

KINETIC RESOLUTION OF RACEMIC 2-HYDROXYACETALS BY ASYMMETRIC ESTERIFICATION USING A MIXED ANHYDRIDE PROTOCOL

Kenya Nakata,^{1,*} Eri Tokumaru,² Takahiro Saitoh,² Takayoshi Nakahara,²
Keisuke Ono,² Takatsugu Murata,² and Isamu Shiina^{2,*}

¹ Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering, Shimane University, Matsue, Shimane 690-8504, Japan; ² Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science, 1-3 Kagurazaka, Shinjuku-ku, Tokyo 162-8601, Japan; E-mail: nakata@riko.shimane-u.ac.jp; shiina@rs.kagu.tus.ac.jp

Supporting Information

- S1 Table of Contents
- S2 Analytical Data of (*R*)-**1b** MTPA ester, and (*S*)-**1b** MTPA ester.
- S3–30 Cartesian Coordinates of Transition Structures

=Appendix=

¹H and ¹³C NMR Spectroscopic Data of Compounds

Spectroscopic Data of Compounds **1a–g**, and **3a–d, f** (Chiral Alcohols)

Spectroscopic Data of **2a–g**, and **4a–d, f** (Chiral Carboxylic Esters)

Spectroscopic Data of Compounds (*R*)-**1b** MTPA ester, and (*S*)-**1b** MTPA ester

=Appendix=

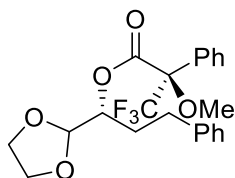
HPLC Analyses of Compounds

Chiral Compounds in **Table 1**

Chiral Compounds in **Table 3**

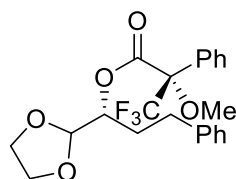
Racemic Compounds **1a–g**, and **3d–f** (Alcohols)

Racemic Compounds **2a–g**, and **4a–d, f** (Carboxylic Esters)



(R)-1-(1,3-dioxolan-2-yl)-3-phenylpropyl

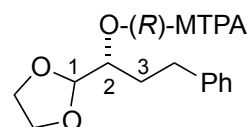
(R)-3,3,3-trifluoro-2-methoxy-2-phenylpropanoate ((R)-1b MTPA ester): IR (neat): 2954, 2893, 1751, 1265, 1173, 1119, 1026, 702 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.69–7.58 (m, 2H), 7.47–7.36 (m, 3H), 7.30–7.21 (m, 2H), 7.21–7.13 (m, 1H), 7.07 (d, $J = 7.2$ Hz, 2H), 5.16 (dt, $J = 8.4, 4.4$ Hz, 1H), 5.01 (d, $J = 4.4$ Hz, 1H), 3.99–3.81 (m, 4H), 3.62 (d, $J = 1.2$ Hz, 3H), 2.61–2.43 (m, 2H), 2.08–1.86 (m, 2H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 166.2, 141.0, 132.4, 129.6, 128.44, 128.36, 128.3, 127.5, 126.1, 102.9, 74.6, 65.5, 64.9, 55.58, 55.56, 31.4, 31.0; HR MS: calcd for $\text{C}_{22}\text{H}_{23}\text{F}_3\text{O}_5\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 447.1390, found 447.1404.

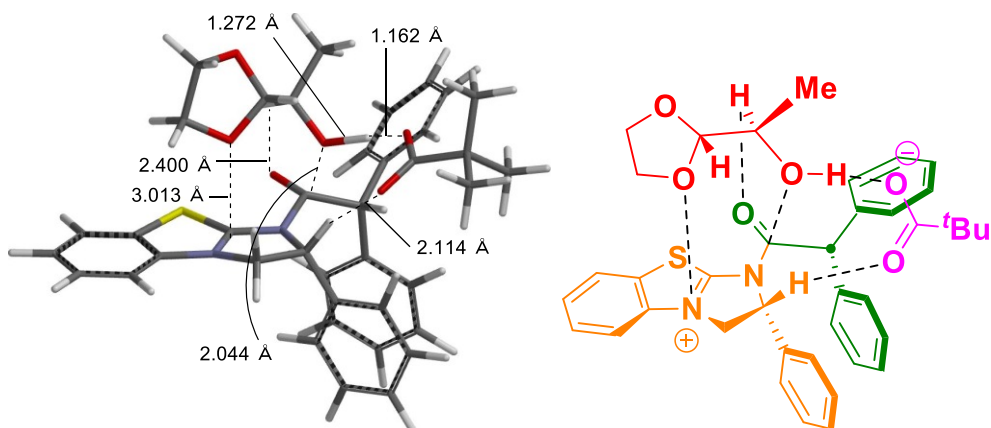


(R)-1-(1,3-dioxolan-2-yl)-3-phenylpropyl

(S)-3,3,3-trifluoro-2-methoxy-2-phenylpropanoate ((S)-1b MTPA ester): IR (neat): 2954, 2893, 1751, 1257, 1173, 1119, 1018, 702 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.67–7.56 (m, 2H), 7.50–7.36 (m, 3H), 7.33–7.23 (m, 2H), 7.23–7.11 (m, 3H), 5.20 (dt, $J = 9.2, 4.0$ Hz, 1H), 4.96 (d, $J = 4.0$ Hz, 1H), 3.86–3.69 (m, 4H), 3.59 (d, $J = 1.2$ Hz, 3H), 2.80–2.58 (m, 2H), 2.05 (dt, $J = 8.4, 7.4$ Hz, 2H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 166.1, 140.9, 132.2, 129.5, 128.5, 128.31, 128.26, 127.7, 126.2, 102.9, 74.7, 65.5, 65.0, 55.49, 55.47, 31.5, 31.4; HR MS: calcd for $\text{C}_{22}\text{H}_{23}\text{F}_3\text{O}_5\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 447.1390, found 447.1387.

(S)-MTPA ester position	(S)-MTPA ester (ppm)	(R)-MTPA ester position	(R)-MTPA ester (ppm)	$\Delta\delta = \delta_{(S)} - \delta_{(R)}$
H-1	4.96	H-1	5.01	-0.05
H-2	5.20	H-2	5.16	+0.04
H-3	2.05	H-3	1.97	+0.08





Transition Structure [(*R*)-**ts-rot1**] ($E_{\text{rel}} = 0.00$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.47272$ au

($E_{\text{SM(IRC)}}(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.49236$ au)

$\nu_{\text{ts}} = 541i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	-0.072048	-0.576454	1.226215
N	0.808987	-0.717702	0.047033
C	2.120064	-0.709764	0.235383
N	2.825314	-0.496838	-0.886447
S	3.094479	-0.913696	1.652258
C	1.933723	-0.053671	-1.966468
C	0.517408	-0.410755	-1.398749
H	-0.109003	0.483034	-1.431471
C	-0.129210	-1.552223	-2.158786
C	0.338449	-2.869351	-2.061748
C	-0.229327	-3.878026	-2.837408
C	-1.262298	-3.578004	-3.729178
C	-1.725908	-2.266947	-3.836379
C	-1.163655	-1.255449	-3.054529
H	-1.508484	-0.228628	-3.140890

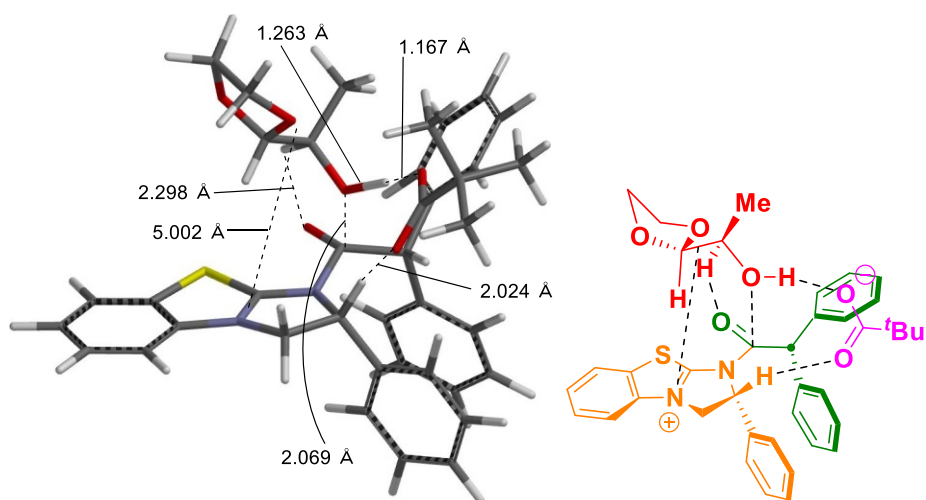
H	-2.528130	-2.027162	-4.529509
H	-1.704430	-4.364701	-4.334858
H	0.130224	-4.898744	-2.741619
H	1.134110	-3.114885	-1.363208
H	2.049675	1.024575	-2.103024
H	2.147633	-0.588612	-2.893511
C	-1.523438	-1.036271	1.048206
H	-1.916044	-0.561655	0.145862
O	0.520711	-0.630802	2.301178
O	-0.458728	1.379320	0.773273
C	0.227372	2.300046	1.579501
H	-1.437488	1.868570	0.125660
O	-2.372694	2.290500	-0.419013
C	-2.255794	2.362339	-1.718162
C	-3.505097	2.927026	-2.428215
O	-1.258822	1.998200	-2.354360
C	4.547592	-0.730530	0.626843
C	4.205490	-0.475519	-0.714421
C	5.881393	-0.770911	1.020896
H	6.149496	-0.966141	2.055010
C	5.185408	-0.252896	-1.680957
H	4.915771	-0.054893	-2.713498
C	6.866841	-0.552390	0.055281
H	7.912822	-0.582906	0.344477
C	6.520371	-0.293522	-1.276636
H	7.301431	-0.122670	-2.011213
C	-1.604102	-2.555273	0.847676
C	-1.903125	-5.333028	0.488664
C	-0.702999	-3.453477	1.434161
C	-2.657042	-3.072041	0.080142
C	-2.808463	-4.445564	-0.097297
C	-0.850793	-4.830809	1.253539
H	0.119017	-3.075842	2.035183

