

# A Convenient Synthesis of Isotellurazoles *via* Deoxygenation of Isotellurazole Oxide Oligomers by Using a Combination of Ph<sub>3</sub>P/I<sub>2</sub>

Yusuke Taneichi, Kazuaki Shimada,\* and Toshinobu Korenaga  
Department of Chemistry and Biosciences, Faculty of Science and Engineering,  
Iwate University, Morioka, Iwate 020-8551, Japan  
E-mail: [Shimada@iwate-u.ac.jp](mailto:Shimada@iwate-u.ac.jp)

## Supporting Information

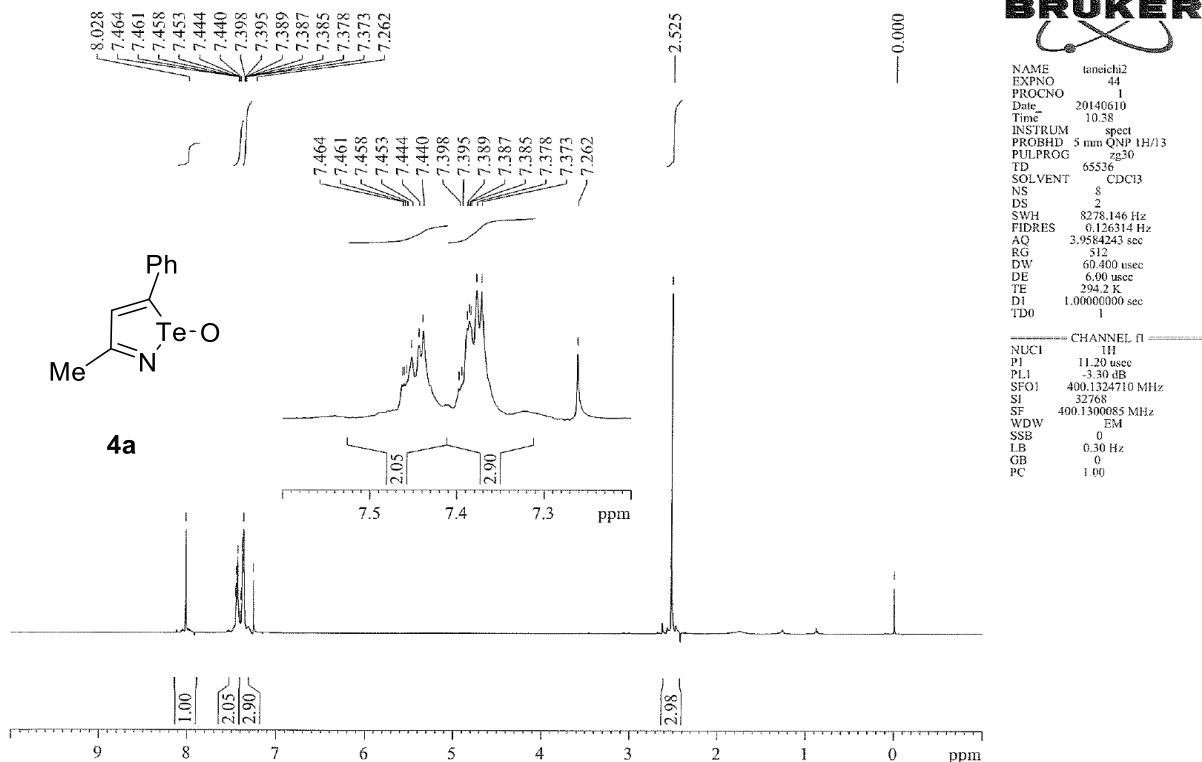
<b>Table of Contents</b>	<b>Page</b>
I. General Information	S2
II. <sup>1</sup> H and <sup>13</sup> C NMR Spectra of Isotellurazole <i>Te</i> -Oxides <b>4</b>	S3–7
III. IR Spectra of Isotellurazole <i>Te</i> -Oxides <b>4</b>	S8–13
IV. ESI Mass Spectra of Isotellurazole <i>Te</i> -Oxides <b>4</b>	S14–16
V. HRMS or Elemental Analysis of Isotellurazole <i>Te</i> -Oxides <b>4</b>	S17–18
VI. <sup>1</sup> H and <sup>13</sup> C NMR Spectra of Isotellurazoles <b>5</b>	S19–24
VII. IR Spectra of Isotellurazoles <b>5</b>	S25–30
VIII. HRMS or Elemental Analysis of Isotellurazoles <b>5</b>	S31–32

## **I. General Information**

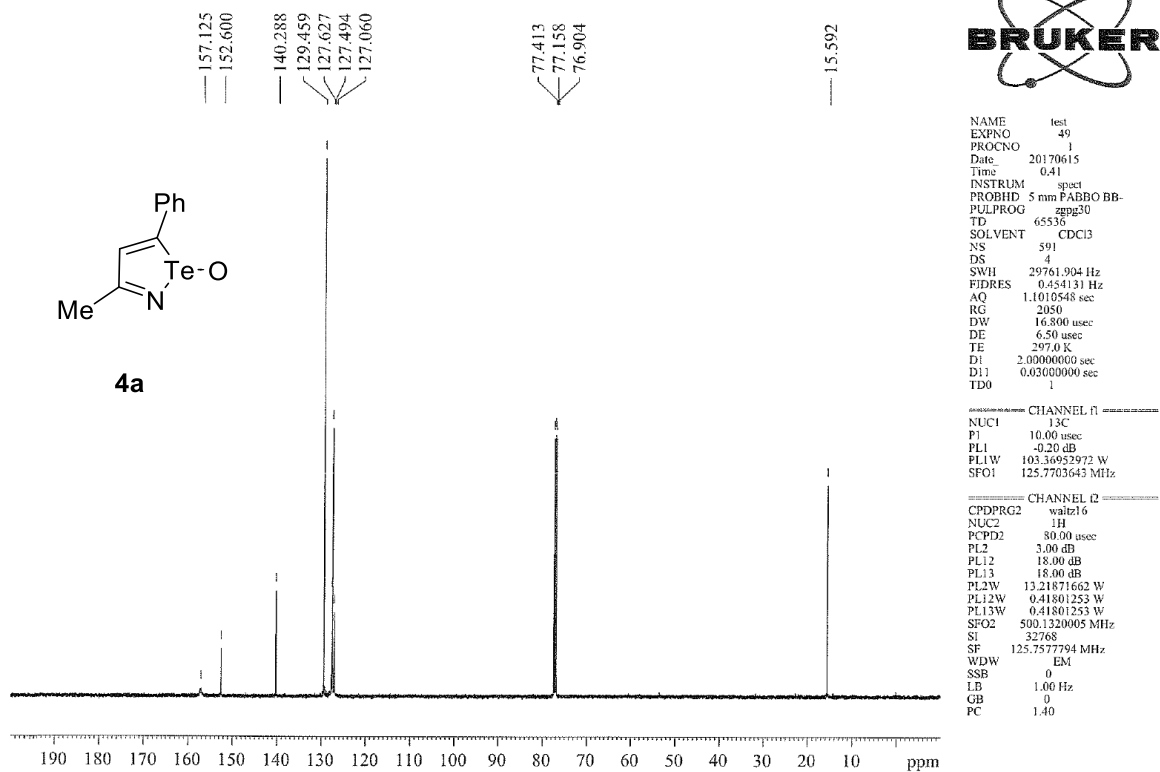
The melting points were determined with a Barnstead International MEL-TEMP.  $^1\text{H}$  NMR spectra were recorded on Bruker DRX-400P (400 MHz) or Bruker AVANCE III 500 (500 MHz) Spectrometer, and the chemical shifts of the  $^1\text{H}$  NMR spectra were given in  $\delta$  relative to internal tetramethylsilane (TMS).  $^{13}\text{C}$  NMR spectra were recorded on a Bruker DRX-400P (101 MHz) AVANCE III 500 (126 MHz).  $^{125}\text{Te}$  NMR Spectra were recorded on Bruker AVANCE III 500 (158 MHz). Mass Spectra were recorded on a JEOL JMS-700 mass spectrometer with electron-impact ionization or Electrospray Ionization. High resolution mass spectra (HRMS) were also recorded on JEOL JMS-700 spectrometer. IR (FT-IR) spectra were recorded for neat or KBr disk on JASCO FT/IR-7300 spectrometer. Elemental analyses were performed using a Yanagimoto CHN corder MT-5.

## II. <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR Spectra of Isotellurazole Te-Oxides

<sup>1</sup>H NMR

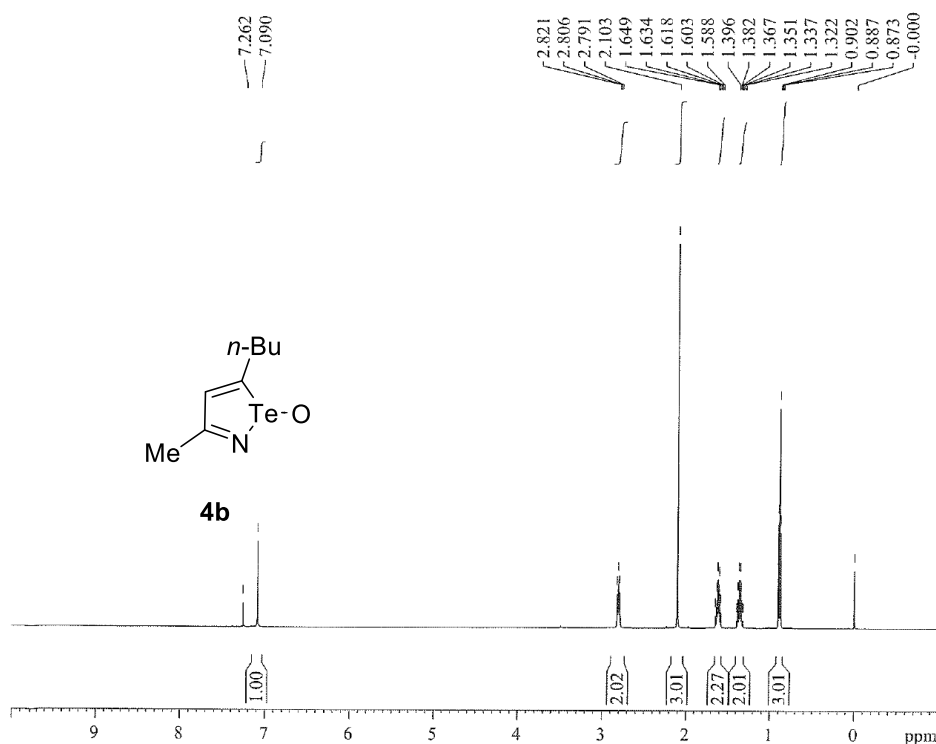


<sup>1</sup>H NMR of 4a



<sup>13</sup>C NMR of 4a

<sup>1</sup>H NMR

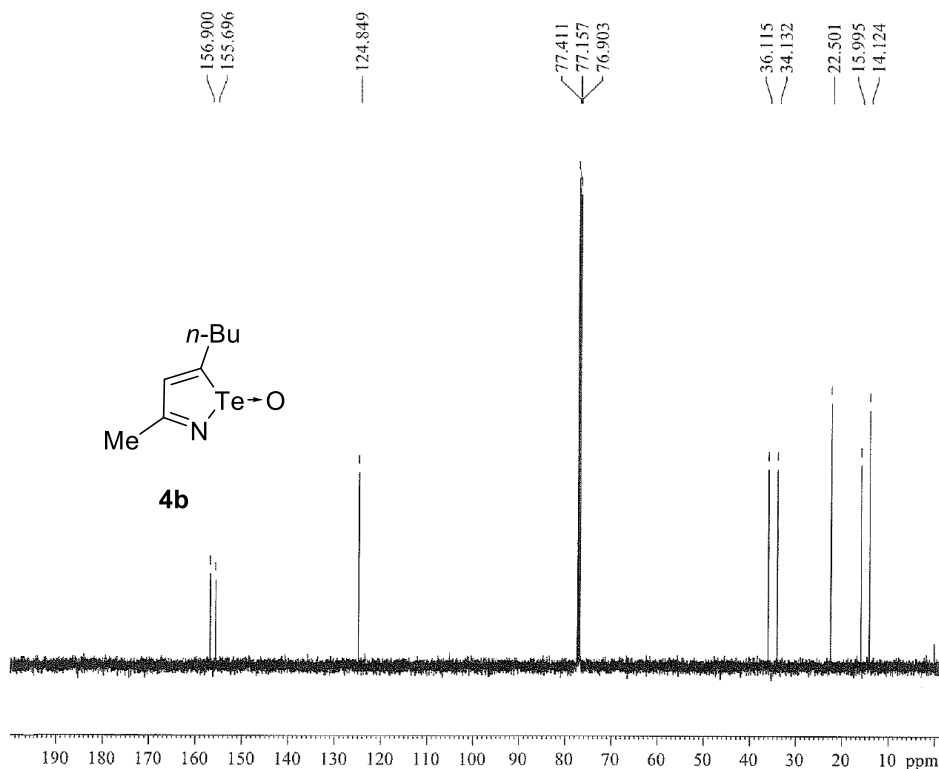


NAME test  
 EXPNO 31  
 PROCNO 1  
 Date\_ 20170613  
 Time 22:55  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 128  
 DW 48.400 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 294.9 K  
 D1 1.00000000 sec  
 TDO 1

----- CHANNEL f1 -----  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1330885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1300127 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of 4b

<sup>13</sup>C NMR CPD



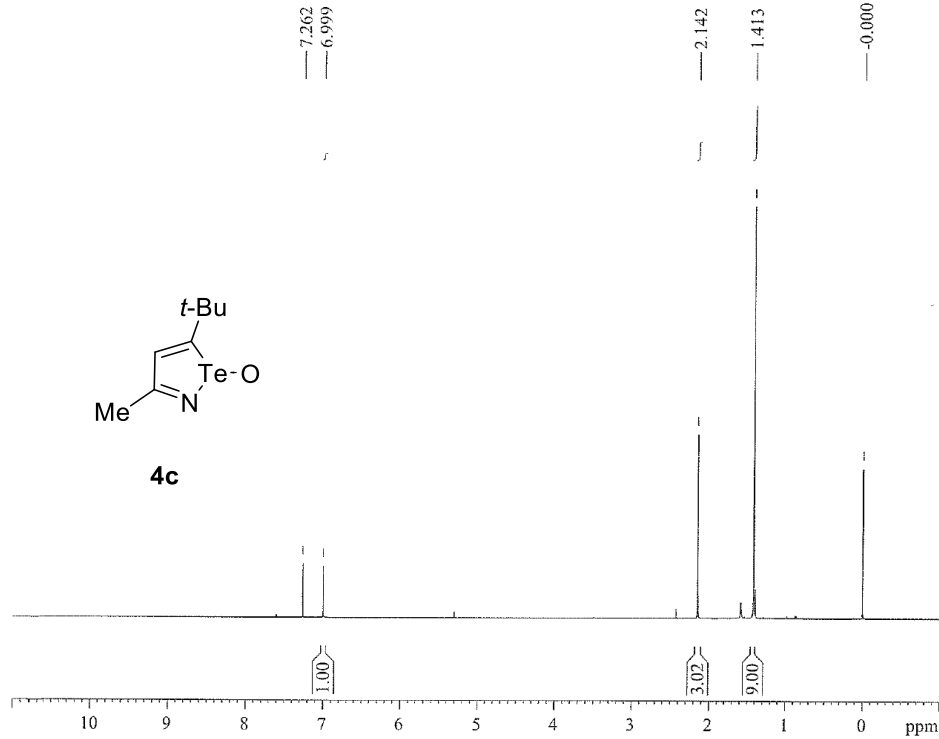
NAME test  
 EXPNO 32  
 PROCNO 1  
 Date\_ 20170613  
 Time 23:05  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 60  
 DS 4  
 SWH 29761.904 Hz  
 FIDRES 0.454131 Hz  
 AQ 1.1010548 sec  
 RG 2050  
 DW 16.800 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 295.9 K  
 D1 2.00000000 sec  
 D11 0.03000000 sec  
 TDO 1

----- CHANNEL f1 -----  
 NUC1 13C  
 P1 16.00 usec  
 PL1 -0.20 dB  
 PL1W 103.36952972 W  
 SFO1 125.7703643 MHz

