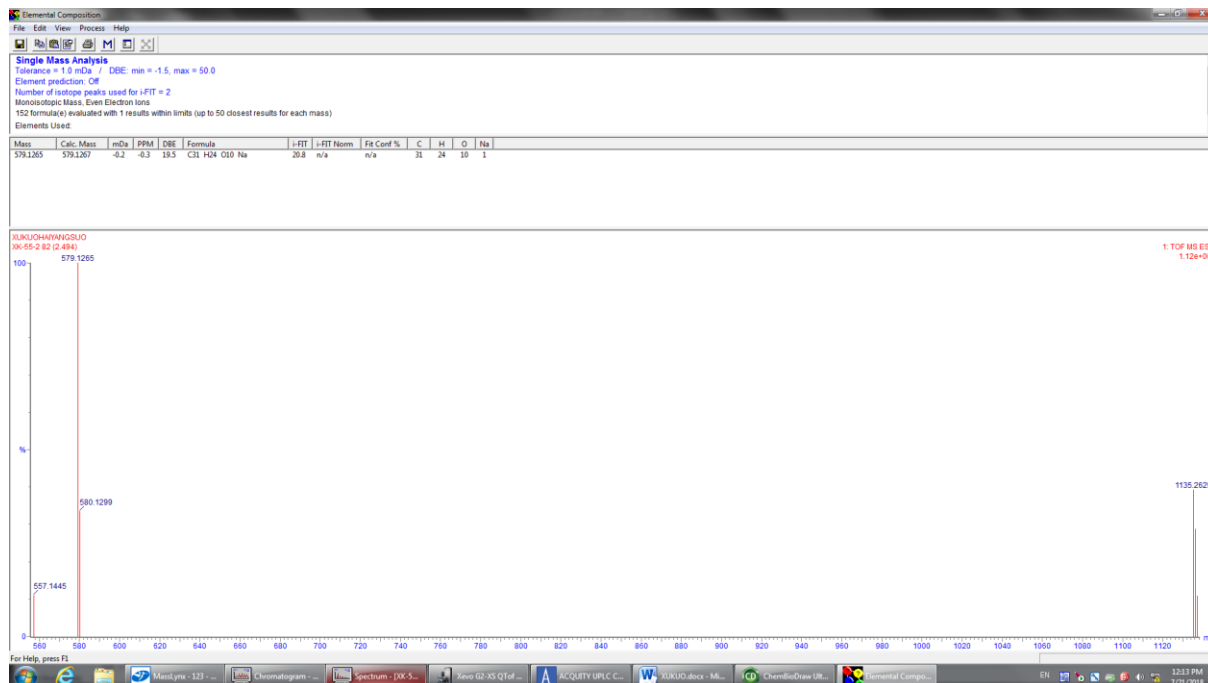


Figure S12. The HR-ESI-MS data of **3**

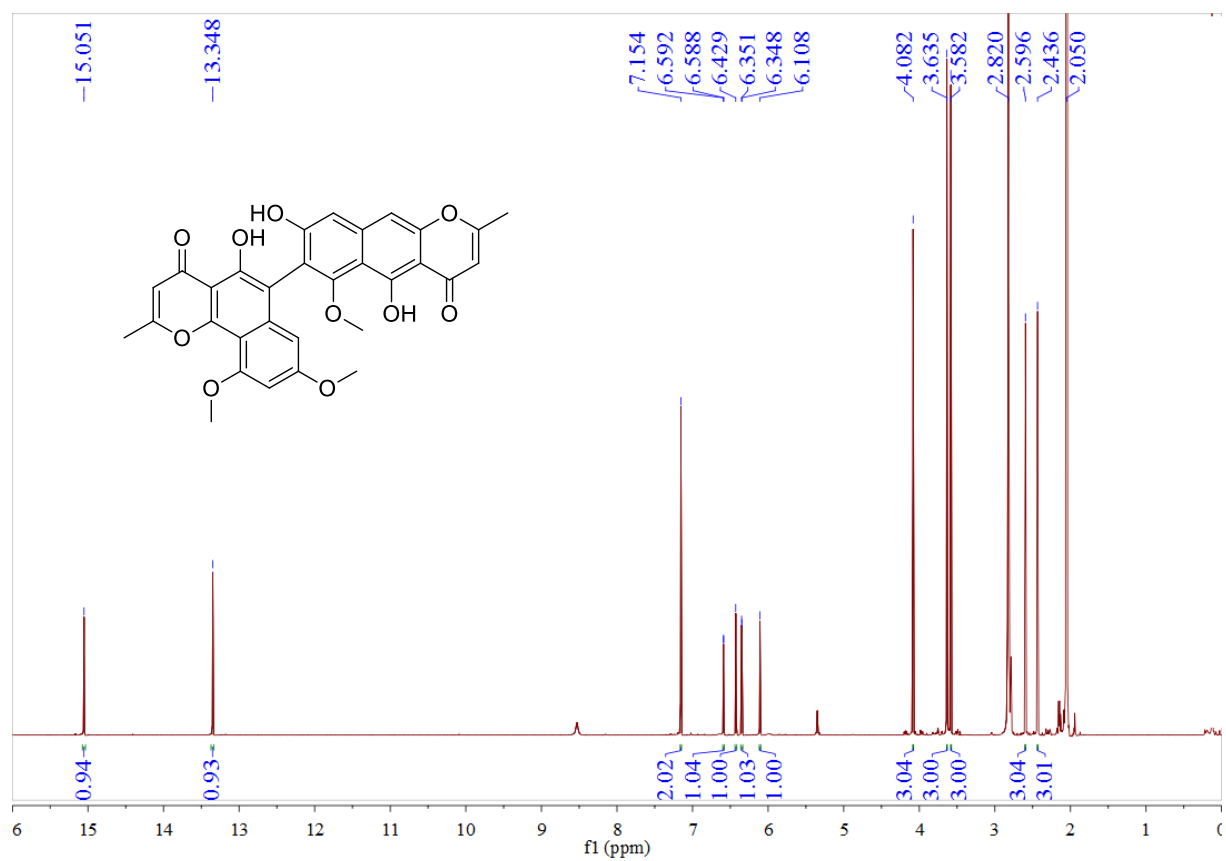


Figure S13. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **3** in acetone- d_6

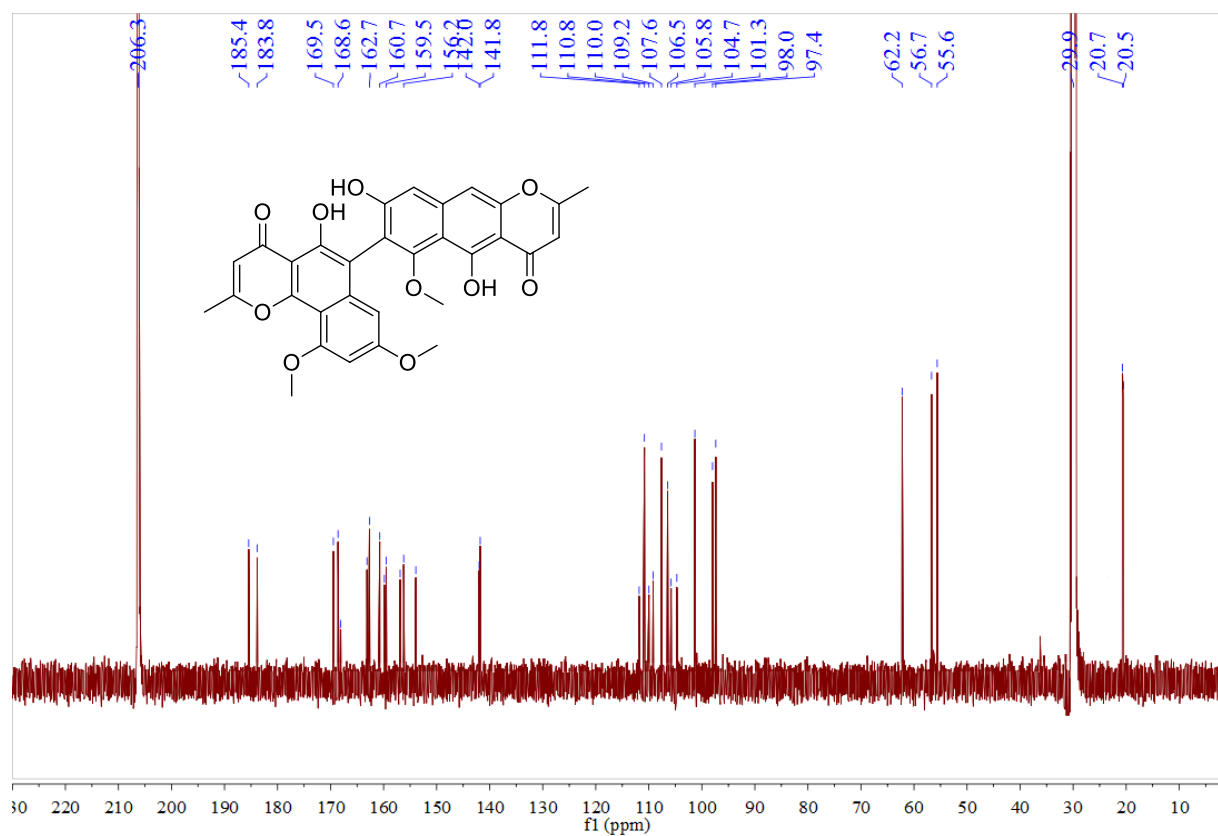


Figure S14. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **3** in acetone- d_6

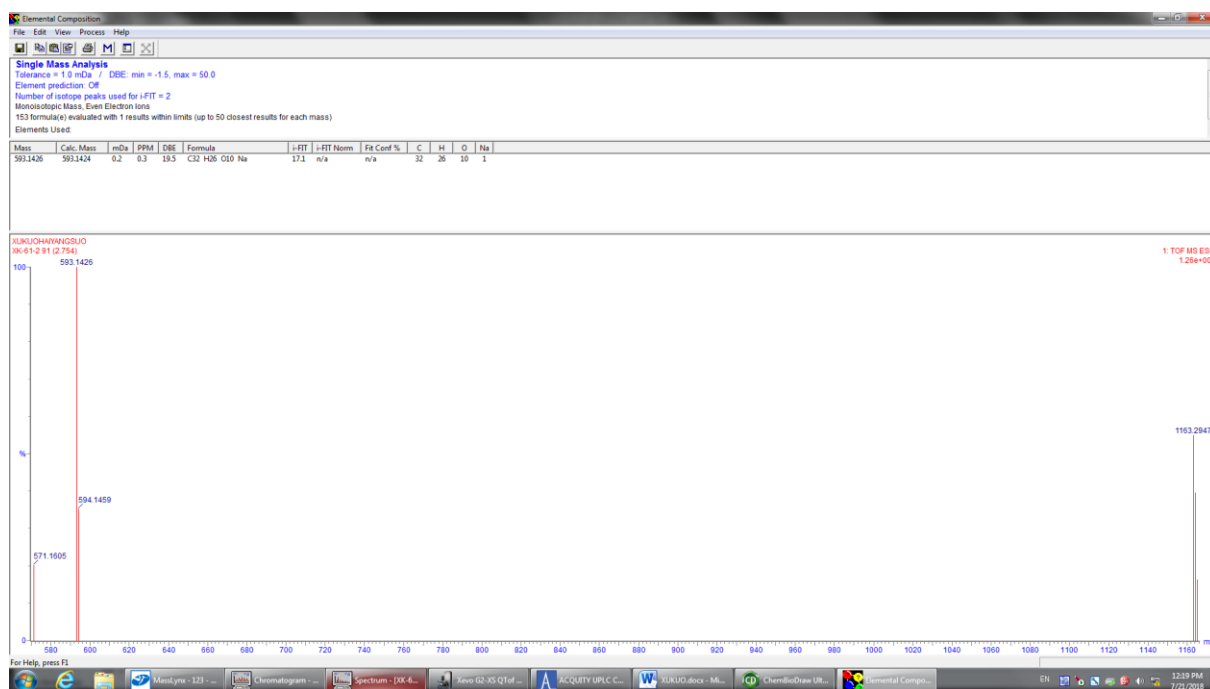


Figure S15. The HR-ESI-MS data of 4

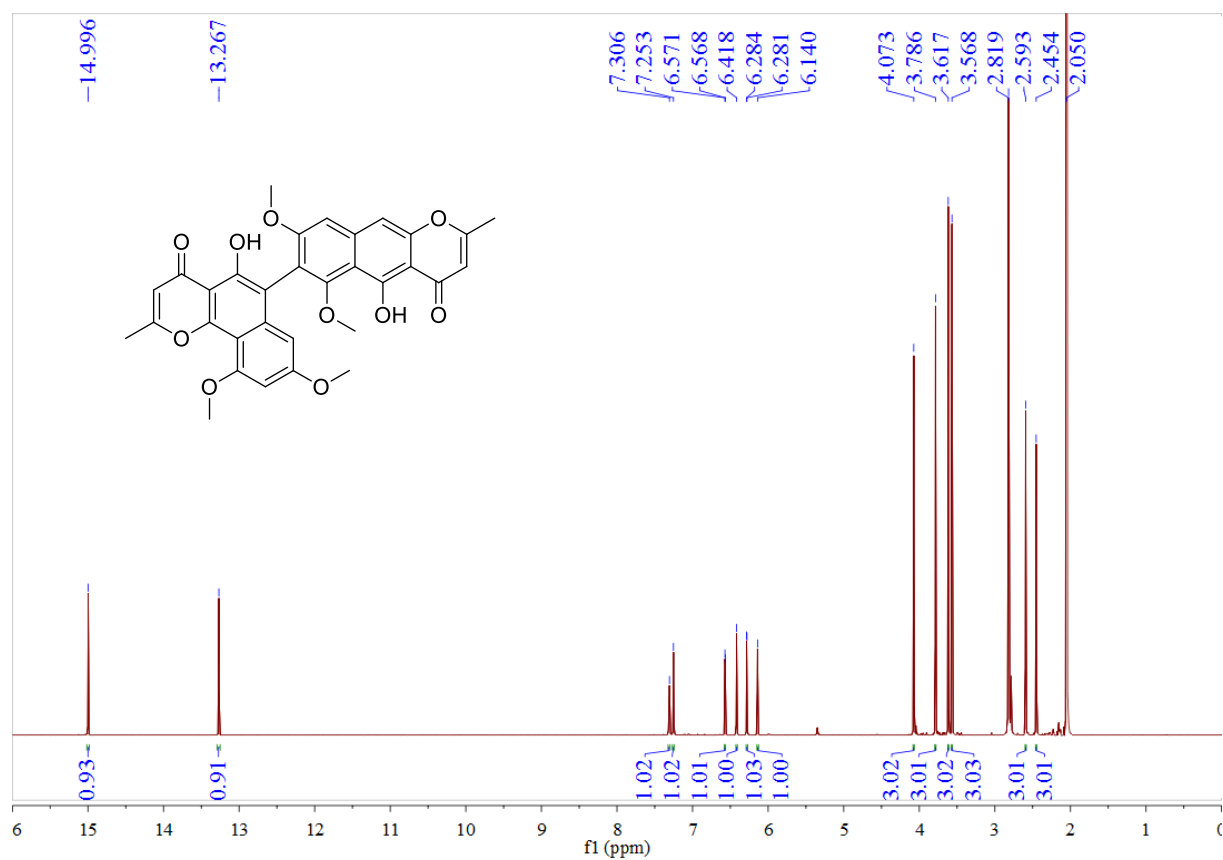


Figure S16. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of 4 in acetone-*d*₆

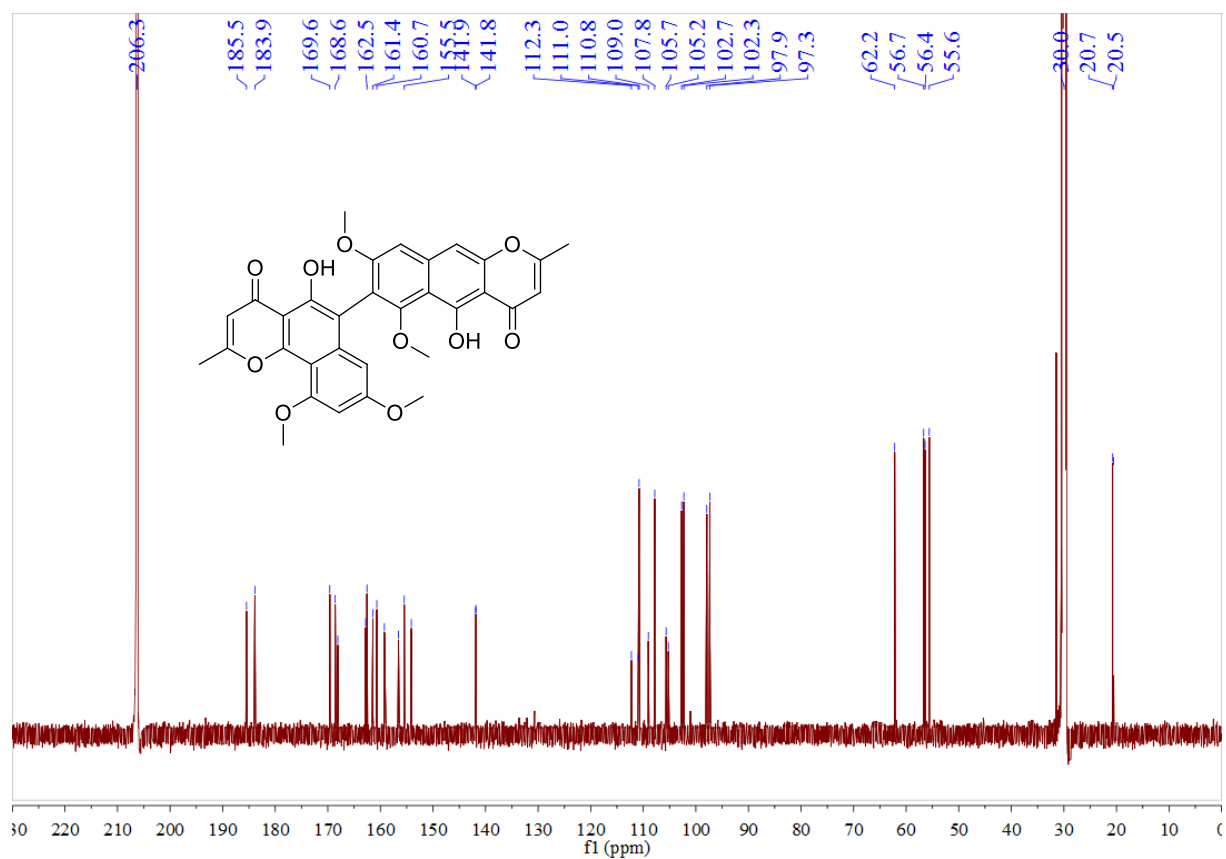


Figure S17. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **4** in acetone- d_6