H	-3.364316	-2.389128	-0.384005
H	-3.632308	-4.822016	-0.698146
H	-0.140434	-5.510891	1.717352
H	-2.018666	-6.404867	0.350247
C	-2.395919	-0.601380	2.228937
C	-4.063557	0.165933	4.360373
C	-3.397033	0.358131	2.041348
C	-2.239200	-1.171728	3.499331
C	-3.063238	-0.788629	4.556450
C	-4.226425	0.738196	3.099052
H	-3.509522	0.833679	1.072161
H	-1.471375	-1.919418	3.663506
H	-2.925026	-1.240842	5.535519
H	-4.995903	1.487945	2.933258
H	-4.708793	0.459755	5.184506
C	-3.847317	4.306020	-1.828292
H	-4.753183	4.712193	-2.296030
H	-3.033865	5.021831	-1.998151
H	-4.014754	4.230635	-0.750592
C	-4.677637	1.952608	-2.178132
H	-5.581948	2.307843	-2.687536
H	-4.894869	1.867332	-1.109549
H	-4.450445	0.950171	-2.562483
C	-3.243438	3.054295	-3.935989
H	-4.132377	3.451603	-4.441327
H	-3.000360	2.083907	-4.379766
H	-2.402157	3.725166	-4.137154
C	1.134195	3.152899	0.685542
C	-0.730272	3.170725	2.403301
H	-0.179890	3.852659	3.059324
H	-1.364794	2.520880	3.012704
H	-1.381673	3.762706	1.750137
H	0.882423	1.741659	2.266785

O	2.204533	2.366384	0.111626
C	2.941244	4.492566	0.699565
H	2.710145	5.140771	-0.160779
C	3.417759	3.110785	0.240761
H	3.944250	3.132516	-0.720785
H	4.066373	2.639213	0.990847
H	0.554819	3.581524	-0.148400
H	3.636148	5.010018	1.365521
O	1.764284	4.176773	1.426080

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*R*)-**ts-rot2**] ($E_{\text{rel}} = +3.97$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46640$ au

$\nu_{\text{ts}} = 578i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	0.378927	-0.769888	-1.170020

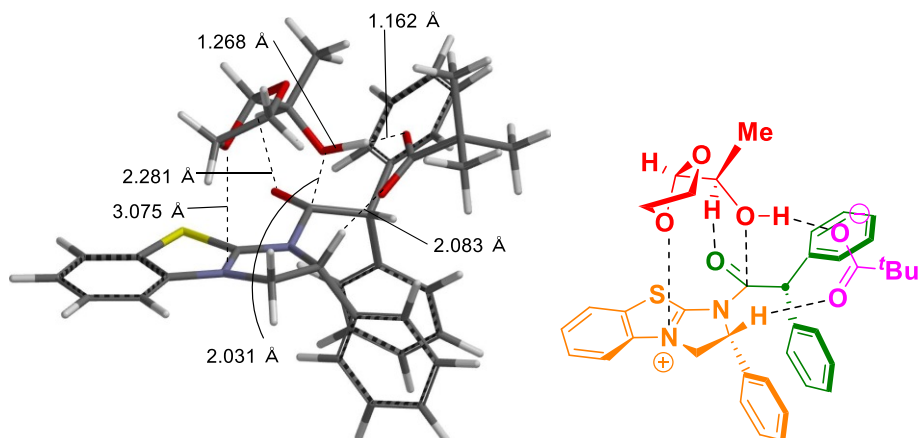
N	-0.430971	-1.254900	-0.030127
C	-1.698505	-1.570883	-0.261018
N	-2.465105	-1.573694	0.840348
S	-2.556070	-1.961049	-1.714211
C	-1.714834	-1.074974	2.000179
C	-0.262786	-0.921675	1.426832
H	0.017894	0.131762	1.507568
C	0.731223	-1.800589	2.156237
C	0.770576	-3.188935	1.973998
C	1.650576	-3.971725	2.718739
C	2.490473	-3.376376	3.663259
C	2.449367	-1.994907	3.854988
C	1.574681	-1.206655	3.103871
H	1.526668	-0.130954	3.252946
H	3.100110	-1.525958	4.588407
H	3.175698	-3.988255	4.243944
H	1.685013	-5.045735	2.557976
H	0.132120	-3.658692	1.229989
H	-2.118437	-0.111975	2.327306
H	-1.757416	-1.794820	2.820823
C	1.882589	-0.653947	-0.913114
H	2.015784	-0.210730	0.076718
O	-0.110871	-1.004290	-2.272718
O	-0.080322	1.192243	-0.699490
C	-0.829489	1.826678	-1.706396
H	0.540851	1.993861	0.053235
O	1.108034	2.782305	0.700485
C	0.812134	2.774020	1.968092
C	1.248991	4.047273	2.725423
O	0.222291	1.853205	2.553069
C	-4.031381	-2.195433	-0.730208
C	-3.796920	-1.921998	0.629924
C	-5.301037	-2.560935	-1.167442

H	-5.489671	-2.768336	-2.216440
C	-4.818108	-2.008398	1.574998
H	-4.630792	-1.792205	2.622026
C	-6.326879	-2.652930	-0.224394
H	-7.323060	-2.939557	-0.547020
C	-6.086672	-2.378140	1.127915
H	-6.899496	-2.452523	1.843908
C	2.551074	-2.038358	-0.896768
C	3.927348	-4.495864	-0.864599
C	2.114514	-3.112462	-1.683185
C	3.687161	-2.216329	-0.094872
C	4.370932	-3.430050	-0.078571
C	2.797226	-4.331290	-1.664705
H	1.239050	-2.996840	-2.313864
H	4.039551	-1.392541	0.520402
H	5.249889	-3.543586	0.550770
H	2.442491	-5.152178	-2.283182
H	4.458746	-5.444018	-0.853227
C	2.577875	0.258646	-1.923953
C	3.952257	1.920602	-3.728292
C	3.222071	1.418067	-1.477578
C	2.632545	-0.061489	-3.286899
C	3.308375	0.767195	-4.182008
C	3.906810	2.242520	-2.372040
H	3.155583	1.700856	-0.431296
H	2.141360	-0.956592	-3.651514
H	3.335170	0.507504	-5.237409
H	4.394731	3.141966	-2.005491
H	4.482710	2.562305	-4.427266
C	0.371622	5.212980	2.215762
H	0.654159	6.147433	2.717260
H	-0.689554	5.024800	2.419274
H	0.490255	5.343382	1.136272

C	2.730281	4.347649	2.418823
H	3.046791	5.266193	2.929699
H	2.886275	4.474088	1.344583
H	3.378581	3.532940	2.765894
C	1.048201	3.861007	4.236333
H	1.331165	4.776145	4.771285
H	1.661325	3.038054	4.619392
H	0.005135	3.629707	4.470188
C	-2.165867	2.300650	-1.116227
C	-0.071744	2.956506	-2.409631
H	-0.705982	3.417848	-3.175278
H	0.822421	2.554598	-2.892425
H	0.233545	3.723476	-1.692916
H	-1.094569	1.064777	-2.457645
O	-3.084038	2.689761	-2.144336
C	-3.224326	4.133428	-0.332592
H	-3.968944	3.688708	0.348073
C	-3.637598	3.957332	-1.797190
H	-4.724084	3.935279	-1.941215
H	-3.209041	4.743386	-2.433891
H	-2.623094	1.473992	-0.540552
H	-3.040614	5.169331	-0.036461
O	-1.996192	3.424041	-0.275391

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*R*)-**ts-rot3**] ($E_{\text{rel}} = +0.51$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.47191$ au

$\nu_{\text{TS}} = 561i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	0.113785	-0.924172	-1.128950
N	-0.854297	-0.866528	-0.011925
C	-2.145753	-0.805228	-0.308086
N	-2.909188	-0.358963	0.700412
S	-3.031096	-1.186537	-1.744375
C	-2.075051	0.139134	1.798428
C	-0.638440	-0.319132	1.370199
H	-0.011112	0.570919	1.290408
C	-0.046672	-1.311458	2.349829
C	-0.496084	-2.635688	2.427170
C	0.018535	-3.498521	3.392770
C	0.980244	-3.042783	4.298027
C	1.426999	-1.722903	4.229722
C	0.917379	-0.858431	3.258585
H	1.249788	0.175027	3.205147
H	2.174695	-1.362937	4.931655
H	1.381280	-3.716294	5.050797

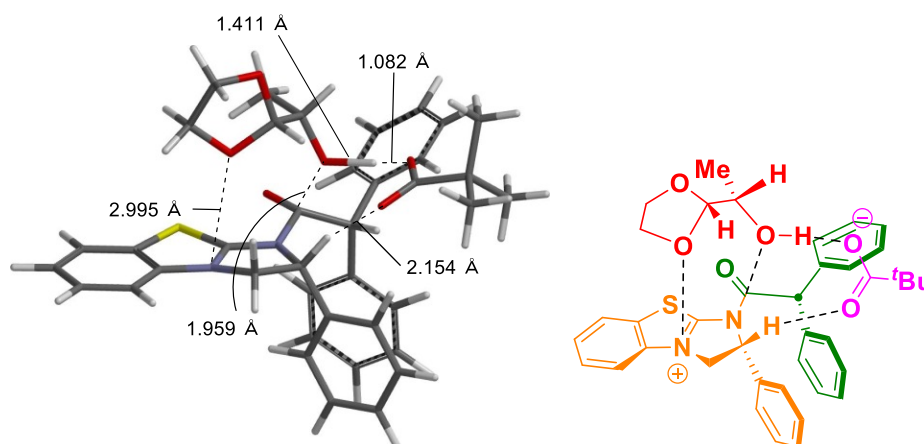
H	-0.326818	-4.527799	3.435215
H	-1.231335	-3.001306	1.714967
H	-2.143843	1.228944	1.856578
H	-2.379489	-0.305931	2.748123
C	1.550421	-1.294542	-0.751831
H	1.824849	-0.711881	0.130723
O	-0.392249	-1.207007	-2.214895
O	0.393880	1.085990	-1.057589
C	-0.100320	1.735701	-2.193464
H	1.270038	1.713850	-0.389898
O	2.119541	2.253288	0.190280
C	1.797547	2.687384	1.374495
C	2.839487	3.644278	1.994803
O	0.765090	2.373725	1.987998
C	-4.532219	-0.722417	-0.892249
C	-4.268718	-0.277678	0.416117
C	-5.833431	-0.733258	-1.384303
H	-6.042236	-1.070713	-2.395075
C	-5.293329	0.158427	1.254793
H	-5.083426	0.495469	2.265167
C	-6.864182	-0.296245	-0.549000
H	-7.885653	-0.298345	-0.916677
C	-6.595045	0.144359	0.752692
H	-7.410394	0.481052	1.385773
C	1.667532	-2.781376	-0.383367
C	2.051907	-5.488339	0.293970
C	0.875851	-3.782079	-0.961744
C	2.651841	-3.159252	0.540658
C	2.845906	-4.497521	0.875737
C	1.066704	-5.124108	-0.623392
H	0.107459	-3.512996	-1.679281
H	3.271650	-2.394024	1.001209
H	3.616075	-4.765780	1.594361