----- CHANNEL f2 -----  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 80.00 usec  
 PL2 3.00 dB  
 PL12 18.00 dB  
 PL13 18.00 dB  
 PL2W 13.21871662 W  
 PL12W 0.41801253 W  
 PL13W 0.41801253 W  
 SFO2 500.1330065 MHz  
 SI 32768  
 SF 125.7377739 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 4b

<sup>1</sup>H NMR

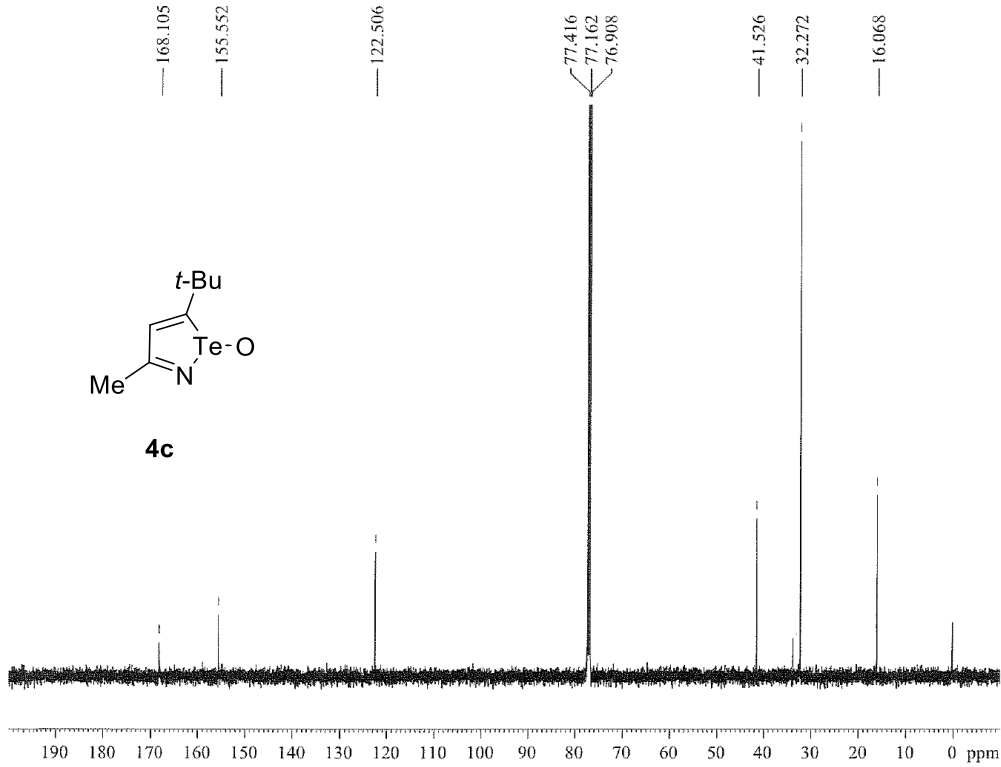


NAME test  
EXPNO 29  
PROCNO 1  
Date 20170612  
Time 10.23  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 8  
DS 2  
SWH 10530.578 Hz  
FIDRES 0.157632 Hz  
AQ 3.1719923 sec  
RG 203  
DW 48.400 usec  
DE 6.50 usec  
TE 294.6 K  
D1 1.00000000 sec  
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
NUC1 1H  
P1 15.00 usec  
PL1 2.50 dB  
PL1W 14.83164406 W  
SFO1 500.1330885 MHz  
SI 32768  
SF 500.1300125 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.30 Hz  
GB 0  
PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of 4c

<sup>13</sup>C NMR CPD

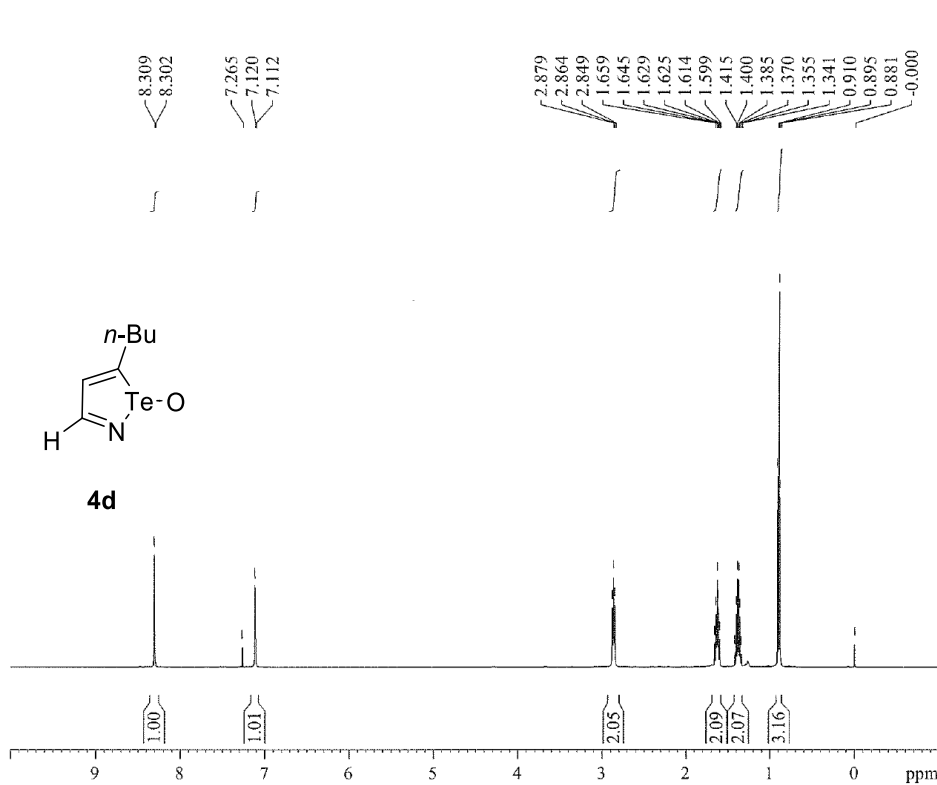


NAME test  
EXPNO 38  
PROCNO 1  
Date 20170614  
Time 0.15  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zgpg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 848  
DS 4  
SWH 29761.904 Hz  
FIDRES 0.454131 Hz  
AQ 1.1010548 sec  
RG 2050  
DW 16.800 usec  
DE 6.50 usec  
TE 298.5 K  
D1 2.00000000 sec  
D11 0.03000000 sec  
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
NUC1 13C  
P1 10.00 usec  
PL1 -0.20 dB  
PL1W 103.36952972 W  
SFO1 125.7703643 MHz

===== CHANNEL f2 =====  
CPDPRG2 waltz16  
NUC2 1H  
PCPD2 80.00 usec  
PL2 3.00 dB  
PL12 18.00 dB  
PL13 18.00 dB  
PL2W 13.21571662 W  
PL12W 0.41801253 W  
PL13W 0.41801253 W  
SFO2 500.1320005 MHz  
SI 32768  
SF 125.7577712 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 1.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 4c

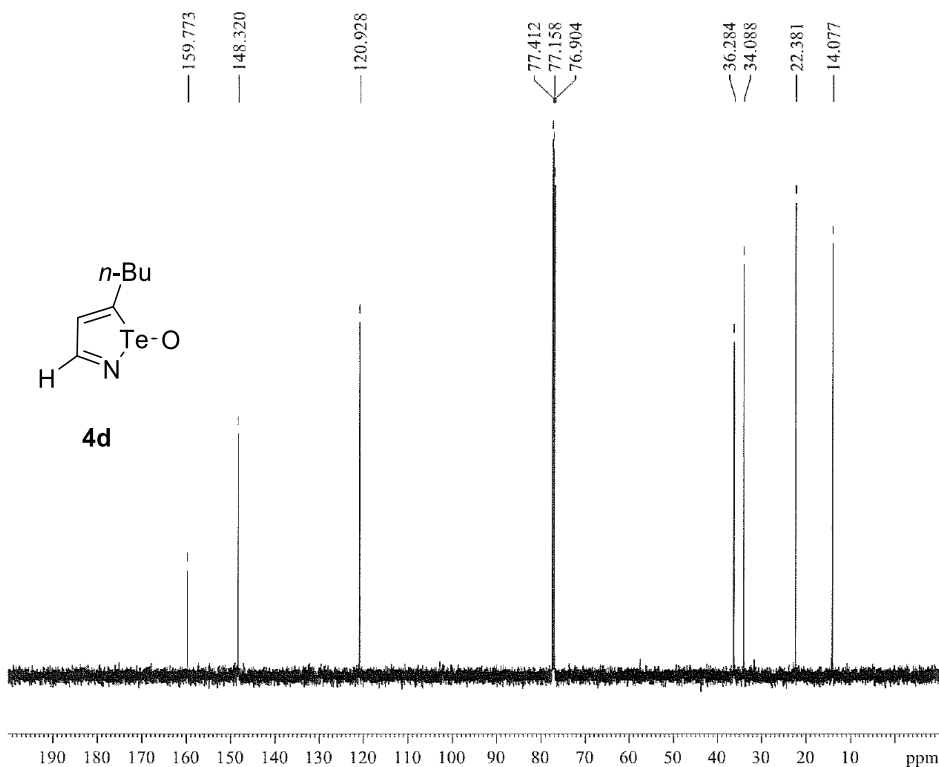


NAME exp 575  
 EXPNO 10  
 PROCNO 1  
 Date 20170222  
 Time 10.25  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65336  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 80.6  
 DW 48.460 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 293.3 K  
 D1 1.00000000 sec  
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1330885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1330108 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of 4d

<sup>13</sup>C NMR CPD



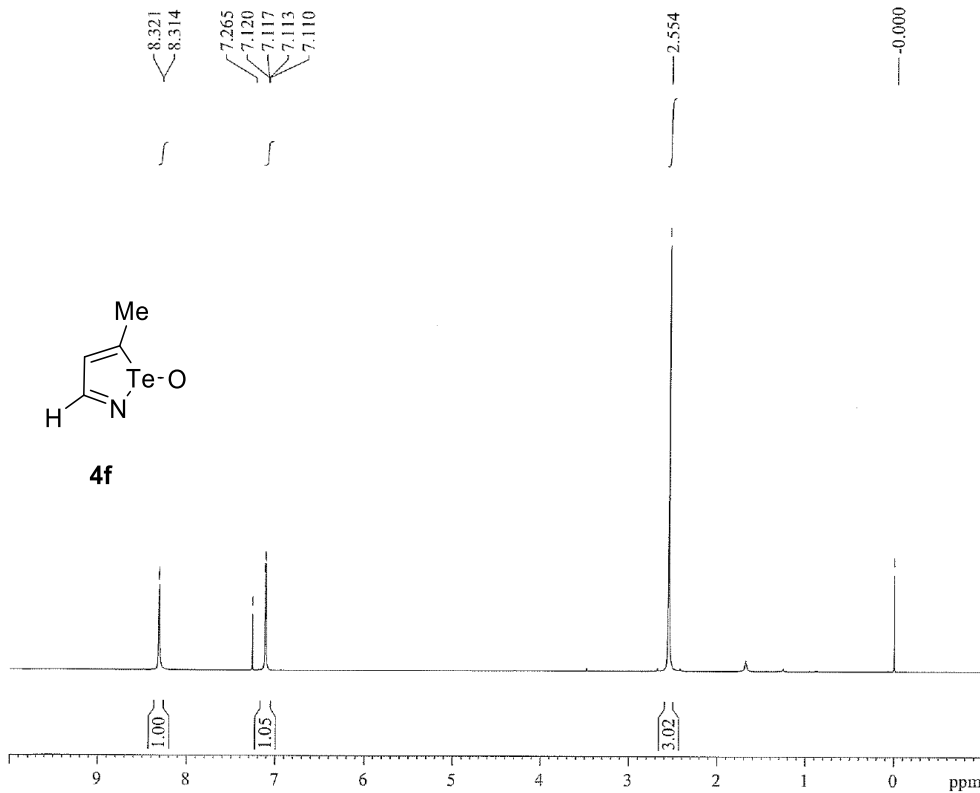
NAME exp 575  
 EXPNO 11  
 PROCNO 1  
 Date 20170222  
 Time 10.32  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65336  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 46  
 DS 4  
 SWH 29761.904 Hz  
 FIDRES 0.454131 Hz  
 AQ 1.1010548 sec  
 RG 2050  
 DW 16.800 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 294.3 K  
 D1 2.00000000 sec  
 D11 0.03000000 sec  
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
 NUC1 13C  
 P1 10.00 usec  
 PL1 -0.20 dB  
 PL1W 103.36952972 W  
 SFO1 125.7703643 MHz

===== CHANNEL f2 =====  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 80.00 usec  
 PL2 3.00 dB  
 PL12 18.00 dB  
 PL13 18.00 dB  
 PL2W 13.21871662 W  
 PL12W 0.41801253 W  
 PL13W 0.41801253 W  
 SFO2 500.1320005 MHz  
 SI 32768  
 SF 125.7577766 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 4d

<sup>1</sup>H NMR

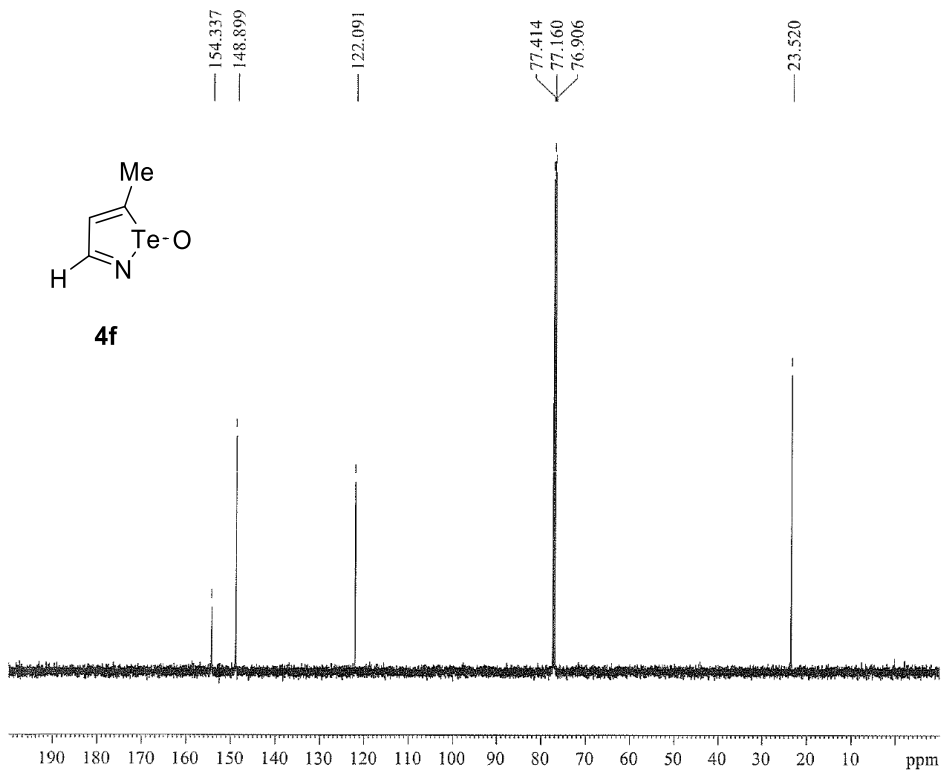


NAME exp 380  
 EXPNO 1  
 PROCNO 1  
 Date 20150922  
 Time 17.22  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 161  
 DW 48.400 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 295.5 K  
 D1 1.0000000 sec  
 TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1330885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1300108 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.60

<sup>1</sup>H NMR of 4f

<sup>13</sup>C NMR CPD



NAME exp 380  
 EXPNO 2  
 PROCNO 1  
 Date 20150922  
 Time 17.35  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 110  
 DS 4  
 SWH 29761.904 Hz  
 FIDRES 0.454131 Hz  
 AQ 1.1010545 sec  
 RG 2050  
 DW 16.800 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 296.5 K  
 D1 2.0000000 sec  
 D11 0.0360000 sec  
 TD0 1