Figure S18. The HR-ESI-MS data of **5**

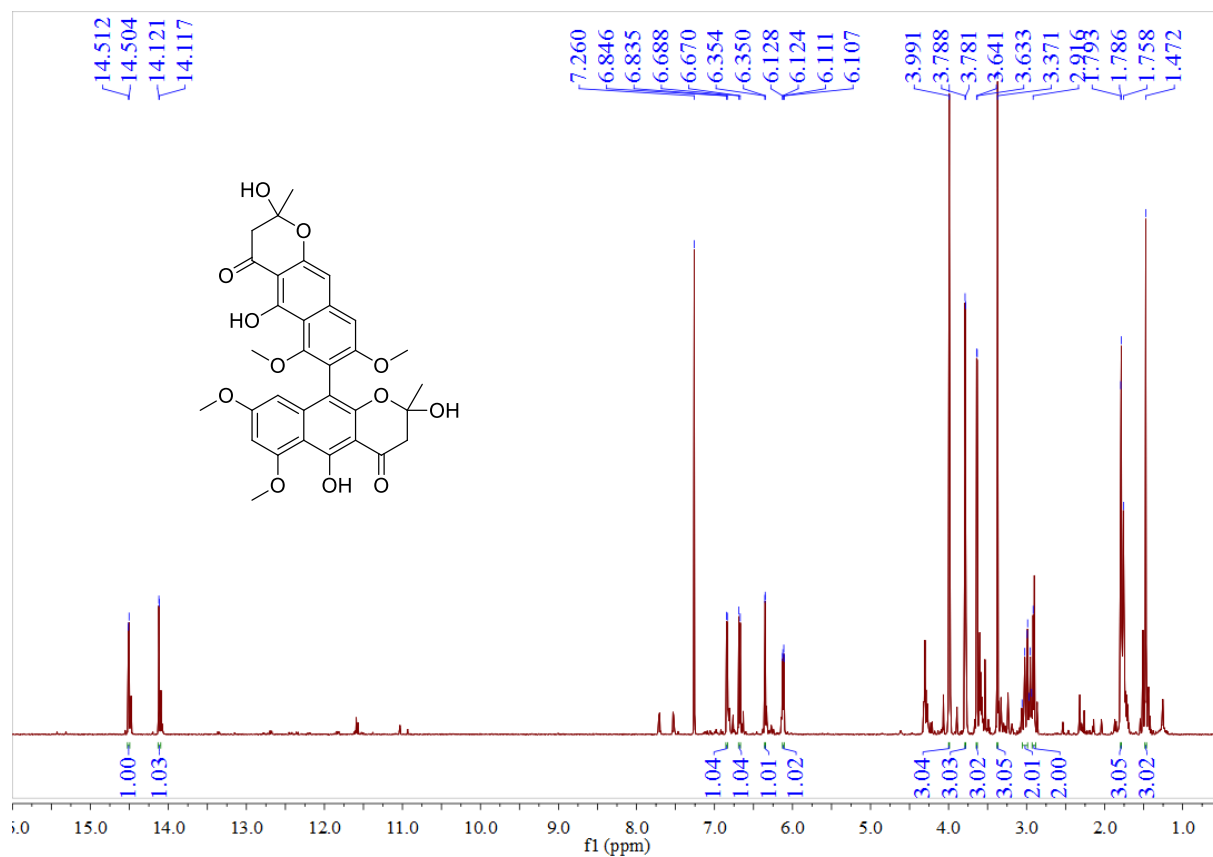


Figure S19. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of 5 in CDCl₃

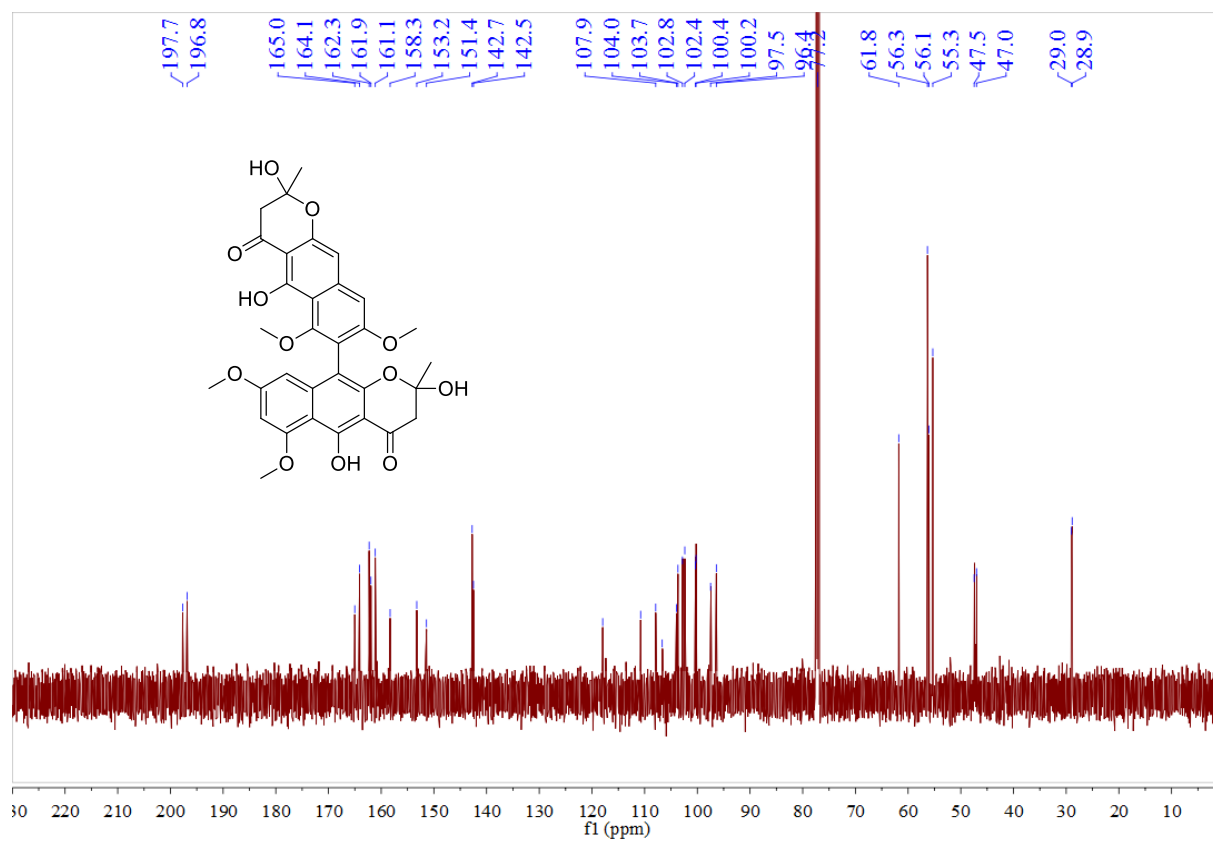


Figure S20. The ¹³C NMR spectrum (150 MHz) of 5 in CDCl₃

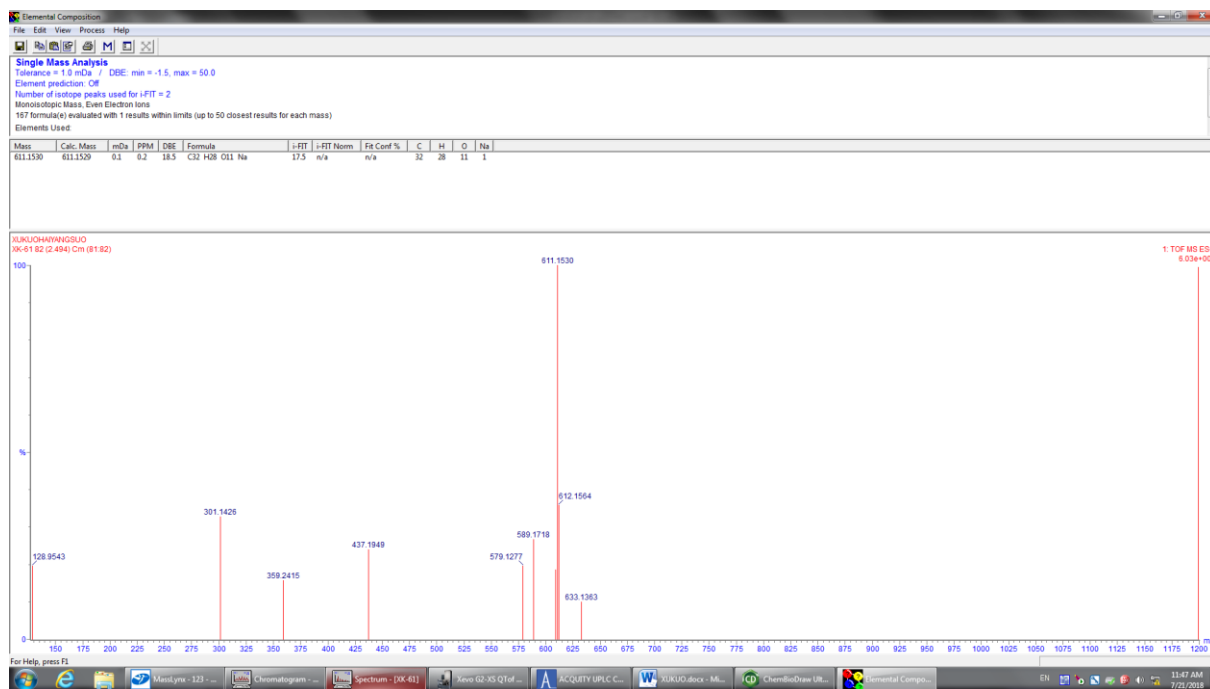


Figure S21. The HR-ESI-MS data of **6**

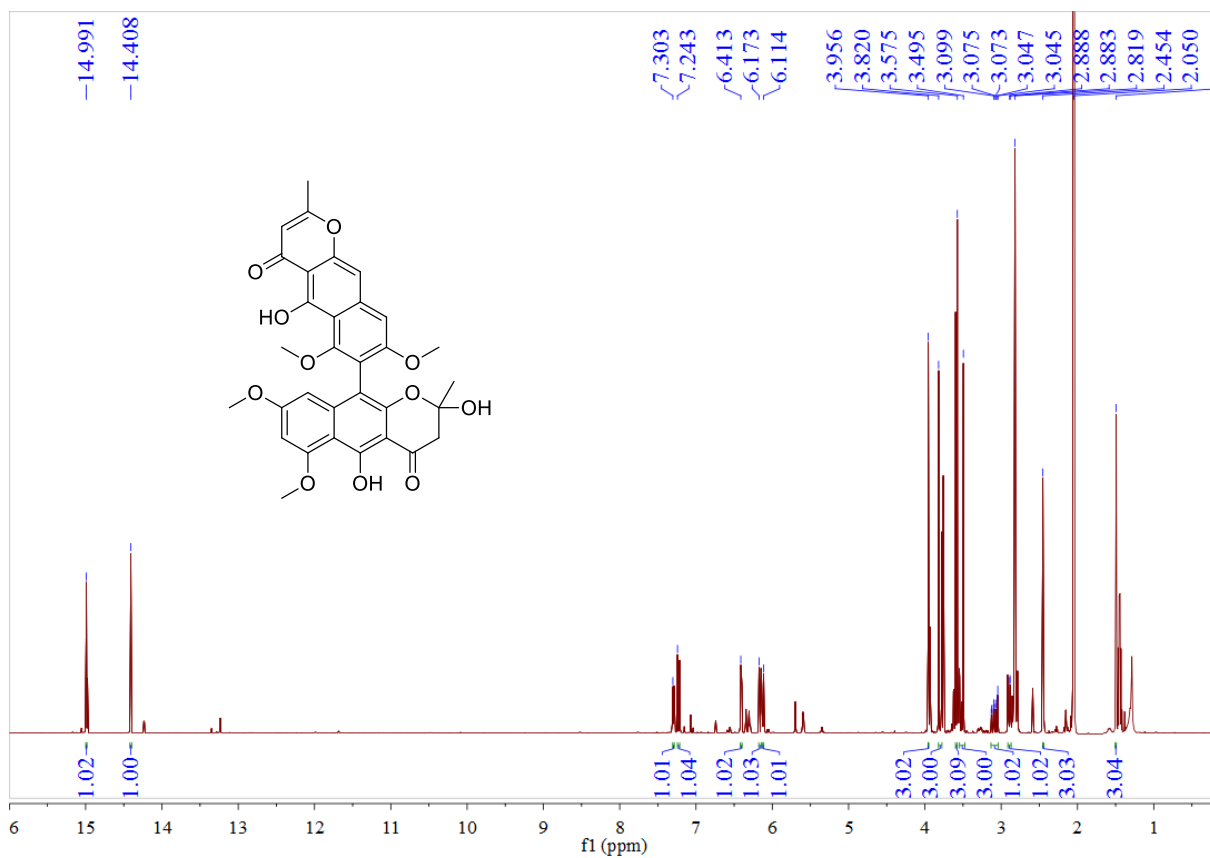


Figure S22. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **6** in acetone-*d*₆

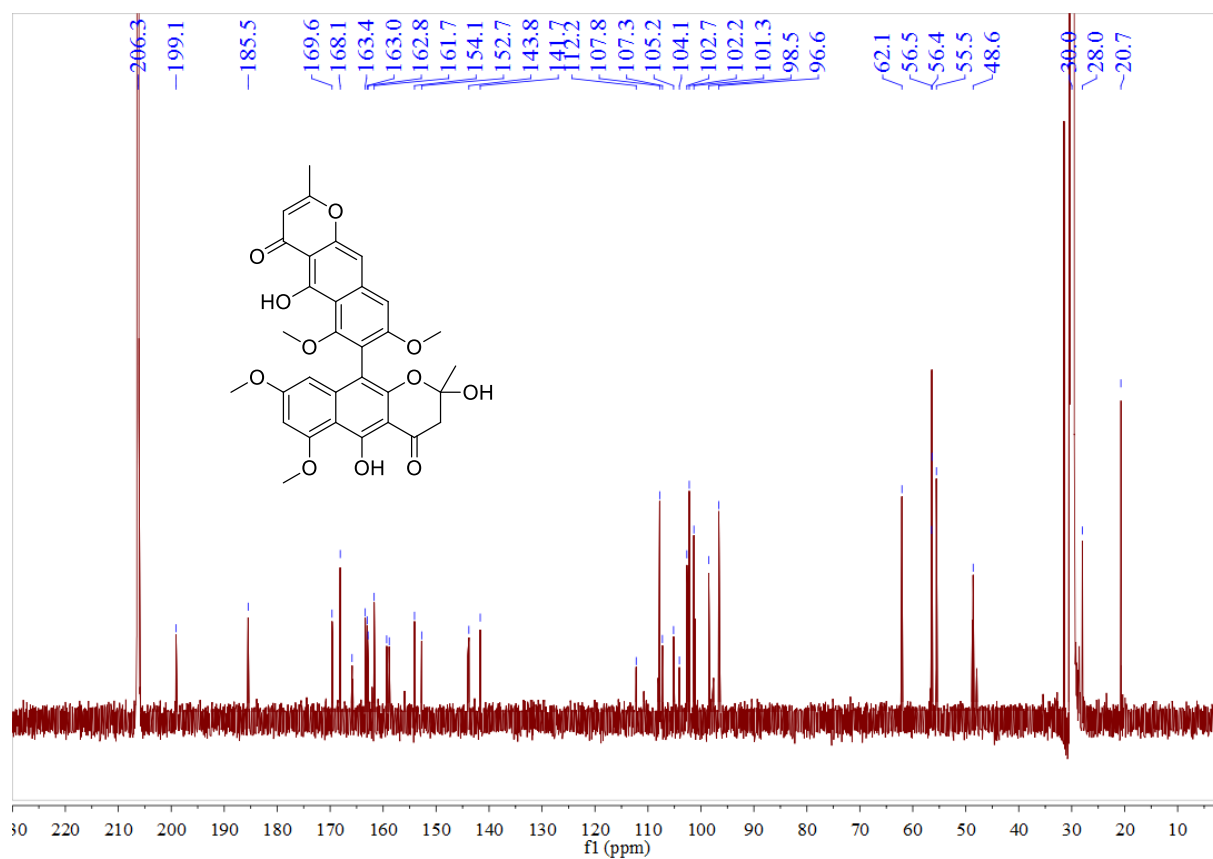


Figure S23. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **6** in acetone- d_6



Figure S24. The HR-ESI-MS data of **7**

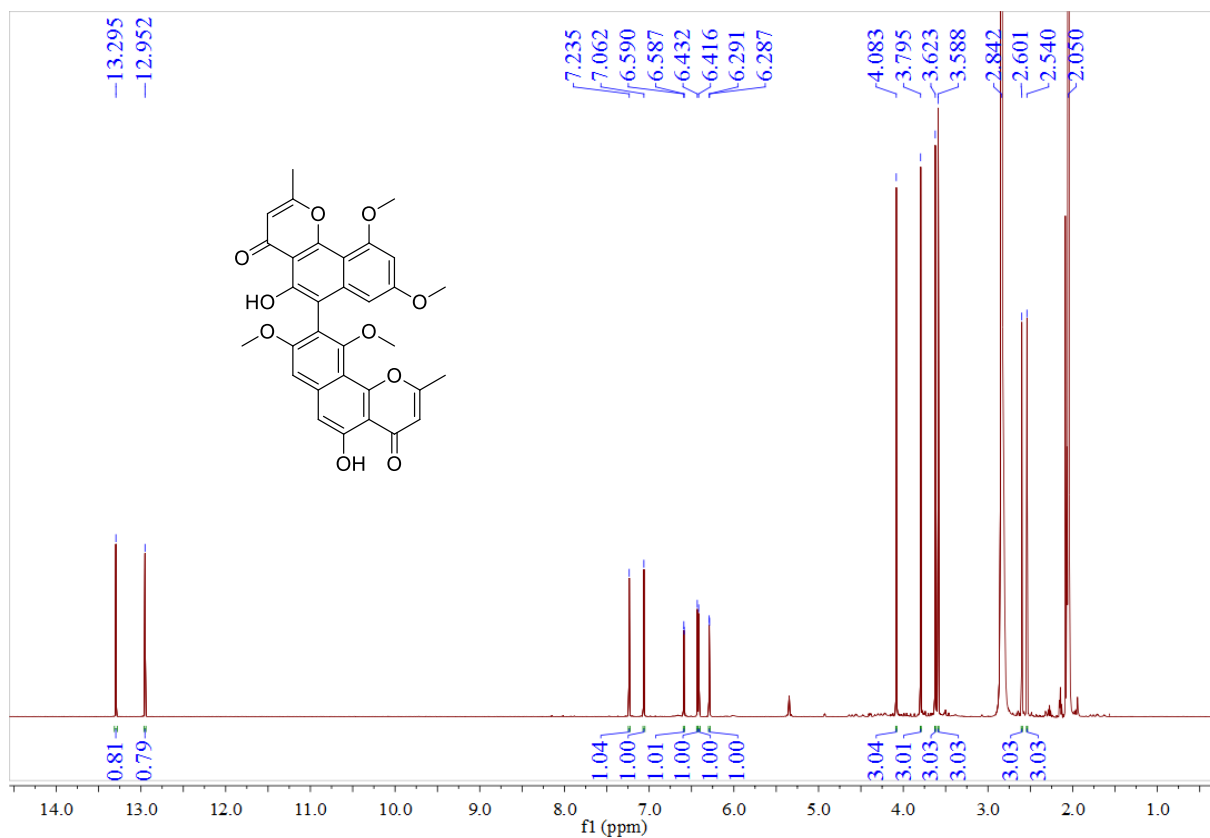


Figure S25. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **7** in acetone- d_6

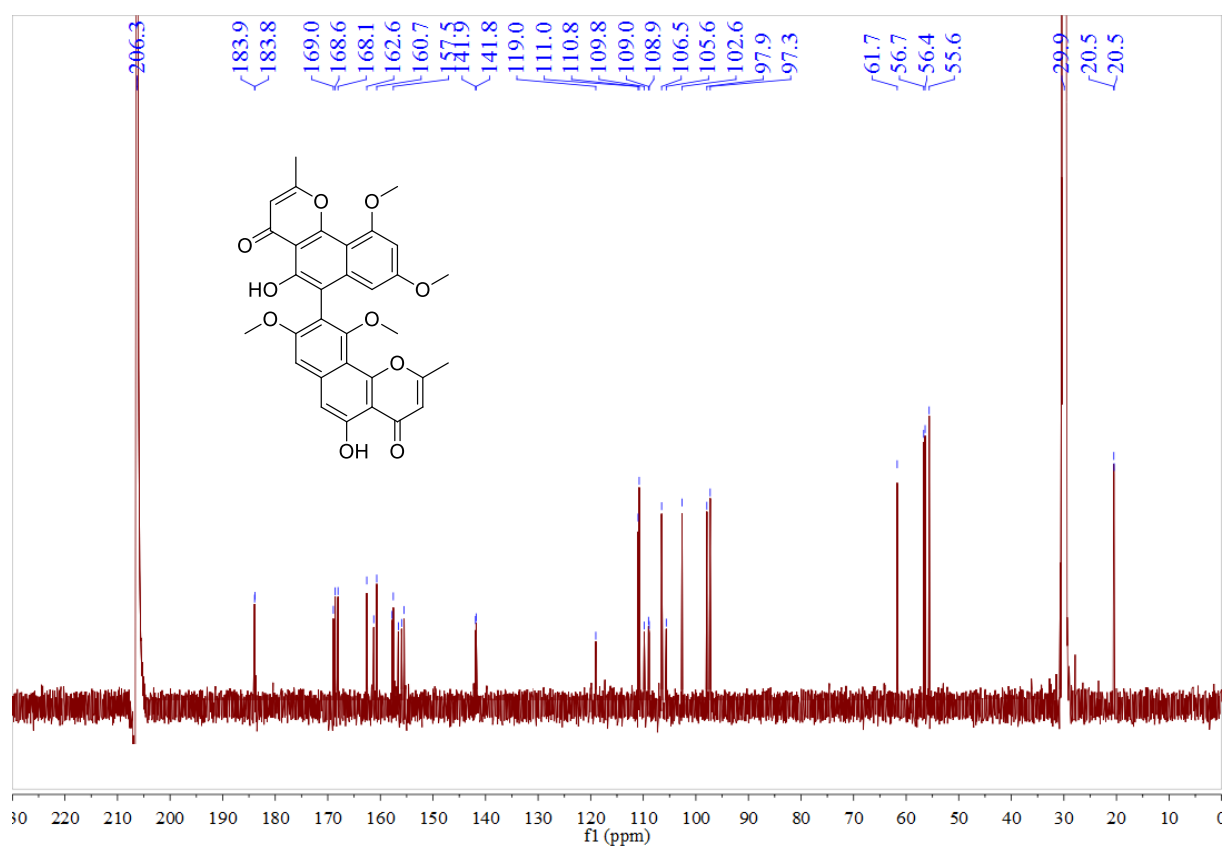


Figure S26. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **7** in acetone- d_6

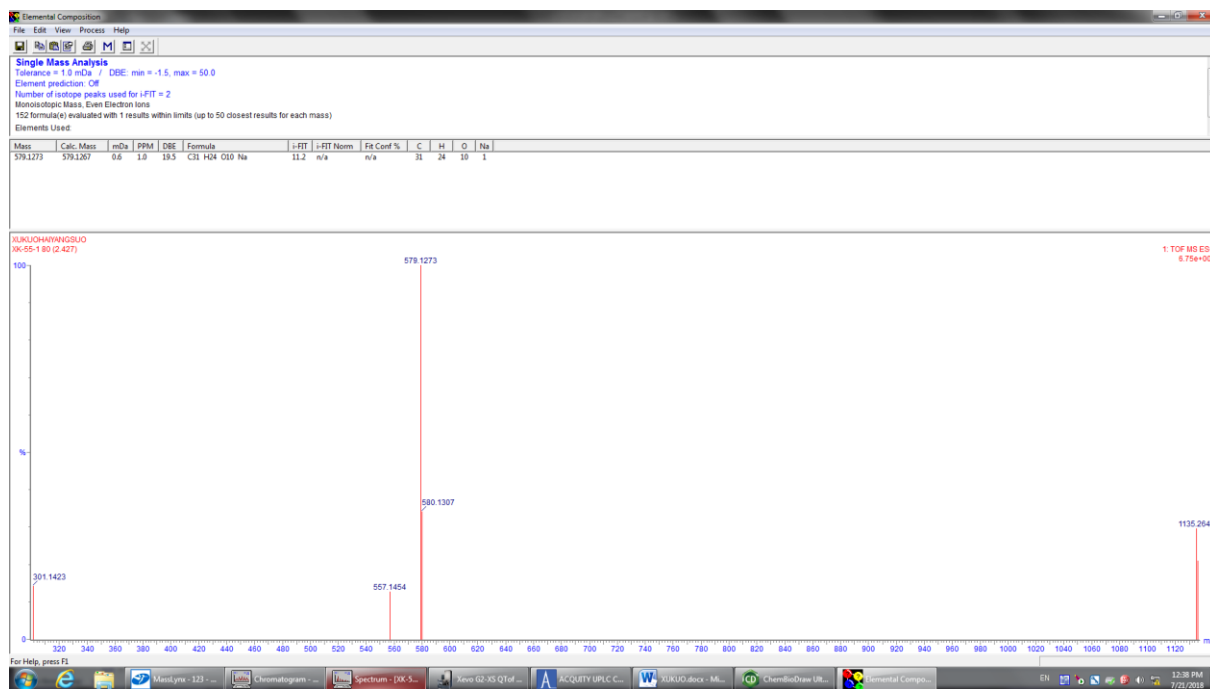


Figure S27. The HR-ESI-MS data of **8**

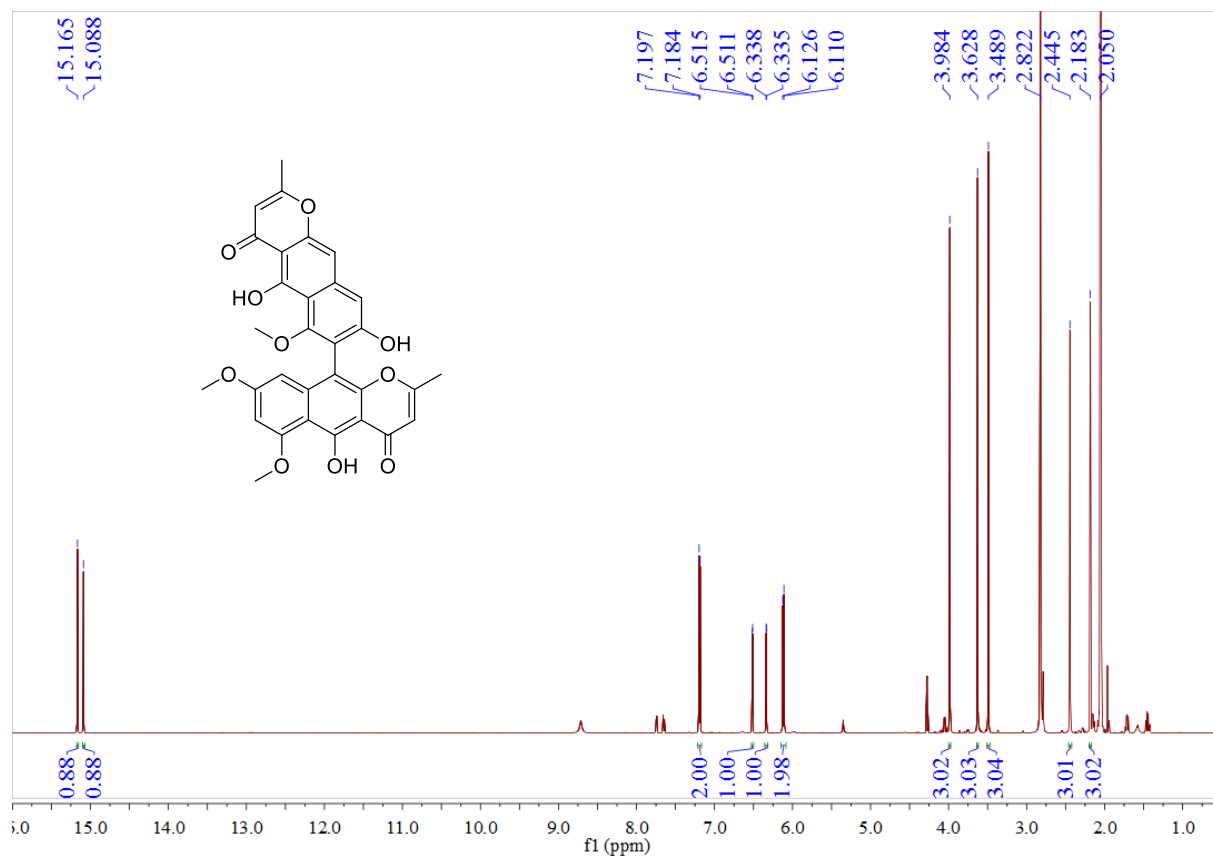


Figure S28. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **8** in acetone-*d*₆

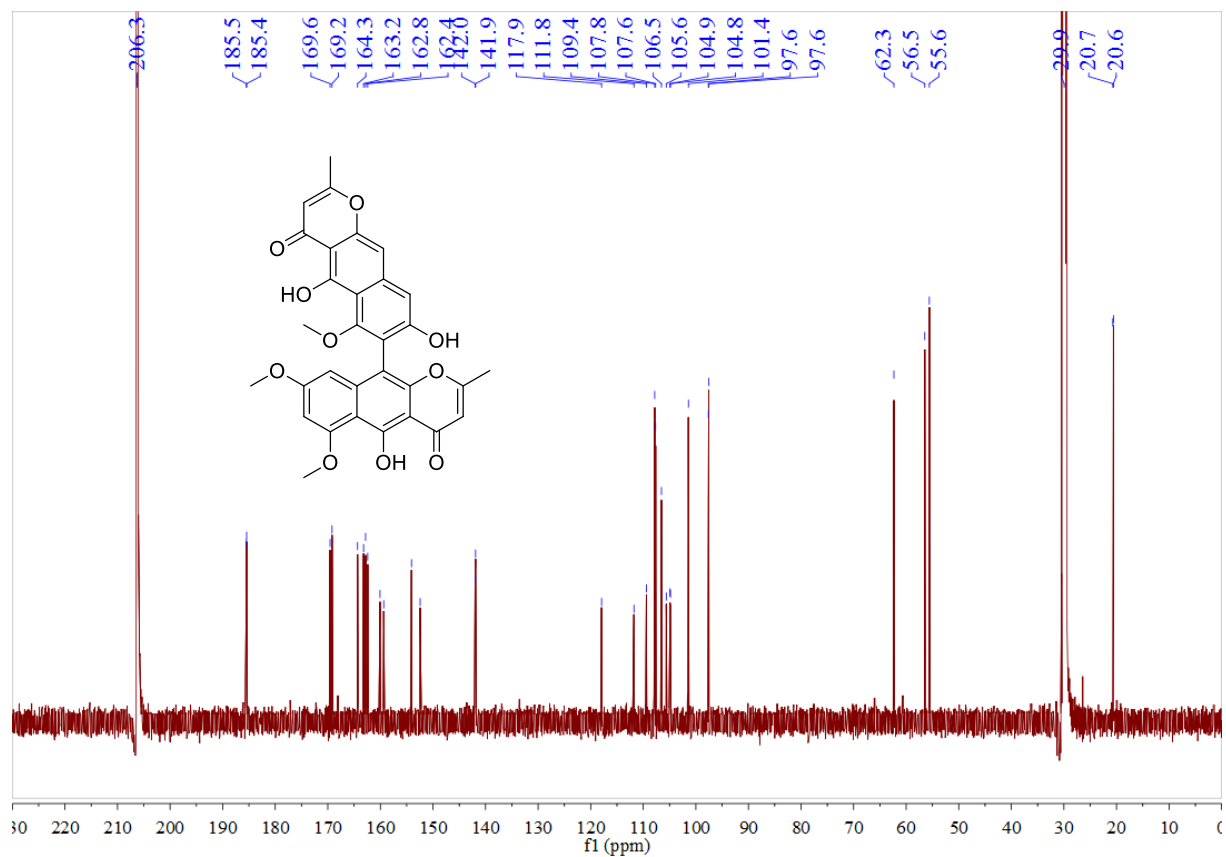


Figure S29. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **8** in acetone- d_6