H	0.442111	-5.885565	-1.084176
H	2.200828	-6.533244	0.553635
C	2.544127	-0.942384	-1.860718
C	4.458033	-0.331821	-3.829716
C	3.579920	-0.039631	-1.594673
C	2.479118	-1.539288	-3.127085
C	3.425378	-1.231269	-4.104387
C	4.531223	0.263257	-2.570469
H	1.681193	-2.237045	-3.353267
H	3.356145	-1.698918	-5.083538
H	5.323554	0.972442	-2.344609
H	5.196501	-0.096296	-4.591986
C	3.003563	4.858589	1.056215
H	3.746549	5.556339	1.462631
H	2.057226	5.401238	0.945511
H	3.327692	4.539772	0.062044
C	4.185211	2.896841	2.113176
H	4.948285	3.555469	2.546587
H	4.535009	2.560320	1.133186
H	4.094619	2.019550	2.766294
C	2.374123	4.108117	3.382721
H	3.116744	4.785580	3.822121
H	2.237147	3.259694	4.060722
H	1.418224	4.637669	3.321720
C	-1.163120	2.780958	-1.831589
C	1.008877	2.385671	-3.034440
H	0.598310	2.857978	-3.936327
H	1.730585	1.624942	-3.342393
H	1.532103	3.149341	-2.451431
H	-0.613556	0.983016	-2.814749
O	-0.621777	3.850521	-1.058298
C	-2.750872	3.306827	-0.322372
H	-3.439847	3.896575	-0.947711

C	-1.497208	4.106470	0.040431
H	-1.686325	5.183885	0.114886
H	-1.034107	3.748270	0.966501
H	-1.589212	3.206516	-2.759409
H	-3.302412	2.914490	0.536705
O	-2.214035	2.214067	-1.060231
H	3.619836	0.460159	-0.631903

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [*(S)*-**ts-(ent)rot1**] ($E_{\text{rel}} = +4.59$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46540$ au

$\nu_{\text{TS}} = 173i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	-0.051666	-0.623706	1.190093
N	0.819789	-0.598258	-0.025342
C	2.130748	-0.615103	0.140960
N	2.820280	-0.264844	-0.959257
S	3.128494	-0.989080	1.506635
C	1.909410	0.315370	-1.953658

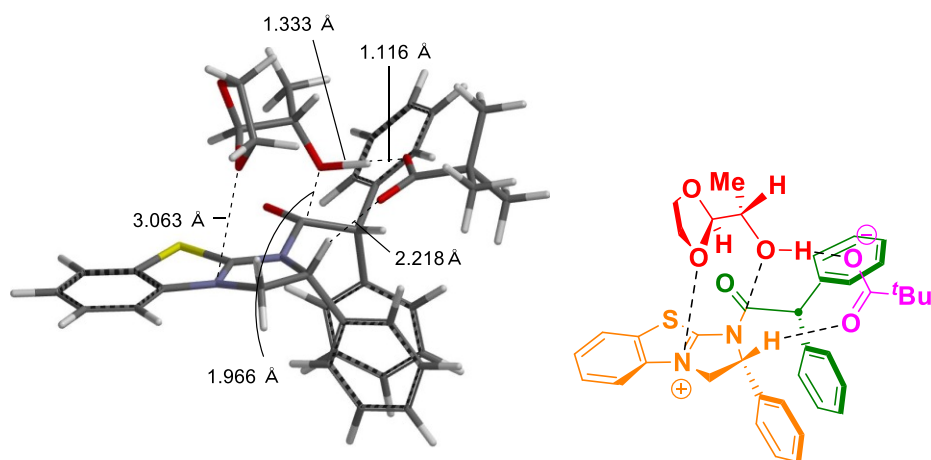
C	0.510115	-0.155276	-1.428100
H	-0.159351	0.703534	-1.372055
C	-0.083434	-1.244366	-2.302221
C	0.430613	-2.547295	-2.314122
C	-0.086568	-3.501980	-3.187285
C	-1.115968	-3.161709	-4.068390
C	-1.627054	-1.863830	-4.067262
C	-1.114532	-0.907413	-3.187954
H	-1.499696	0.108674	-3.190948
H	-2.428103	-1.591968	-4.749773
H	-1.519216	-3.906960	-4.748876
H	0.308531	-4.513897	-3.173544
H	1.221057	-2.826986	-1.623411
H	2.008284	1.404024	-1.929839
H	2.117854	-0.071353	-2.952661
C	-1.472236	-1.175219	0.978265
H	-1.915059	-0.660492	0.123086
O	0.580656	-0.844296	2.224005
O	-0.605596	1.243586	0.976330
C	-0.079455	2.354187	1.668336
C	0.553335	2.044019	3.027774
H	-0.145961	1.471856	3.641457
H	0.790195	2.983778	3.537558
H	1.468966	1.457768	2.925554
H	-0.911072	3.059318	1.849984
H	-1.729628	1.682333	0.244958
O	-2.628729	2.062517	-0.220738
C	-2.458360	2.430556	-1.473065
C	-3.724035	3.034213	-2.109091
O	-1.400160	2.309755	-2.093972
C	4.565694	-0.666006	0.490599
C	4.202457	-0.250387	-0.803948
C	5.905815	-0.749964	0.854843

H	6.190950	-1.070549	1.852620
C	5.166324	0.094279	-1.750605
H	4.879979	0.414212	-2.747665
C	6.875912	-0.409781	-0.091248
H	7.926608	-0.472006	0.175441
C	6.507926	0.009961	-1.375387
H	7.276793	0.273377	-2.095463
C	-1.449690	-2.674763	0.650991
C	-1.575322	-5.429605	0.066815
C	-0.505248	-3.563614	1.182552
C	-2.456010	-3.190859	-0.177444
C	-2.522723	-4.552726	-0.465629
C	-0.566936	-4.927924	0.889463
H	0.281987	-3.186734	1.827935
H	-3.194806	-2.516288	-0.603561
H	-3.313455	-4.927368	-1.110671
H	0.175895	-5.599836	1.312957
H	-1.624279	-6.492282	-0.156712
C	-2.366135	-0.910005	2.193237
C	-4.089973	-0.477280	4.376448
C	-3.516800	-0.125928	2.052181
C	-2.090965	-1.477485	3.445324
C	-2.942300	-1.258123	4.527516
C	-4.373205	0.088115	3.133790
H	-3.732864	0.341476	1.097000
H	-1.203058	-2.084301	3.576729
H	-2.708605	-1.703036	5.491567
H	-5.259992	0.703101	3.002081
H	-4.755427	-0.311075	5.219878
C	-4.117228	4.299448	-1.315057
H	-5.034854	4.731991	-1.731795
H	-3.330674	5.061142	-1.371574
H	-4.290058	4.062645	-0.261406

C	-4.866082	1.998061	-2.024325
H	-5.775097	2.403175	-2.485283
H	-5.090564	1.742393	-0.985020
H	-4.605243	1.074162	-2.555807
C	-3.447355	3.395750	-3.575983
H	-4.336674	3.855535	-4.023749
H	-3.188278	2.507906	-4.162091
H	-2.613736	4.099557	-3.657621
C	0.880428	3.115122	0.739020
O	1.244501	4.356095	1.313826
C	2.558923	4.638183	0.856420
H	2.541033	5.069780	-0.156998
H	3.022424	5.348973	1.545245
H	0.403781	3.264292	-0.241238
O	2.113208	2.397735	0.498887
C	3.200842	3.251328	0.855262
H	4.003031	3.136581	0.118105
H	3.585379	2.987915	1.850267

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*S*)-**ts-(ent)rot2**] ($E_{\text{rel}} = +5.72$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46361$ au

$$\nu_{ts} = 314i \text{ cm}^{-1}$$

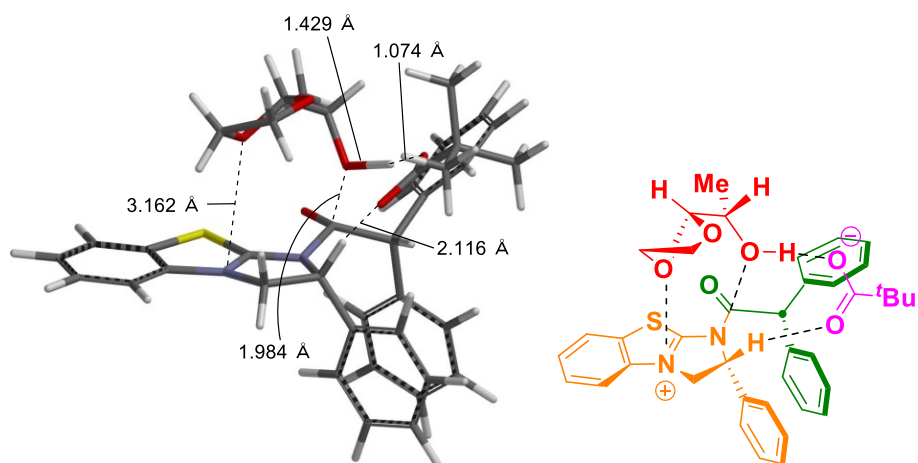
Cartesian Coordinates (Angstroms)			
Atom	X	Y	Z
C	0.037138	-0.632249	1.187548
N	0.914775	-0.642043	-0.026383
C	2.226480	-0.609159	0.160388
N	2.924101	-0.272714	-0.935658
S	3.214389	-0.895075	1.556012
C	2.025488	0.179871	-1.999914
C	0.611846	-0.199328	-1.433141
H	0.002164	0.702941	-1.369678
C	-0.056914	-1.257220	-2.289163
C	0.383562	-2.587110	-2.294962
C	-0.195643	-3.517770	-3.154931
C	-1.210657	-3.125474	-4.031095
C	-1.644788	-1.799996	-4.038996
C	-1.071855	-0.867707	-3.170682
H	-1.393421	0.169960	-3.181756
H	-2.431691	-1.487732	-4.720642
H	-1.661354	-3.851936	-4.702208
H	0.139435	-4.550939	-3.134160
H	1.162390	-2.903654	-1.606396
H	2.134992	1.258186	-2.134335
H	2.239907	-0.342825	-2.934630
C	-1.395289	-1.160784	0.994688
H	-1.843295	-0.629775	0.152600
O	0.667929	-0.815065	2.230615
O	-0.481411	1.246031	0.926460
C	-0.020090	2.312021	1.722132
C	-0.312513	2.143088	3.217898
H	-1.386218	2.007813	3.376014