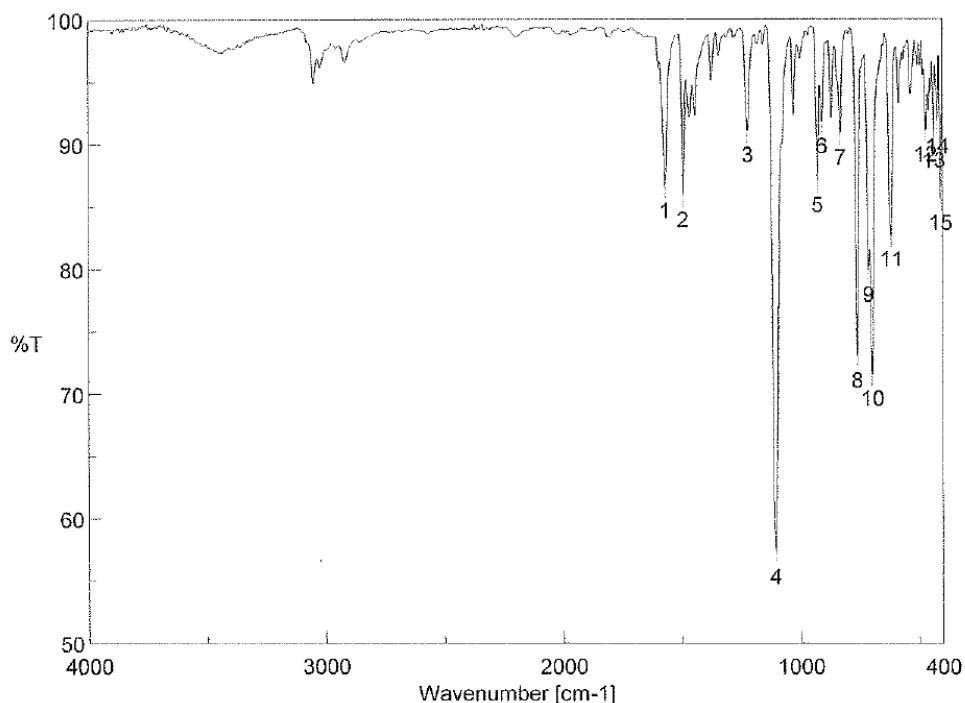
===== CHANNEL f1 =====  
 NUC1 13C  
 P1 10.00 usec  
 PL1 -0.20 dB  
 PL1W 103.36952972 W  
 SFO1 125.7703645 MHz

===== CHANNEL f2 =====  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 FCPD2 80.00 usec  
 PL2 3.00 dB  
 PL12 18.00 dB  
 PL13 18.00 dB  
 PL2W 13.21871662 W  
 PL12W 0.41801253 W  
 PL13W 0.41801253 W  
 SFO2 500.1320005 MHz  
 SI 32768  
 SF 125.7577748 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 4f

### III. IR Spectra of Isotellurazole Te-Oxides 4

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社

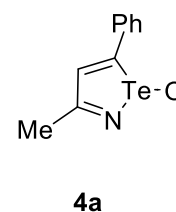
岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/14 9:49  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm⁻¹]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm⁻¹  
エンド 5000.51 cm⁻¹  
データ間隔 0.964233 cm⁻¹  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B001661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm⁻¹  
ゼロフィリング On  
アボダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

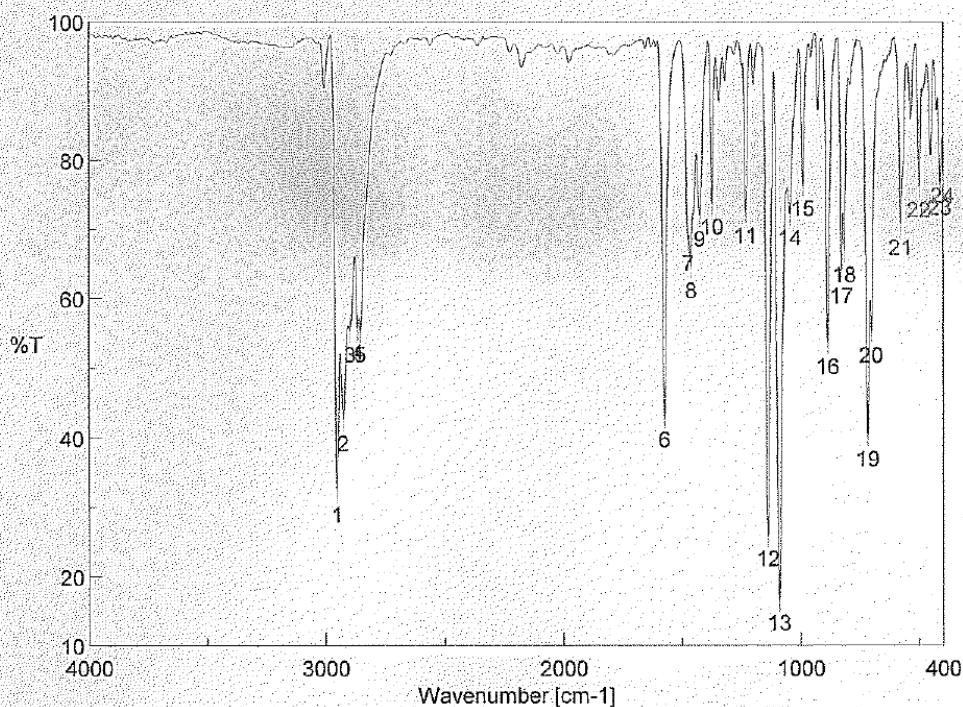


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	1568.8	86.61	2	1492.6	85.8763	3	1221.7	91.0797
4	1106.0	57.2785	5	926.6	87.0559	6	907.3	91.7937
7	830.2	90.8856	8	760.8	73.0148	9	712.6	79.8958
10	697.1	71.5903	11	616.2	82.6989	12	470.6	91.1144
13	436.8	90.6345	14	421.4	91.7711	15	407.9	85.6435

### IR Spectra of 4a

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

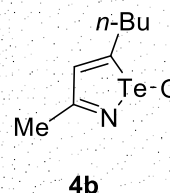
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社 岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/14 9:29  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 5000.51 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
オーバーチャージ Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

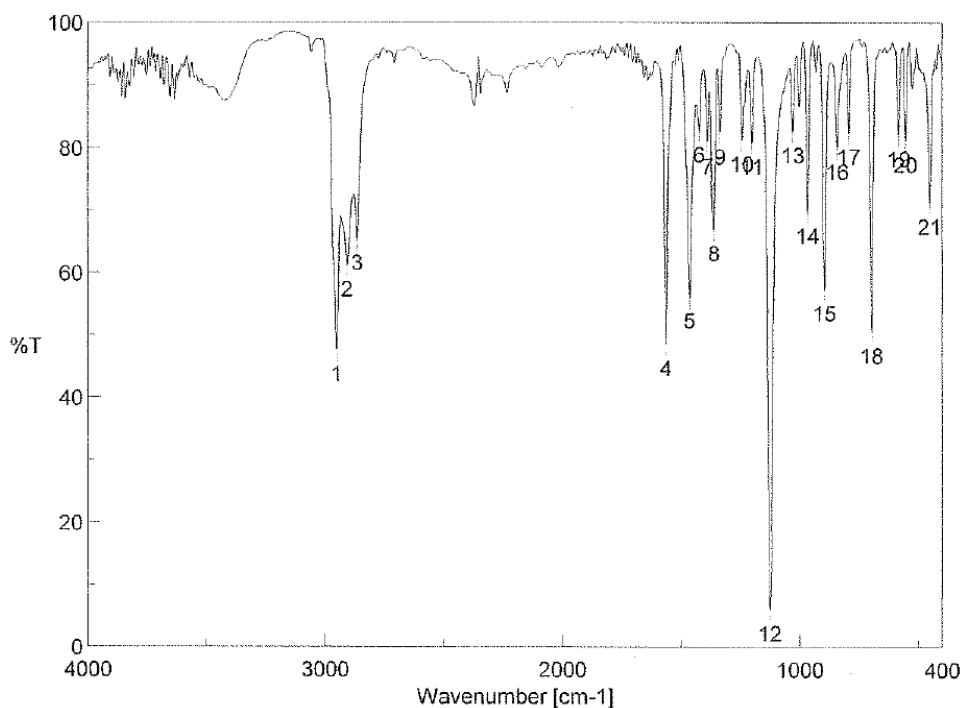


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2953.5	32.3883	2	2927.4	42.628	3	2899.5	55.3767
4	2867.6	55.7634	5	2855.1	55.3946	6	1574.6	43.2025
7	1475.3	68.5962	8	1463.7	64.6337	9	1426.1	72.1265
10	1374.0	73.8867	11	1232.3	72.5933	12	1138.8	26.0545
13	1091.5	16.7245	14	1046.2	72.2704	15	991.2	76.5219
16	887.1	53.7058	17	829.2	63.9056	18	817.7	66.893
19	718.4	40.3938	20	702.9	55.3155	21	578.5	70.8235
22	500.4	76.3029	23	413.7	76.6357	24	401.1	78.3785

IR Spectra of 4b

ピーク検出 - Memory-7



[コメント情報]

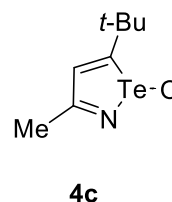
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社 岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/14 9:17  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 5000.51 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

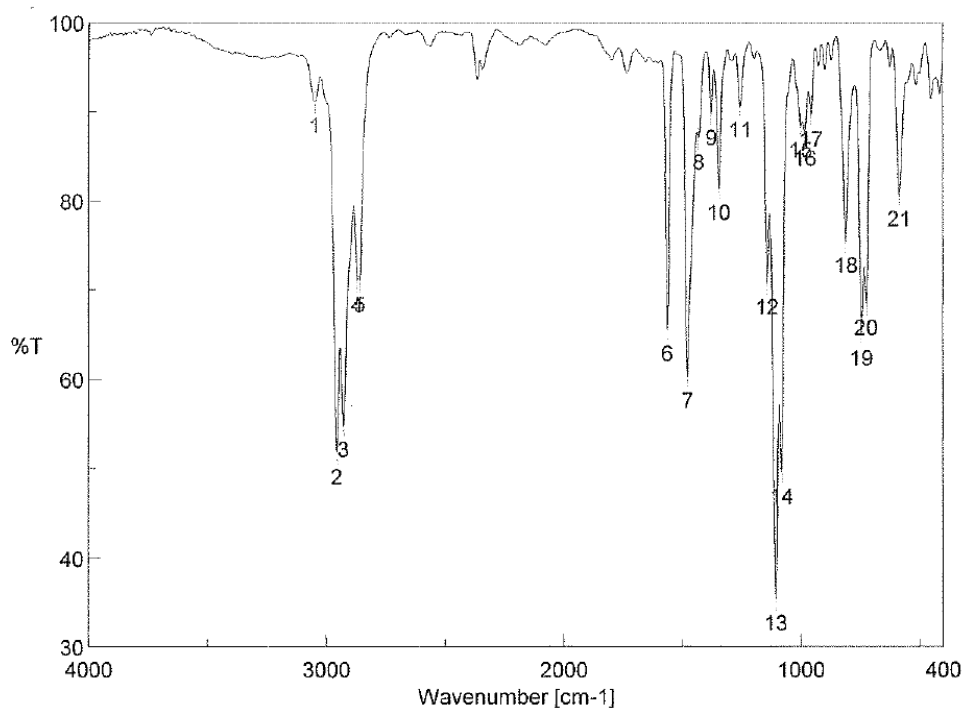


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2951.5	47.6042	2	2908.1	61.1352	3	2865.7	65.3601
4	1564.0	48.5205	5	1464.7	56.1027	6	1424.2	82.7305
7	1389.5	80.9236	8	1362.5	66.8823	9	1336.4	82.3891
10	1243.9	81.2544	11	1202.4	80.8334	12	1125.3	5.98899
13	1029.8	82.6692	14	967.1	69.7715	15	896.7	57.3103
16	842.7	80.038	17	794.5	82.451	18	697.1	50.5496
19	584.3	82.0551	20	554.4	81.1762	21	451.3	71.2513

IR Spectra of 4c

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

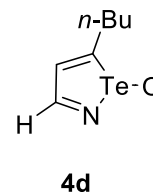
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社  
岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/02/22 14:38  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 7800.65 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 7729

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 16  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

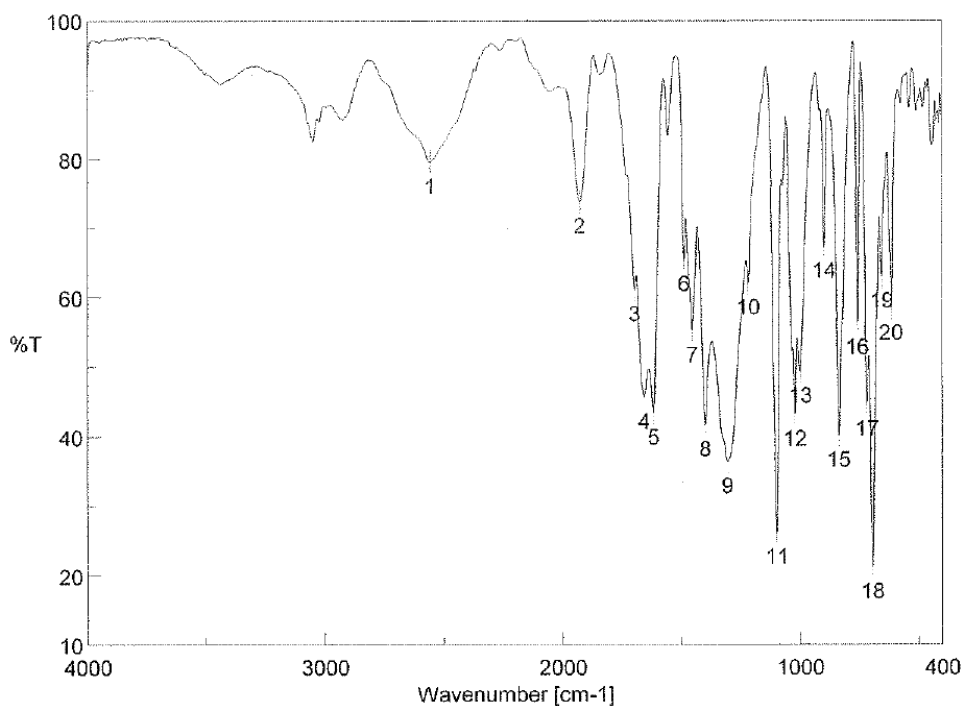


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	3045.1	91.1695	2	2954.4	51.788	3	2926.5	54.842
4	2867.6	71.0357	5	2857.0	71.0142	6	1561.1	65.5889
7	1477.2	60.3341	8	1430.0	87.1057	9	1376.9	89.8315
10	1344.1	81.426	11	1254.5	90.6993	12	1141.7	70.8077
13	1106.0	35.3773	14	1080.9	49.6249	15	999.9	88.4799
16	982.6	87.5312	17	955.6	89.6584	18	810.0	75.4956
19	744.4	65.0715	20	723.2	68.4639	21	584.3	80.7073

IR Spectra of 4d

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

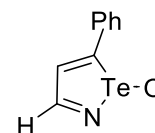
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社 岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/13 15:11  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 5000.51 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (16)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)



