スペクトルデータ (NMR MS)

	スペクトルテ	ータ(NMR MS)	
製品番号 24	品名	バイカリン Ba	icalin
分子式	C <sub>21</sub> H <sub>18</sub> O <sub>11</sub>	分子量	446.4
CAS RN	21967-41-9	作成日	2023/11/7
測定核種	<sup>1</sup> H (400MHz)	測定溶媒	DMSO-d <sub>6</sub>
Reference	G. Jakab., et al., AAPS Phari	<i>mSciTech.</i> , <b>2019</b> , <i>20</i> , 8, 3	14.
GlcA-O OH	OH O		
11.0 10	8.00 7.00 8.00 7.00 9.00 8.00 7.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00 1.00	6.0 5.0 4.0 3.0	2.5.268 7.7.268 7.7.268 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.0000 0.000 0.00000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0
分析機器	LCMS (Q-TOF)	イオン化法	ESI (positive ion mode)
AS(+) 保持時間: [12.697-12.877]-[12.690-12.892] 0e2 0e2 0e2 0e2 0e2 0e2 0e2		447.09 448.10	5.0
	434 436 438 440 442 444 344 47.09	446 448 450 452 454	456 458 460 462 464 466