H	0.020113	3.028099	3.772371
H	0.199949	1.262432	3.614851
H	-0.551739	3.214898	1.373418
H	-1.532573	1.648852	0.212935
O	-2.467838	1.992751	-0.289720
C	-2.314190	2.382333	-1.532617
C	-3.629859	2.831051	-2.199858
O	-1.238096	2.373724	-2.138378
C	4.656951	-0.554410	0.554582
C	4.302454	-0.205873	-0.760792
C	5.991241	-0.560051	0.948001
H	6.270417	-0.821840	1.964329
C	5.268247	0.139550	-1.704652
H	4.987227	0.408230	-2.718076
C	6.963349	-0.215192	0.006387
H	8.009531	-0.214478	0.296593
C	6.603921	0.131555	-1.301827
H	7.374899	0.400118	-2.017658
C	-1.423708	-2.654503	0.654904
C	-1.652770	-5.390477	0.028071
C	-0.484837	-3.577138	1.133712
C	-2.479251	-3.125773	-0.138745
C	-2.596705	-4.478288	-0.448943
C	-0.598148	-4.933999	0.818804
H	0.336534	-3.234918	1.756106
H	-3.212282	-2.418940	-0.519709
H	-3.423565	-4.818518	-1.067179
H	0.140681	-5.635256	1.199047
H	-1.741550	-6.446779	-0.212285
C	-2.252894	-0.876821	2.232064
C	-3.880440	-0.370002	4.471374
C	-3.331773	0.010356	2.144796
C	-2.005005	-1.514482	3.455129

C	-2.808144	-1.259218	4.565976
C	-4.140267	0.261680	3.255428
H	-3.523514	0.530193	1.211859
H	-1.175589	-2.206629	3.543645
H	-2.594899	-1.758534	5.507873
H	-4.971306	0.957305	3.167411
H	-4.507283	-0.172923	5.337447
C	-4.291595	3.925638	-1.336577
H	-5.245433	4.228718	-1.784705
H	-3.654551	4.815639	-1.268783
H	-4.480570	3.563444	-0.322883
C	-4.567478	1.605080	-2.280079
H	-5.516241	1.887405	-2.752545
H	-4.782590	1.207606	-1.283911
H	-4.121315	0.801698	-2.879607
C	-3.348410	3.368923	-3.610325
H	-4.283521	3.700438	-4.077696
H	-2.897313	2.602198	-4.247639
H	-2.657559	4.217213	-3.578850
C	1.486725	2.590717	1.509088
O	1.899657	2.497616	0.153043
C	1.611720	3.768851	-0.436675
H	2.400860	3.986701	-1.164112
H	0.646209	3.738692	-0.953673
H	2.104511	1.896863	2.087646
O	1.817002	3.913548	1.910112
C	1.616121	4.746947	0.767762
H	2.437702	5.469590	0.732206
H	0.669401	5.298305	0.839268

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*S*)-**ts-(ent)rot3**] ($E_{rel} = +6.74$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46197$ au

$\nu_{ts} = 168i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	0.135125	-1.008653	-1.050386
N	-0.819579	-0.840455	0.083254
C	-2.111242	-0.827553	-0.204798
N	-2.879526	-0.316834	0.771177
S	-2.996608	-1.341086	-1.599827
C	-2.054880	0.237323	1.847020
C	-0.603454	-0.169828	1.411286
H	-0.028332	0.740262	1.236868
C	0.070774	-1.044244	2.449490
C	-0.341077	-2.363267	2.682079
C	0.253810	-3.119904	3.689603
C	1.259259	-2.561674	4.482997
C	1.666099	-1.245883	4.263076
C	1.075173	-0.487603	3.249816
H	1.375604	0.542554	3.081461
H	2.446437	-0.806006	4.878629

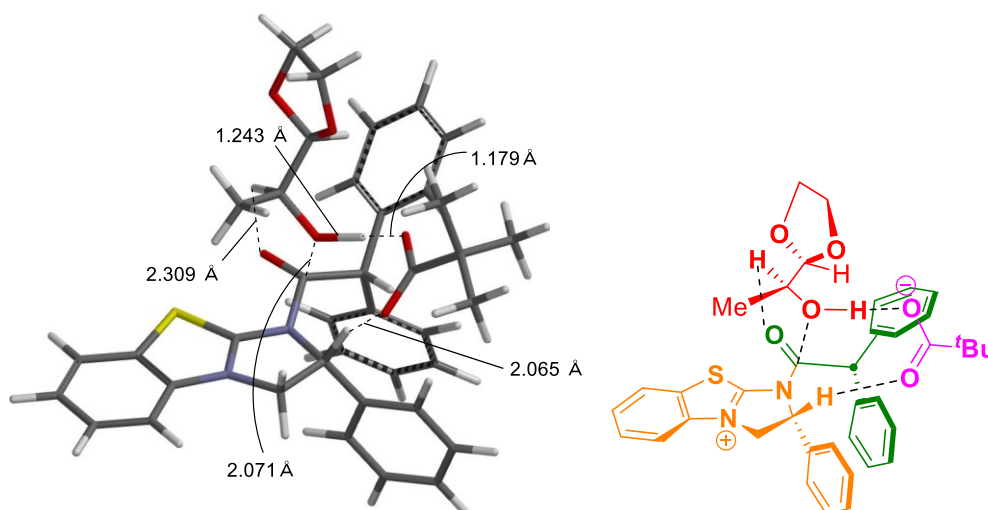
H	1.723882	-3.152368	5.268155
H	-0.061648	-4.146964	3.850453
H	-1.111617	-2.809313	2.058105
H	-2.172322	1.323660	1.894514
H	-2.330185	-0.203548	2.808381
C	1.579936	-1.361872	-0.666165
H	1.888802	-0.700969	0.147025
O	-0.398402	-1.459494	-2.064891
O	0.462277	0.945442	-1.145994
C	0.148465	1.771308	-2.236808
H	1.421086	1.662490	-0.365270
O	2.190085	2.274956	0.066717
C	1.813393	2.891209	1.165991
C	2.745643	4.048027	1.565924
O	0.822080	2.584031	1.831908
C	-4.503295	-0.840796	-0.774190
C	-4.242706	-0.292288	0.495135
C	-5.807498	-0.917195	-1.252299
H	-6.015416	-1.336019	-2.232448
C	-5.271620	0.184592	1.306063
H	-5.063559	0.600617	2.287047
C	-6.843290	-0.440727	-0.444874
H	-7.866706	-0.494793	-0.802993
C	-6.576170	0.104013	0.816954
H	-7.394798	0.469687	1.429430
C	1.691157	-2.805033	-0.153268
C	2.062309	-5.433933	0.790832
C	0.861835	-3.846555	-0.591353
C	2.707396	-3.103785	0.765715
C	2.894643	-4.402912	1.232576
C	1.046177	-5.149044	-0.120634
H	0.071487	-3.637462	-1.304822
H	3.356269	-2.306630	1.119740

H	3.689545	-4.609596	1.944662
H	0.392454	-5.942806	-0.474110
H	2.206621	-6.448584	1.153217
C	2.536583	-1.133663	-1.838888
C	4.355765	-0.730341	-3.946607
C	3.517002	-0.138334	-1.755348
C	2.478911	-1.926822	-2.992915
C	3.378020	-1.723032	-4.039735
C	4.421813	0.060784	-2.799835
H	1.723930	-2.700297	-3.074088
H	3.315890	-2.345350	-4.929089
H	5.174530	0.840714	-2.715642
H	5.058971	-0.575852	-4.761146
C	2.756639	5.076417	0.413528
H	3.370962	5.942806	0.688408
H	1.743846	5.428666	0.189397
H	3.163918	4.633822	-0.499289
C	4.170679	3.493322	1.780540
H	4.850313	4.305747	2.065885
H	4.554549	3.025613	0.869605
H	4.189477	2.746336	2.583970
C	2.238366	4.704763	2.858307
H	2.910018	5.521091	3.149201
H	2.192540	3.983387	3.680474
H	1.232349	5.115156	2.726064
C	-0.956924	2.775938	-1.874020
O	-0.512117	3.703342	-0.887144
C	-2.772639	3.188789	-0.629672
H	-3.371402	3.797020	-1.325756
C	-1.612305	4.005569	-0.031661
H	-1.819028	5.083656	-0.039810
H	-1.354908	3.697110	0.987459
H	-1.257473	3.343930	-2.775426

H	-3.441859	2.743437	0.111961
O	-2.104818	2.145154	-1.326969
H	3.559234	0.501391	-0.879538
C	-0.215547	1.053776	-3.547004
H	0.556262	0.327806	-3.808817
H	-0.284418	1.794615	-4.353628
H	-1.170194	0.527435	-3.480882
H	1.027556	2.403181	-2.458983

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*S*)-**ts-(ent)rot4**] ($E_{\text{rel}} = +4.29$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46588$ au

$(E_{\text{SM(IRC)}}(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.48656$ au)

$\nu_{\text{TS}} = 594i$ cm^{-1}

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	0.437442	-0.407171	1.217079
N	1.466969	-0.116679	0.194761
C	2.346983	0.841575	0.457906