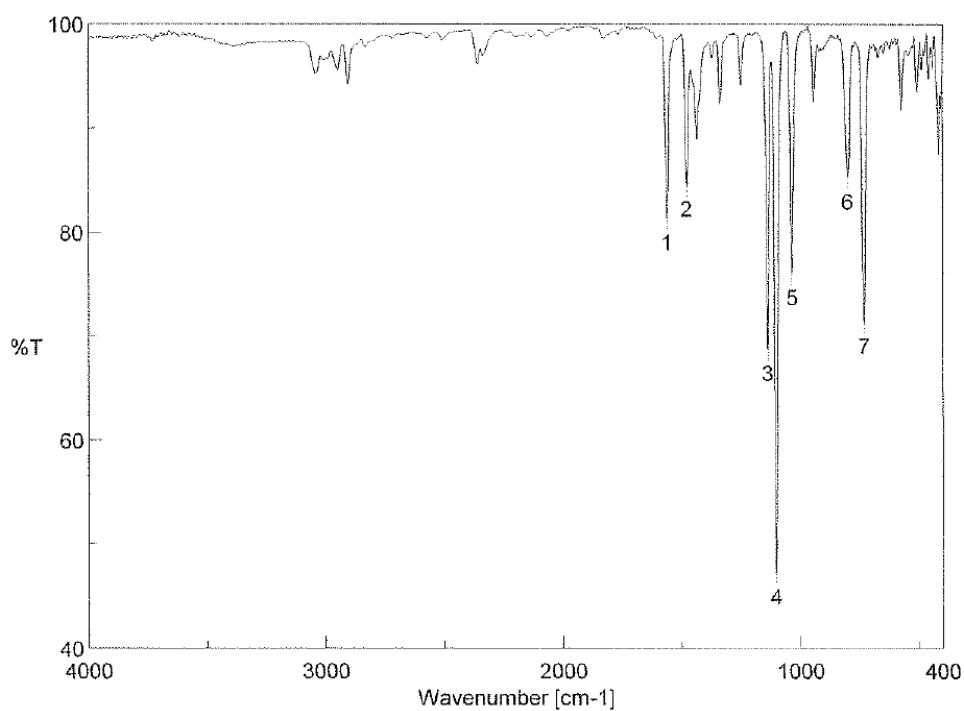
4e

[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2557.2	79.6086	2	1925.6	73.8482	3	1697.1	61.1072
4	1657.5	45.6273	5	1618.0	43.3988	6	1487.8	65.4488
7	1454.1	55.2071	8	1399.1	41.6748	9	1304.6	36.4053
10	1217.8	62.0787	11	1098.3	26.1895	12	1021.1	43.1776
13	999.0	49.3511	14	897.7	67.3664	15	836.0	40.1452
16	756.9	56.294	17	718.4	44.64	18	694.3	21.1496
19	655.7	63.0284	20	613.3	58.3604			

IR Spectra of 4e

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

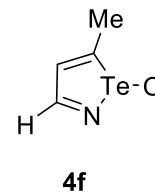
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社 岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/14 9:40  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 5000.51 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)



[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	1563.0	81.3269	2	1479.1	84.5444	3	1138.8	68.7728
4	1103.1	47.3001	5	1036.6	76.0304	6	801.3	85.2683
7	732.8	71.3867						

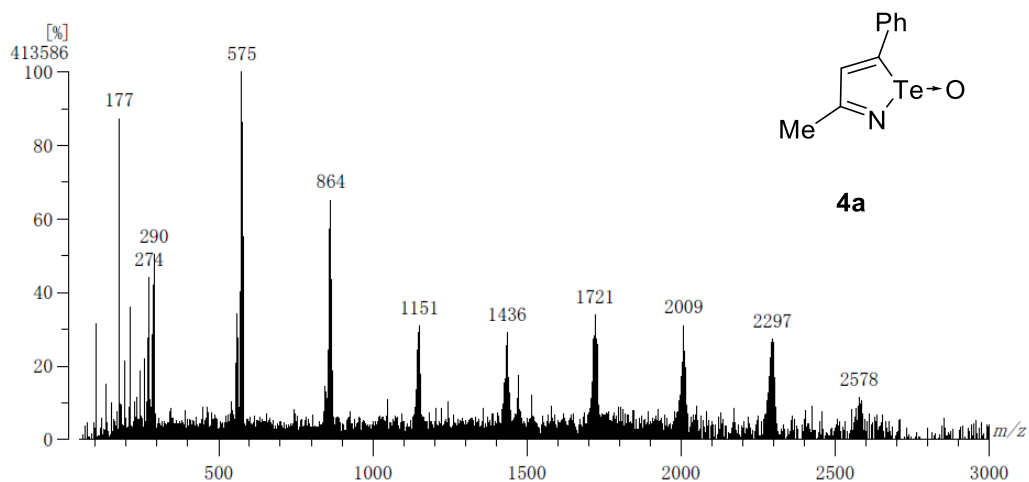
IR Spectra of 4f

#### IV. ESI Mass Spectra of Isotellurazole *Te*-Oxides 4

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-289 Date : 19-May-2017 09:39

RT : 1.00 min Scan# : (3,5)

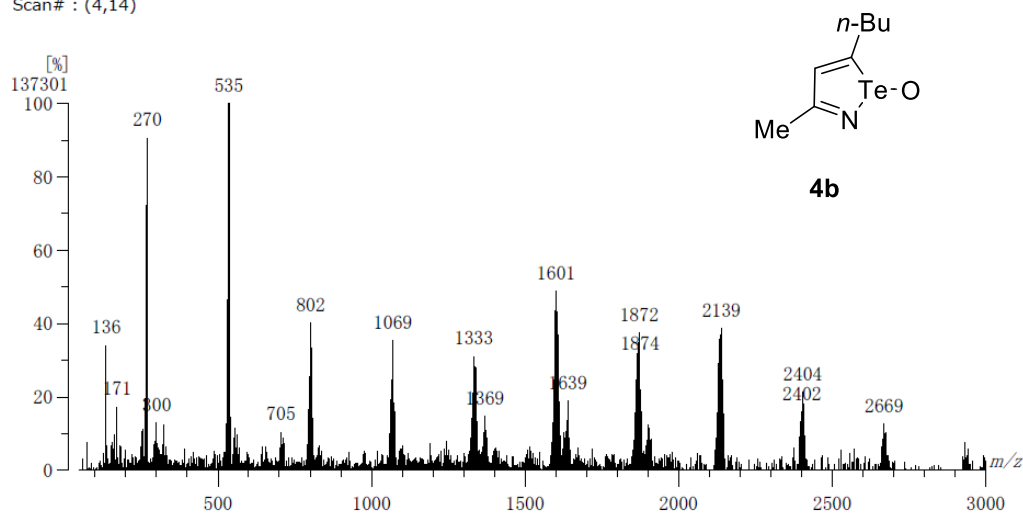


#### ESI MS of 4a

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-269-90V10uL34sec Date : 14-Apr-2017 15:15

RT : 1.50 min Scan# : (4,14)

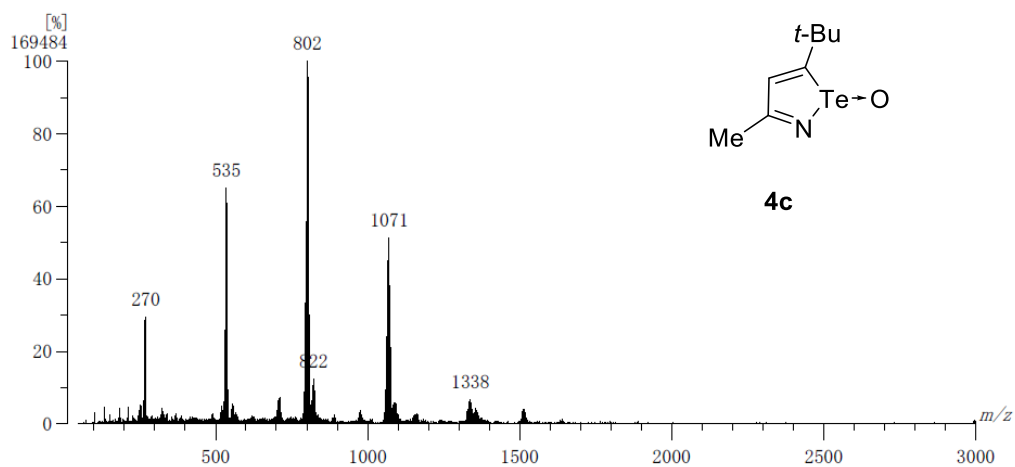


#### ESI MS of 4b

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-269-tBuMe Date : 19-May-2017 10:20

RT : 1.00 min Scan# : (3,14)

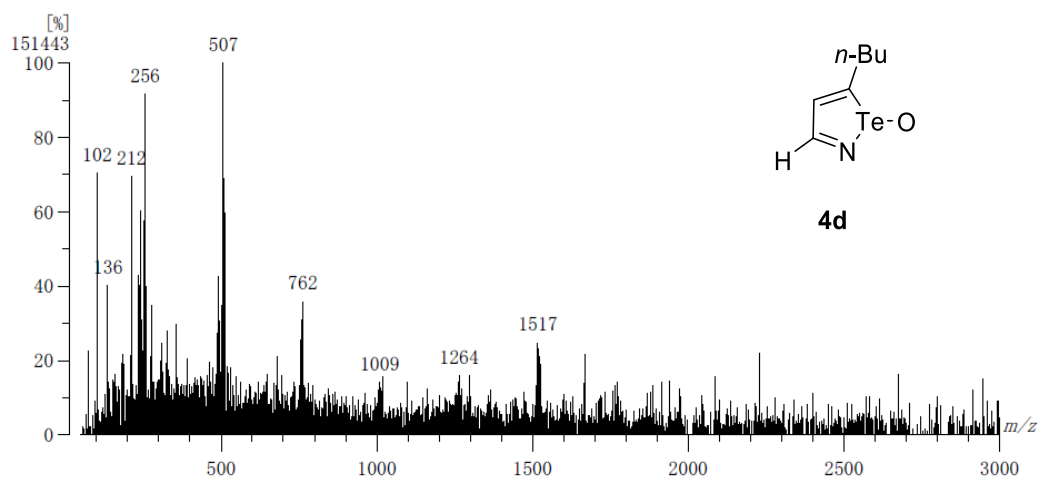


### ESI MS of **4c**

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-255 Date : 22-May-2017 11:07

RT : 0.50 min Scan# : (2,6)

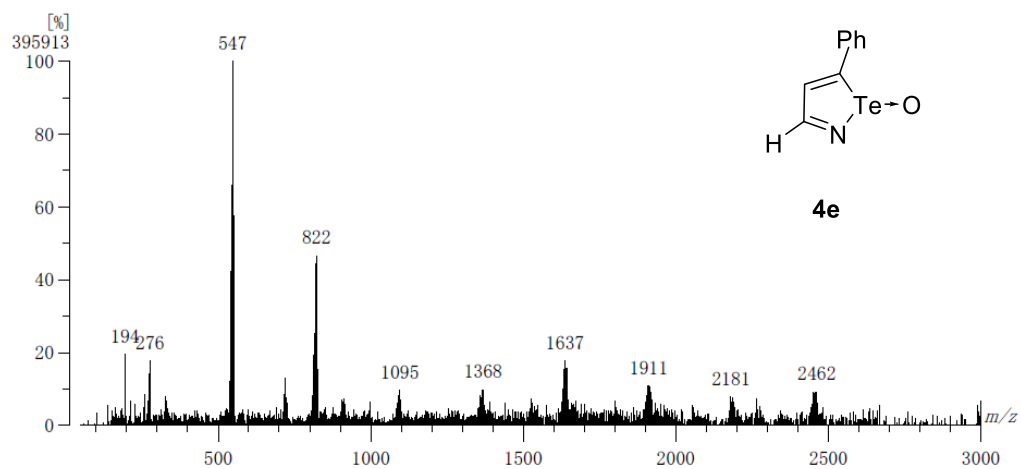


### ESI MS of **4d**

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-275 Date : 22-May-2017 11:44

RT : 1.00 min Scan# : (3,8)

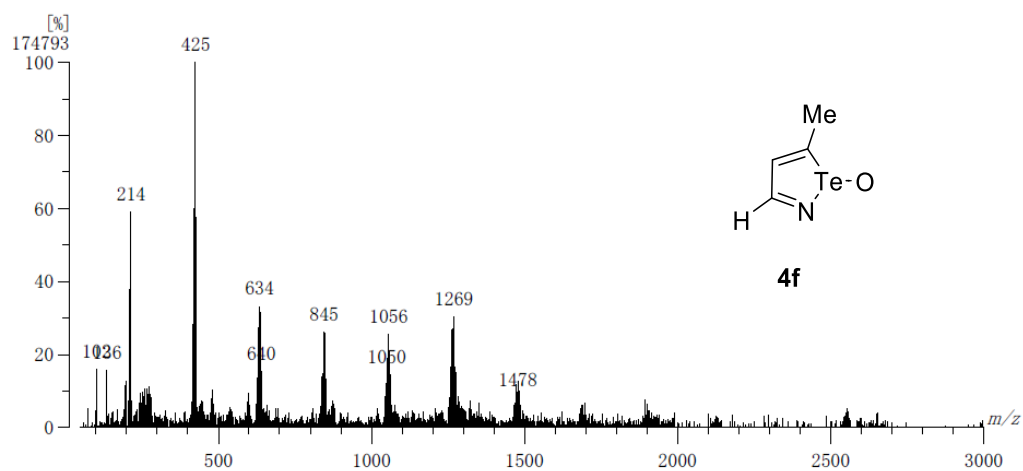


ESI MS of **4e**

[ Mass Spectrum ]

Data : ESI+taneichi-212-ESI+90V20uL34sec Date : 14-Apr-2017 16:34

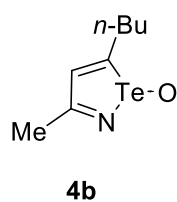
RT : 1.50 min Scan# : (4,15)



ESI MS of **4f**

## V. HRMS or Elemental Analysis of Isotellurazole *Te*-Oxides 4

Analytical Data(%)	
C :	36.00
H :	4.90
N :	5.28

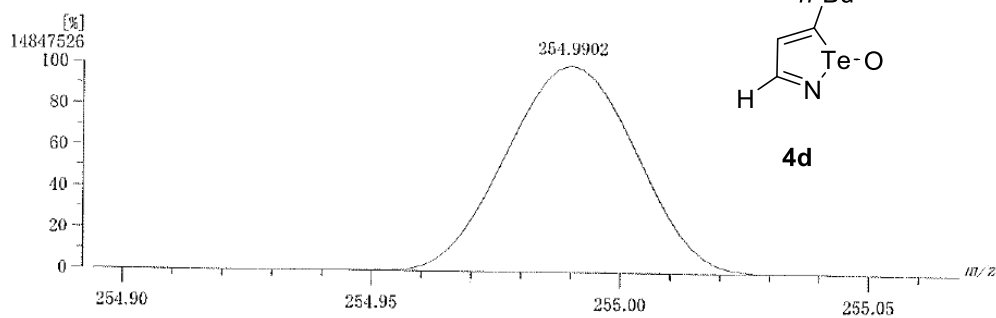


### Elemental Analysis of 4b

[ Mass Spectrum ]

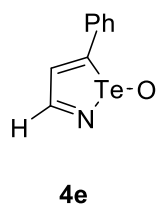
Data : EI+HR-taneichi-254 Date : 23-Feb-2017 16:08

RT : 0.88 min Scan# : (27,31)



### HRMS of 4d

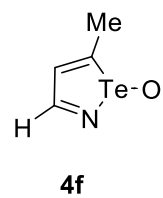
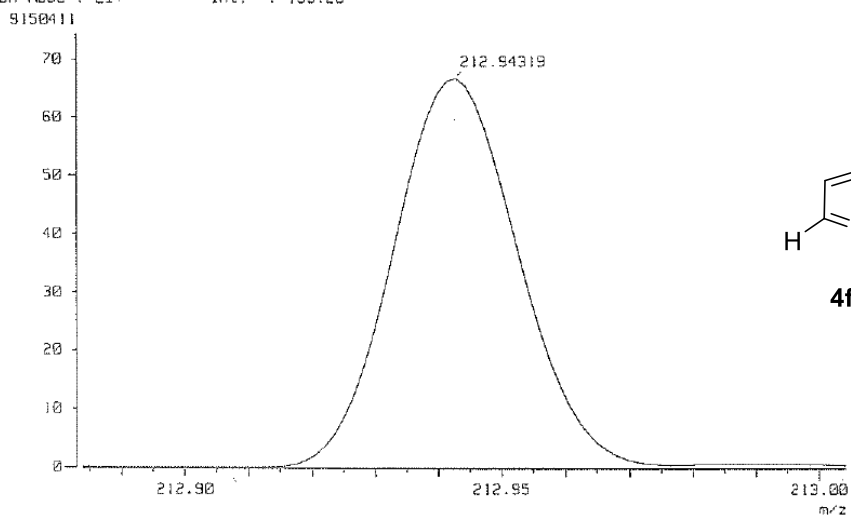
Analytical Data(%)	
C :	39.62
H :	2.70
N :	5.13