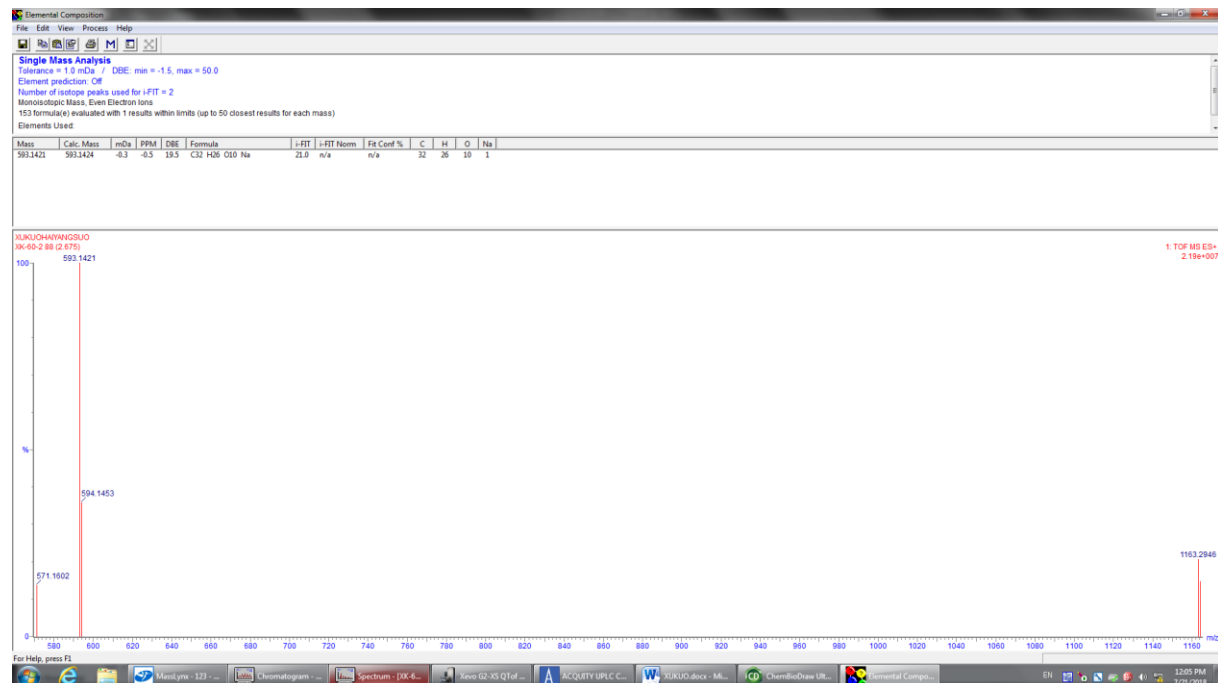


Figure S30. The HR-ESI-MS data of **9**

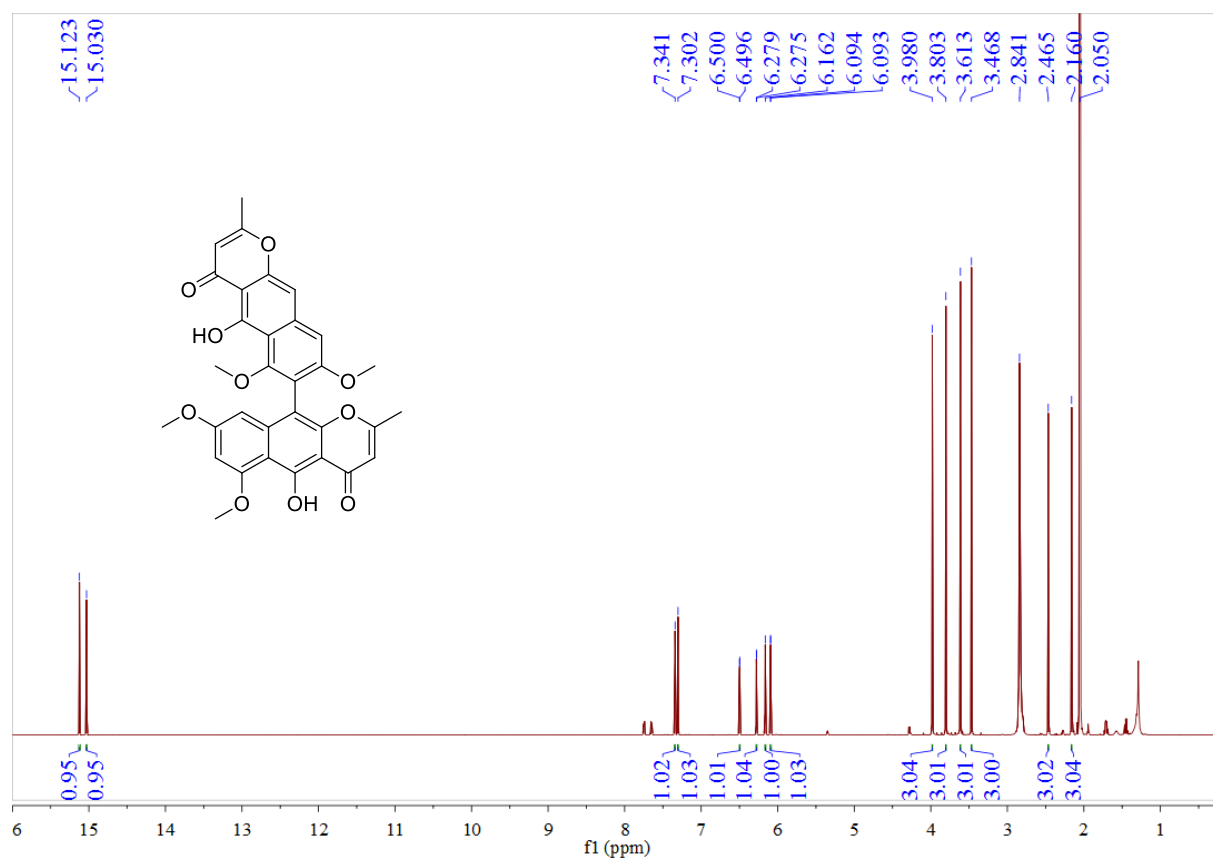


Figure S31. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **9** in acetone-*d*₆

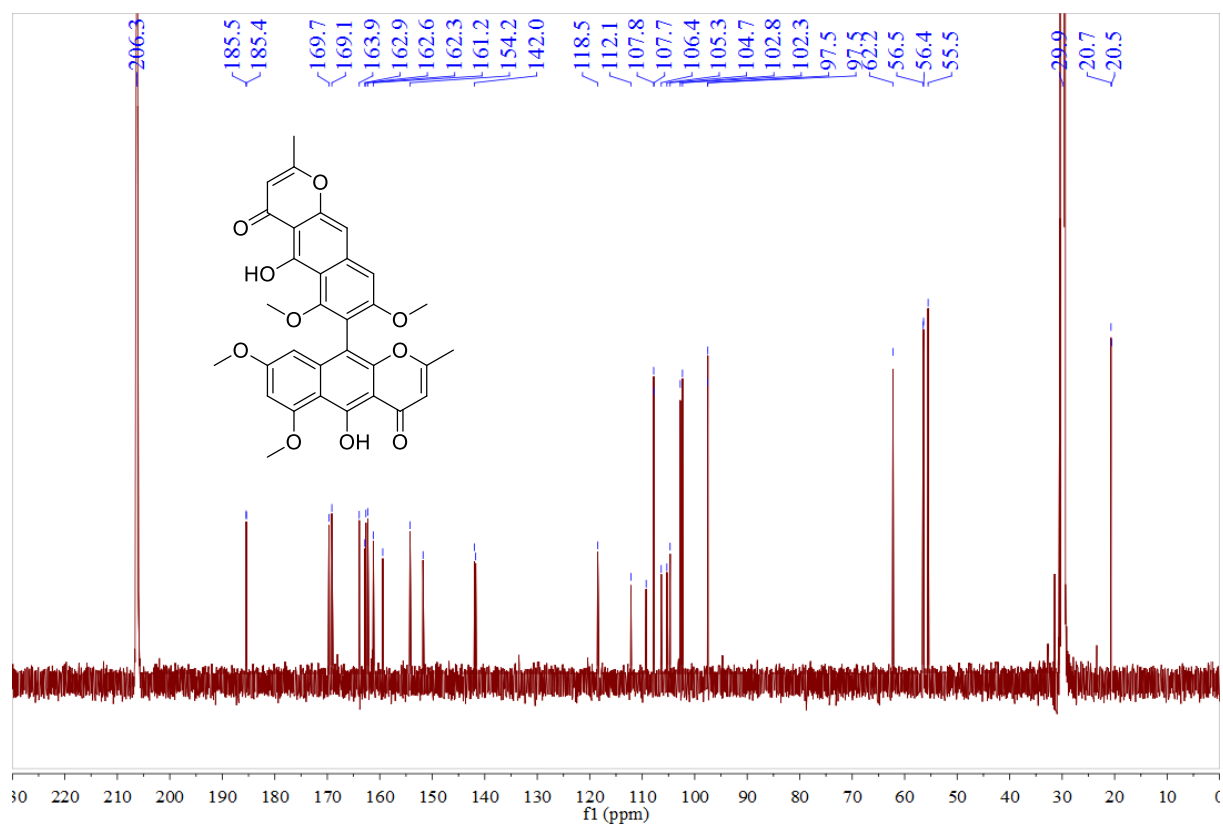


Figure S32. The ¹³C NMR spectrum (150 MHz) of **9** in acetone-*d*₆

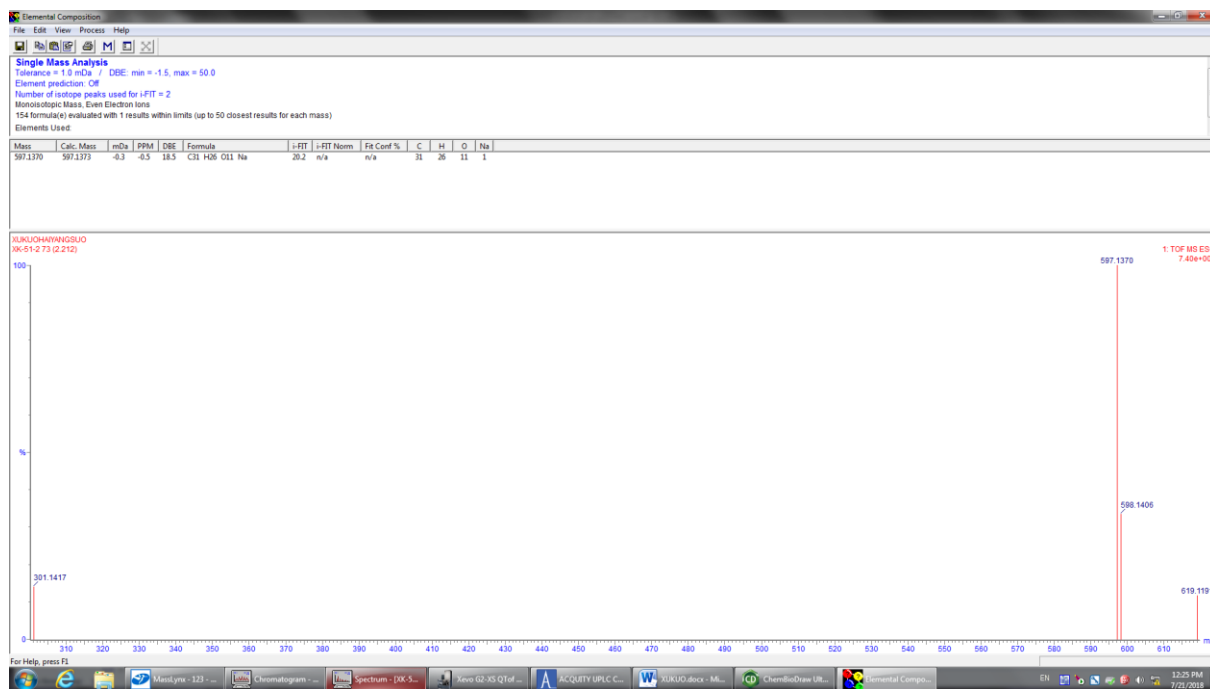


Figure S33. The HR-ESI-MS data of **10**

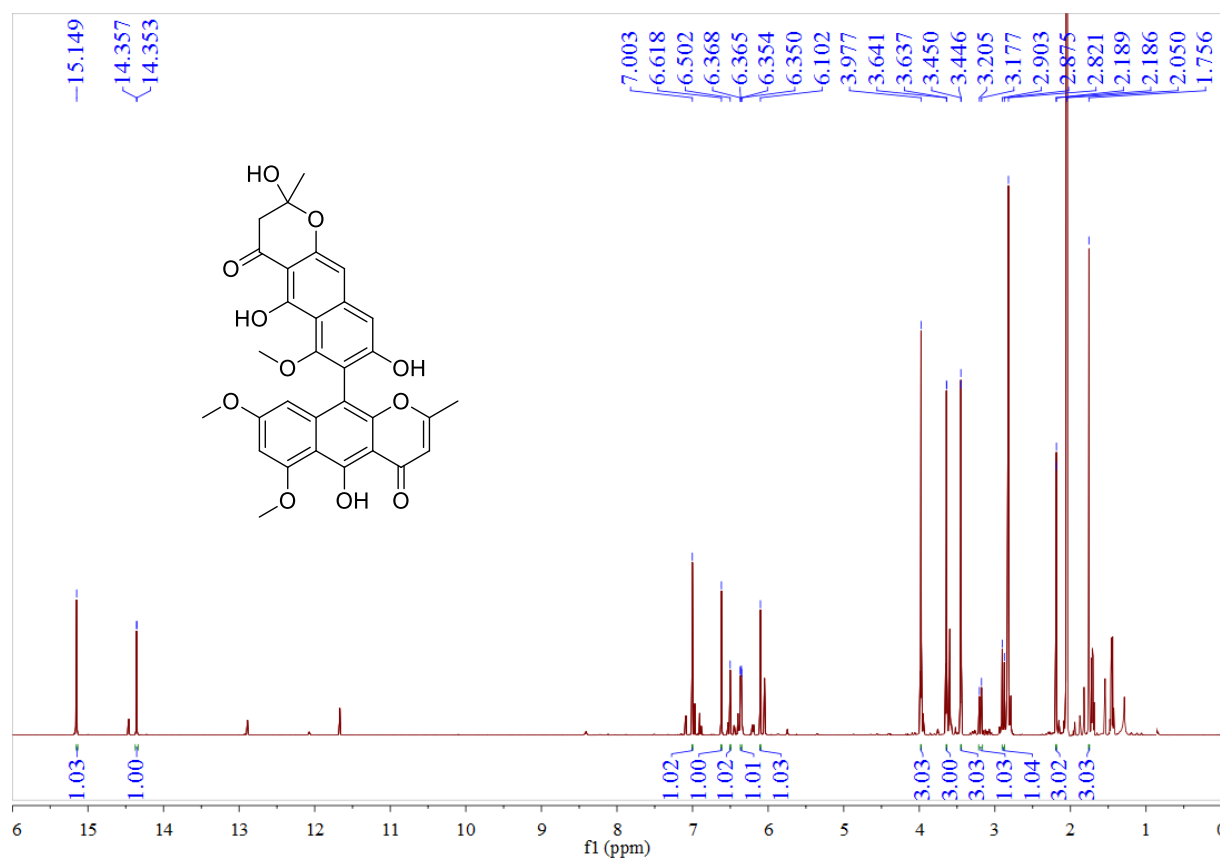


Figure S34. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **10** in acetone-*d*₆

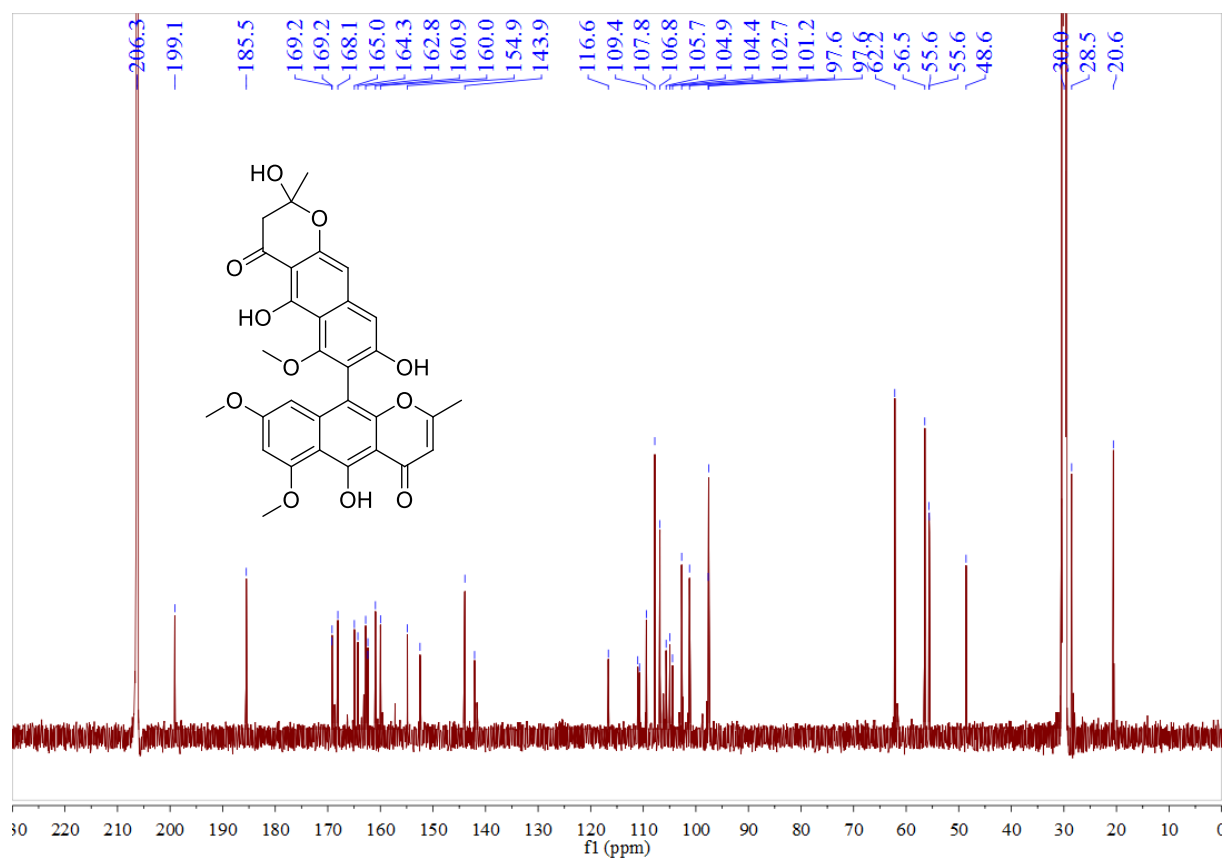


Figure S35. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **10** in acetone- d_6

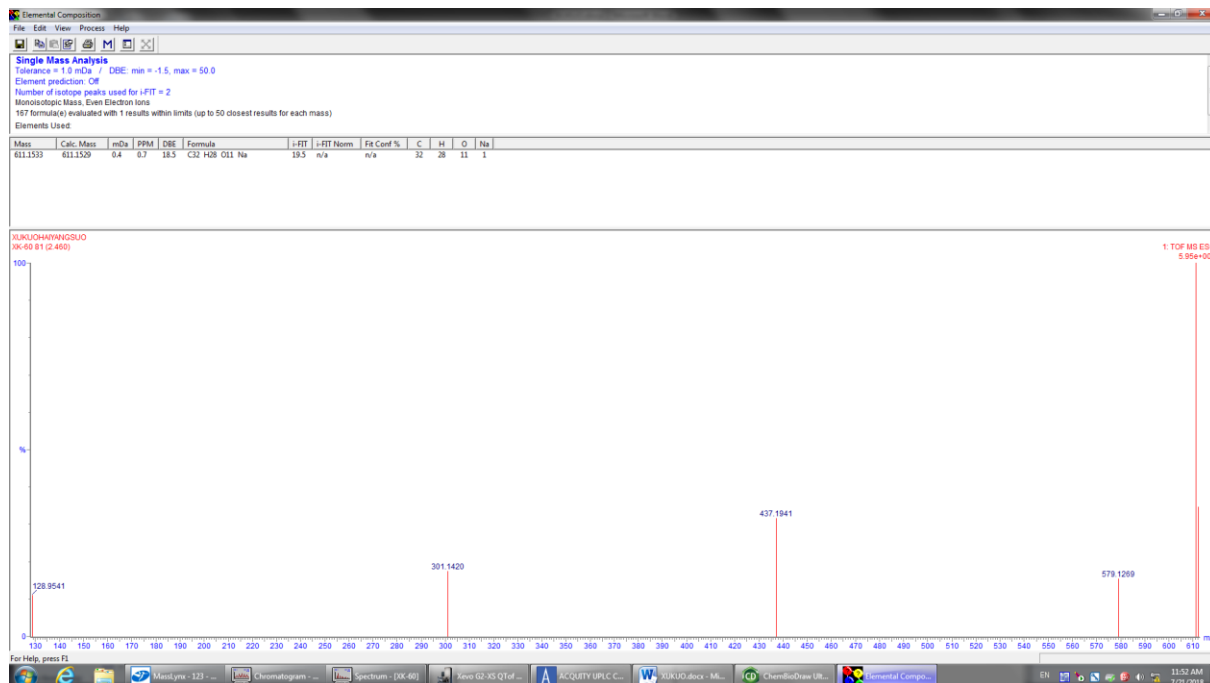


Figure S36. The HR-ESI-MS data of **11**

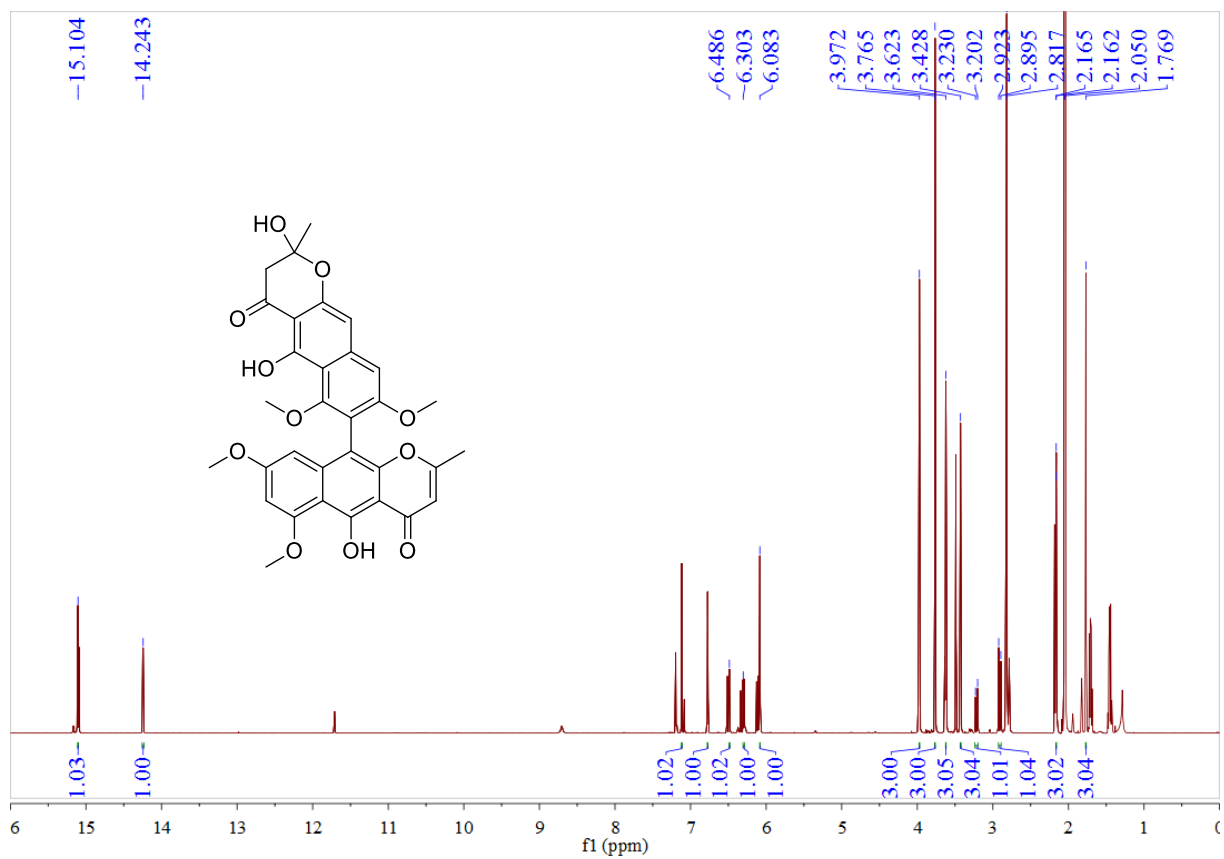


Figure S37. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **11** in acetone-*d*₆