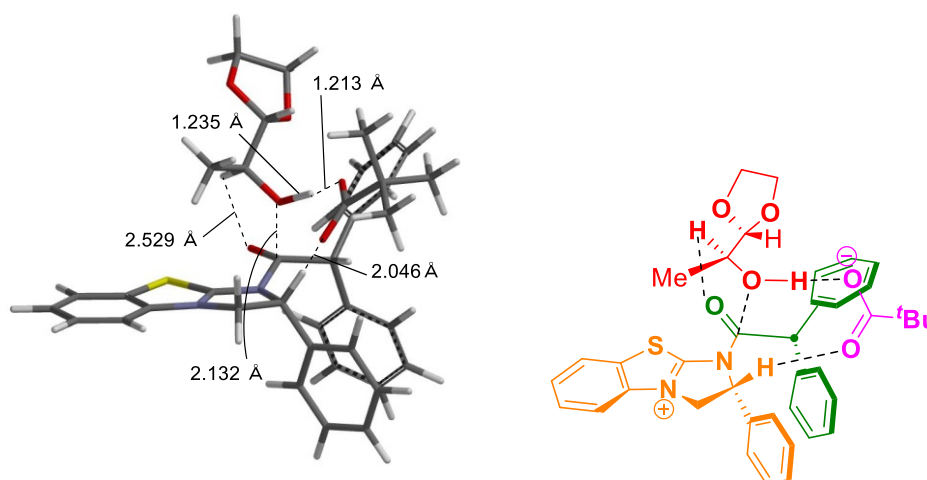
N	2.930672	1.356572	-0.634045
S	2.871426	1.565573	1.940786
C	2.331908	0.807572	-1.857089
C	1.346670	-0.275299	-1.296761
H	0.338946	0.025182	-1.590754
C	1.672063	-1.662083	-1.808624
C	2.764523	-2.395805	-1.328297
C	3.073464	-3.639190	-1.877123
C	2.299658	-4.156450	-2.918916
C	1.216244	-3.425594	-3.407484
C	0.901559	-2.182140	-2.855948
H	0.070495	-1.598398	-3.242140
H	0.612169	-3.821756	-4.219435
H	2.540704	-5.126222	-3.346117
H	3.913732	-4.206849	-1.487135
H	3.358771	-2.006781	-0.505324
H	1.790455	1.586414	-2.401868
H	3.102217	0.369120	-2.496010
C	-0.391946	-1.667768	0.976023
H	-0.647224	-1.696853	-0.085578
O	0.685473	0.045642	2.332010
O	-0.869815	0.912198	0.300714
C	-1.206979	2.008656	1.114079
C	-0.675018	3.327690	0.541341
H	0.420080	3.309935	0.498207
H	-0.976972	4.172386	1.170750
H	-1.061993	3.484869	-0.469363
H	-0.752585	1.837311	2.103532
H	-1.651715	0.612697	-0.617615
O	-2.425931	0.285703	-1.444041
C	-2.081764	0.537018	-2.673705
C	-3.268495	0.562749	-3.662217
O	-0.921310	0.758147	-3.053792

C	3.999137	2.584599	0.995686
C	3.876588	2.347086	-0.385614
C	4.888851	3.544448	1.469282
H	4.985111	3.737136	2.533527
C	4.634577	3.055681	-1.316364
H	4.530739	2.868233	-2.380350
C	5.653496	4.254911	0.541579
H	6.354539	5.005727	0.892931
C	5.525169	4.013612	-0.832350
H	6.126693	4.581003	-1.535859
C	0.419008	-2.933040	1.297002
C	1.759102	-5.341368	1.875352
C	1.396177	-2.983925	2.299969
C	0.124618	-4.107241	0.589839
C	0.784591	-5.300589	0.875699
C	2.061530	-4.179006	2.583896
H	1.637095	-2.088442	2.863647
H	-0.630190	-4.083367	-0.192111
H	0.539814	-6.198420	0.314073
H	2.816842	-4.197918	3.365853
H	2.276078	-6.270839	2.099644
C	-1.705044	-1.667048	1.761012
C	-4.150178	-1.769613	3.145855
C	-2.916140	-1.763548	1.065238
C	-1.731998	-1.627527	3.161680
C	-2.946216	-1.670341	3.846596
C	-4.130484	-1.816801	1.751971
H	-2.912331	-1.754903	-0.020425
H	-0.804919	-1.549322	3.717981
H	-2.949901	-1.628393	4.932882
H	-5.059828	-1.886793	1.192443
H	-5.094393	-1.808547	3.683165
C	-4.106908	1.818628	-3.329724

H	-5.012893	1.845249	-3.948658
H	-3.535121	2.733238	-3.528185
H	-4.393485	1.823307	-2.274365
C	-4.134175	-0.697945	-3.464137
H	-4.992430	-0.676078	-4.147345
H	-4.505309	-0.758074	-2.438007
H	-3.562500	-1.610598	-3.675791
C	-2.759391	0.634446	-5.108694
H	-3.605358	0.694070	-5.804816
H	-2.167471	-0.250955	-5.367156
H	-2.121029	1.509932	-5.257473
C	-2.718838	2.081214	1.380241
O	-2.950358	2.910352	2.507597
C	-4.276597	3.390358	2.346858
H	-5.006992	2.636911	2.681931
H	-4.393899	4.297831	2.945259
H	-3.119911	1.072655	1.556299
O	-3.444340	2.673926	0.295042
C	-4.368851	3.616053	0.831817
H	-5.371790	3.424297	0.431870
H	-4.066315	4.635005	0.552336

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions



Transition Structure [(*S*)-**ts**-(**ent**)**rot5**] ($E_{\text{rel}} = +5.40$ kcal/mol)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2470.46411$ au

$\nu_{\text{ts}} = 814i$ cm^{-1}

 Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
C	0.218013	-0.245252	1.270057
N	1.323430	-0.404381	0.307371
C	2.370521	0.406662	0.424917
N	3.064615	0.559025	-0.711399
S	2.994055	1.317293	1.757604
C	2.365930	-0.080182	-1.835709
C	1.243666	-0.893726	-1.108815
H	0.295819	-0.572099	-1.539802
C	1.424699	-2.389294	-1.264577
C	2.321953	-3.126823	-0.483408
C	2.507518	-4.488222	-0.721588
C	1.807647	-5.122658	-1.750024
C	0.917565	-4.389996	-2.536811
C	0.724651	-3.028856	-2.296075
H	0.044422	-2.446358	-2.912656
H	0.368147	-4.877330	-3.337969

H	1.953326	-6.183762	-1.934037
H	3.195832	-5.054198	-0.099785
H	2.859401	-2.646641	0.330064
H	1.932017	0.676465	-2.495828
H	3.045459	-0.726611	-2.394080
C	-0.906709	-1.271106	1.164638
H	-1.108671	-1.433040	0.103218
O	0.513173	0.358889	2.292240
O	-0.700573	1.168725	-0.034561
C	-0.595711	2.526145	0.305854
C	0.214422	3.310735	-0.738019
H	1.230285	2.904692	-0.810442
H	0.282301	4.370594	-0.475856
H	-0.251868	3.223870	-1.726786
H	-0.101934	2.596561	1.288114
H	-1.407402	0.928612	-1.017950
O	-2.212006	0.719317	-1.901357
C	-1.753597	0.343700	-3.057075
C	-2.818622	0.298945	-4.177772
O	-0.571794	0.038732	-3.289231
C	4.306743	1.899145	0.691674
C	4.169363	1.401074	-0.617051
C	5.346090	2.767984	1.010555
H	5.454319	3.160075	2.017238
C	5.060862	1.757894	-1.627811
H	4.944301	1.373139	-2.635959
C	6.244196	3.125185	0.002861
H	7.062491	3.800087	0.233642
C	6.100023	2.627507	-1.298950
H	6.806484	2.922928	-2.068592
C	-0.459907	-2.616021	1.763323
C	0.199052	-5.127088	2.854835
C	0.391835	-2.712649	2.871571

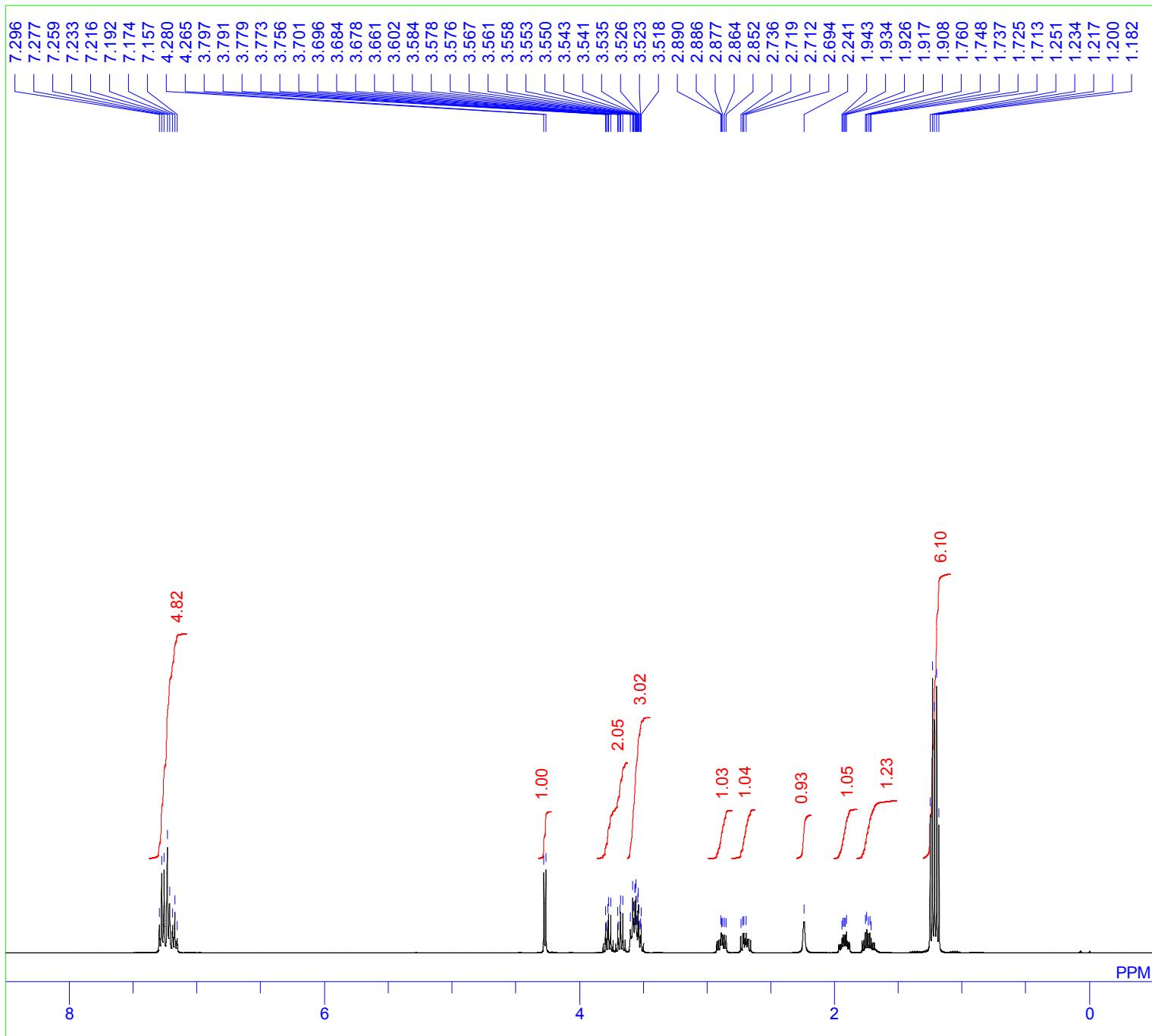
C	-0.972619	-3.797155	1.209608
C	-0.649438	-5.040781	1.749020
C	0.718024	-3.958806	3.411742
H	0.804114	-1.812018	3.314863
H	-1.635112	-3.740202	0.349682
H	-1.059465	-5.943124	1.302804
H	1.379482	-4.011887	4.273000
H	0.452509	-6.096109	3.276825
C	-2.212325	-0.807573	1.811220
C	-4.682896	-0.136952	2.968367
C	-3.362689	-0.701644	1.022976
C	-2.310094	-0.566270	3.186946
C	-3.535455	-0.227329	3.759103
C	-4.590675	-0.370969	1.596468
H	-3.291548	-0.846985	-0.051138
H	-1.427702	-0.639279	3.812908
H	-3.594817	-0.042501	4.829067
H	-5.473236	-0.292537	0.966509
H	-5.639852	0.115339	3.418891
C	-3.306528	1.743251	-4.427241
H	-4.091274	1.755369	-5.194234
H	-2.485704	2.380918	-4.778371
H	-3.710232	2.180832	-3.509708
C	-4.005050	-0.569205	-3.710139
H	-4.783477	-0.600785	-4.483144
H	-4.441947	-0.168595	-2.791589
H	-3.688080	-1.601638	-3.515007
C	-2.213069	-0.278849	-5.465158
H	-2.959807	-0.278909	-6.268938
H	-1.871210	-1.308915	-5.317300
H	-1.349739	0.308934	-5.789963
C	-1.983505	3.154467	0.486835
O	-2.626056	2.608150	1.613696