### Elemental Analysis of 4e

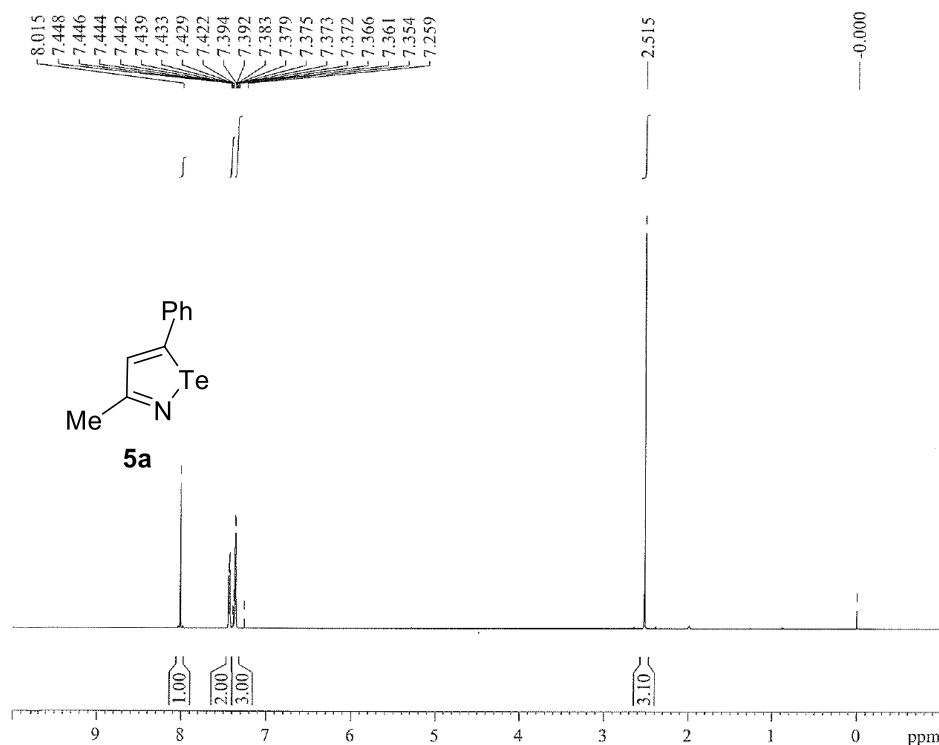
[ Mass Spectrum ]  
RT : 1.38 min  
Ion Mode : EI+

Scan# : (15,20)  
Int. : 195.28



# VI. <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR Spectra of Isotellurazoles

<sup>1</sup>H NMR

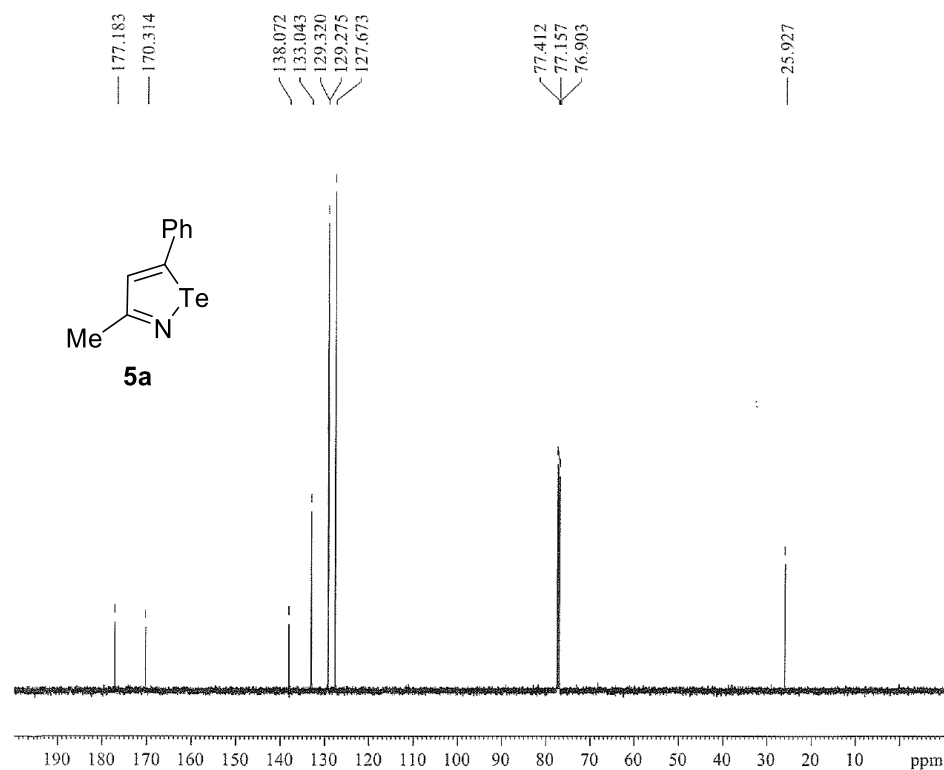


NAME test  
 EXPNO 42  
 PROCNO 1  
 Date 20170614  
 Time 16.40  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 101  
 DW 48.400 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 295.7 K  
 D1 1.00006000 sec  
 TD0 1

CHANNEL 1  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1330885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1330140 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of 5a

<sup>13</sup>C NMR CPD



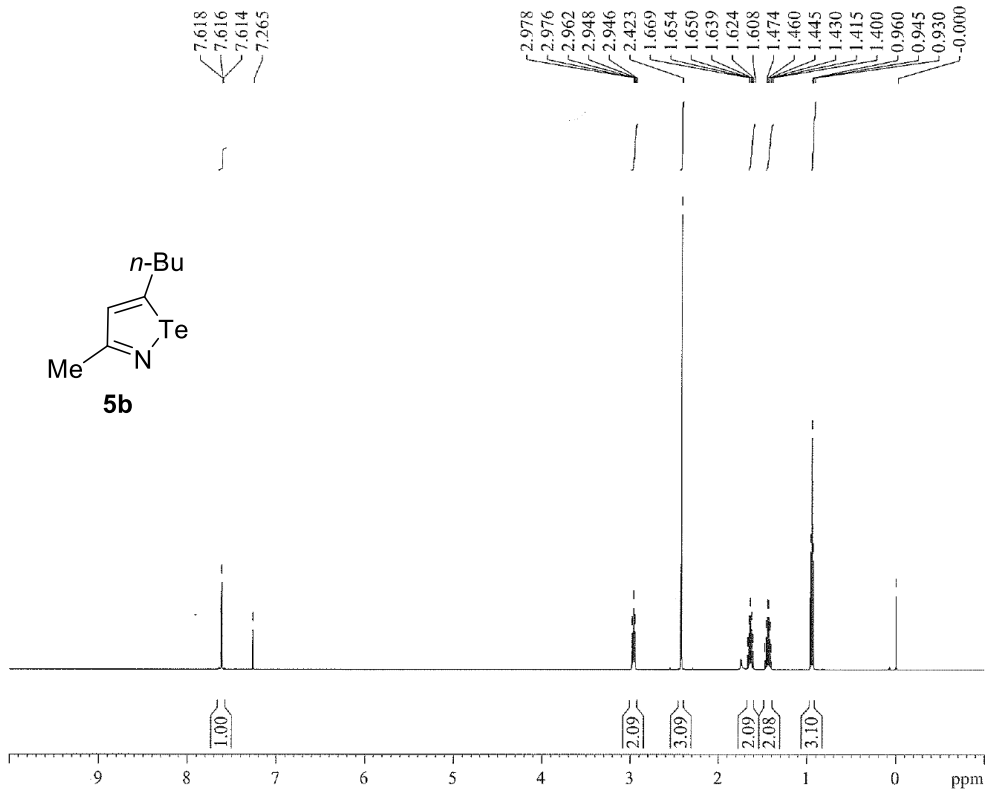
NAME test  
 EXPNO 43  
 PROCNO 1  
 Date 20170614  
 Time 16.52  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 62  
 DS 4  
 SWH 29761.904 Hz  
 FIDRES 0.454131 Hz  
 AQ 1.1010548 sec  
 RG 2050  
 DW 16.800 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 296.8 K  
 D1 2.00000000 sec  
 D11 0.03000000 sec  
 TD0 1

CHANNEL 1  
 NUC1 13C  
 P1 10.00 usec  
 PL1 -0.20 dB  
 PL1W 103.36952972 W  
 SFO1 125.7703643 MHz

CHANNEL 2  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 80.00 usec  
 PL2 3.00 dB  
 PL12 18.00 dB  
 PL13 18.00 dB  
 PL2W 13.21871662 W  
 PL12W 0.41801253 W  
 PL13W 0.41801253 W  
 SFO2 500.1320005 MHz  
 SI 32768  
 SF 125.7577812 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 5a

<sup>1</sup>H NMR

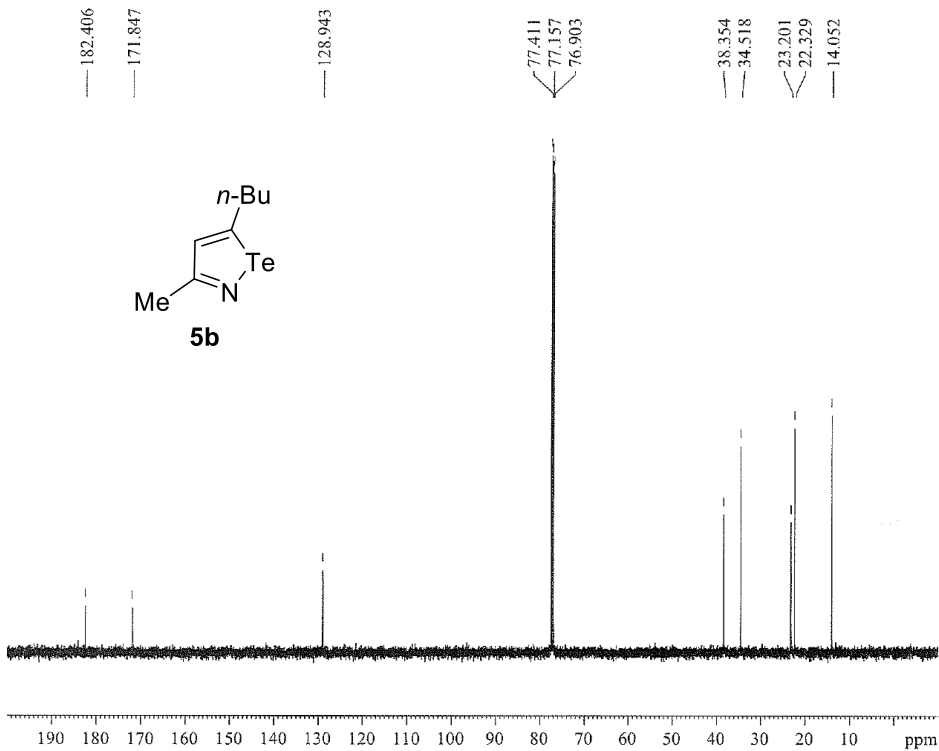


NAME exp 335  
EXPNO 3  
PROCNO 1  
Date\_ 20150621  
Time 19.20  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 8  
DS 2  
SWH 10330.578 Hz  
FIDRES 0.157632 Hz  
AQ 3.1719923 sec  
RG 161  
DW 48.400 usec  
DE 6.50 usec  
TE 297.9 K  
D1 1.0000000 sec  
TD0 1

CHANNEL f1  
NUC1 1H  
P1 15.00 usec  
PL1 2.50 dB  
PL1W 14.83164406 W  
SFO1 500.1330885 MHz  
SI 32768  
SF 500.1330108 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.30 Hz  
GB 0  
PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of **5b**

<sup>13</sup>C NMR CPD



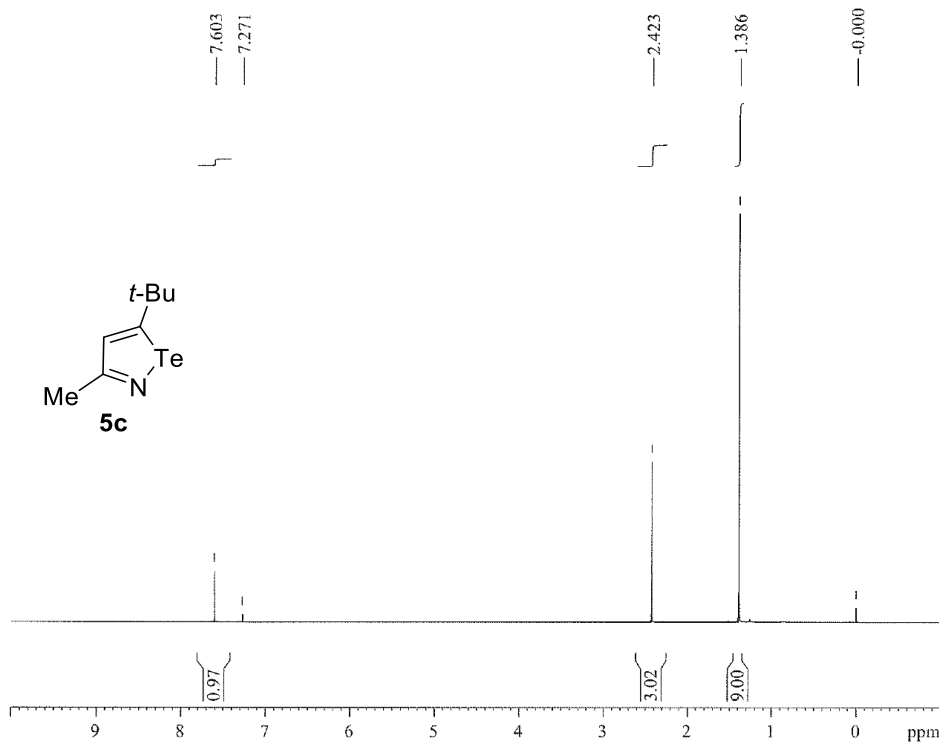
NAME exp 326  
EXPNO 5  
PROCNO 1  
Date\_ 20150616  
Time 16.55  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zgpg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 113  
DS 4  
SWH 29761.904 Hz  
FIDRES 0.454131 Hz  
AQ 1.1010548 sec  
RG 2050  
DW 16.800 usec  
DE 6.50 usec  
TE 298.9 K  
D1 2.0000000 sec  
D11 0.03000000 sec  
TD0 1

CHANNEL f1  
NUC1 13C  
P1 10.00 usec  
PL1 -0.20 dB  
PL1W 103.2652972 W  
SFO1 125.7702643 MHz

CHANNEL f2  
CPDPRG2 waltz16  
NUC2 1H  
PCPD2 80.00 usec  
PL2 3.00 dB  
PL12 18.00 dB  
PL13 18.00 dB  
PL2W 13.21871662 W  
PL12W 0.41801253 W  
PL13W 0.41801253 W  
SFO2 500.1320005 MHz  
SI 32768  
SF 125.7577757 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 1.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of **5b**

<sup>1</sup>H NMR

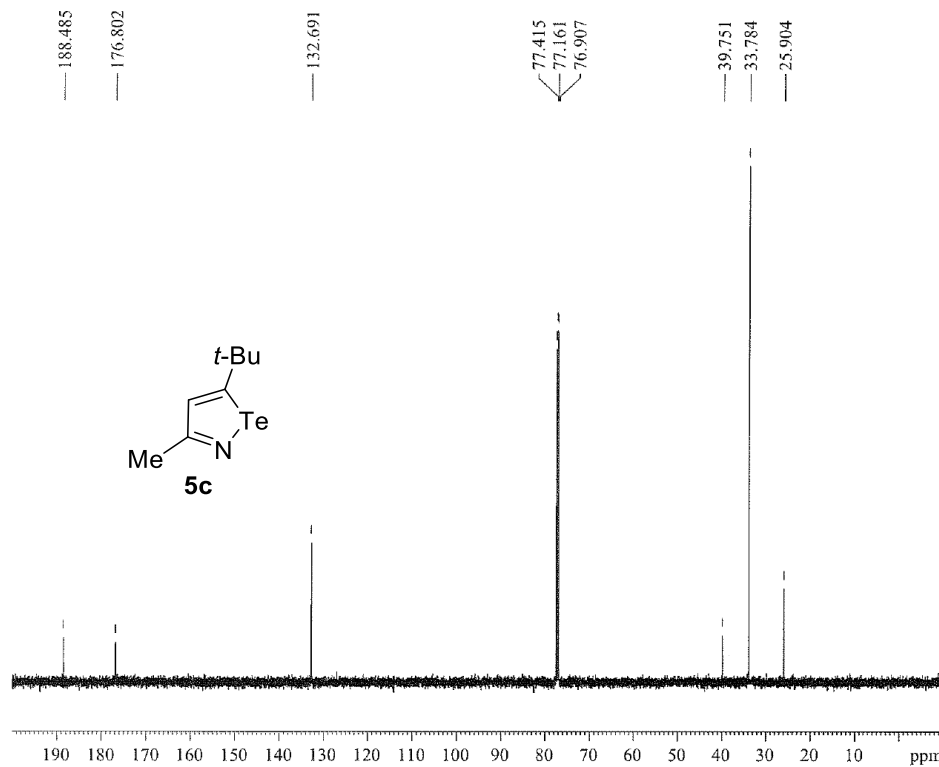


NAME exp 590  
EXPNO 4  
PROCNO 1  
Date\_ 20170216  
Time 21.21  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm FAPBO BB-  
PULPROG zg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 8  
DS 2  
SWH 10330.578 Hz  
FIDRES 0.157632 Hz  
AQ 3.171923 sec  
RG 114  
DW 48.400 usec  
DE 6.50 usec  
TE 293.5 K  
D1 1.0000000 sec  
TD0 1