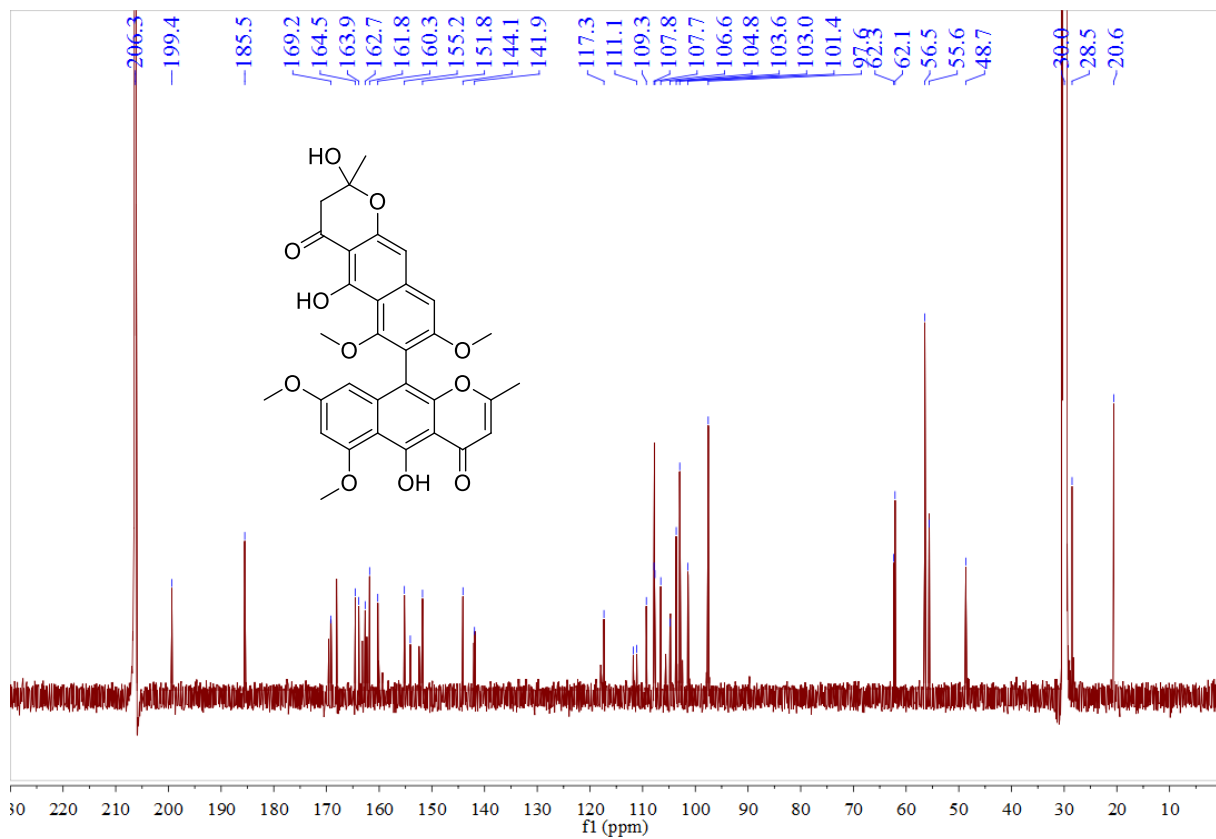


Figure S38. The ¹³C NMR spectrum (150 MHz) of **11** in acetone-*d*₆

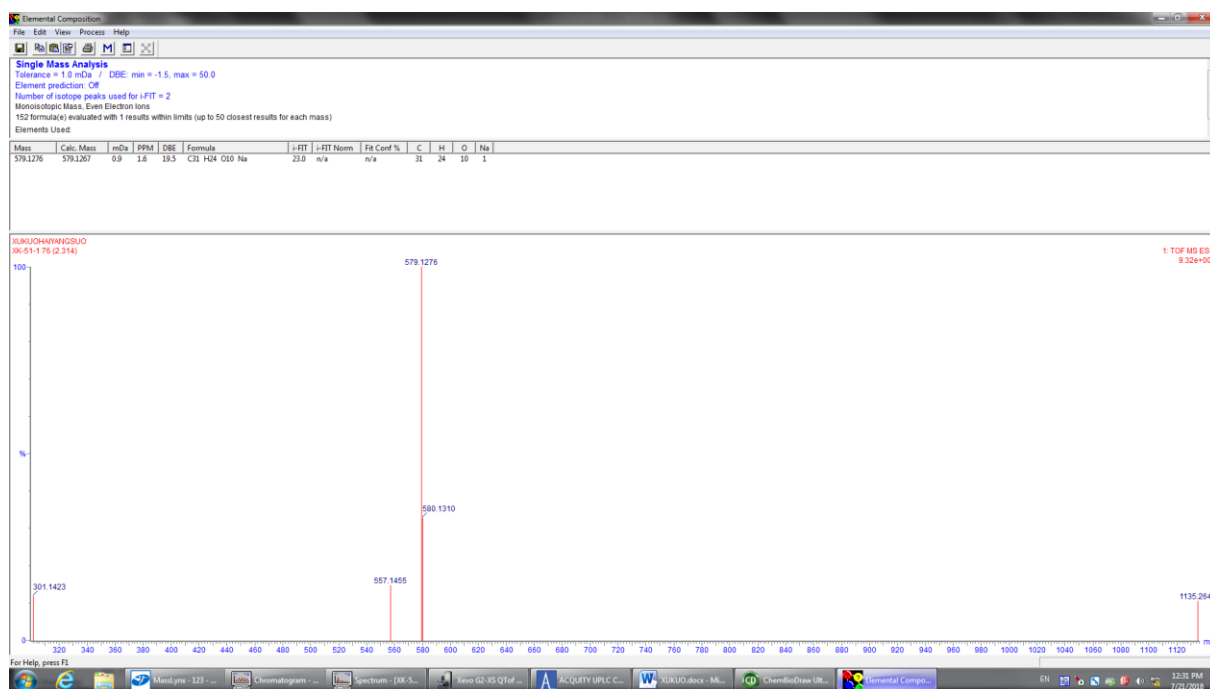


Figure S39. The HR-ESI-MS data of **12**

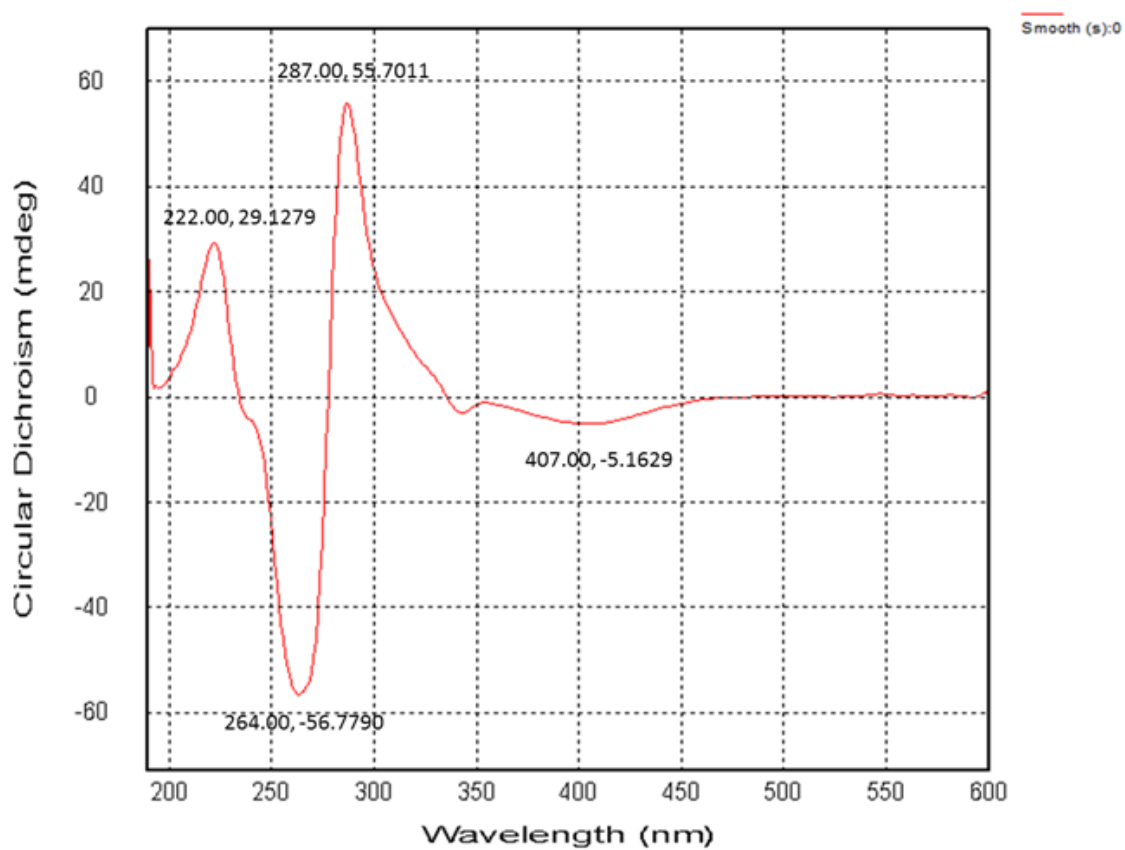


Figure S40. The ECD spectrum of **12** in MeOH

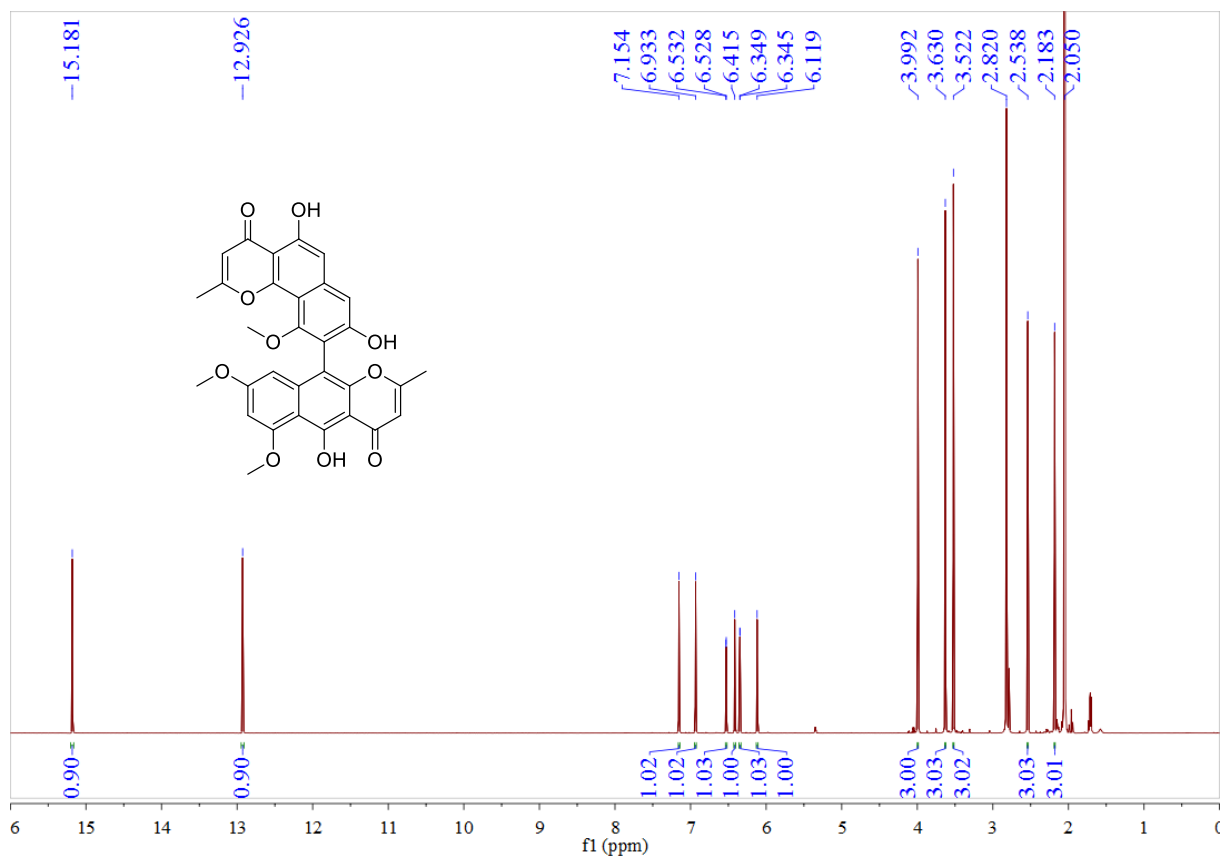


Figure S41. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **12** in acetone- d_6

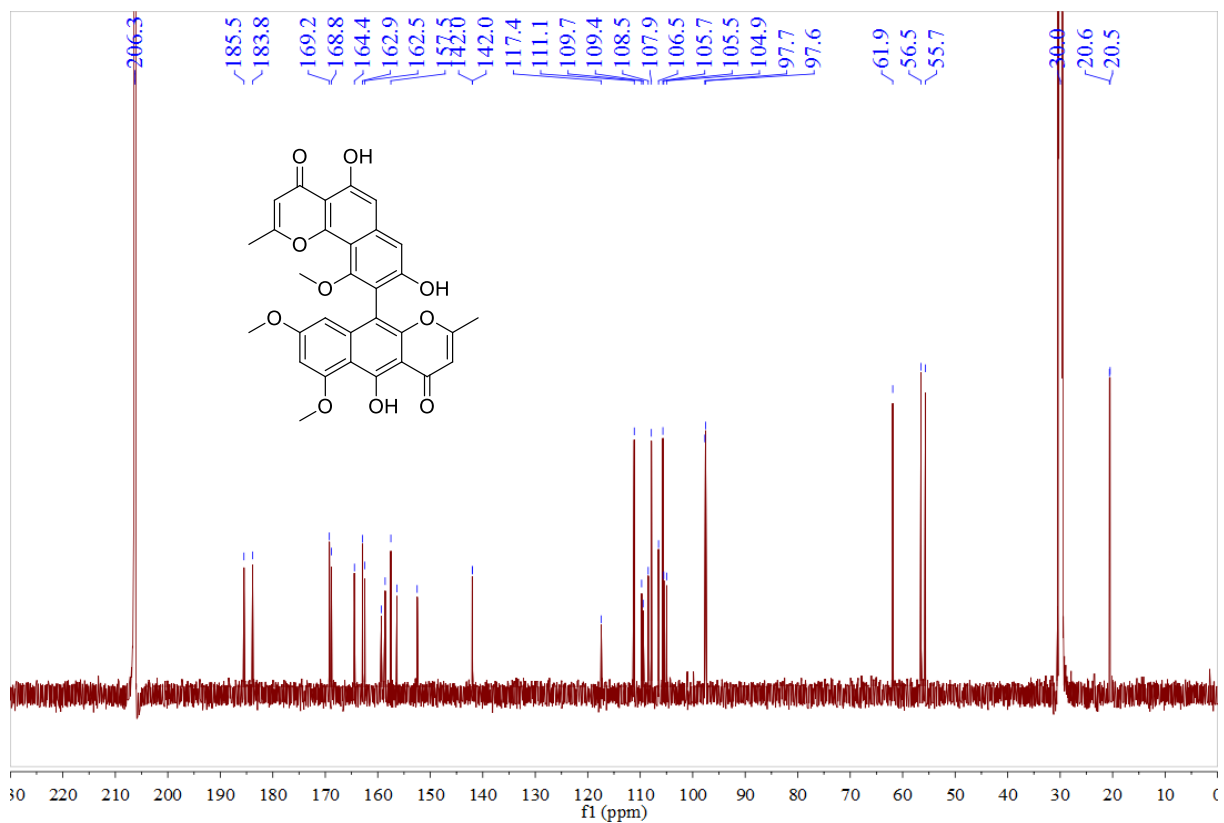


Figure S42. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **12** in acetone- d_6

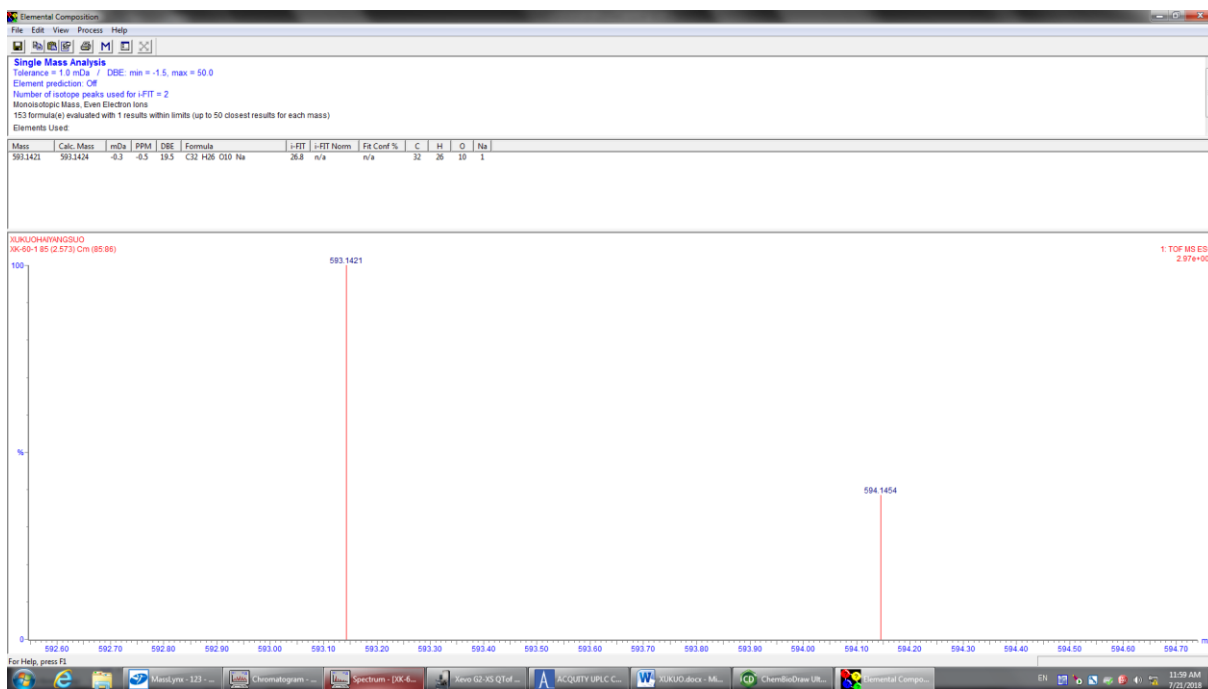


Figure S43. The HR-ESI-MS data of **13**

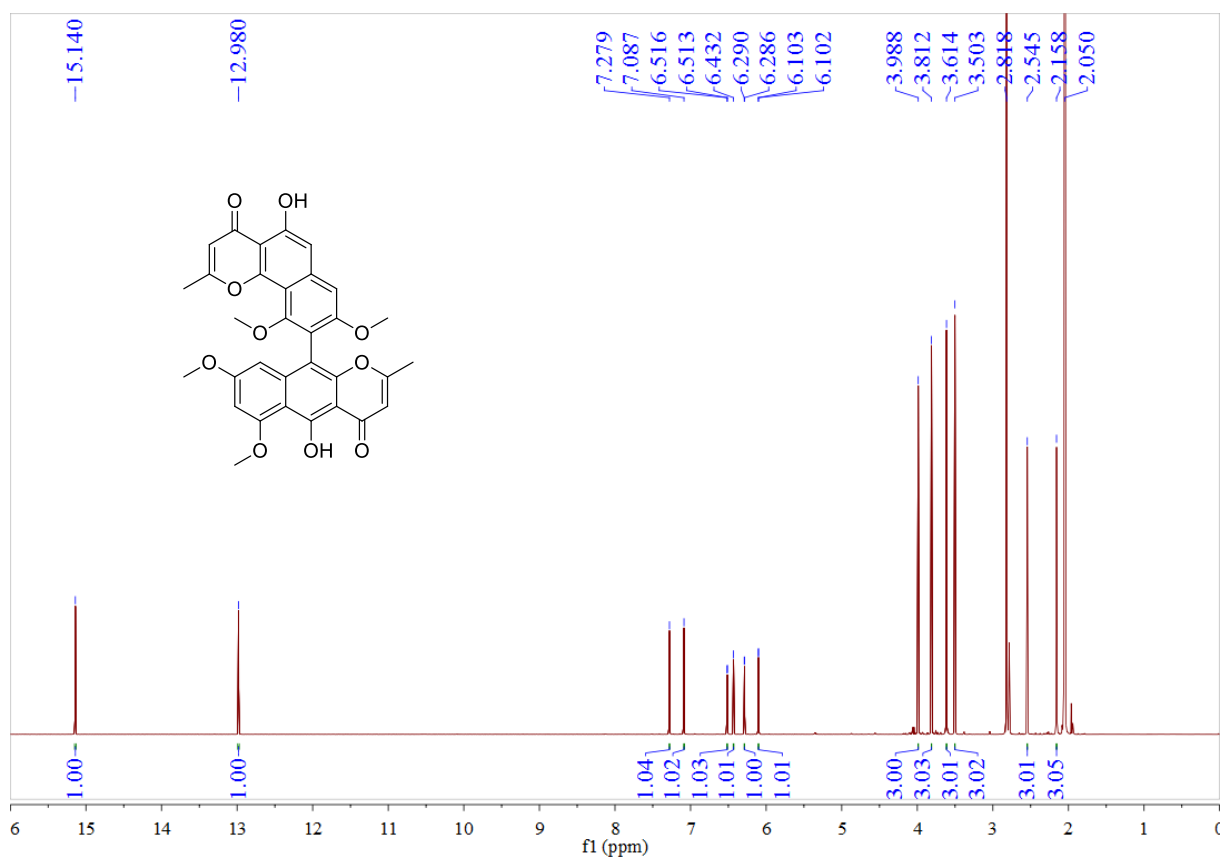


Figure S44. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of **13** in acetone-*d*₆

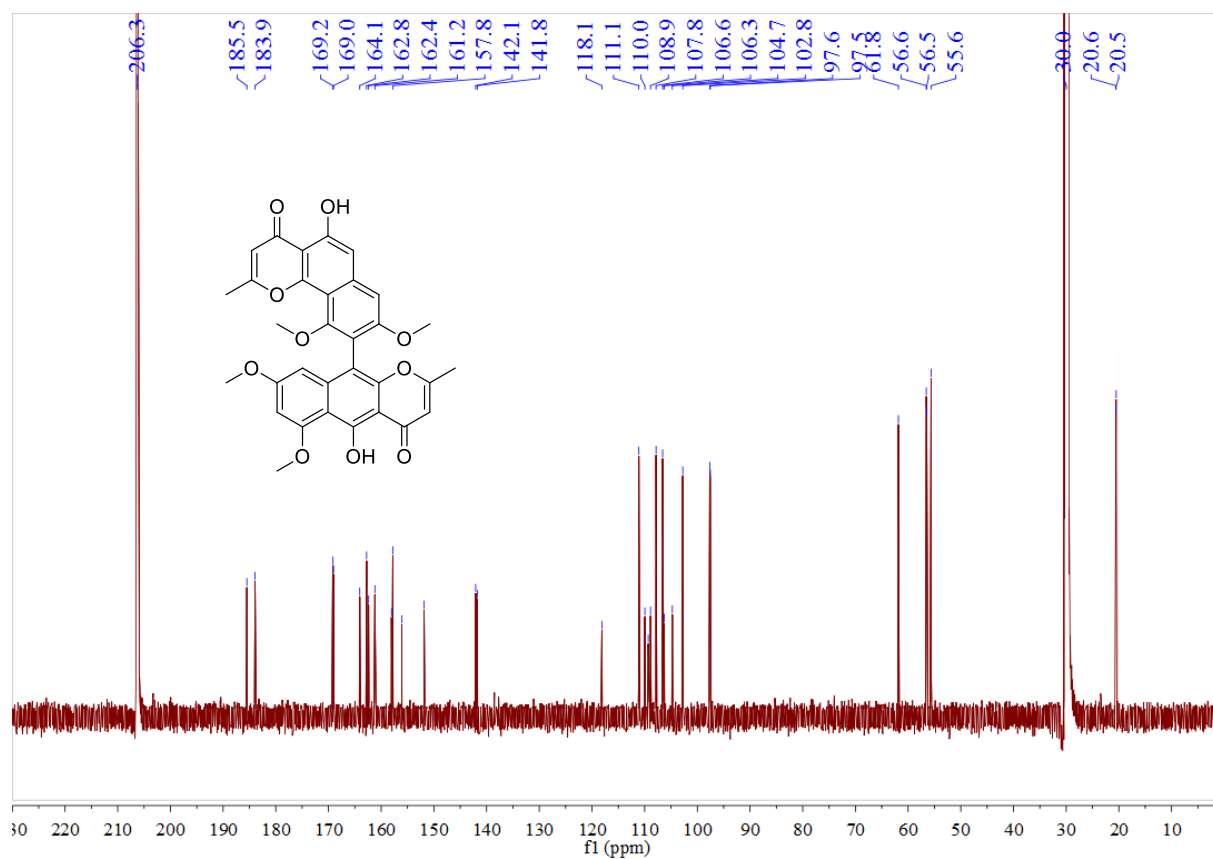


Figure S45. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of 13 in acetone- d_6