C	-3.530872	3.609432	2.047716
H	-4.446799	3.608288	1.434850
H	-3.794023	3.409271	3.089180
H	-2.595537	2.999172	-0.418140
O	-1.878190	4.569105	0.726461
C	-2.722362	4.894443	1.829143
H	-3.345627	5.760123	1.574182
H	-2.112155	5.143207	2.708930

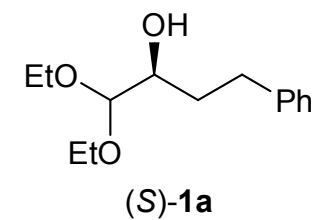
Requested basis set is 6-31G(d)

There are 277 shells and 808 basis functions

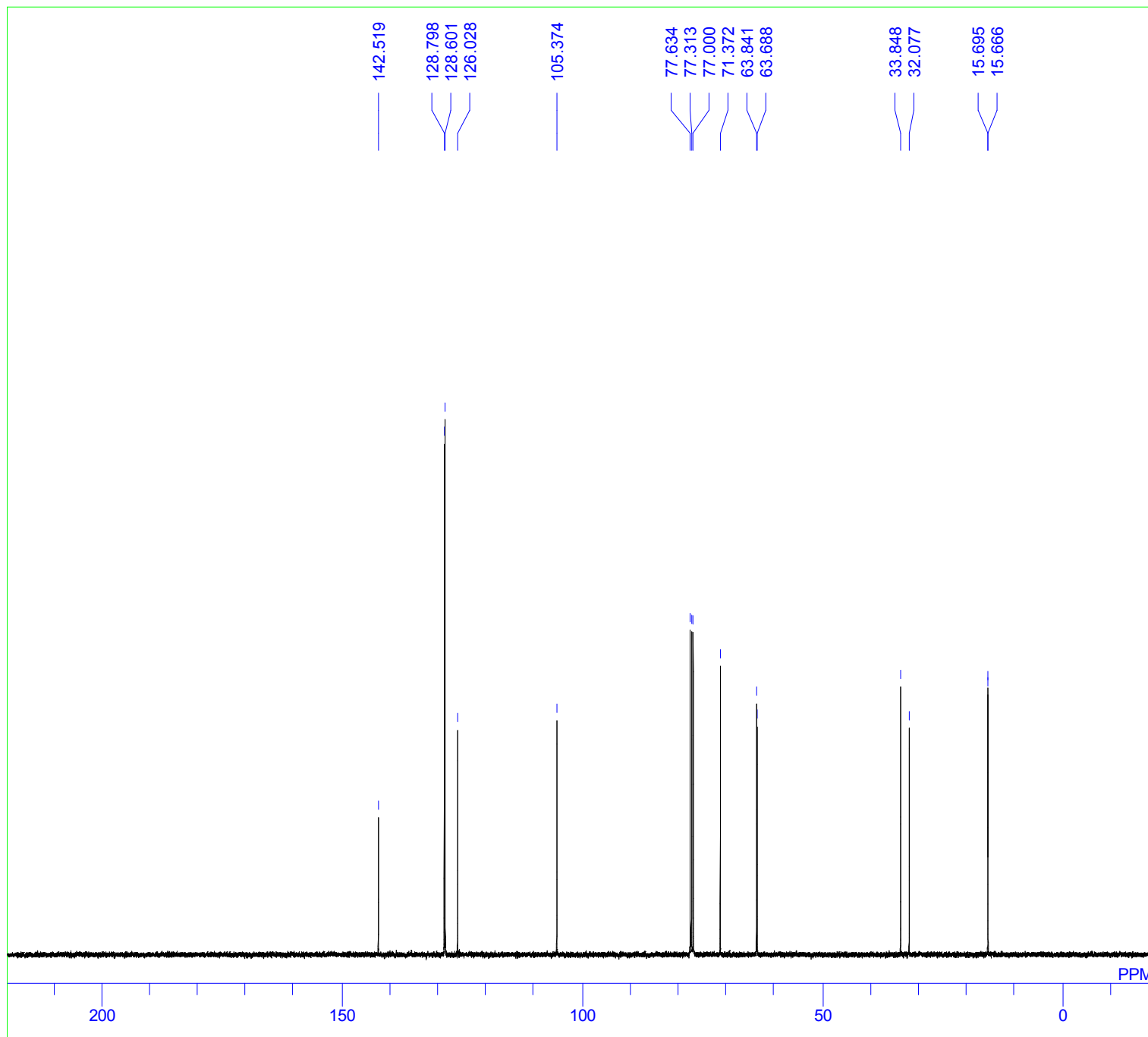
(S)-1a



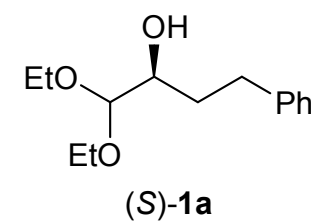
DFILE (S)-1a 1H.als
COMNT (S)-1a
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



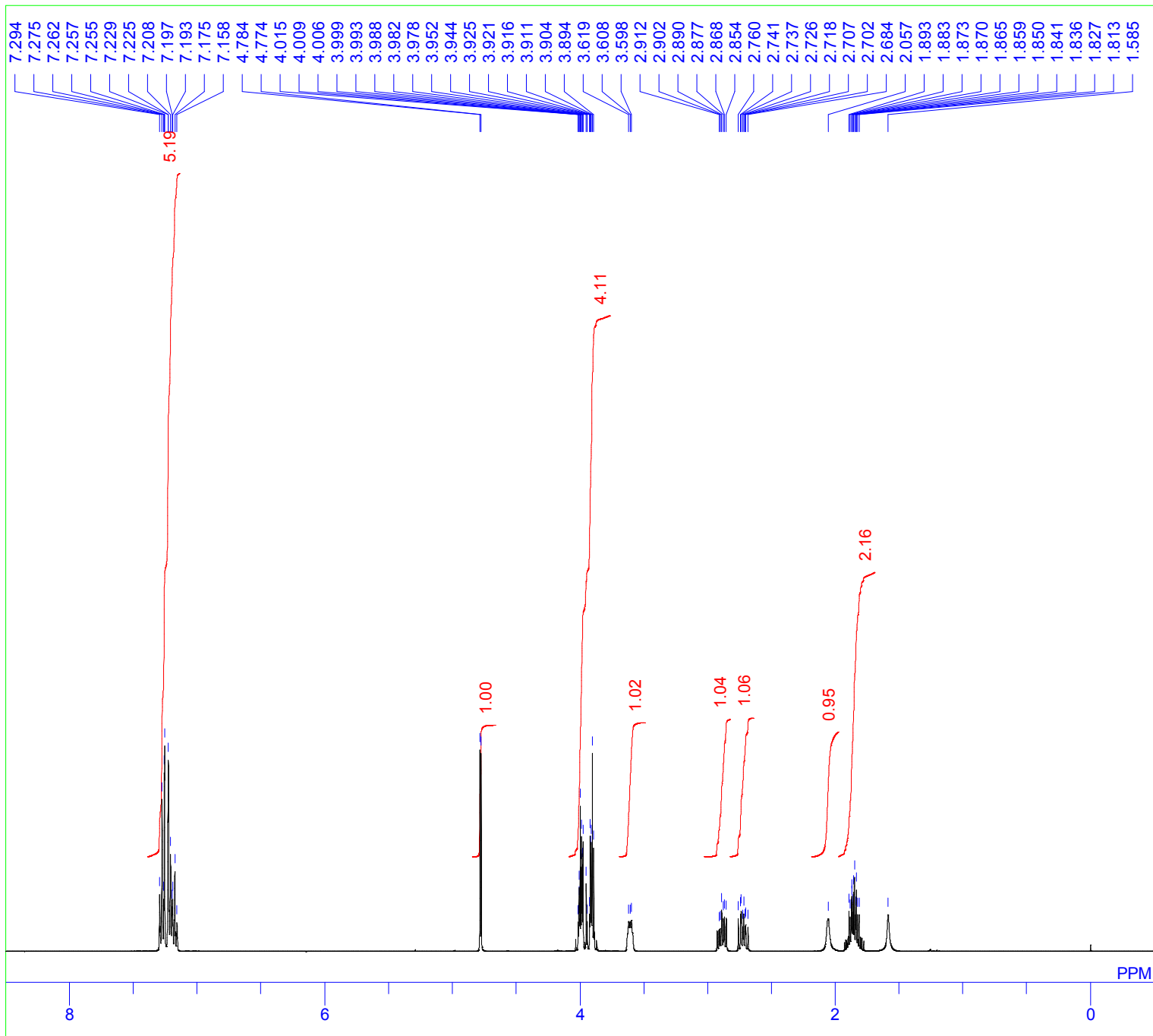
(S)-1a



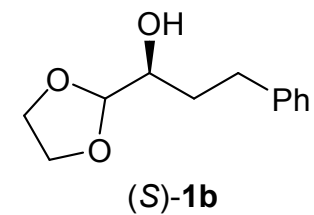
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1a
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