CHANNEL f1  
NUC1 1H  
P1 15.00 usec  
PL1 2.50 dB  
PL1W 14.83164406 W  
SFO1 500.1330885 MHz  
SI 32768  
SF 500.1300077 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.30 Hz  
GB 0  
PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of **5c**

<sup>13</sup>C NMR CPD

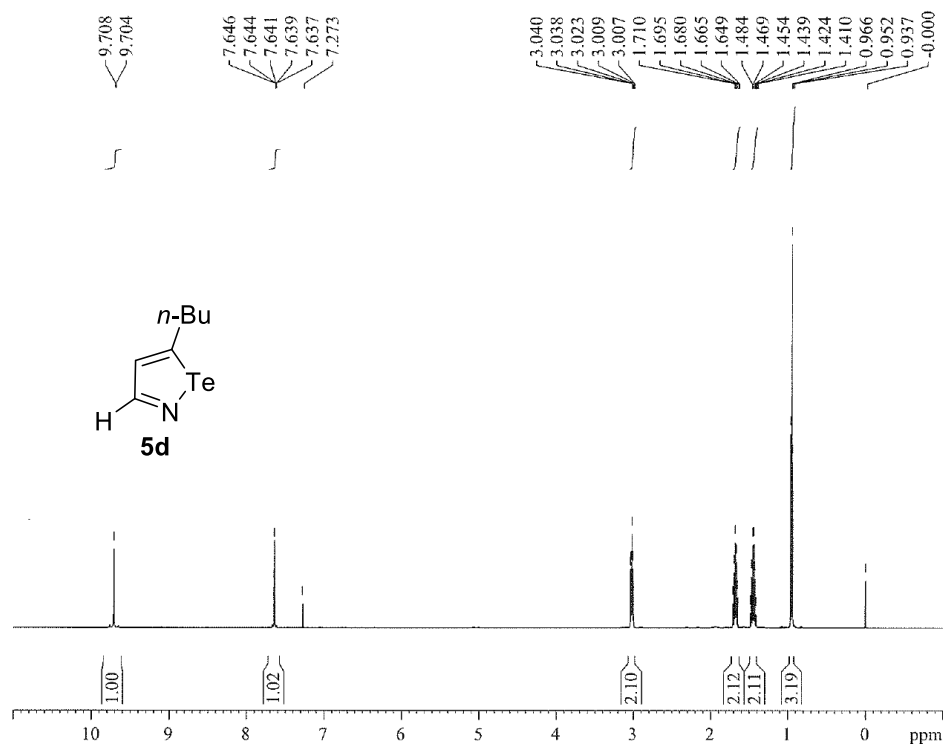


NAME exp 590  
EXPNO 5  
PROCNO 1  
Date\_ 20170216  
Time 21.29  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm FAPBO BB-  
PULPROG zgpg30  
TD 65536  
SOLVENT CDCl3  
NS 50  
DS 4  
SWH 29761.904 Hz  
FIDRES 0.454131 Hz  
AQ 1.1010548 sec  
RG 2050  
DW 16.800 usec  
DE 6.50 usec  
TE 294.6 K  
D1 2.0000000 sec  
D11 0.0300000 sec  
TD0 1

CHANNEL f2  
CPDPRG2 waltz16  
NUC2 13C  
PCPD2 80.00 usec  
PL2 3.00 dB  
PL12 18.00 dB  
PL13 18.00 dB  
PL2W 13.21871662 W  
PL12W 0.41801253 W  
PL13W 0.41801253 W  
SFO2 500.1320005 MHz  
SI 32768  
SF 125.7577737 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 1.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of **5c**

<sup>1</sup>H NMR

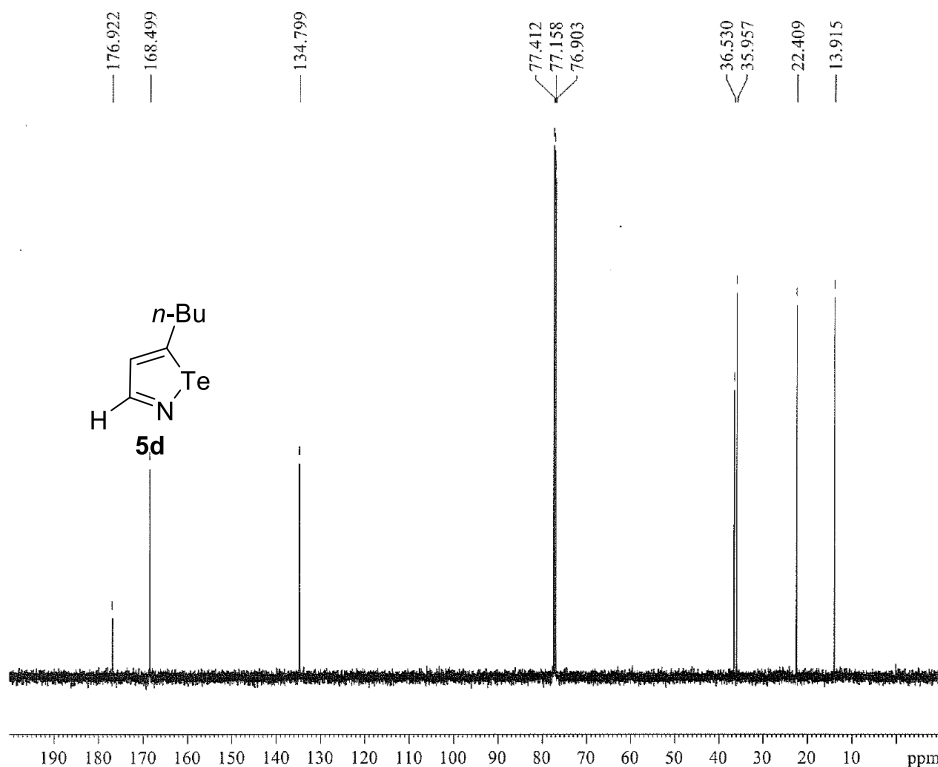


NAME exp 594  
 EXPNO 3  
 PROCNO 1  
 Date\_ 20170223  
 Time 9.08  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 101  
 DW 48.400 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 293.1 K  
 D1 1.00000000 sec  
 TD0 1

CHANNEL 1  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1330885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1330967 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of **5d**

<sup>13</sup>C NMR CPD

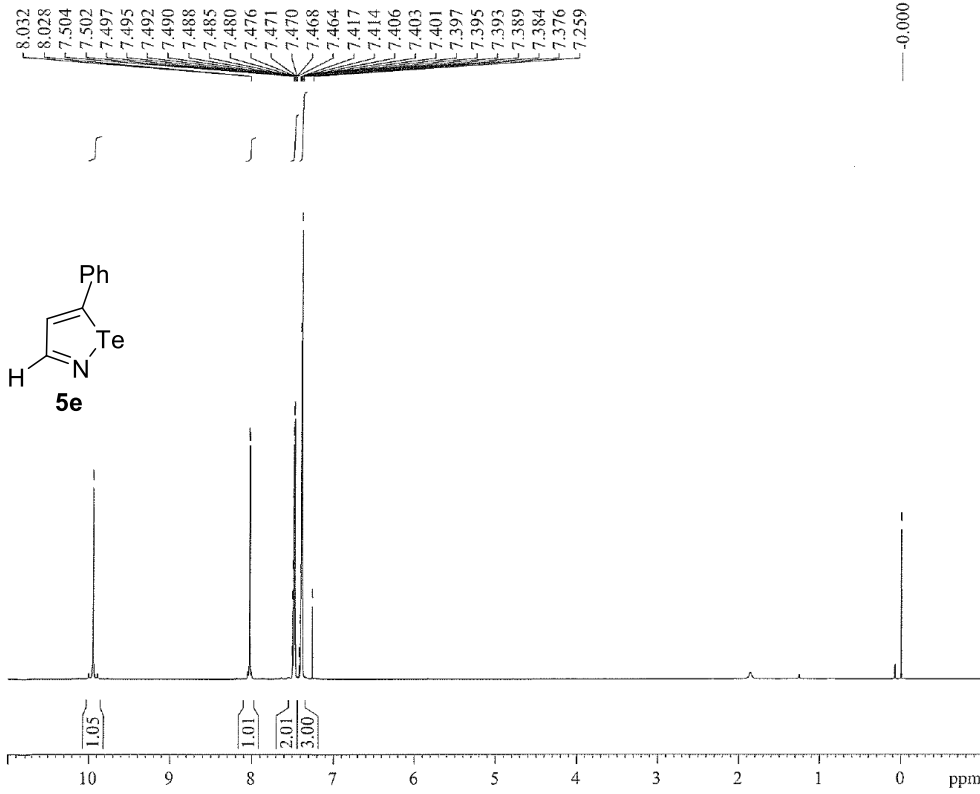


NAME exp 594  
 EXPNO 4  
 PROCNO 1  
 Date\_ 20170223  
 Time 9.20  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDCl3  
 NS 77  
 DS 4  
 SWH 29761.904 Hz  
 FIDRES 0.454131 Hz  
 AQ 1.1010548 sec  
 RG 2050  
 DW 16.800 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 294.3 K  
 D1 2.00000000 sec  
 D11 0.03000000 sec  
 TD0 1

CHANNEL 1  
 NUC1 13C  
 P1 10.00 usec  
 PL1 -0.20 dB  
 PL1W 103.26952972 W  
 SFO1 125.7703643 MHz  
 CHANNEL 2  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 80.00 usec  
 PL2 3.00 dB  
 PL12 18.00 dB  
 PL13 18.00 dB  
 PL2W 13.21871662 W  
 PL12W 0.41801253 W  
 PL13W 0.41801253 W  
 SFO2 500.1320005 MHz  
 SI 32768  
 SF 125.7577785 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of **5d**

<sup>1</sup>H NMR

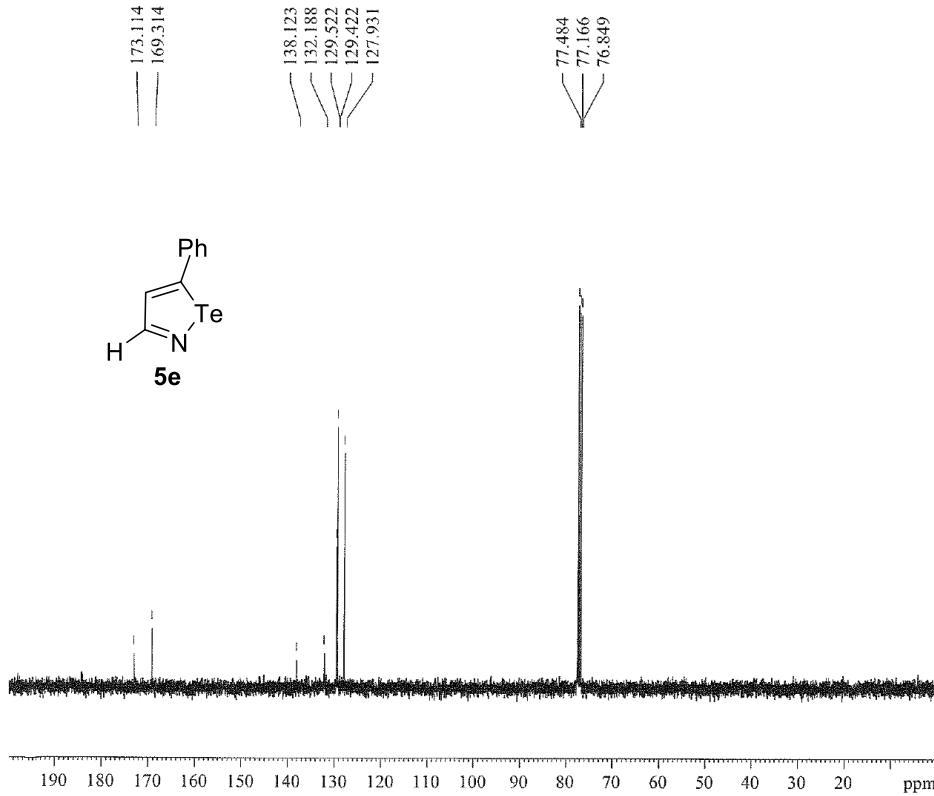


NAME exp 376  
 EXPNO 2  
 PROCNO 1  
 Date\_ 20150919  
 Time 21.42  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm PABBO BB-  
 PULPROG zg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDC13  
 NS 8  
 DS 2  
 SWH 10330.578 Hz  
 FIDRES 0.157632 Hz  
 AQ 3.1719923 sec  
 RG 128  
 DW 48.400 usec  
 DE 6.50 usec  
 TE 294.6 K  
 D1 1.00000000 sec  
 TD0 1

CHANNEL f1  
 NUC1 1H  
 P1 15.00 usec  
 PL1 2.50 dB  
 PL1W 14.83164406 W  
 SFO1 500.1320885 MHz  
 SI 32768  
 SF 500.1506137 MHz  
 WDW EM4  
 SSB 0  
 LB 0.30 Hz  
 GB 0  
 PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of 5e

CPD



Current Data Parameters  
 NAME tmeich2  
 EXPNO 1  
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters  
 Date\_ 20140625  
 Time 21.00  
 INSTRUM spect  
 PROBHD 5 mm QNP 1H/13  
 PULPROG zgpg30  
 TD 65536  
 SOLVENT CDC13  
 NS 56  
 DS 4  
 SWH 23980.814 Hz  
 FIDRES 0.365918 Hz  
 AQ 1.3664756 sec  
 RG 32768  
 DW 20.850 usec  
 DE 6.00 usec  
 TE 293.2 K  
 D1 2.00000000 sec  
 d11 0.03000000 sec  
 DELTA 1.89999998 sec  
 TD0 1

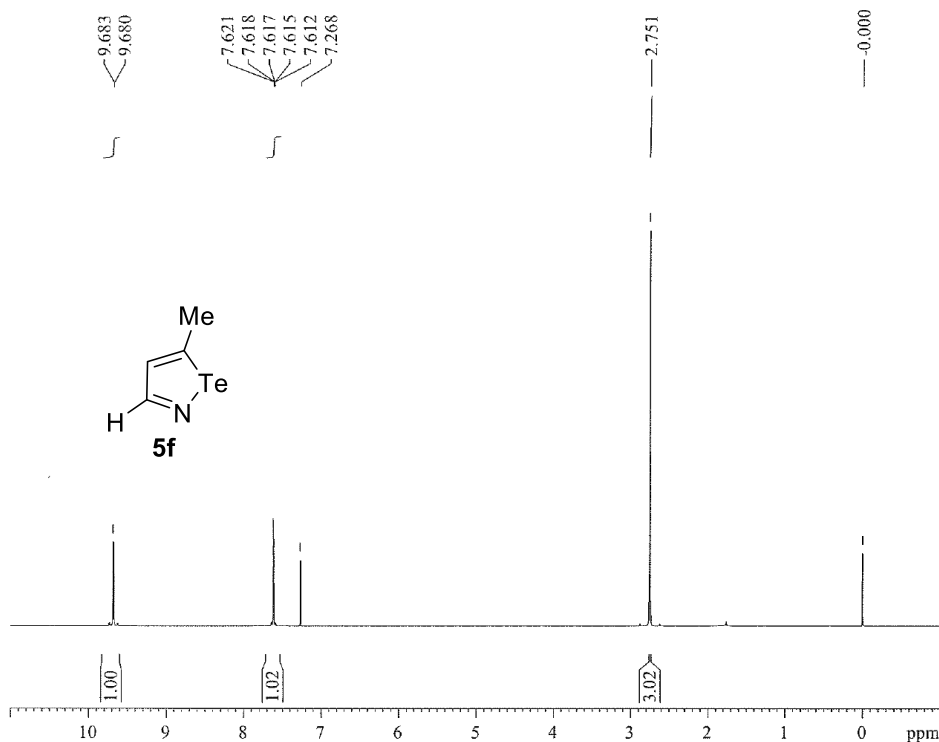
CHANNEL f1  
 NUC1 13C  
 P1 10.00 usec  
 PL1 0.20 dB  
 SFO1 100.6228298 MHz