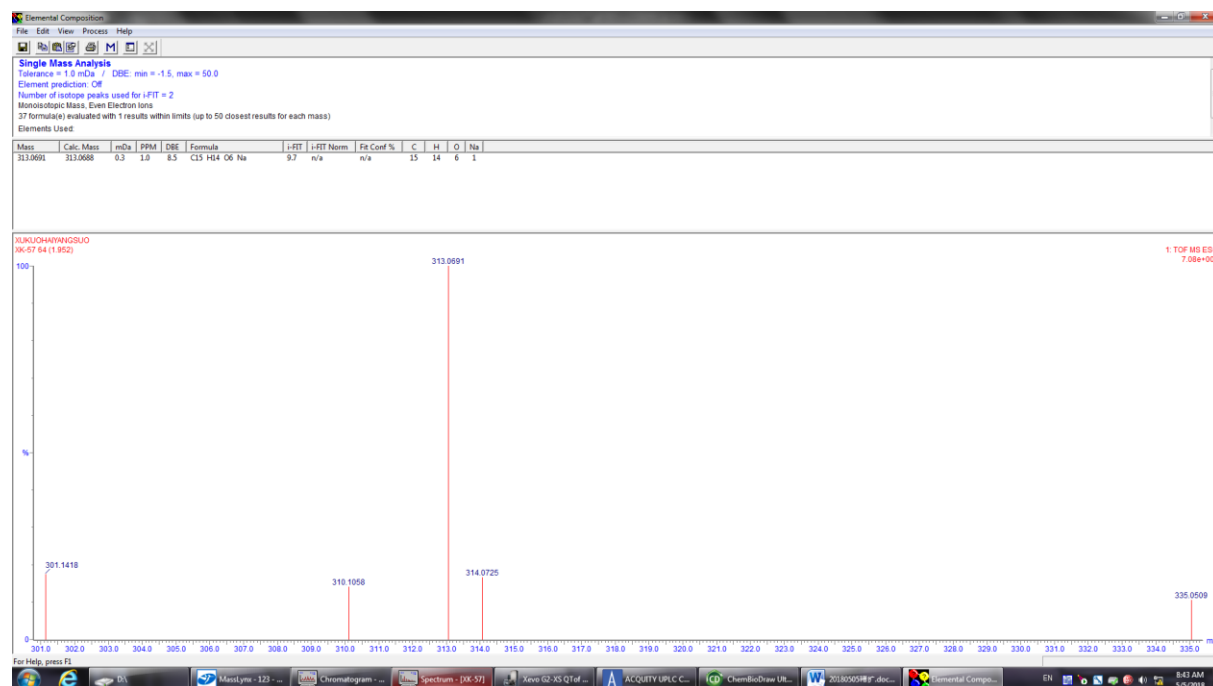


Figure S46. The HR-ESI-MS data of 14

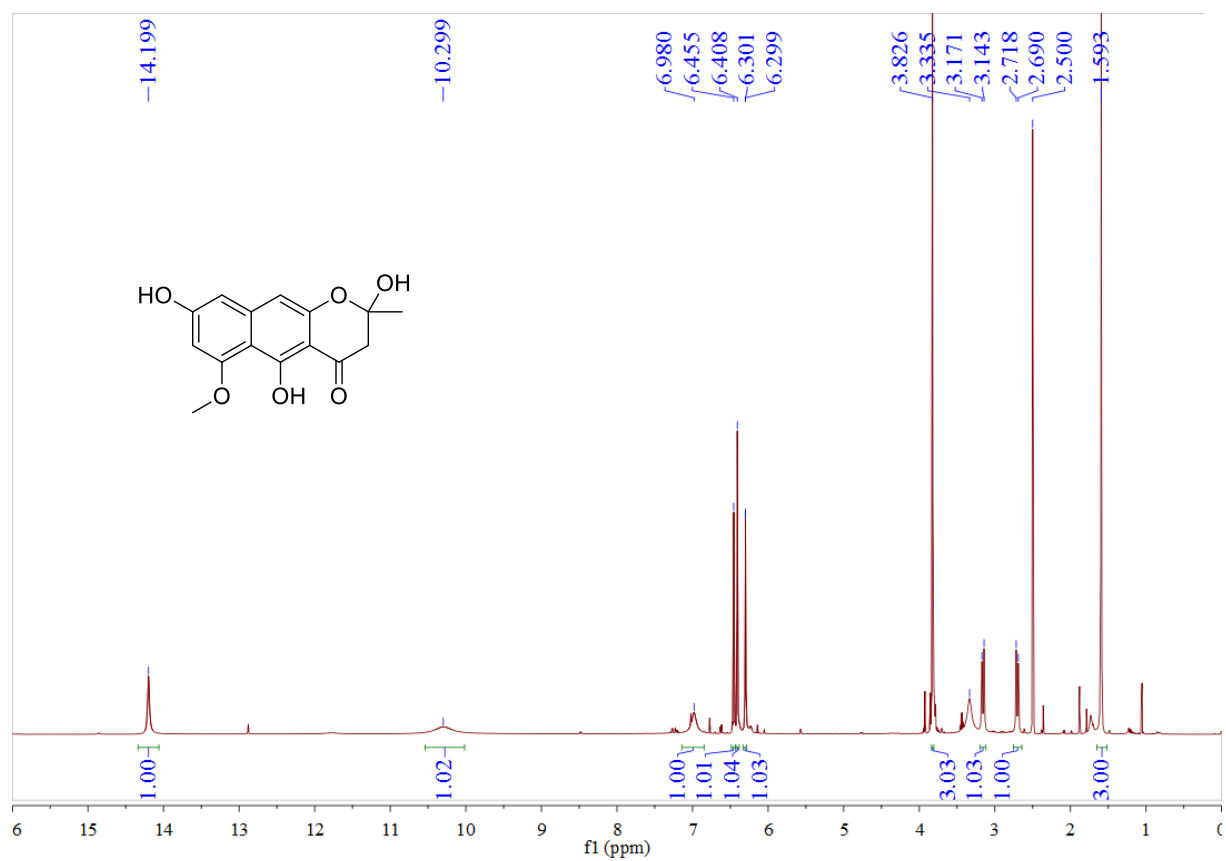


Figure S47. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of 14 in DMSO-*d*₆

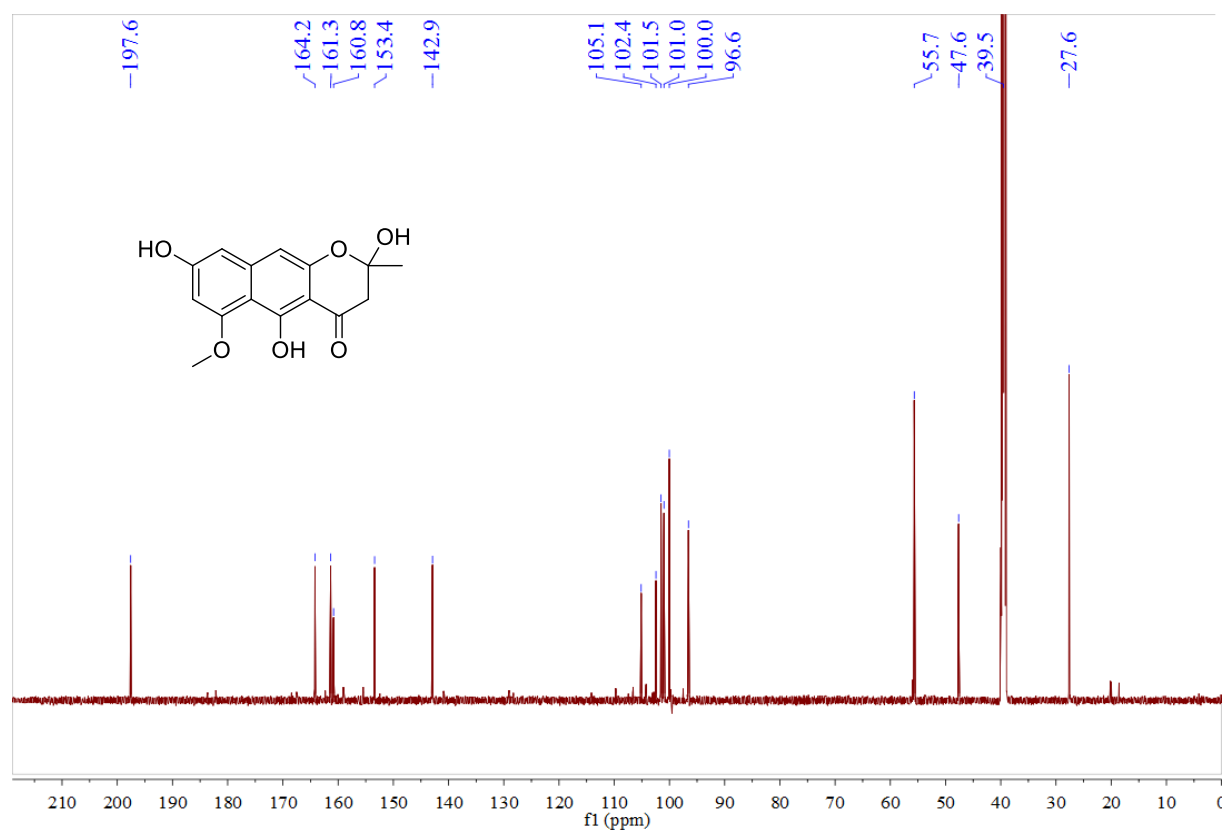


Figure S48. The ¹³C NMR spectrum (150 MHz) of 14 in DMSO-*d*₆

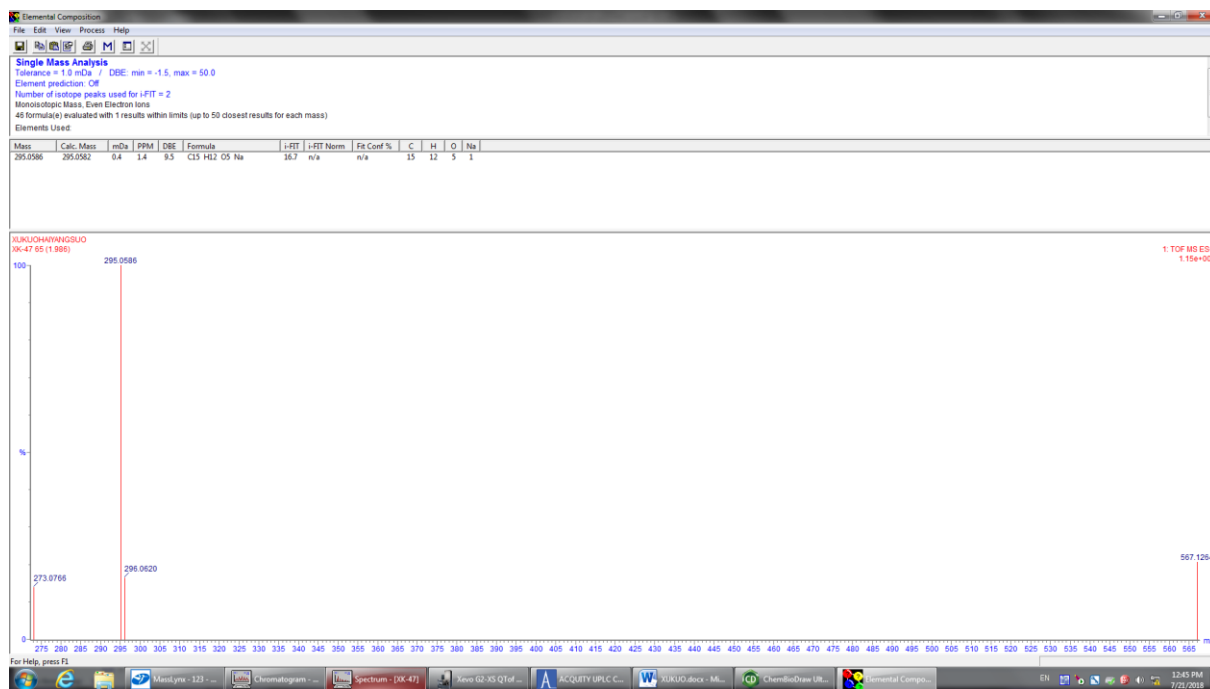


Figure S49. The HR-ESI-MS data of **15**

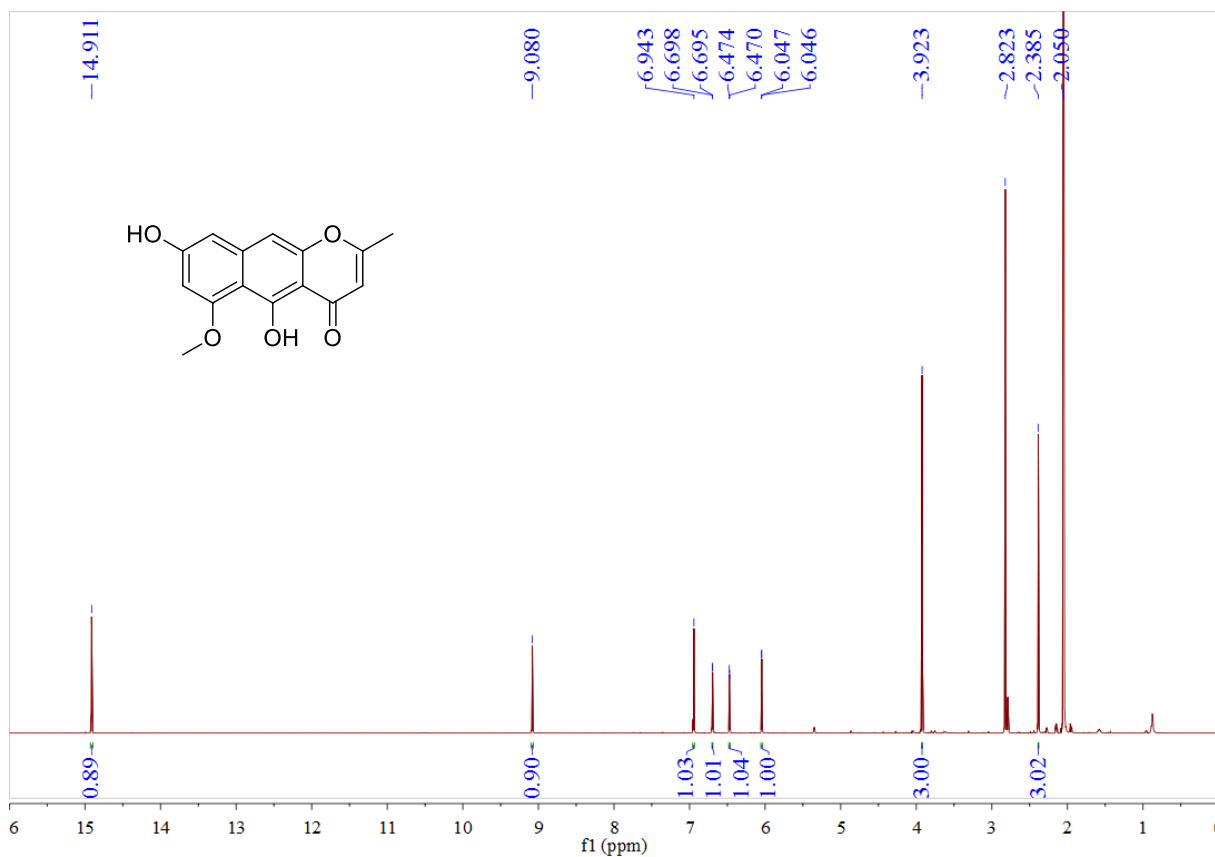


Figure S50. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **15** in acetone- d_6

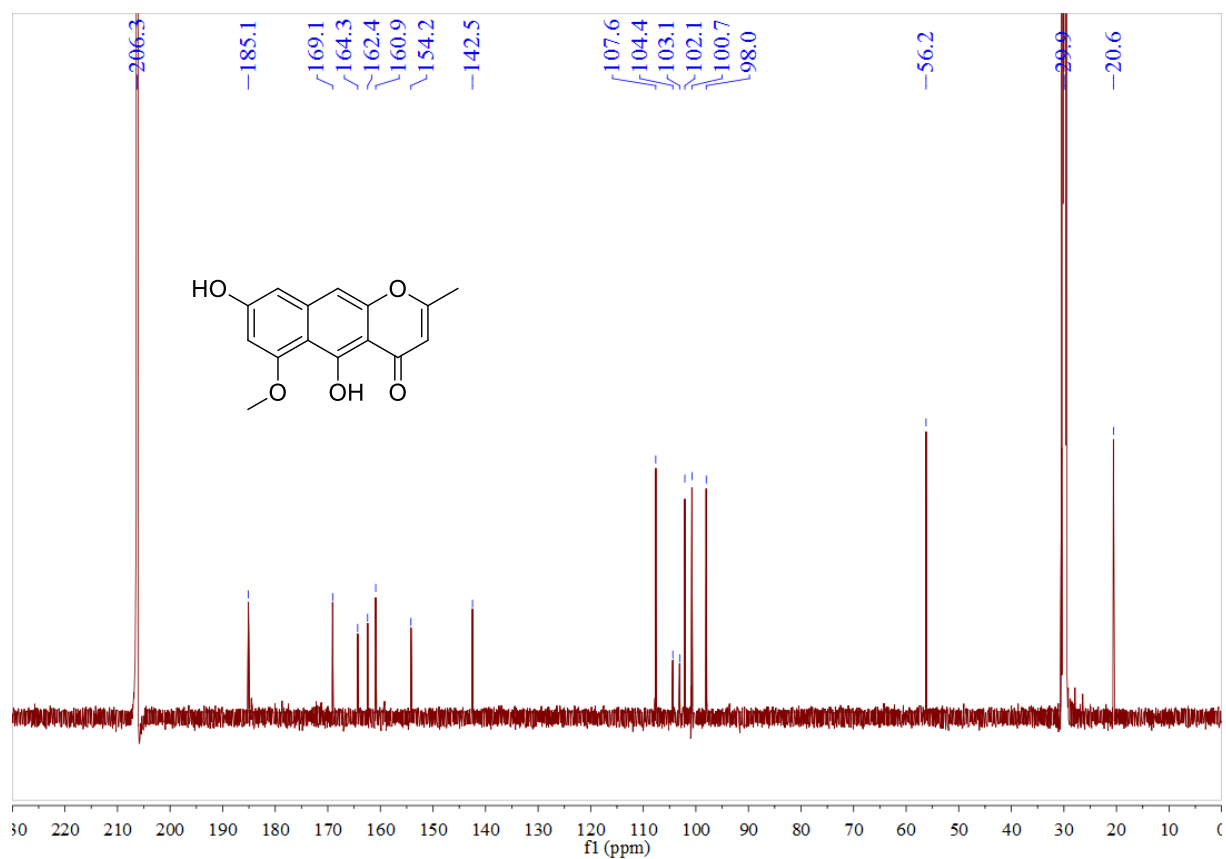


Figure S51. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of 15 in acetone- d_6

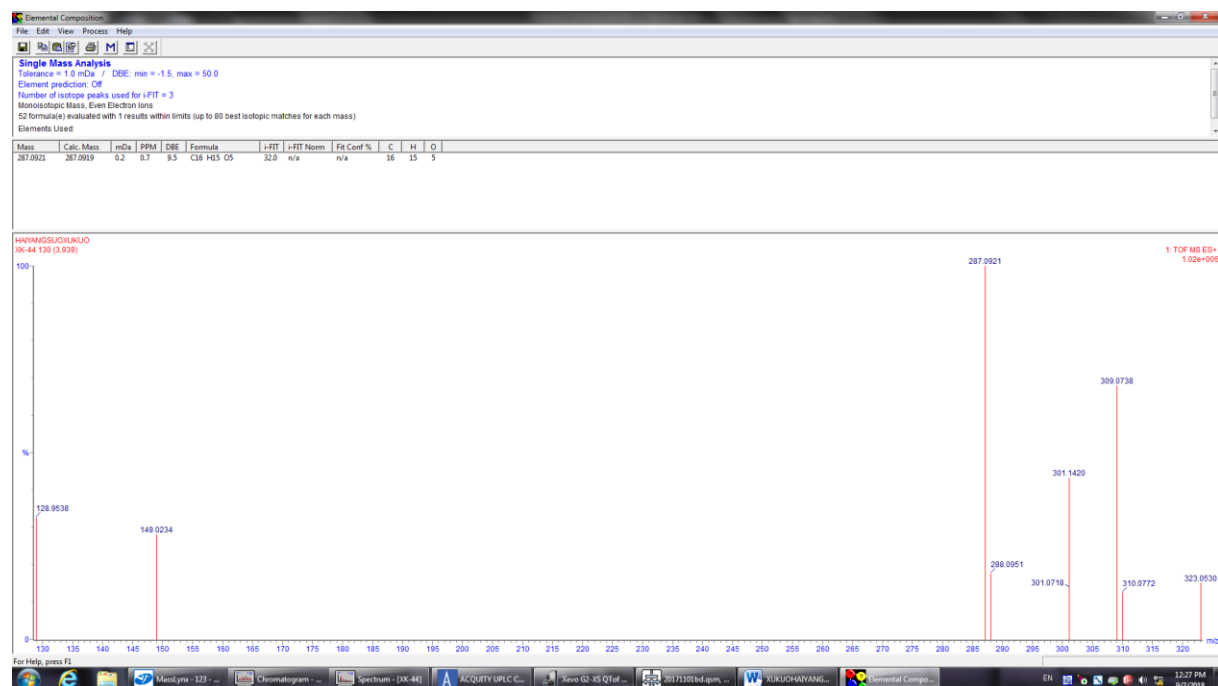


Figure S52. The HR-ESI-MS data of 16

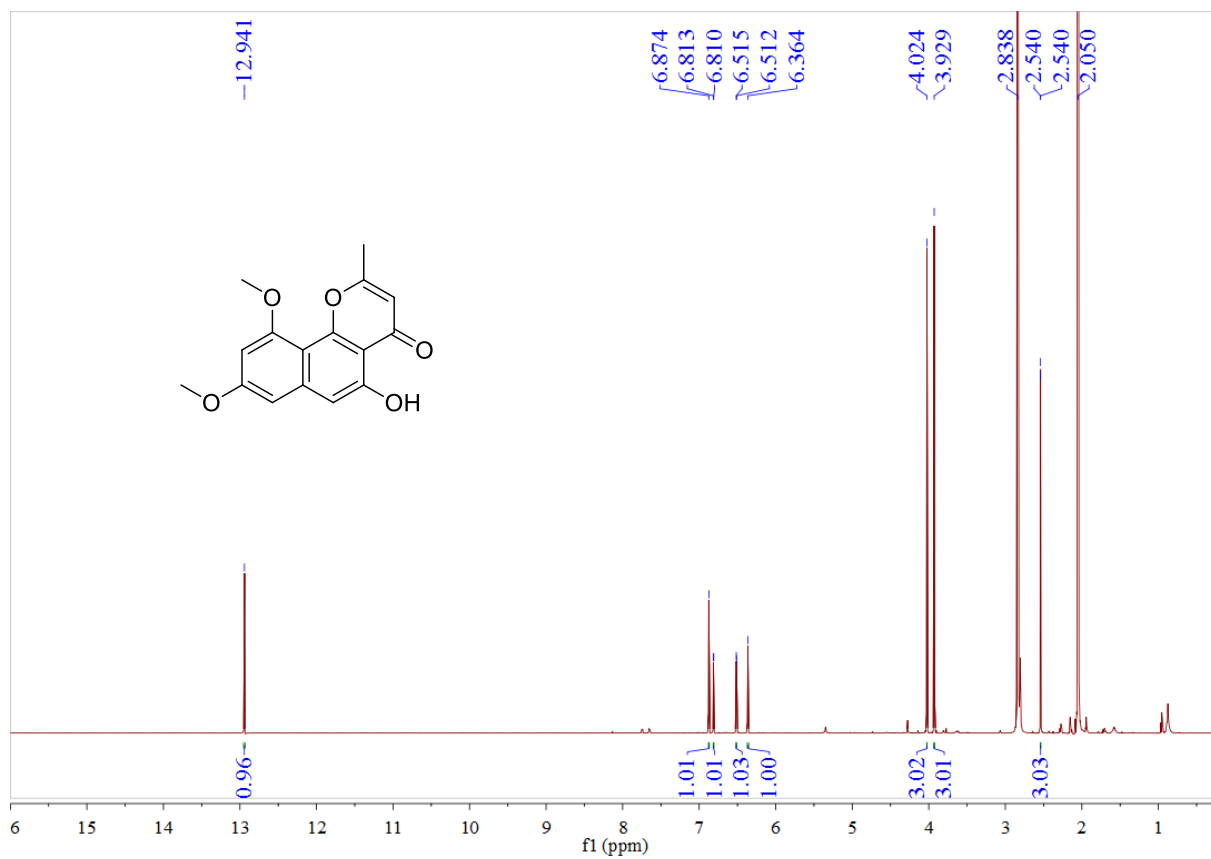


Figure S53. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **16** in acetone- d_6

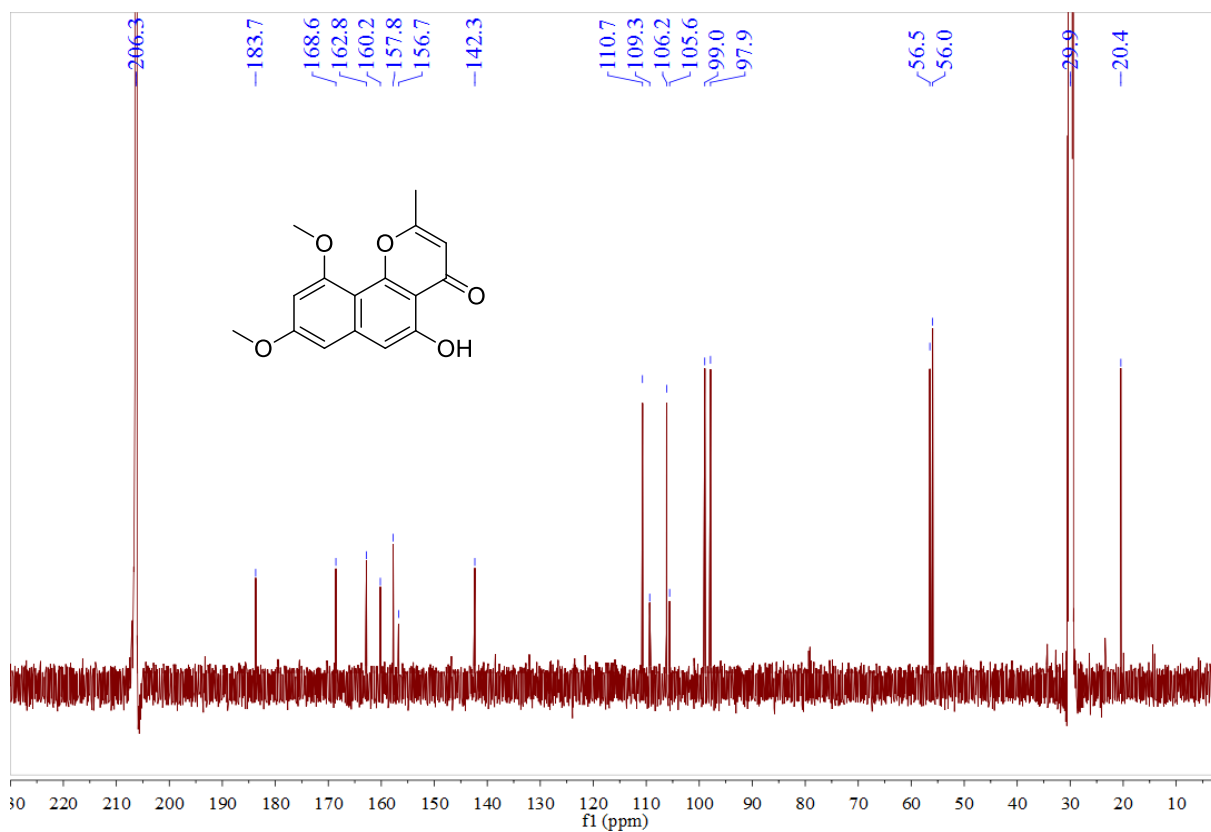


Figure S54. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **16** in acetone- d_6