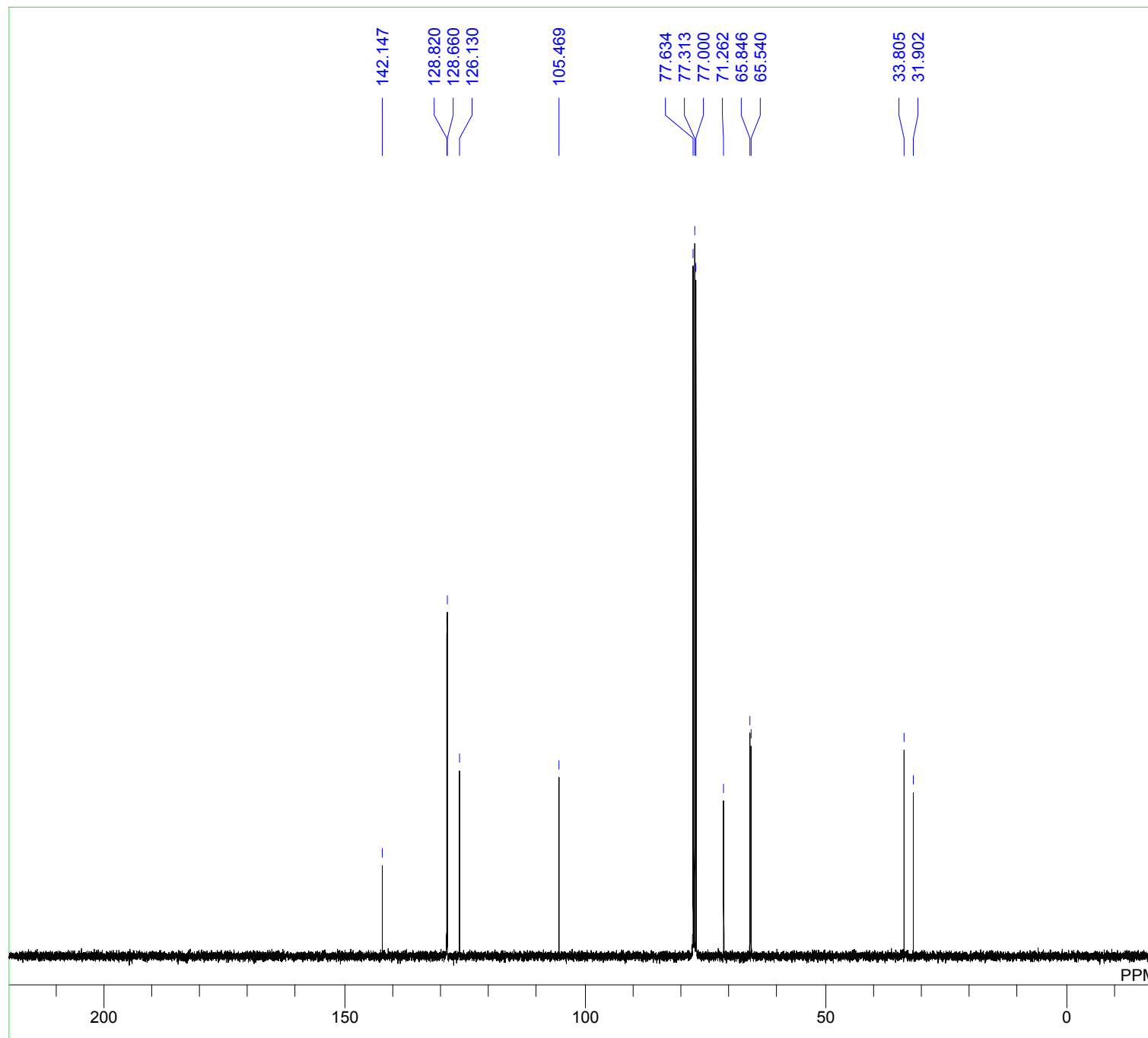
(S)-1b



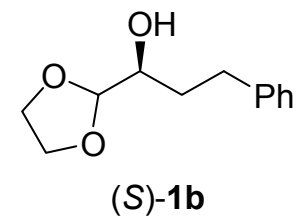
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1b
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



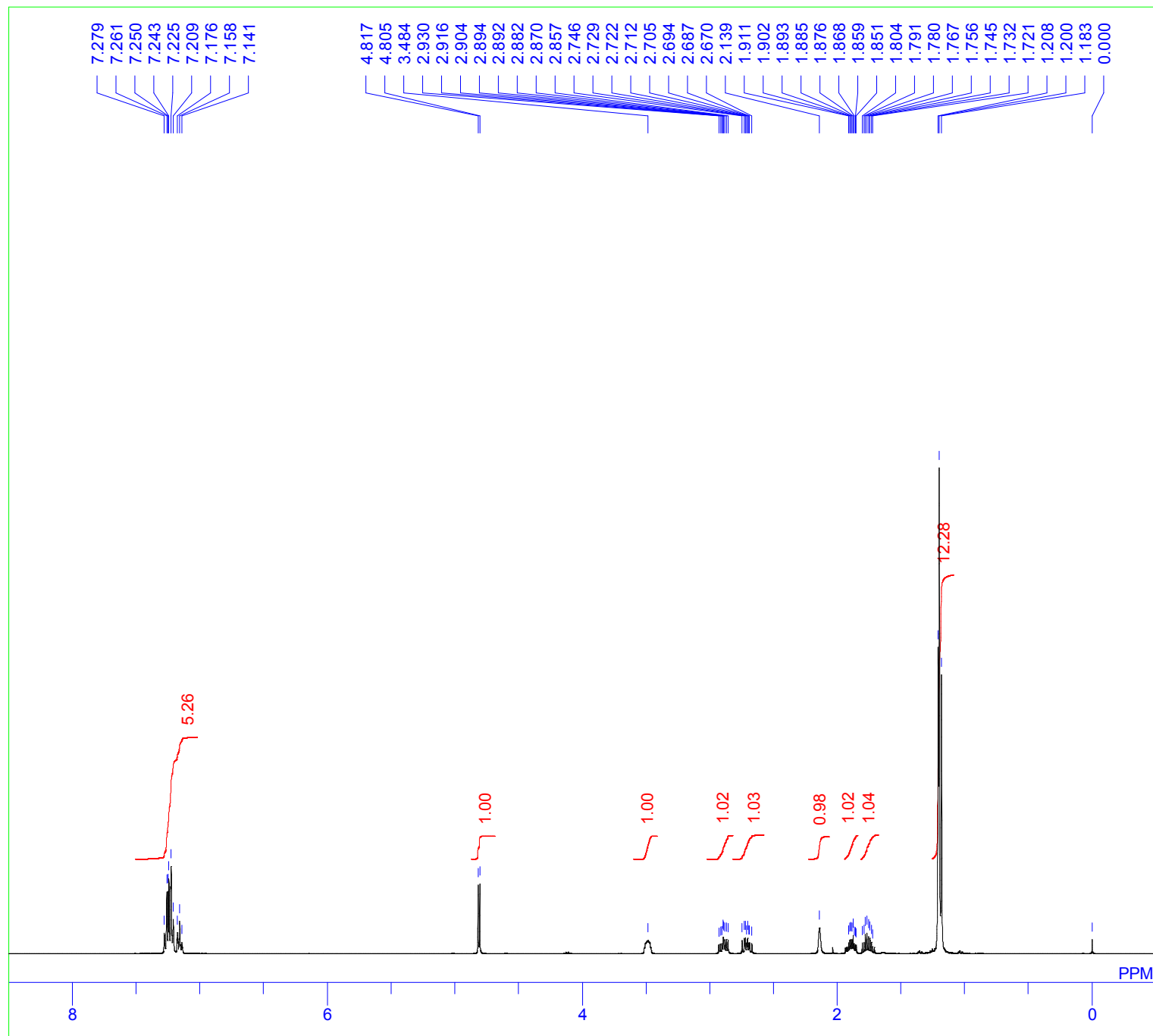
(S)-1b



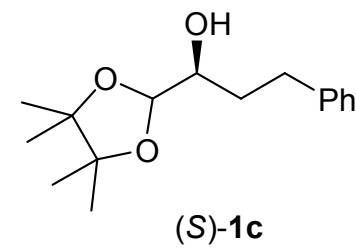
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1b
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