CHANNEL f2  
 CPDPRG2 waltz16  
 NUC2 1H  
 PCPD2 80.00 usec  
 PL2 -3.50 dB  
 PL12 15.00 dB  
 PL13 15.00 dB  
 SFO2 400.1316005 MHz

F2 - Processing parameters  
 SI 32768  
 SF 100.6127594 MHz  
 WDW EM  
 SSB 0  
 LB 1.00 Hz  
 GB 0  
 PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of 5e

<sup>1</sup>H NMR

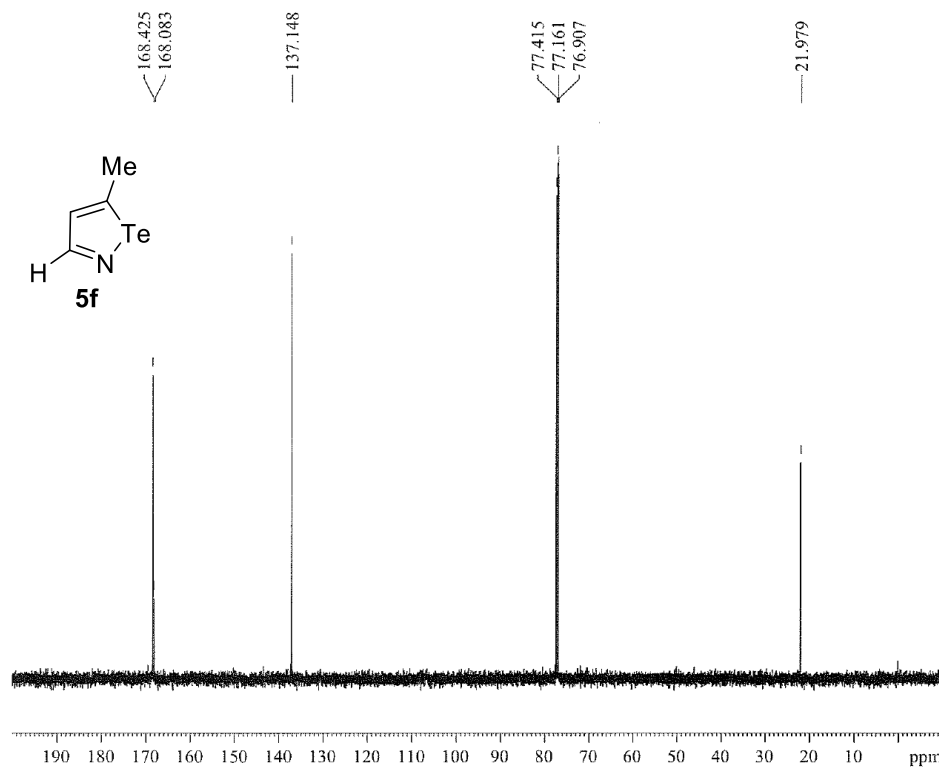


NAME exp 569  
EXPNO 6  
PROCNO 1  
Date 20170124  
Time 22.25  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zg30  
TD 65546  
SOLVENT CDCl3  
NS 8  
DS 2  
SWH 10330.578 Hz  
FIDRES 0.157632 Hz  
AQ 3.1719923 sec  
RG 203  
DW 48.400 usec  
DE 6.50 usec  
TE 293.1 K  
D1 1.00000000 sec  
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====  
NUC1 1H  
P1 15.00 usec  
PL1 2.50 dB  
PL1W 14.83164406 W  
SFO1 500.1330885 MHz  
SI 32768  
SF 500.1300088 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 0.30 Hz  
GB 0  
PC 1.00

<sup>1</sup>H NMR of **5f**

<sup>13</sup>C NMR CPD



NAME exp 569  
EXPNO 9  
PROCNO 1  
Date 20170206  
Time 15.25  
INSTRUM spect  
PROBHD 5 mm PABBO BB-  
PULPROG zgpg30  
TD 65336  
SOLVENT CDCl3  
NS 65  
DS 4  
SWH 29761.904 Hz  
FIDRES 0.454121 Hz  
AQ 1.1010548 sec  
RG 2050  
DW 16.800 usec  
DE 6.50 usec  
TE 294.4 K  
D1 2.00000000 sec  
D11 0.05000000 sec  
TD0 1

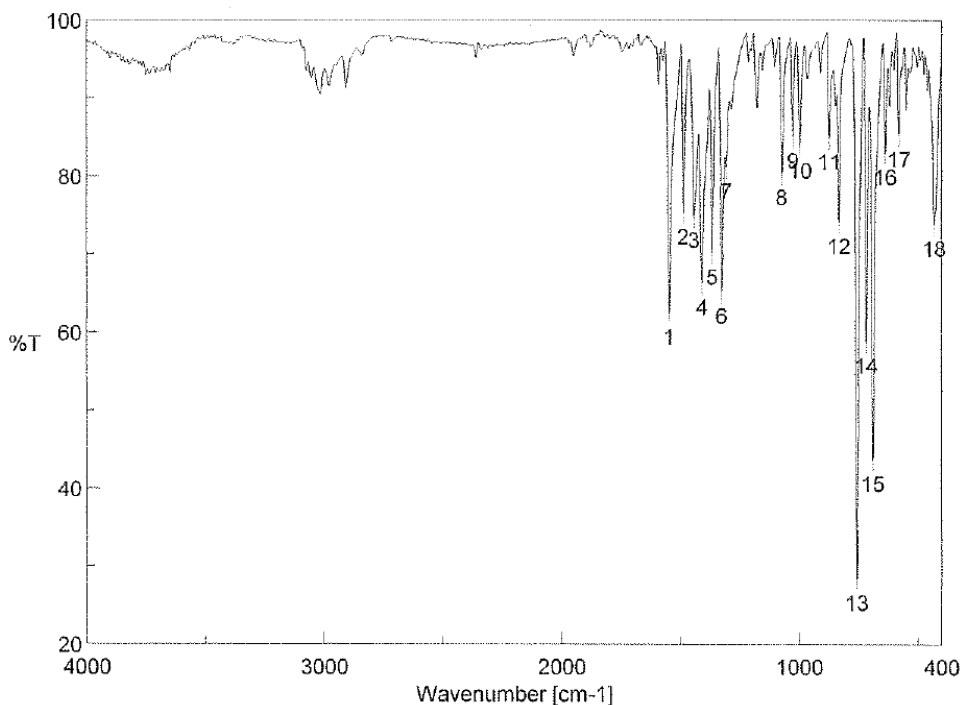
===== CHANNEL f1 =====  
NUC1 13C  
P1 10.00 usec  
PL1 -0.20 dB  
PL1W 103.36932972 W  
SFO1 125.7703643 MHz

===== CHANNEL f2 =====  
CPDPRG2 waltz16  
NUC2 1H  
PCPD2 80.00 usec  
PL2 3.00 dB  
PL12 18.00 dB  
PL13 18.00 dB  
PL2W 13.21871662 W  
PL12W 0.41801253 W  
PL13W 0.41801253 W  
SFO2 500.1320005 MHz  
SI 32768  
SF 125.7577803 MHz  
WDW EM  
SSB 0  
LB 1.00 Hz  
GB 0  
PC 1.40

<sup>13</sup>C NMR of **5f**

## VII. IR Spectra of Isotellurazoles 5

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社

岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時

2017/06/14 23:18

データタイプ

等間隔データ

横軸

Wavenumber [cm-1]

縦軸

%T

スタート

349.053 cm-1

エンド

5000.51 cm-1

データ間隔

0.964233 cm-1

データ数

4825

[測定情報]

機種名

FT/IR-4200typeA

シリアル番号

B061661018

光源

標準光源

検出器

TGS

積算回数

8

分解

4 cm-1

ゼロファイリング

On

アポダイゼーション

Cosine

ゲイン

Auto (16)

アパーチャー

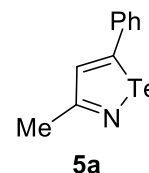
Auto (7.1 mm)

スキャンスピード

Auto (2 mm/sec)

フィルタ

Auto (30000 Hz)

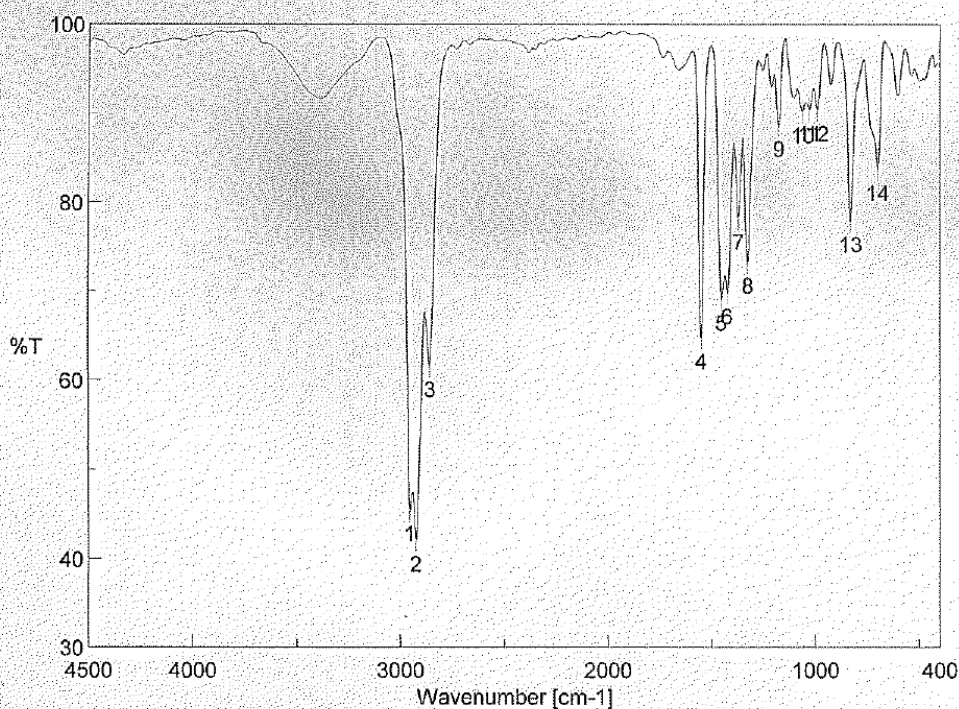


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	1547.6	62.5012	2	1486.9	75.3247	3	1442.5	74.9138
4	1409.7	66.2898	5	1366.3	70.1585	6	1325.8	65.153
7	1307.5	81.2087	8	1072.2	80.4045	9	1026.9	85.0775
10	996.1	83.8124	11	872.6	84.9933	12	831.2	74.1414
13	757.9	28.427	14	717.4	58.847	15	689.4	43.6922
16	637.4	83.0122	17	579.5	85.2804	18	431.0	73.8477

## IR Spectra of 5a

ピーク検出 - Memory-5



[コメント情報]

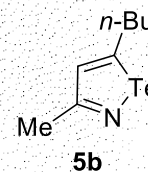
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社  
岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2015/06/21 22:32  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 389.55 cm-1  
エンド 6000.42 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 5820

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 16  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャ Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

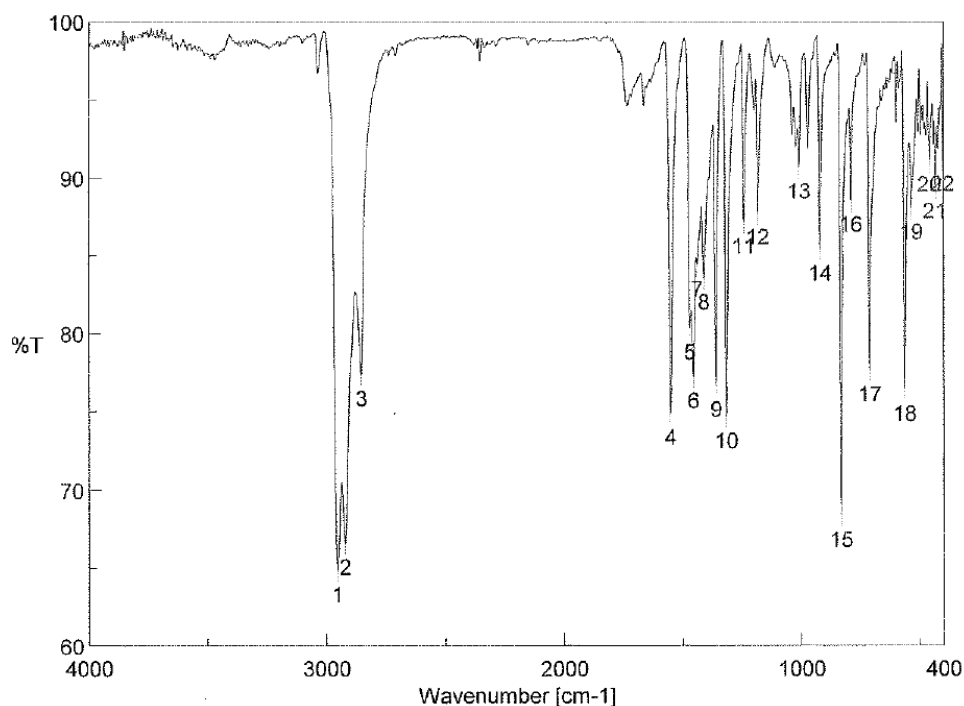


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2953.5	45.4807	2	2923.6	42.0934	3	2861.8	61.6119
4	1551.5	64.755	5	1454.1	69.0841	6	1425.1	69.7954
7	1372.1	78.2164	8	1327.8	73.2746	9	1177.3	88.6777
10	1062.6	90.2015	11	1028.8	90.3515	12	990.3	90.4043
13	831.2	77.9032	14	701.0	83.7005			

IR Spectra of 5b

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

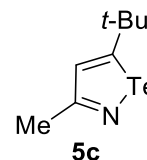
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社  
岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/02/22 15:17  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm-1  
エンド 7800.65 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 7729

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 16  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (8)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

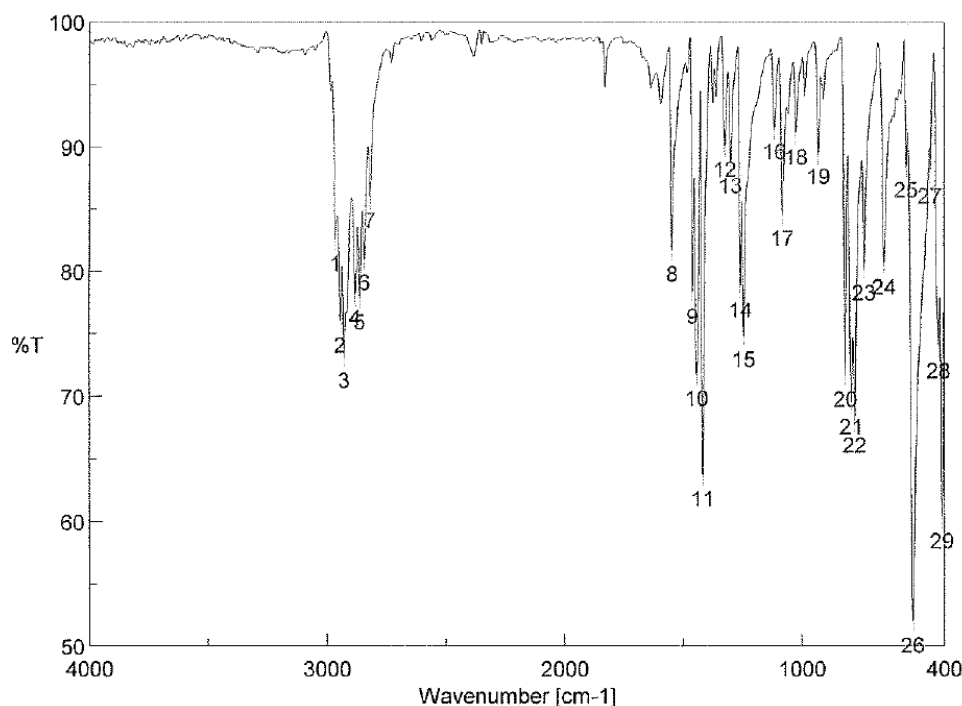


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2955.4	64.8468	2	2922.6	66.6059	3	2854.1	77.3789
4	1552.4	74.905	5	1470.5	80.3515	6	1455.0	77.2399
7	1439.6	84.3861	8	1411.6	83.5542	9	1360.5	76.6945
10	1317.1	74.6775	11	1241.9	87.1591	12	1183.1	87.7447
13	1009.6	90.6864	14	921.8	85.4016	15	833.1	68.3593
16	790.7	88.5308	17	712.6	77.6443	18	565.0	76.3989
19	536.1	88.0498	20	459.0	91.1134	21	434.9	89.3938
22	403.1	91.1433						