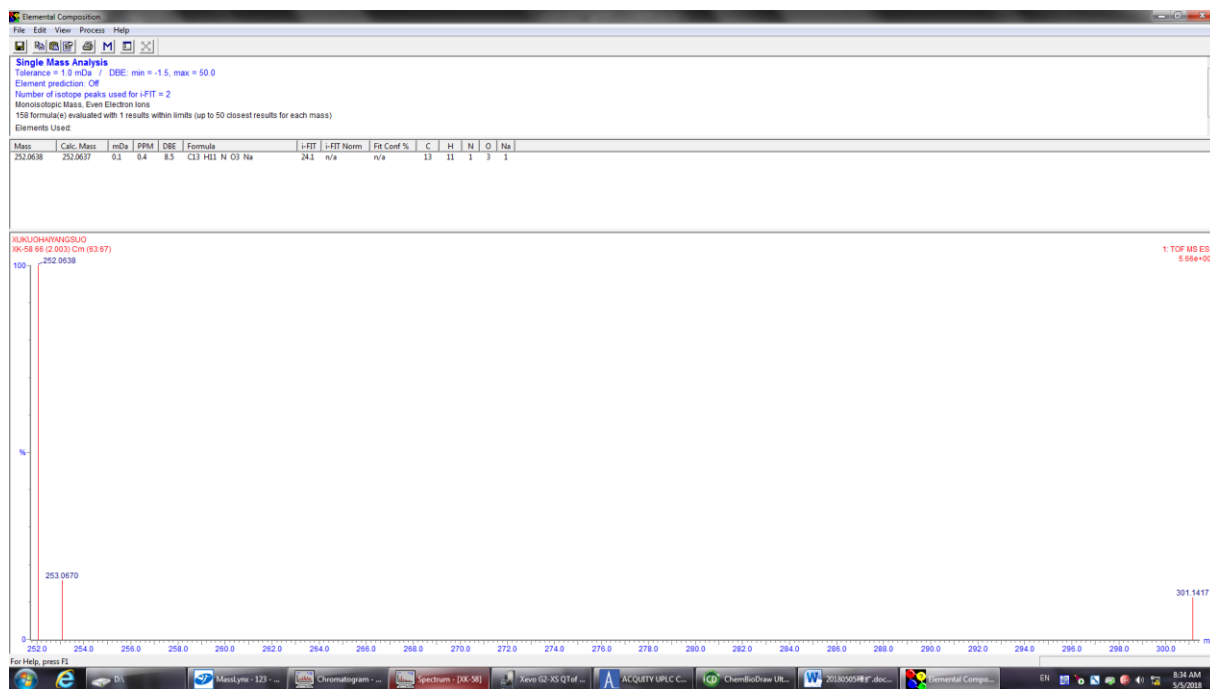


Figure S55. The HR-ESI-MS data of 17

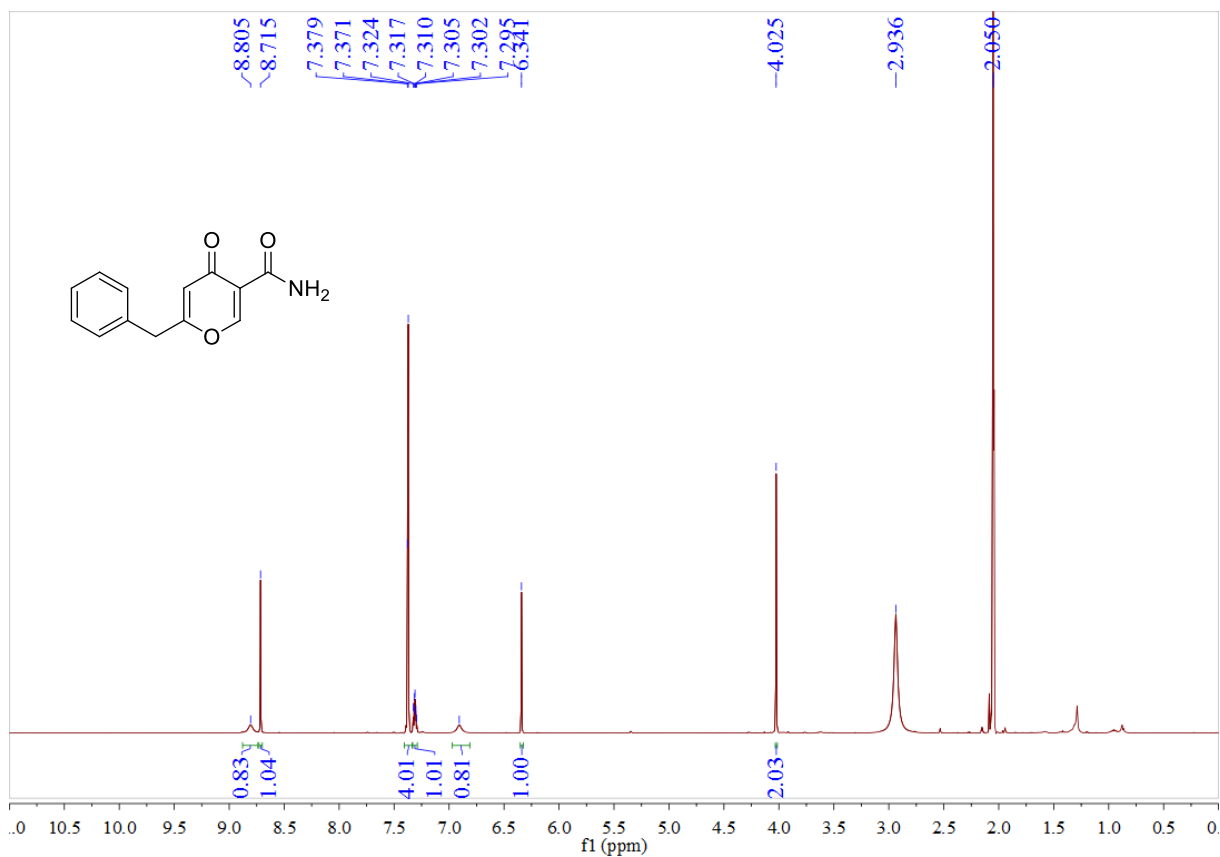
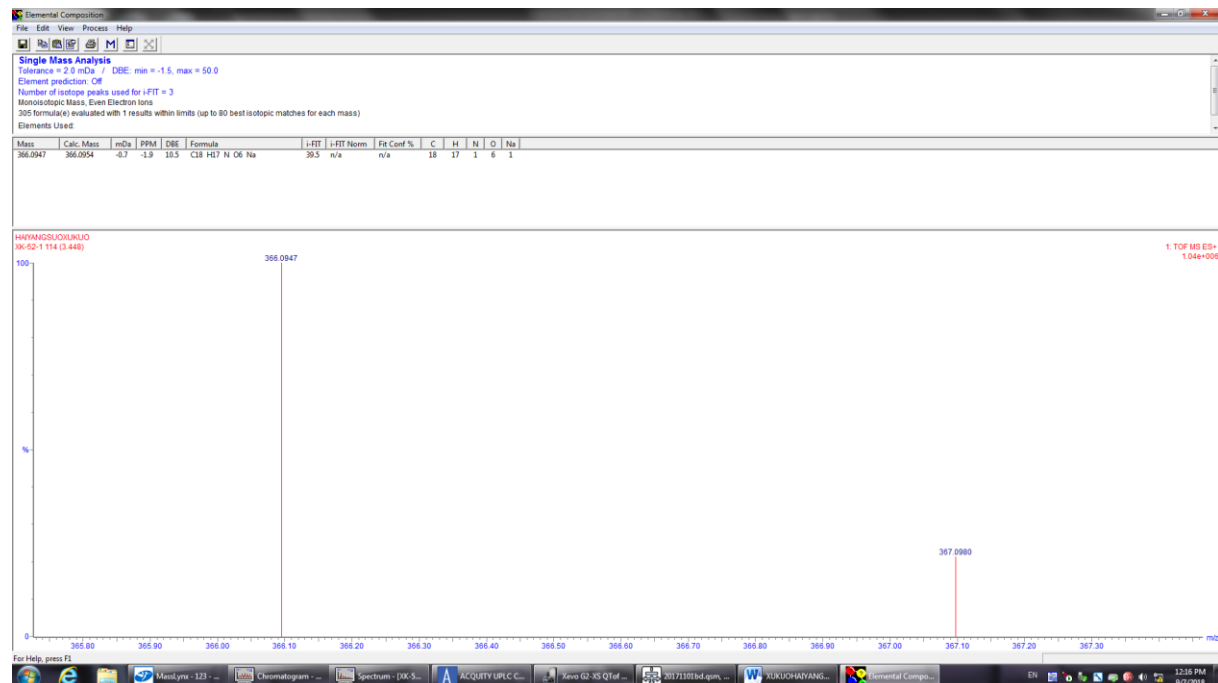
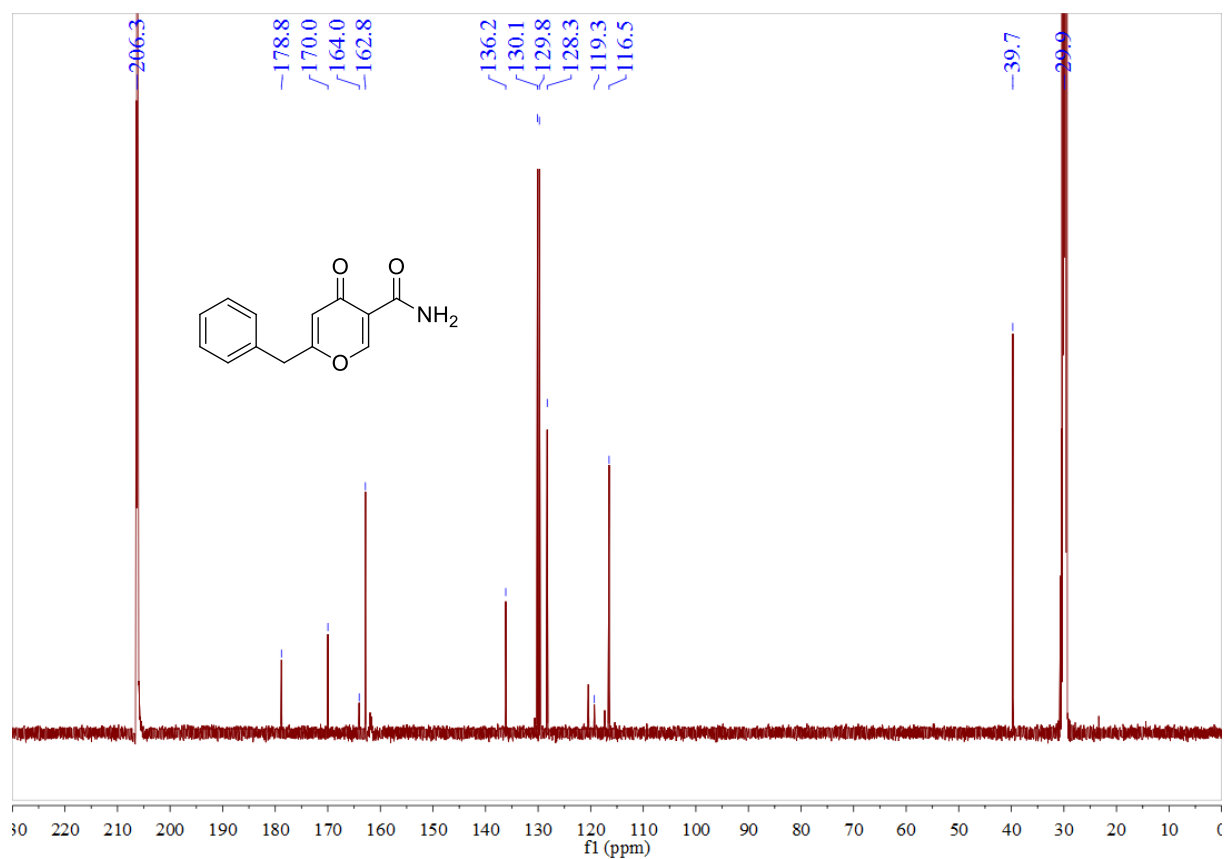


Figure S56. The ¹H NMR spectrum (600 MHz) of 17 in acetone-*d*₆



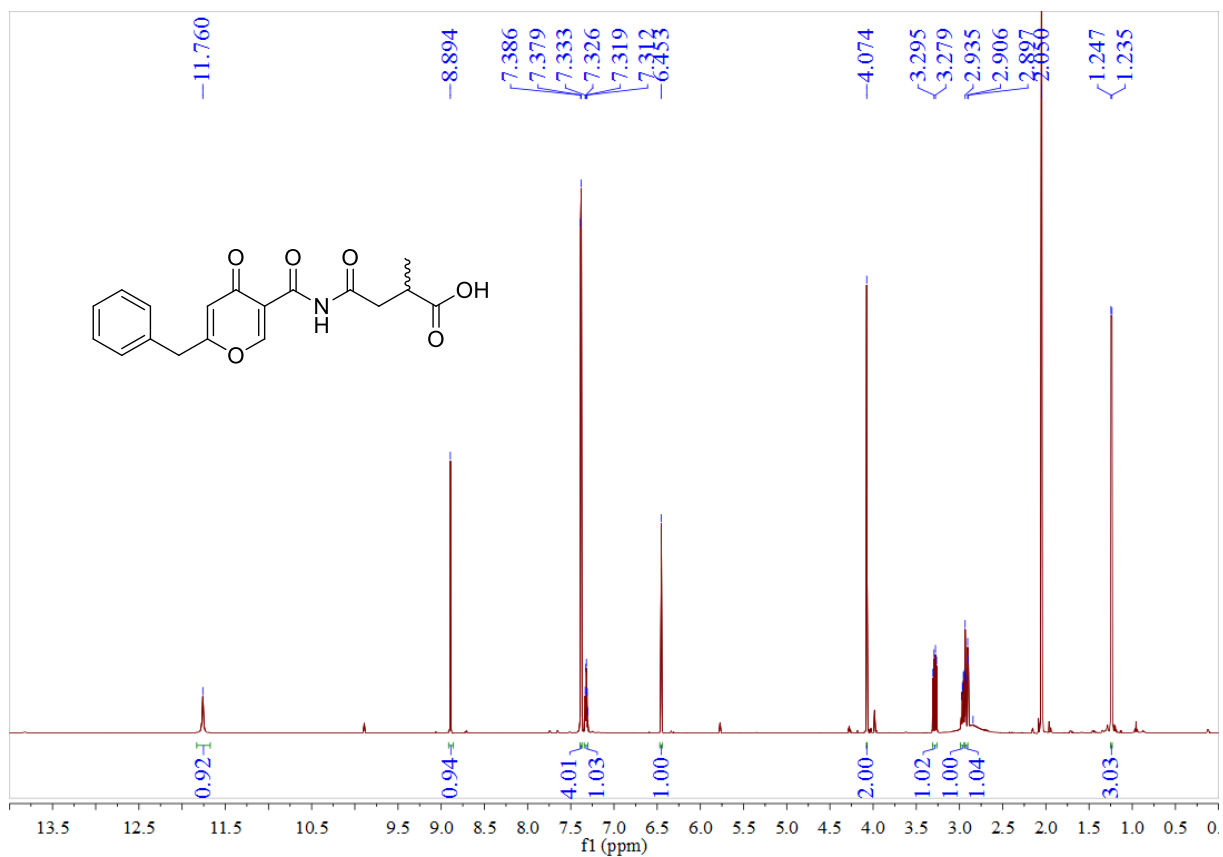


Figure S59. The ^1H NMR spectrum (600 MHz) of **18** in acetone- d_6

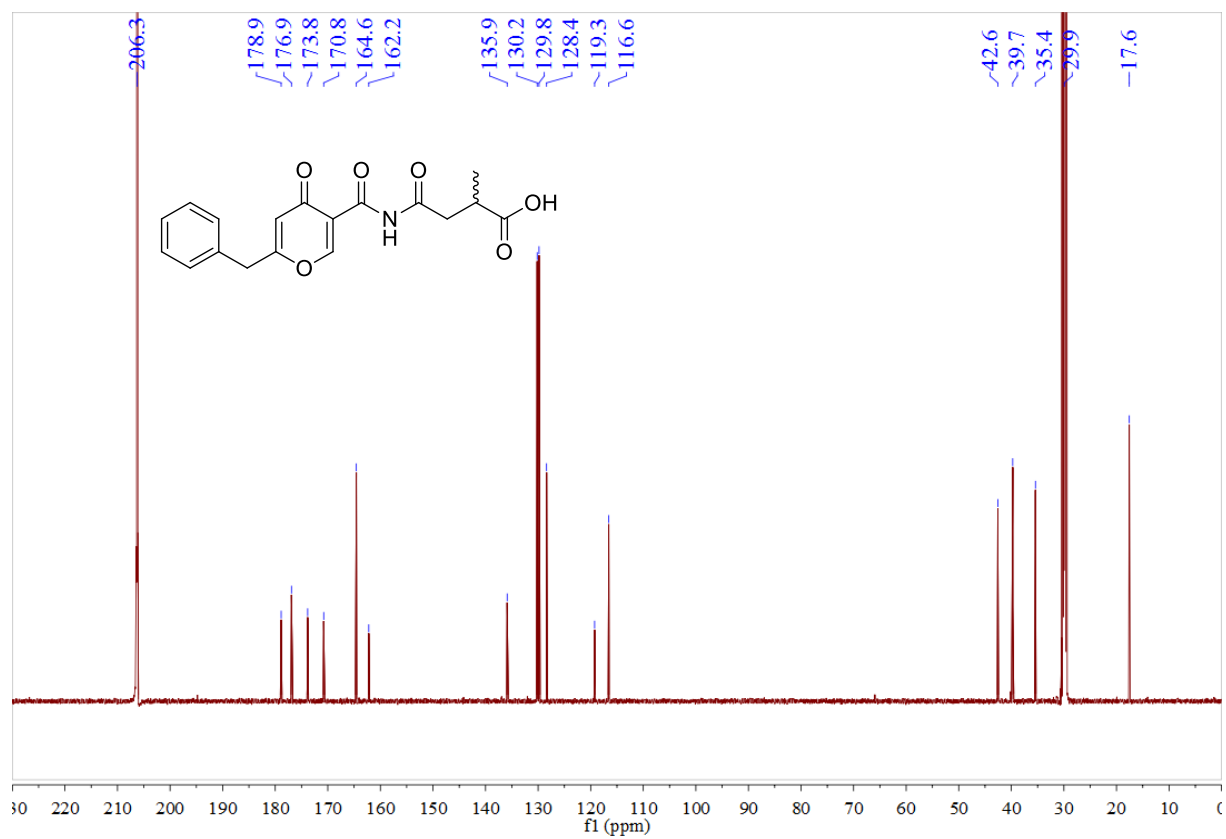
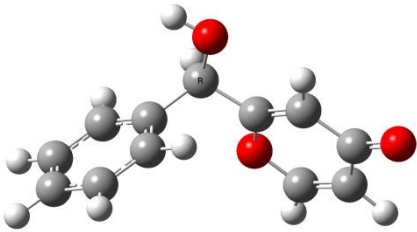
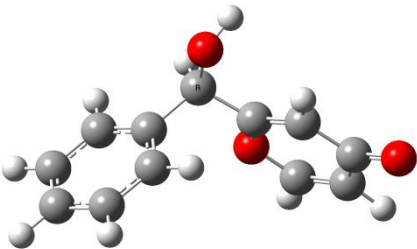


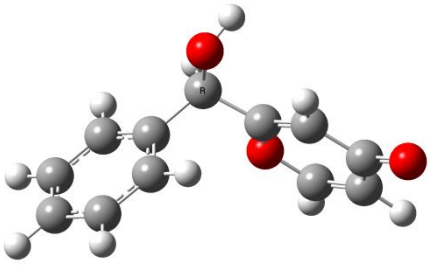
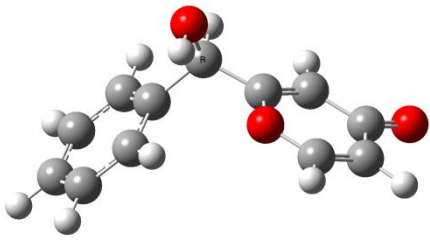
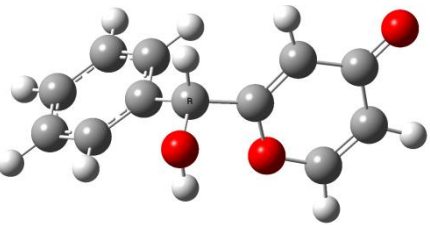
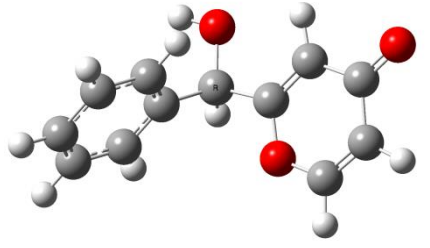
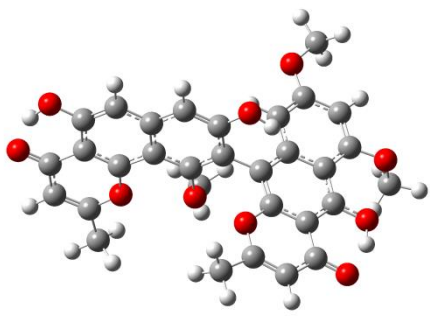
Figure S60. The ^{13}C NMR spectrum (150 MHz) of **18** in acetone- d_6

General procedure for ECD calculations

In general, conformational analyses of compounds **1** and **12** are carried out via systematic searching in the WaveFunction Spartan 14 (version 1.1.4) using the MMFF94 force field. Conformers with Boltzmann distribution over 1% are chosen as the beginning for ECD calculations. Ground-state geometries are optimized at the B3LYP/6-311+G(d,p) level in gas phase by the Gaussian 16 program (Gaussian Inc., Wallingford, CT, USA).¹ All quantum computations are performed on an IBM cluster machine located at the High Performance Computing Center of Peking Union Medical College. The energies, oscillator strengths, and rotational strengths (velocity) of the first 50 electronic excitations are calculated using the TD-DFT methodology at the B3LYP/6-311+G(d,p) level in methanol. The ECD spectra are simulated by the overlapping Gaussian function (half the bandwidth at 1/e peak height, 0.25 eV).² By comparison of the calculated and experimental ECD spectra, the absolute configurations of these compounds are established.

Table 1. The 3D conformers of **1** and **12** with Boltzmann distribution over 1%.