IR Spectra of 5c

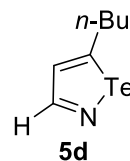
ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社

岩手大学 工学部



[データ情報]

作成日時

2017/02/22 14:56

[測定情報]

機種名

FT/IR-4200typeA

シリアル番号

B061661018

データタイプ

等間隔データ

横軸

Wavenumber [cm-1]

光源

標準光源

縦軸

%T

検出器

TGS

スタート

349.053 cm-1

積算回数

16

エンド

7800.65 cm-1

分解

4 cm-1

データ間隔

0.964233 cm-1

ゼロフィリング

On

データ数

7729

アポダイゼーション

Cosine

ゲイン

Auto (8)

アパーチャー

Auto (7.1 mm)

スキャンスピード

Auto (2 mm/sec)

フィルタ

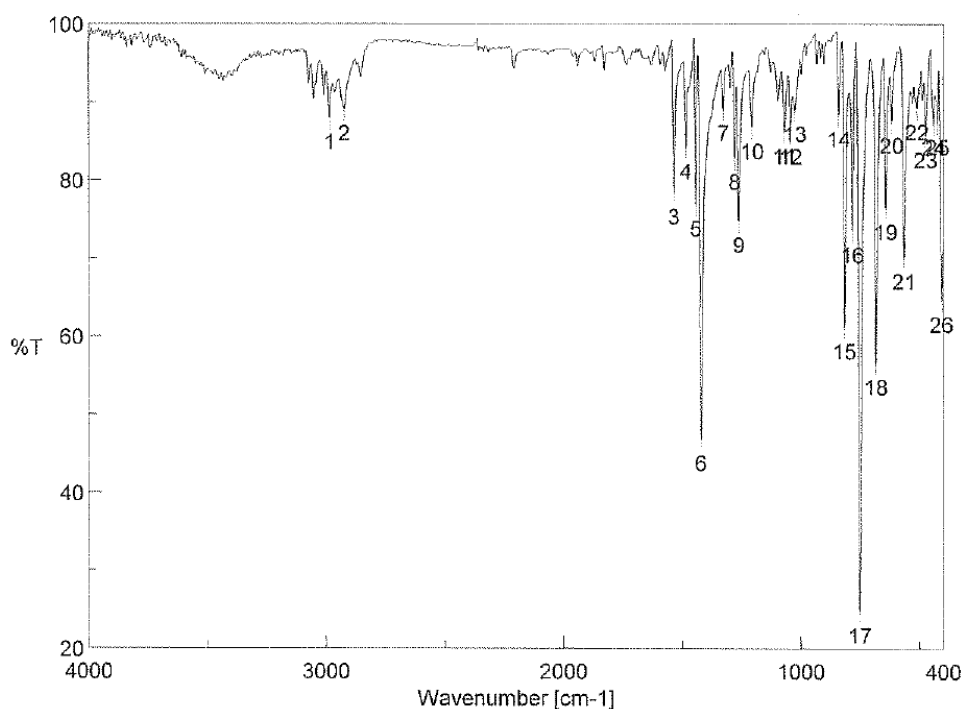
Auto (30000 Hz)

[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2965.0	82.558	2	2944.8	76.0096	3	2928.4	73.1833
4	2881.1	78.2092	5	2862.8	77.8462	6	2842.6	81.0325
7	2818.5	86.024	8	1547.6	81.7296	9	1460.8	78.3323
10	1444.4	71.7823	11	1418.4	63.7703	12	1324.9	90.1311
13	1300.8	88.8223	14	1259.3	78.8275	15	1245.8	74.8826
16	1115.6	91.5791	17	1082.8	84.605	18	1025.0	91.1477
19	930.5	89.5858	20	817.7	71.7016	21	791.6	69.5171
22	777.2	68.0329	23	737.6	80.2127	24	653.8	80.6704
25	559.3	88.4716	26	532.3	52.0049	27	459.0	88.0046
28	423.3	73.9875	29	409.8	60.3504			

IR Spectra of 5d

ピーク検出 - Memory-3



[コメント情報]

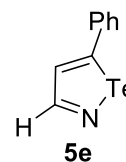
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社  
岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2017/06/13 14:58  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm⁻¹]  
縦軸 %T  
スタート 349.053 cm⁻¹  
エンド 5000.51 cm⁻¹  
データ間隔 0.964233 cm⁻¹  
データ数 4825

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 B061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm⁻¹  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (16)  
アパーチャ Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)

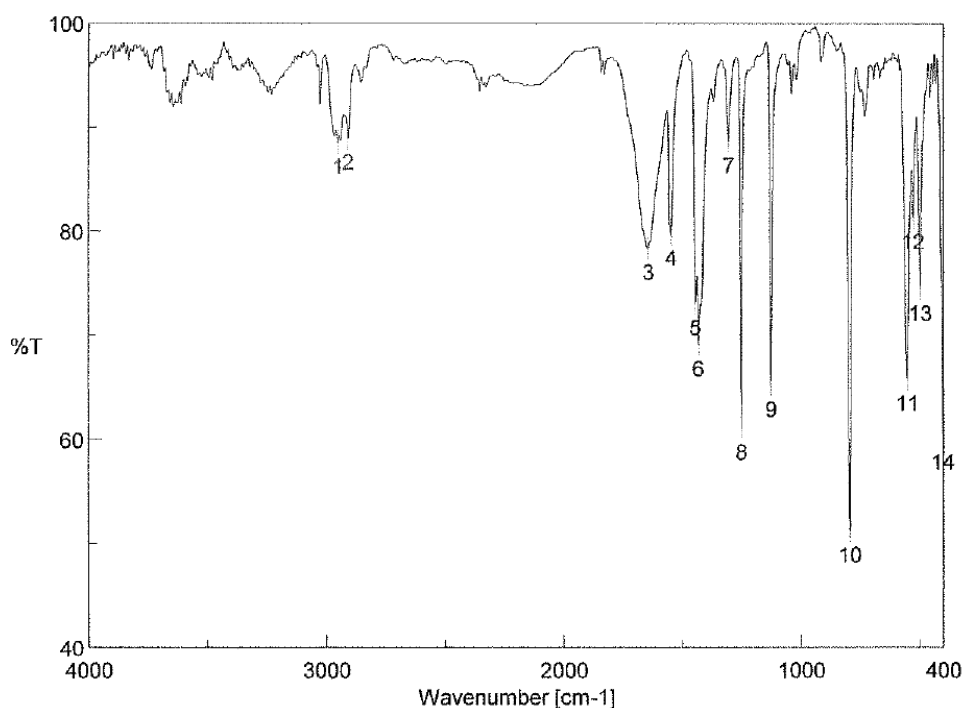


[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2985.3	87.9308	2	2922.6	89.0499	3	1534.1	78.3866
4	1484.0	84.1915	5	1441.5	76.8785	6	1420.3	46.8851
7	1326.8	89.1326	8	1278.6	82.8197	9	1261.2	74.8094
10	1206.3	86.7697	11	1069.3	86.11	12	1043.3	86.0791
13	1025.0	88.9771	14	839.9	88.3602	15	815.7	61.178
16	783.0	73.5428	17	751.1	24.7848	18	683.6	56.5972
19	642.2	76.5013	20	617.1	87.5693	21	565.0	70.1783
22	510.1	89.2652	23	474.4	85.6884	24	440.7	87.2944
25	424.3	87.3571	26	406.9	64.6322			

IR Spectra of 5e

ピーク検出 - イソテルラゾールMeH2.jws



[コメント情報]

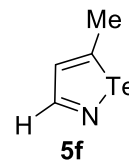
試料名  
コメント  
測定者  
所属  
会社 岩手大学 工学部

[データ情報]

作成日時 2016/05/12 2:07  
データタイプ 等間隔データ  
横軸 Wavenumber [cm-1]  
縦軸 %T  
スタート 399.193 cm-1  
エンド 4000.6 cm-1  
データ間隔 0.964233 cm-1  
データ数 3736

[測定情報]

機種名 FT/IR-4200typeA  
シリアル番号 8061661018  
光源 標準光源  
検出器 TGS  
積算回数 8  
分解 4 cm-1  
ゼロフィリング On  
アポダイゼーション Cosine  
ゲイン Auto (16)  
アパーチャー Auto (7.1 mm)  
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)  
フィルタ Auto (30000 Hz)



[ピーク検出結果]

No.	位置	強度	No.	位置	強度	No.	位置	強度
1	2951.5	88.5461	2	2908.1	88.9762	3	1645.0	78.3719
4	1548.8	79.7244	5	1445.4	73.0247	6	1432.9	69.0983
7	1306.5	88.6697	8	1252.5	61.0992	9	1128.2	65.1852
10	795.5	51.2249	11	553.5	65.7605	12	527.4	81.3055
13	498.5	74.4185	14	402.1	60.1762			

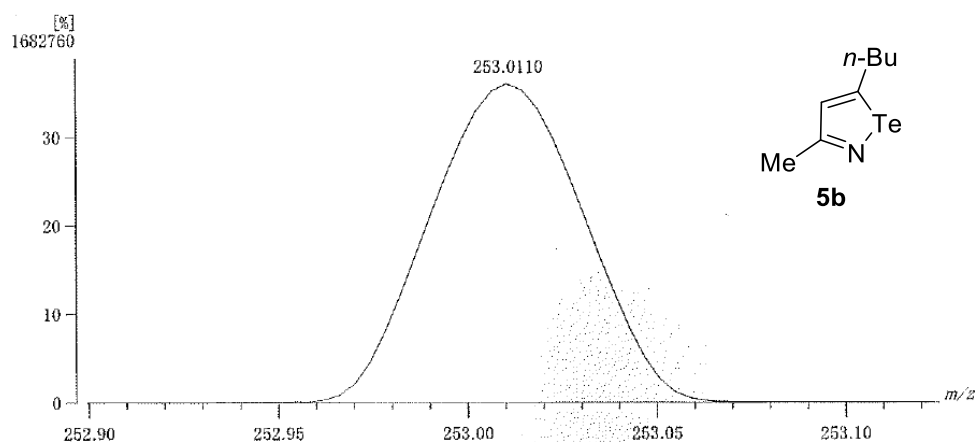
IR Spectra of 5f

## VIII. HRMS or Elemental Analysis of Isotellurazoles 5

[ Mass Spectrum ]

Data : EI+HR-taneichi Date : 23-Jun-2015 09:34

RT : 0.24 min Scan# : (8,12)

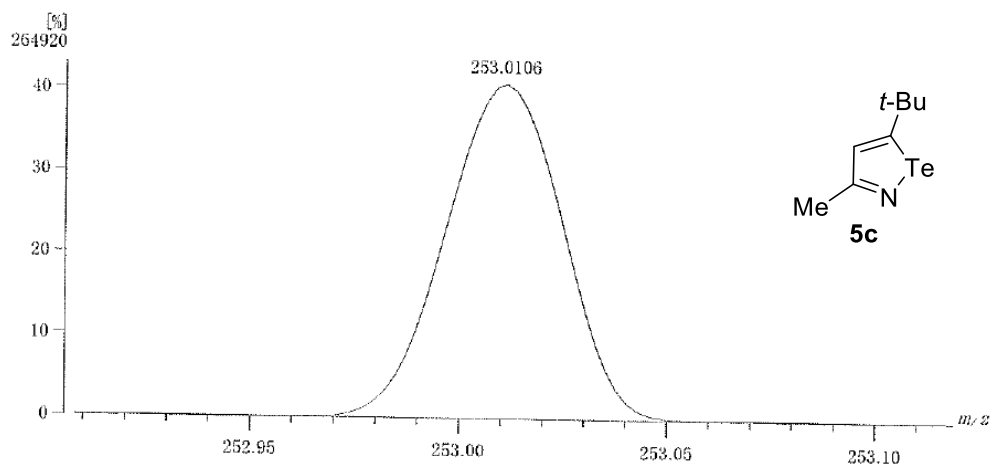


### HRMS of 5b

[ Mass Spectrum ]

Data : EI+HR-taneichi-253 Date : 23-Feb-2017 15:09

RT : 0.27 min Scan# : (9,13)

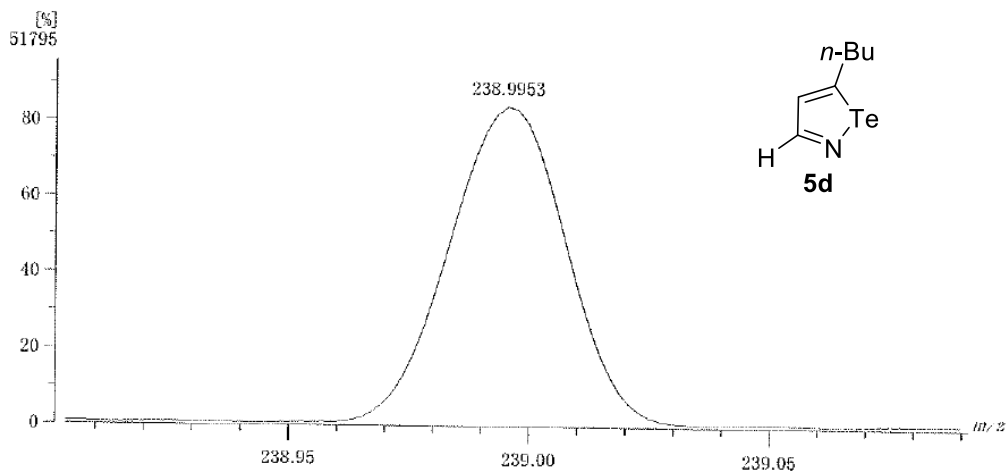


### HRMS of 5c

[ Mass Spectrum ]

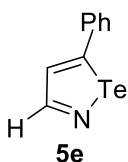
Data : EI+HR-taneichi-238 Date : 23-Feb-2017 14:36

RT : 0.10 min Scan# : (4,8)



### HRMS of 5d

Analytical Data(%)	
C :	42.08
H :	2.90
N :	5.46

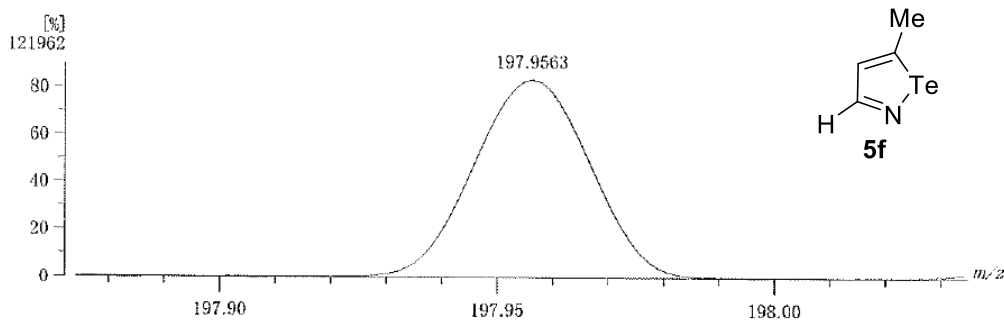


### Elemental analysis of 5e

[ Mass Spectrum ]

Data : FAB+HR-taneichi Date : 25-Jan-2017 14:20

RT : 0.13 min Scan# : (3,7)



### HRMS of 5f