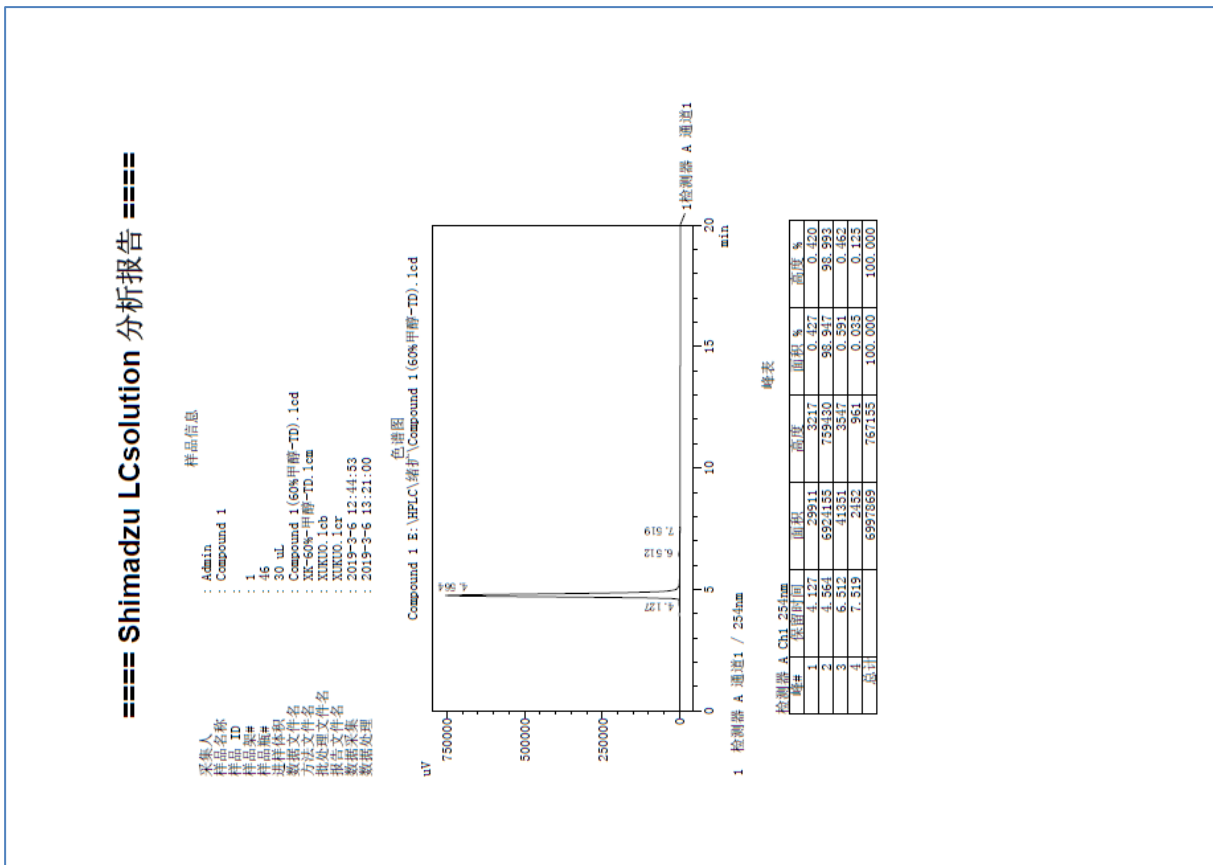
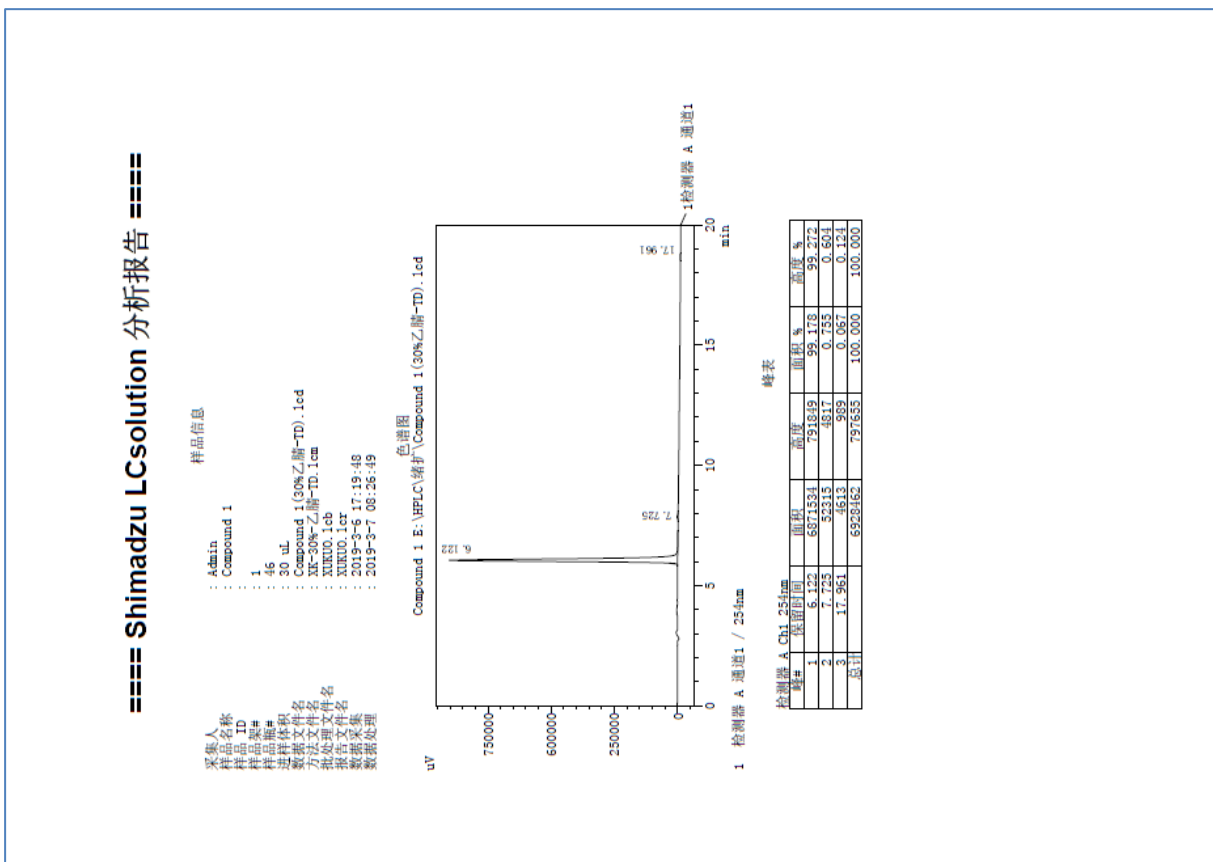
Compounds	no.	3D Conformers	ΔG (kcal/mol)	Population (%)
1	1		0.00	79.7
	2		5.92	7.3

	3		6.73	5.3
	4		7.48	3.9
	5		8.39	0.027
	6		10.54	1.1
12	1		0.00	100.0

References:

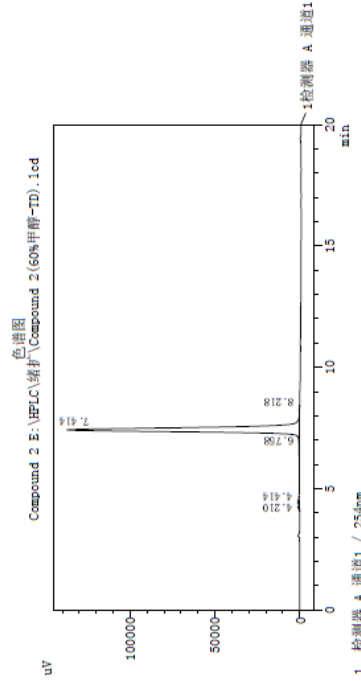
1. Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian 09, Rev. C 01; Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
2. Stephens, P. J.; Harada, N. ECD cotton effect approximated by the Gaussian curve and other methods. *Chirality* **2010**, *22*, 229–233.

Analytical HPLC spectra for all isolated compounds (1-18)



==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 2
 样品ID : 1
 样品架# : 47
 样品瓶# : 60 uL
 进样体积 : Compound 2 (60%甲醇-TD).1cd
 方法文件名 : XF-60%甲醇-TD.1cm
 数据文件名 : XMK00.1cb
 批号 : XMK00.1cb
 批号文件名 : 2019-3-7 13:08:24
 采集日期 : 2019-3-8 13:38:44
 数据处理 : 数据处理

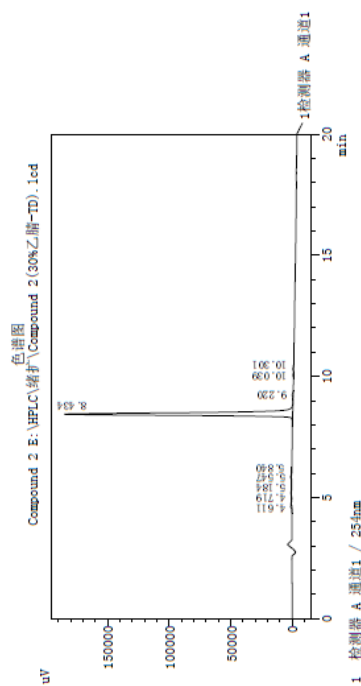


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	4.41	10749	956	0.115	0.871
2	4.41	10749	956	0.633	0.871
3	6.758	288	268	0.469	0.205
4	7.414	1575501	137290	98.313	98.258
5	6.218	2927	242	0.139	0.173
总计		1602332	139724	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 2
 样品ID : 1
 样品架# : 47
 样品瓶# : 60 uL
 进样体积 : Compound 2 (30%乙醇-TD).1cd
 方法文件名 : XF-30%乙醇-TD.1cm
 数据文件名 : XMK00.1cb
 批号 : XMK00.1cb
 批号文件名 : 2019-3-7 17:49:17
 采集日期 : 2019-3-7 08:27:38
 数据处理 : 数据处理

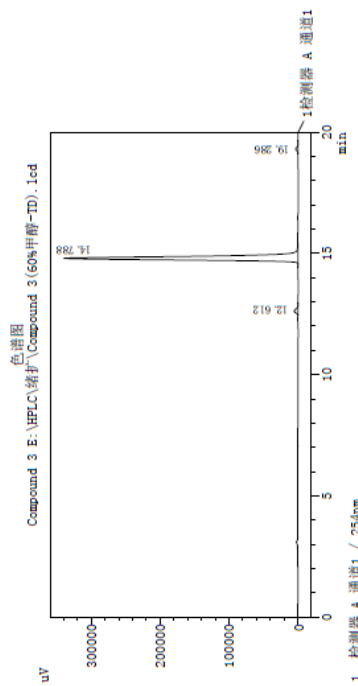


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	4.511	6428	970	0.444	0.506
2	4.719	7637	624	0.527	0.430
3	5.181	10663	803	0.736	0.419
4	5.547	4283	329	0.296	0.172
5	5.840	10350	1115	0.715	0.582
6	8.434	1393574	165116	96.240	96.782
7	9.220	6286	797	0.410	0.418
8	10.039	4310	642	0.298	0.333
9	10.220	4824	681	0.351	0.357
10	10.301	1448022	191580	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 3
 样品ID : 1
 样品架# : 48
 样品体积 : 30 uL
 进样体积 : Compound 3 (60%甲醇-TD).1cd
 数据文件名 : XK-60%-甲醇-TD.1cm
 方法文件名 : XUKU0.1cb
 报告文件名 : 2019-3-6 13:01:50
 数据文件 : 2019-3-6 13:03:07
 数据处理

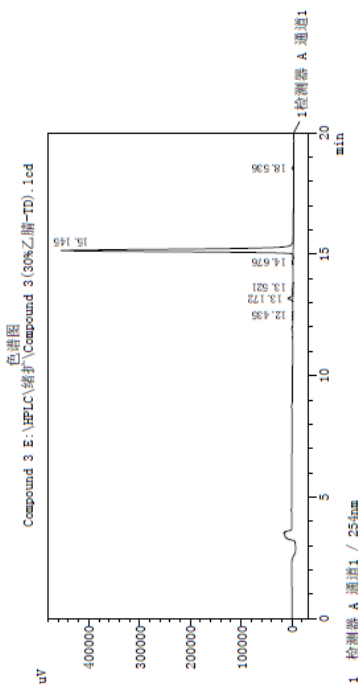


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	14.62	49657	15609	97.172	97.270
2	14.788	330297	21036	1.067	1.128
3	14.288	3382429	249931	100.000	100.000
总计					

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 3
 样品ID : 1
 样品架# : 48
 样品体积 : 30 uL
 进样体积 : Compound 3 (30%乙醇-TD).1cd
 数据文件名 : XK-30%-乙醇-TD.1cm
 方法文件名 : XUKU0.1cb
 报告文件名 : 2019-3-7 08:06:46
 数据文件 : 2019-3-7 08:06:40
 数据处理



峰表

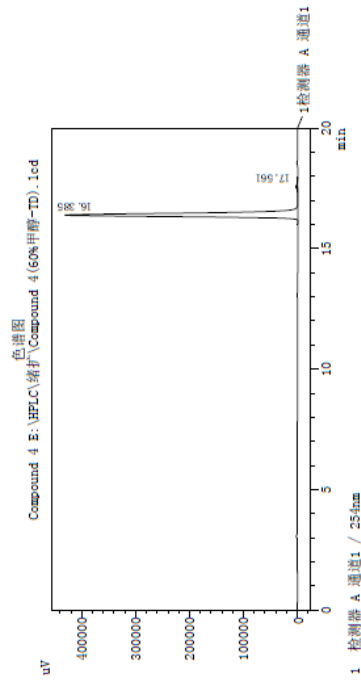
峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.435	6071	651	0.179	0.180
2	13.172	67739	9412	2.001	1.988
3	13.521	14056	1862	0.414	0.393
4	14.676	113800	1641	0.336	0.246
5	15.145	3263820	45710	96.433	96.471
6	18.536	21495	2954	0.635	0.623
总计		3384530	473830	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息

```

采集人       : Admin
样品名称     : Compound 4
样品ID      : 1
样品瓶#     : 49
样品瓶#     : 30 uL
进样体积    : Compound 4 (60%甲醇-TD).lcd
方法文件名  : XK-60%-甲醇-TD.lcm
数据文件    : XUK00.lcb
批处理文件  : XUK00.lcr
报告文件    : 2019-3-7 13:55:16
数据收集    : 2019-3-7 14:25:16
数据整理
    
```



峰表

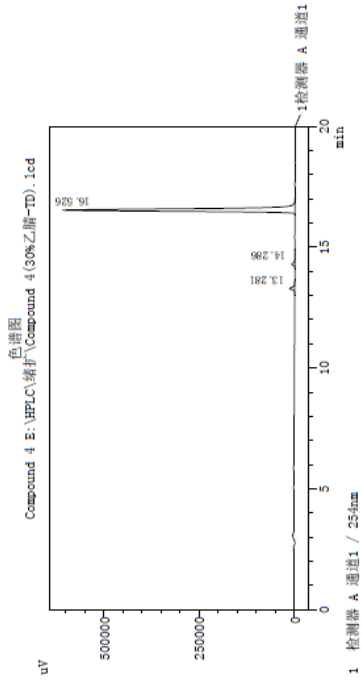
峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	17.661	425995	432281	99.176	99.182
2	17.581	55043	5559	0.823	0.817
总计		4261941	433840	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息

```

采集人       : Admin
样品名称     : Compound 4
样品ID      : 1
样品瓶#     : 49
样品瓶#     : 30 uL
进样体积    : Compound 4 (30%乙醇-TD).lcd
方法文件名  : XK-30%-乙醇-TD.lcm
数据文件    : XUK00.lcb
批处理文件  : XUK00.lcr
报告文件    : 2019-3-7 13:30:13
数据收集    : 2019-3-7 07:59:23
数据整理
    
```

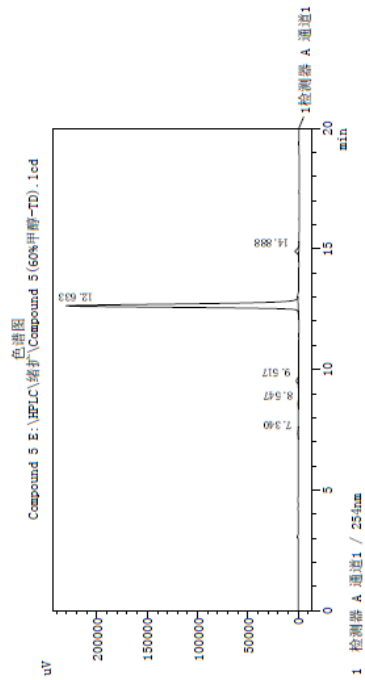


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.281	96095	13107	2.120	2.067
2	14.285	67564	9166	1.491	1.416
3	16.526	485743	611821	96.388	96.487
总计		4831314	634096	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 : Admin
 : Compound 5
 : 1
 : 50
 : 30 uL
 : Compound 5 (60%甲醇-TD).1cd
 : XE-60%-甲醇-TD.1cm
 : XRU0.1cb
 : 2019-3-6 14:48:44
 : 2019-3-6 14:48:35

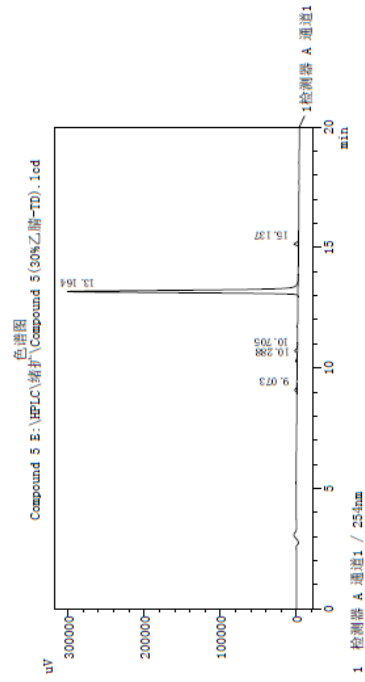


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	7.36	5501	505	0.244	0.212
2	8.67	7281	643	0.333	0.270
3	9.57	29111	2315	1.305	0.973
4	12.633	2171335	230730	96.369	96.978
5	14.888	396512	3727	1.758	1.566
总计		2253243	237920	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 : Admin
 : Compound 5
 : 1
 : 50
 : 30 uL
 : Compound 5 (30%乙醇-TD).1cd
 : XE-30%-乙醇-TD.1cm
 : XRU0.1cb
 : 2019-3-6 18:53:38
 : 2019-3-7 07:54:32

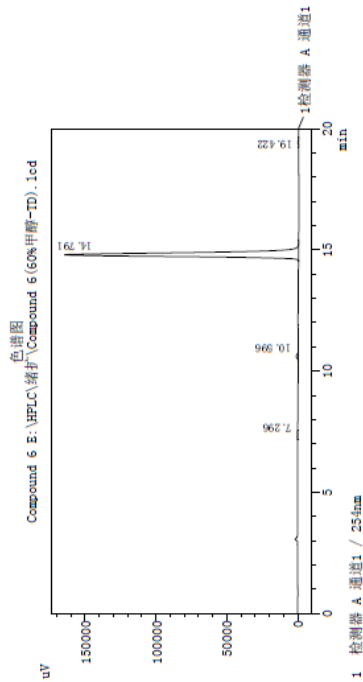


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	7.073	23507	2022	1.017	0.857
2	8.92	18090	2172	0.805	0.952
3	9.5	24309	3315	1.083	1.017
4	13.164	2137994	302540	95.253	95.526
5	15.137	406535	5662	1.811	1.788
总计		2244533	316711	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 6
 样品ID : 1
 样品架# : 51
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 6 (60%甲醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-60%甲醇-TD.lcm
 数据文件名 : XUKUO.lcb
 批处理文件名 : XUKUO.lcr
 采集日期 : 2013-3-6 14:42:10
 数据文件 : 2013-3-6 15:05:12
 数据处理 :



色谱图
 Compound 6 E:\HPLC\维护\Compound 6 (60%甲醇-TD).lcd

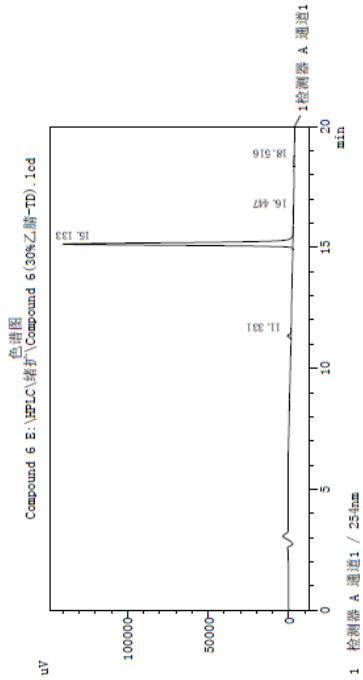
1 检测器 A 通道1 / 254nm

峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	16.791	1776317	167072	100.000	100.000
2	10.996	483	0.241	0.027	0.289
3	7.296	165015	98.809	9.336	98.782
4	14.791	1755765	165015	98.809	98.782
总计		1776317	167072	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 6
 样品ID : 1
 样品架# : 51
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 6 (30%乙醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-30%乙醇-TD.lcm
 数据文件名 : XUKUO.lcb
 批处理文件名 : XUKUO.lcr
 采集日期 : 2013-3-6 19:17:04
 数据文件 : 2013-3-6 19:40:05
 数据处理 :



色谱图
 Compound 6 E:\HPLC\维护\Compound 6 (30%乙醇-TD).lcd

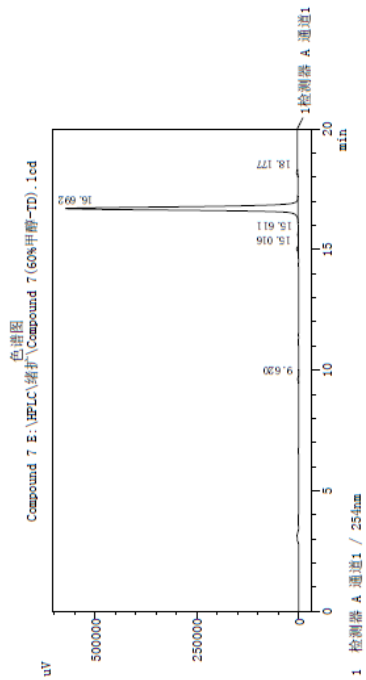
1 检测器 A 通道1 / 254nm

峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	16.473	1089324	115136	100.000	100.000
2	11.331	16413	2257	1.507	1.552
3	15.133	1066632	147334	97.936	98.003
4	16.447	3299	345	0.303	0.337
总计		1089324	115136	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 7
 样品ID : 1
 样品架# : 52
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名称 : Compound 7 (60%甲醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-60%-甲醇-TD.lcm
 样品ID : XUK001.ccb
 采集日期 : 2019-3-6 15:05:37
 采集位置 : 2019-3-6 15:13:01
 数据处理

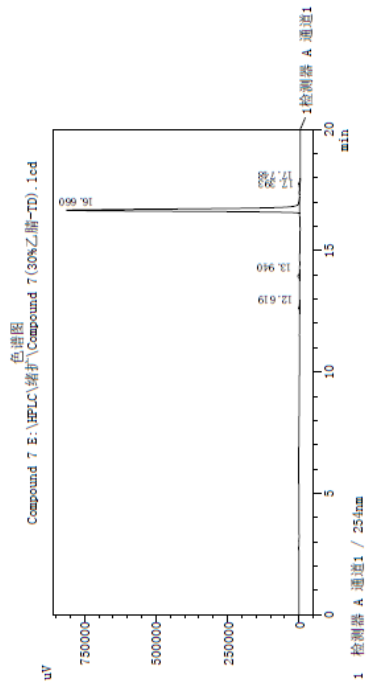


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	9.620	17993	2083	0.318	0.358
2	15.016	10689	4152	0.179	0.714
3	15.611	16366	1749	0.289	0.301
4	16.692	5556452	570349	98.233	98.128
5	18.177	24529	2894	0.411	0.498
总计		5556435	581257	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 7
 样品ID : 1
 样品架# : 52
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名称 : Compound 7 (30%乙醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-30%-乙醇-TD.lcm
 样品ID : XUK001.ccb
 采集日期 : 2019-3-7 18:40:31
 采集位置 : 2019-3-7 07:56:14
 数据处理

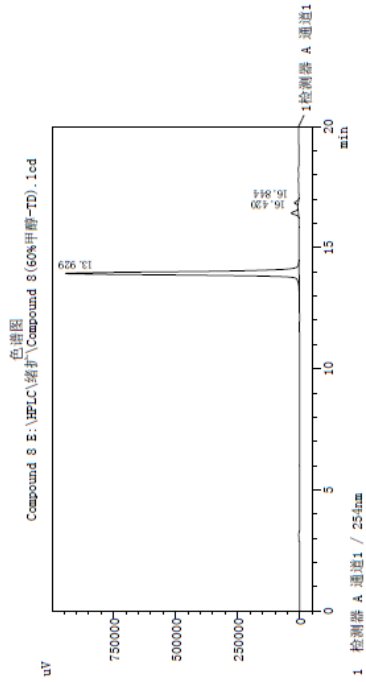


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.619	20070	4149	0.691	0.892
2	12.916	48323	6442	0.878	0.773
3	15.660	5357531	816111	97.240	97.912
4	17.393	16389	1687	0.297	0.202
5	17.746	49242	5122	0.894	0.615
总计		5509615	833311	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 8
 样品ID : 1
 样品架# : 53
 进样体积 : 30 uL
 进样文件名称 : Compound 8 (60%甲醇-TD).1cd
 方法文件名称 : XUKIO.icb
 报告文件名 : XUKIO.icb
 报告文件位置 : 2019-3-6 15:29:04
 数据收集 : 2019-3-6 15:54:28
 数据处理

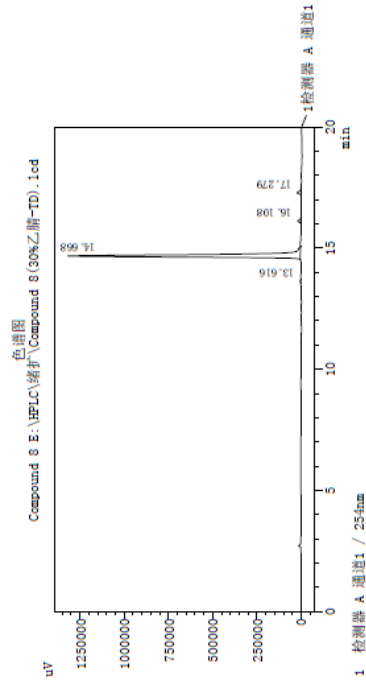


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.929	8975892	940773	96.159	95.350
2	16.420	252002	26261	2.700	2.870
3	16.844	106544	13553	1.141	1.280
总计		9334139	964587	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 8
 样品ID : 1
 样品架# : 53
 进样体积 : 30 uL
 进样文件名称 : Compound 8 (30%乙醇-TD).1cd
 方法文件名称 : XUKIO.icb
 报告文件名 : XUKIO.icb
 报告文件位置 : 2019-3-7 01:03:58
 数据收集 : 2019-3-7 07:57:34
 数据处理



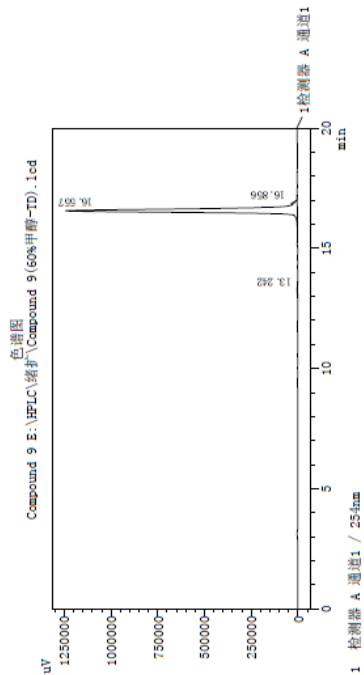
峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.416	16816	3636	0.183	0.267
2	14.868	8870039	1314073	96.479	96.608
3	16.108	132943	19362	1.446	1.423
4	17.279	173960	23146	1.892	1.702
总计		9198778	1360219	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

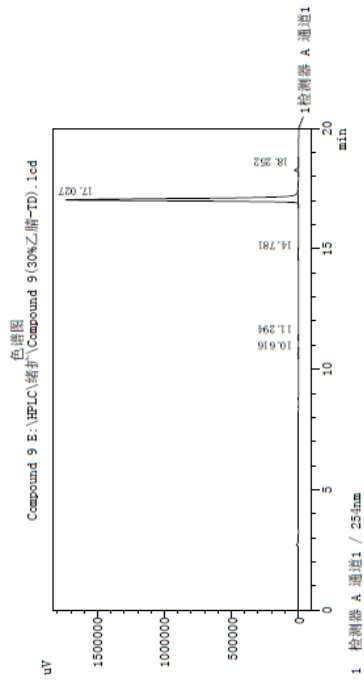
采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 9
 样品ID : 1
 样品架# : 54
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 9 (60%甲醇-TD).lcd
 数据文件名 : XR001.cb
 方法文件名 : 2019-9-7
 报告文件名 : 2019-9-7 07:39:29
 数据文件 :
 数据处理 :

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 9
 样品ID : 1
 样品架# : 54
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 9 (30%乙醇-TD).lcd
 数据文件名 : XR001.cb
 方法文件名 : 2019-9-7
 报告文件名 : 2019-9-7 08:01:13
 数据文件 :
 数据处理 :



峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.242	55800	4391	0.510	0.350
2	16.587	12059614	1240172	99.001	98.786
3	16.856	55928	10845	0.489	0.864
总计		12181342	1255108	100.000	100.000

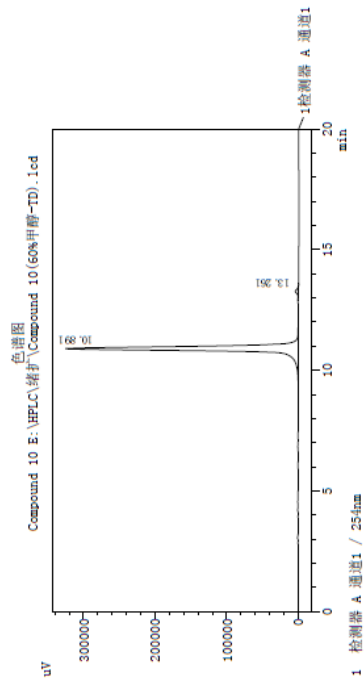


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	10.616	34533	4487	0.283	0.283
2	11.294	22204	3837	0.182	0.216
3	14.781	44905	2537	0.367	0.443
4	17.027	11924803	1734735	97.547	97.744
5	18.252	498103	29174	1.651	1.644
总计		12221549	1774769	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 10
 样品ID : 1
 样品架# : 55
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound_10(60%甲醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-60%-甲醇-TD.lcm
 数据文件 : XRU0.icb
 报告文件名 : XRU0.lcd
 报告文件 : 2015-3-7 16:16:01
 数据文件 : 2015-3-7 08:02:54
 数据处理 :

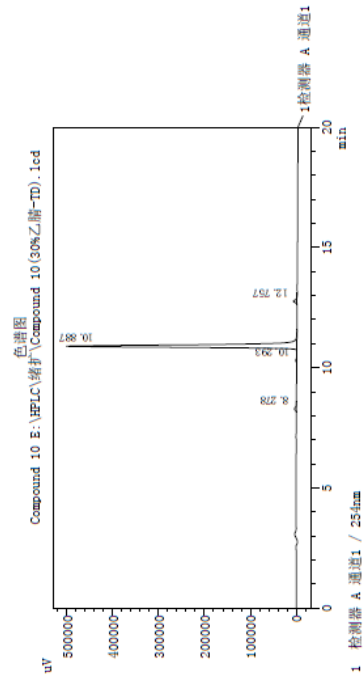


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	10.881	3961183	324956	98.731	98.715
2	13.261	50900	4130	1.269	1.285
总计		4012083	329185	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 10
 样品ID : 1
 样品架# : 55
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound_10(30%乙醇-TD).lcd
 方法文件名 : XF-30%-乙醇-TD.lcm
 数据文件 : XRU0.icb
 报告文件名 : XRU0.lcd
 报告文件 : 2015-3-7 20:50:53
 数据处理 : 2015-3-7 08:03:59

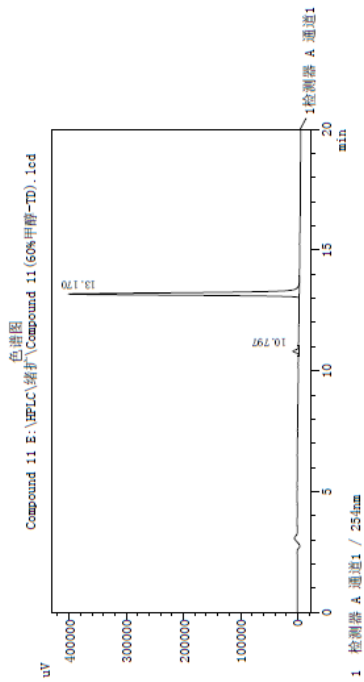


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	8.278	33839	4680	0.969	0.904
2	10.293	18889	2387	0.510	0.461
3	10.887	3853535	502564	96.899	97.087
4	12.757	60037	8165	1.652	1.578
总计		3700299	517196	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品 ID : Compound 11
 样品架# : 1
 样品瓶# : 56
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名 : Compound 11 (60%甲醇-TD).1cd
 方法文件名 : XT-60%-甲醇-TD.1cm
 积分文件名 : XUKO.icb
 积分参数 : XUKO.icb
 报告文件名 : 2019-3-7 13:16:41
 数据文件 : 2019-3-7 13:39:43
 数据处理

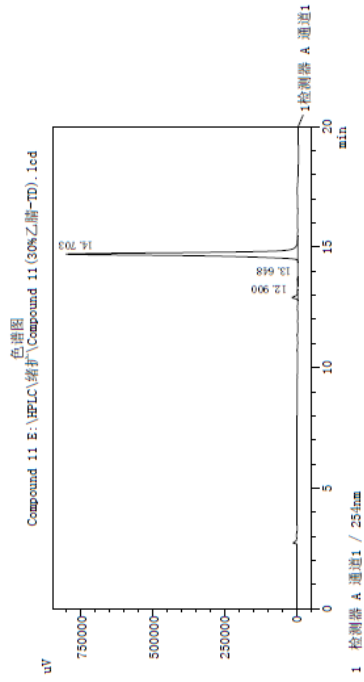


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	10.797	164367	11575	2.556	2.767
2	13.170	7029857	406754	97.444	97.233
总计		7214224	418329	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品 ID : Compound 11
 样品架# : 1
 样品瓶# : 56
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名 : Compound 11 (30%乙醇-TD).1cd
 方法文件名 : XT-30%-乙醇-TD.1cm
 积分文件名 : XUKO.icb
 积分参数 : XUKO.icb
 报告文件名 : 2019-3-7 08:26:10
 数据文件 : 2019-3-7 08:49:13
 数据处理

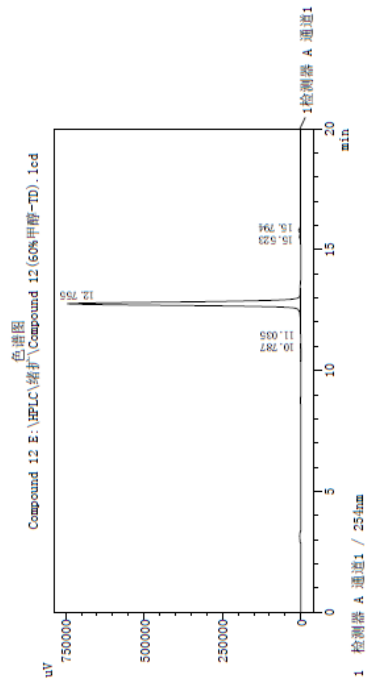


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.906	132829	19136	1.821	2.320
2	13.648	12981	1595	0.178	0.193
3	14.703	7146927	804039	98.001	97.486
总计		7292738	824771	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 12
 样品ID : 1
 样品架# : 57
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 12 (60%甲醇-TD).1cd
 数据文件名 : XT-60%-甲醇-ID.1cm
 方法文件名 : XRPC.1cb
 报告文件名 : 2019-3-7 13:40:09
 报告生成时间 : 2019-3-7 14:14:13
 数据处理 :



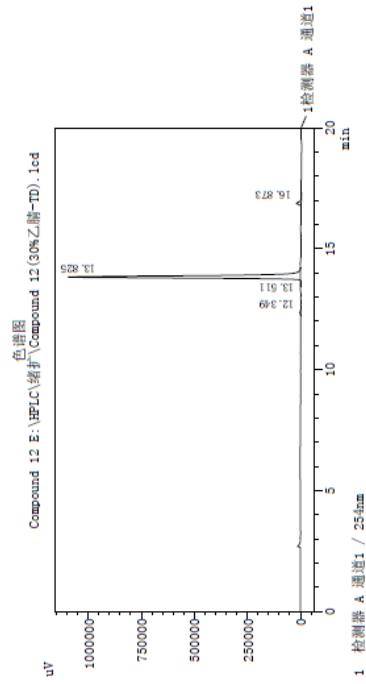
1 检测器 A 通道1 / 25-nm

峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.511	5375	363	0.073	0.048
2	11.035	729	90	0.010	0.012
3	12.755	731404	743367	98.672	98.876
4	15.523	33613	3737	0.453	0.495
5	15.794	58699	5784	0.792	0.768
总计		7412458	753362	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 12
 样品ID : 1
 样品架# : 57
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 12 (30%乙醇-TD).1cd
 数据文件名 : XT-30%-乙醇-TD.1cm
 方法文件名 : XRPC.1cb
 报告文件名 : 2019-3-7 08:49:38
 报告生成时间 : 2019-3-7 09:39:03
 数据处理 :



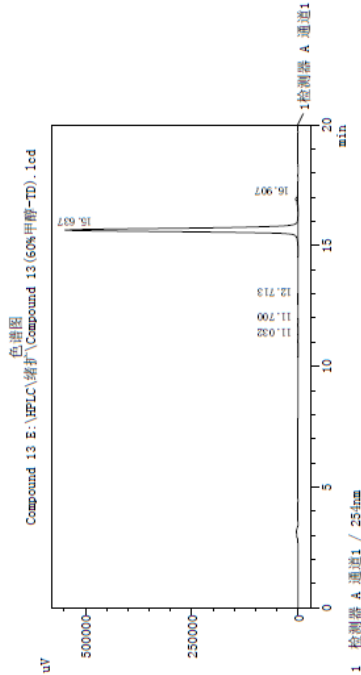
1 检测器 A 通道1 / 25-nm

峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.549	27276	4568	0.371	0.407
2	13.511	10164	1382	0.138	0.141
3	18.835	7143105	1094695	97.246	97.478
4	16.873	1648205	22171	2.244	1.974
总计		7348370	1123016	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 13
 样品ID : 1
 样品架# : 58
 进样体积 : 30 uL
 进样体积分 : Compound 13 (60%甲醇-TD).1cd
 数据文件名 : XF-60%-甲醇-TD.1cm
 方法文件名 : XRU0.1cb
 报告文件名 : XRU0.1cr
 报告文件路径 : C:\Users\Administrator\Desktop\2019-3-7 14:03:36
 采集日期 : 2019-3-7 14:03:36
 数据文件 : 2019-3-7 14:26:39
 数据处理 :

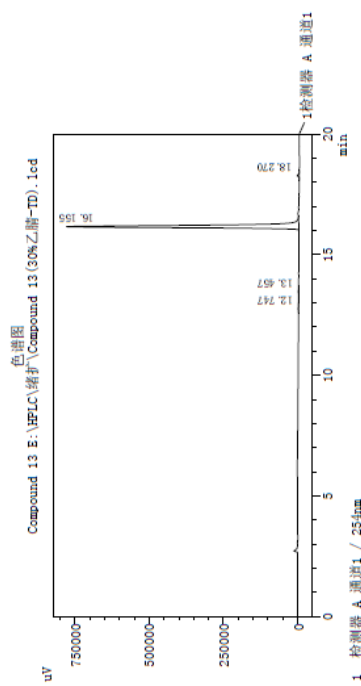


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	11.032	7976	681	0.145	0.122
2	11.700	8786	801	0.160	0.144
3	12.713	4641	505	0.084	0.091
4	15.637	5409189	548612	98.361	98.573
5	16.907	60745	5952	1.250	1.069
总计		5499337	556551	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 13
 样品ID : 1
 样品架# : 58
 进样体积 : 30 uL
 进样体积分 : Compound 13 (30%乙醇-TD).1cd
 数据文件名 : XF-30%-乙醇-TD.1cm
 方法文件名 : XRU0.1cb
 报告文件名 : XRU0.1cr
 报告文件路径 : C:\Users\Administrator\Desktop\2019-3-7 09:36:11
 采集日期 : 2019-3-7 09:36:11
 数据处理 :

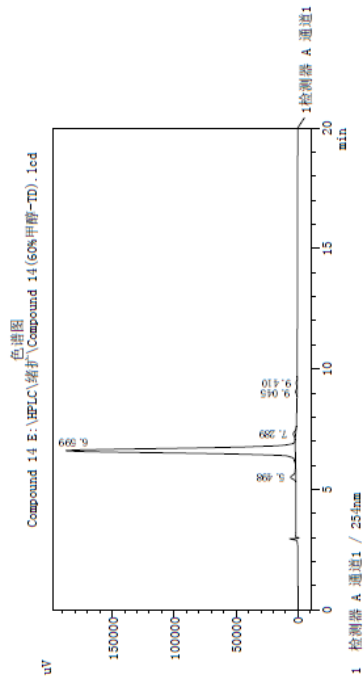


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.747	10627	1321	0.199	0.167
2	13.457	16349	1579	0.306	0.199
3	16.155	5267538	782230	98.729	98.781
4	18.270	40863	6757	0.766	0.853
总计		5333373	791887	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 14
 样品ID : 1
 样品架# : 59
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 14(60%甲醇-TD).1cd
 数据文件名 : XT-60%-甲醇-TD.1cm
 方法文件名 : XRM01.cb
 报告文件名 : XRM01-1.r
 采集日期 : 2019-3-7 14:37:05
 数据收集 : 2019-3-7 15:04:50
 数据处理 :

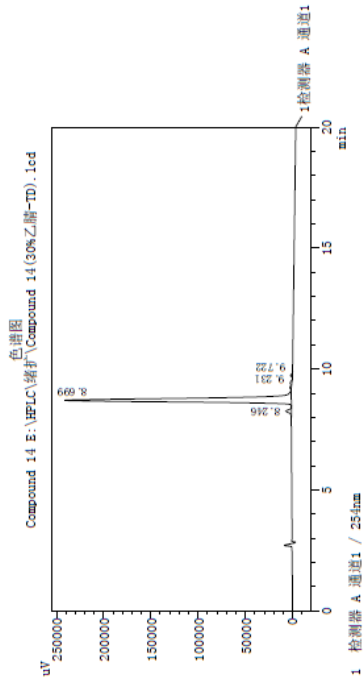


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	5.498	52483	4132	2.061	2.169
2	6.599	2418759	185088	96.117	95.791
3	7.289	24326	1871	0.985	0.968
4	9.045	12363	1224	0.485	0.633
5	9.410	8955	846	0.352	0.438
总计		2546898	193220	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 14
 样品ID : 1
 样品架# : 59
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 14(30%乙醇-TD).1cd
 数据文件名 : XT-30%-乙醇-TD.1cm
 方法文件名 : XRM01.cb
 报告文件名 : XRM01-1.r
 采集日期 : 2019-3-7 09:36:38
 数据收集 : 2019-3-7 09:59:41
 数据处理 :

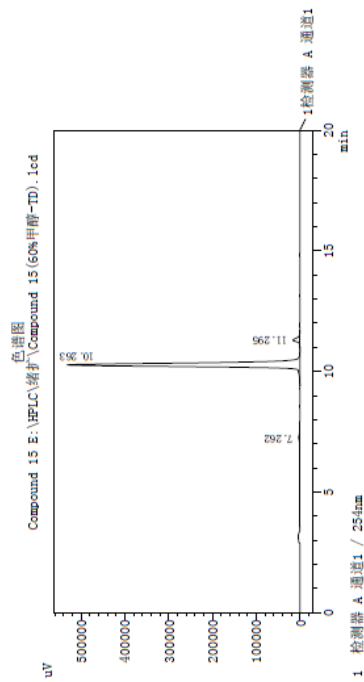


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	5.498	49778	6276	2.053	2.512
2	6.599	233006	239956	96.424	96.081
3	7.289	25096	1618	1.035	0.648
4	9.045	11825	1946	0.488	0.779
总计		2424705	249796	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 15
 样品ID : 1
 样品架# : 1
 样品瓶# : 60
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名 : Compound_15(60%甲醇-TD).1cd
 方法文件名 : XT-60%甲醇-TD.1cm
 数据文件 : XKU0.1cd
 批处理文件名 : XKU0.1cd
 报告文件名 : 2019-3-7 14:50:34
 数据收集 : 2019-3-7 15:33:37
 数据处理 :

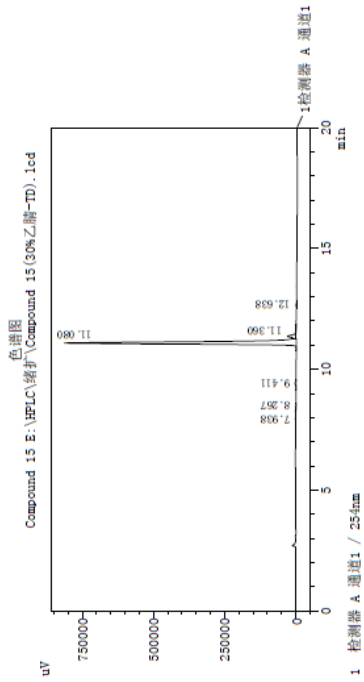


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	7.262	53673	2342	0.517	0.423
2	10.283	523266	532148	96.418	96.565
3	11.295	161821	160410	2.965	2.911
总计		5437760	550830	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 15
 样品ID : 1
 样品架# : 1
 样品瓶# : 60
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名 : Compound_15(30%乙醇-TD).1cd
 方法文件名 : XT-30%乙醇-TD.1cm
 数据文件 : XKU0.1cd
 批处理文件名 : XKU0.1cd
 报告文件名 : 2019-3-7 10:00:08
 数据收集 : 2019-3-7 10:23:11
 数据处理 :



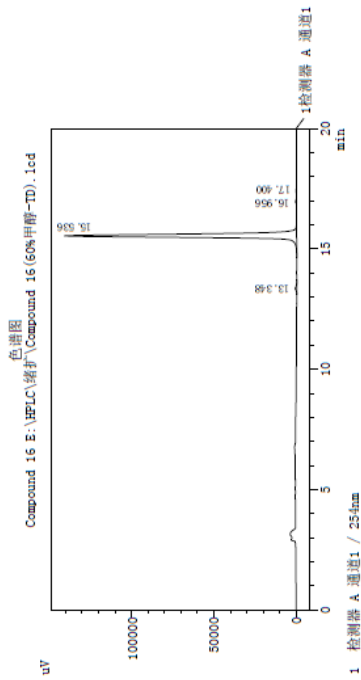
峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	7.335	10969	1305	0.203	0.133
2	8.267	10109	1183	0.187	0.135
3	9.411	29400	3743	0.543	0.439
4	11.000	513840	81435	94.890	95.411
5	11.560	212481	30782	3.923	3.605
6	12.638	14282	2192	0.264	0.257
总计		5445712	853609	100.000	100.000

==== Shimadzu LcSolution 分析报告 ====

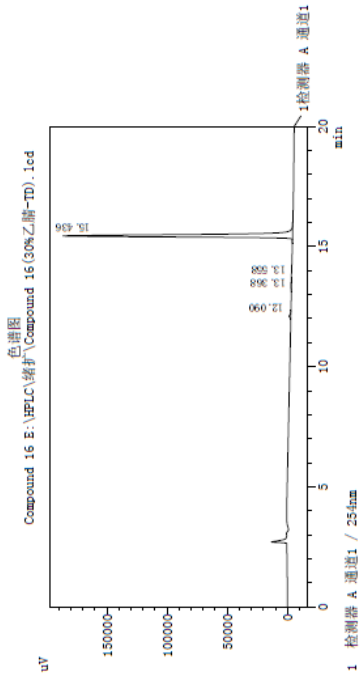
采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 16
 样品ID : 1
 样品架# : 61
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 16 (60%甲醇-TD).lcd
 数据文件名 : XR-60%-甲醇-TD.lcm
 方法文件名 : XRM001.cb
 批处理文件名 : XRM001.cb
 数据文件集 : 2019-3-7 15:44:02
 数据日期 : 2019-3-7 15:37:05
 数据处理 :

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 16
 样品ID : 1
 样品架# : 61
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 16 (30%乙醇-TD).lcd
 数据文件名 : XRM001.cb
 方法文件名 : XRM001.cb
 批处理文件名 : XRM001.cb
 数据文件集 : 2019-3-7 10:23:36
 数据日期 : 2019-3-7 10:46:39
 数据处理 :



峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	13.348	8740	877	0.853	0.614
2	13.536	1319331	141162	98.870	98.763
3	16.956	4357	613	0.327	0.428
4	17.400	1978	250	0.148	0.173
总计		1334405	145921	100.000	100.000

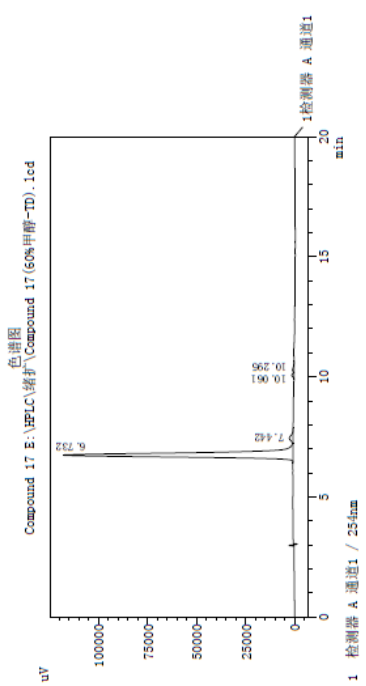


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	12.050	8497	1374	0.662	0.713
2	13.368	39994	273	0.311	0.142
3	13.558	1078	182	0.084	0.094
4	15.436	1269881	190811	98.943	99.051
总计		1283150	152639	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 17
 样品 ID : 1
 样品架# : 62
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 17 (60%甲醇-TD).lcd
 数据文件名 : XR-60%甲醇-TD.lcm
 方法文件名 : XRM001.cb
 批处理文件名 : XRM001.cb
 数据文件 : 2019-9-7 15:37:31
 数据收集 : 2019-9-7 16:00:34
 数据处理 :

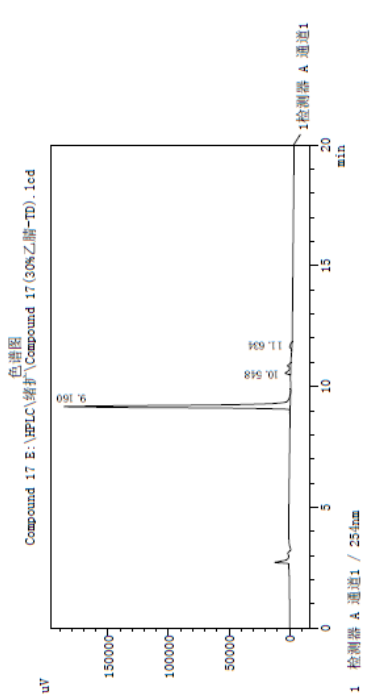


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	6.732	1349366	117237	96.535	96.820
2	7.442	29419	1928	2.105	1.892
3	10.061	10540	1156	0.751	0.953
4	10.295	8477	765	0.606	0.633
总计		1387803	121057	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 17
 样品 ID : 1
 样品架# : 62
 样品瓶# : 30 uL
 进样体积 : Compound 17 (30%乙醇-TD).lcd
 数据文件名 : XR-30%乙醇-TD.lcm
 方法文件名 : XRM001.cb
 批处理文件名 : XRM001.cb
 数据文件 : 2019-9-7 10:47:04
 数据收集 : 2019-9-7 14:36:38
 数据处理 :

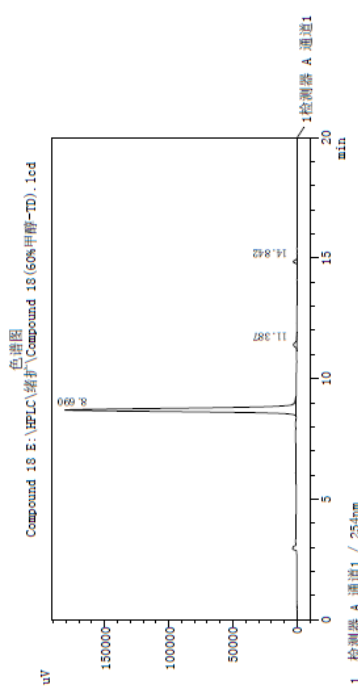


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	9.150	1300054	186763	94.892	96.852
2	10.548	50836	4075	3.710	2.118
3	11.624	19286	1761	1.408	0.928
总计		1370175	192641	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 18
 样品ID : 1
 样品瓶# : 63
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名称 : Compound 18 (60%甲醇-TD).1cd
 方法文件名 : XF-60%甲醇-TD.1cm
 数据文件 : XUKU0.1cb
 报告文件名 : XUKU0.1cr
 报告生成日期 : 2019-3-7 16:00:39
 数据路径 : 2019-3-7 16:27:37
 数据处理

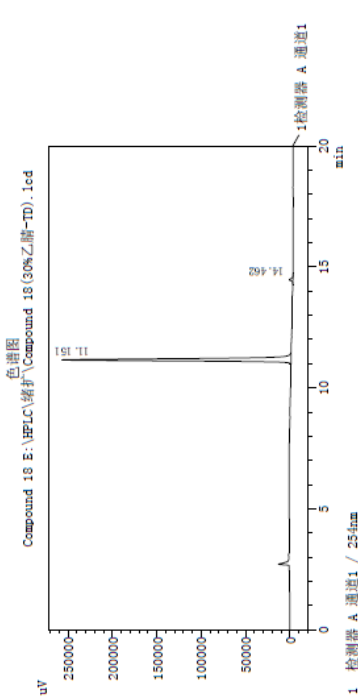


峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	11.387	1733559	180215	96.752	95.832
2	14.827	23231	9754	1.321	1.482
3	14.842	25867	3145	1.427	1.690
总计		1791747	186115	100.000	100.000

==== Shimadzu LCsolution 分析报告 ====

样品信息
 采集人 : Admin
 样品名称 : Compound 18
 样品ID : 1
 样品瓶# : 63
 进样体积 : 30 uL
 数据文件名称 : Compound 18 (30%乙醇-TD).1cd
 方法文件名 : XF-30%乙醇-TD.1cm
 数据文件 : XUKU0.1cb
 报告文件名 : XUKU0.1cr
 报告生成日期 : 2019-3-7 11:10:32
 数据路径 : 2019-3-7 11:33:33
 数据处理



峰表

峰#	保留时间	面积	高度	面积%	高度%
1	11.151	1593630	237530	98.422	98.176
2	14.462	25533	3966	1.578	1.524
总计		1619163	261515	100.000	100.000