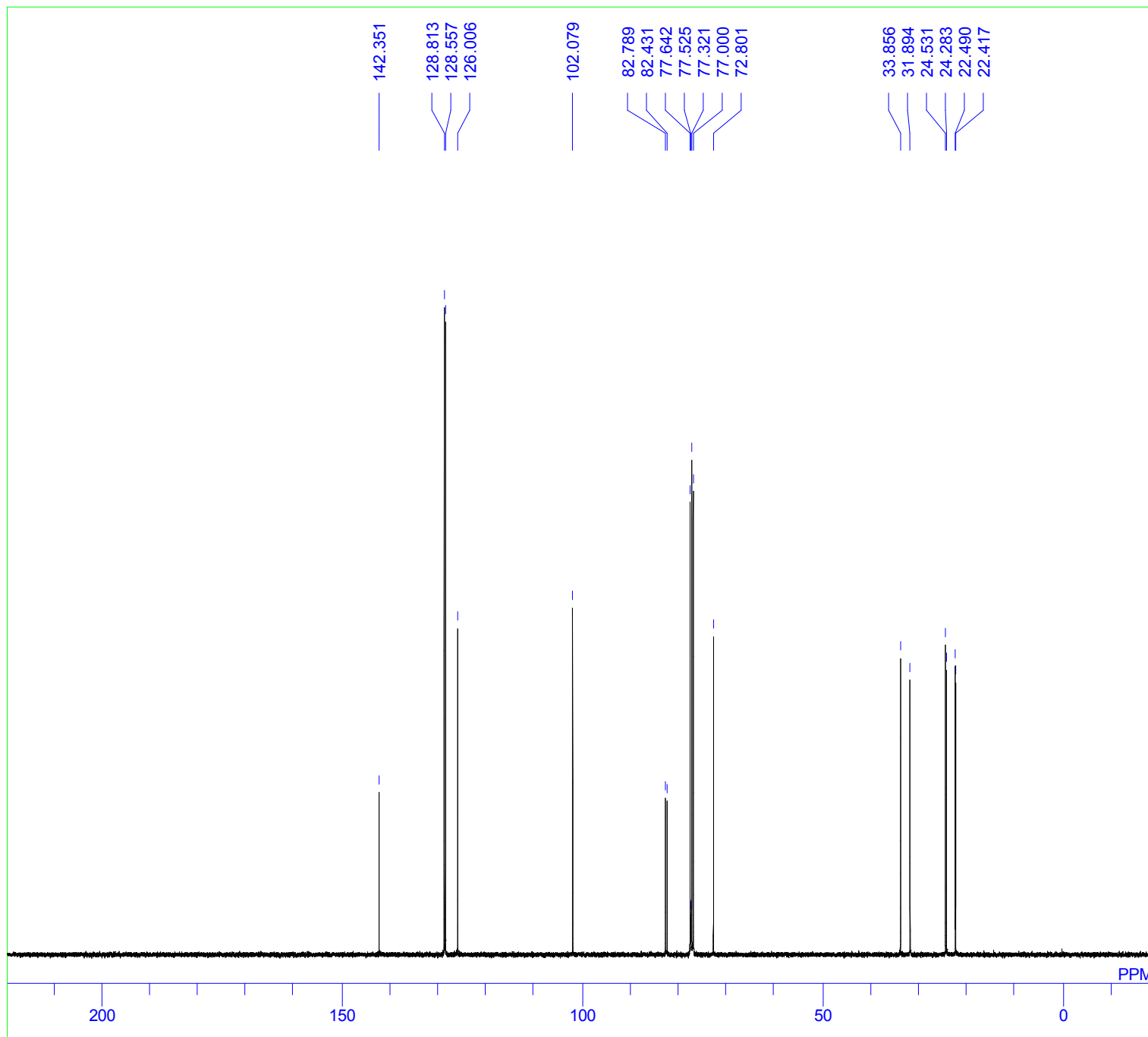
(S)-1c



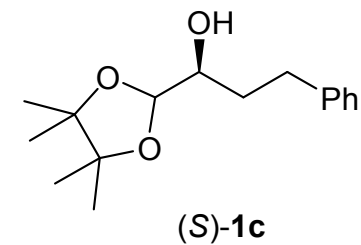
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1c
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



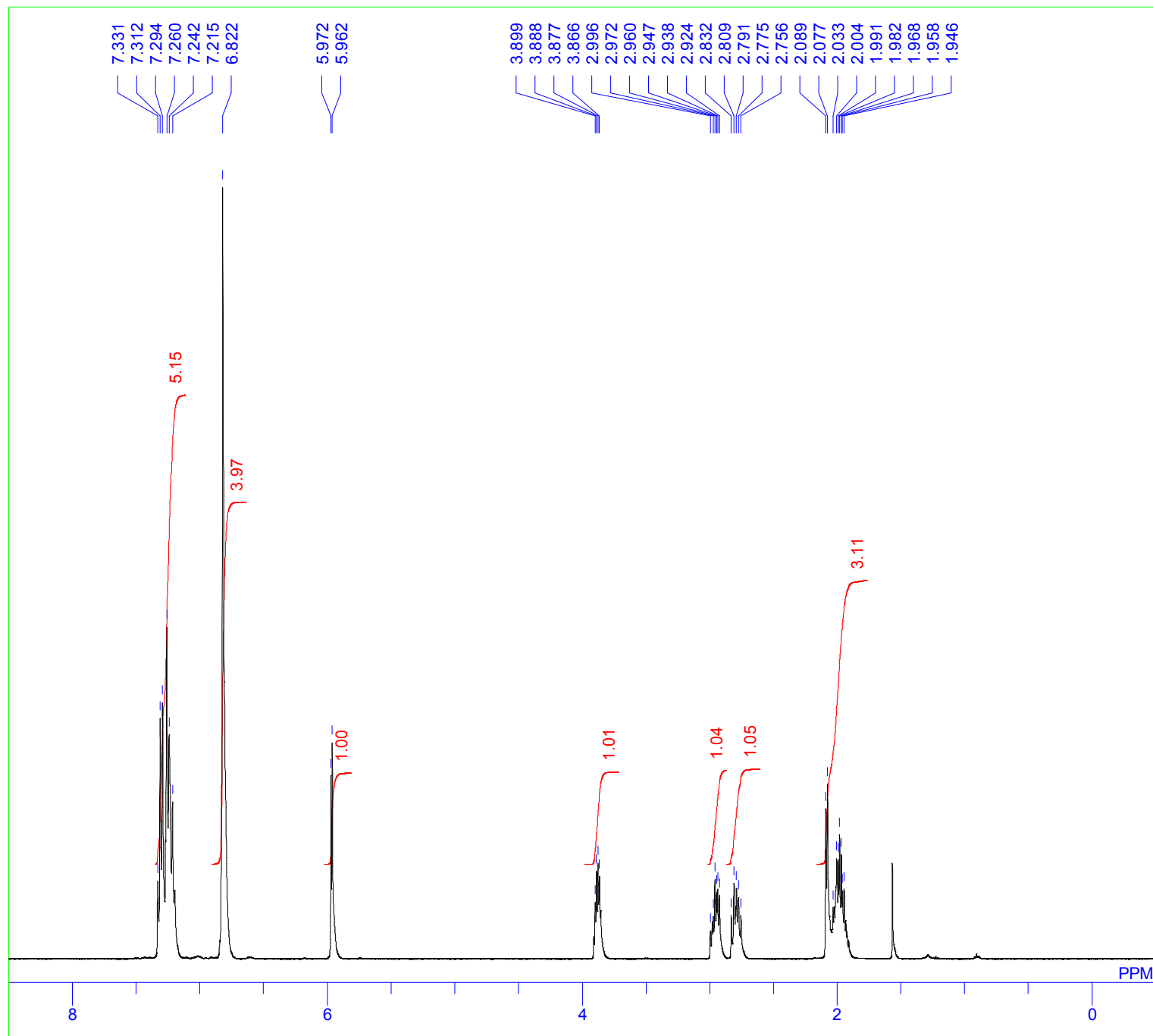
(S)-1c



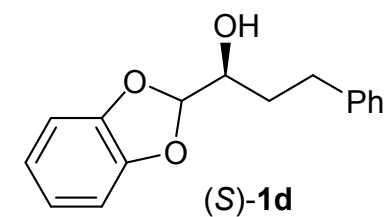
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1c
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



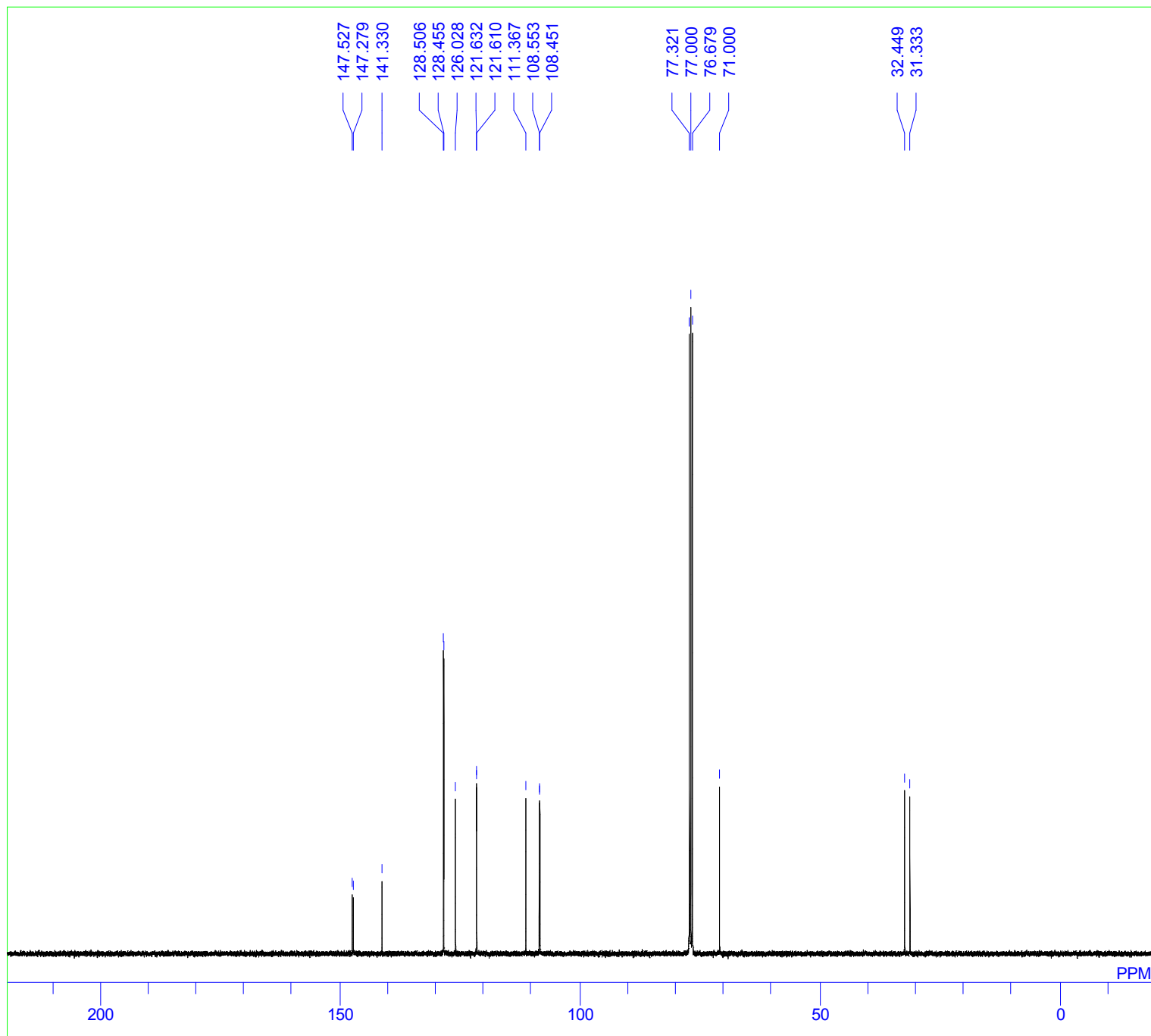
(S)-1d



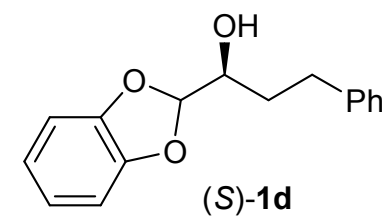
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1d
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



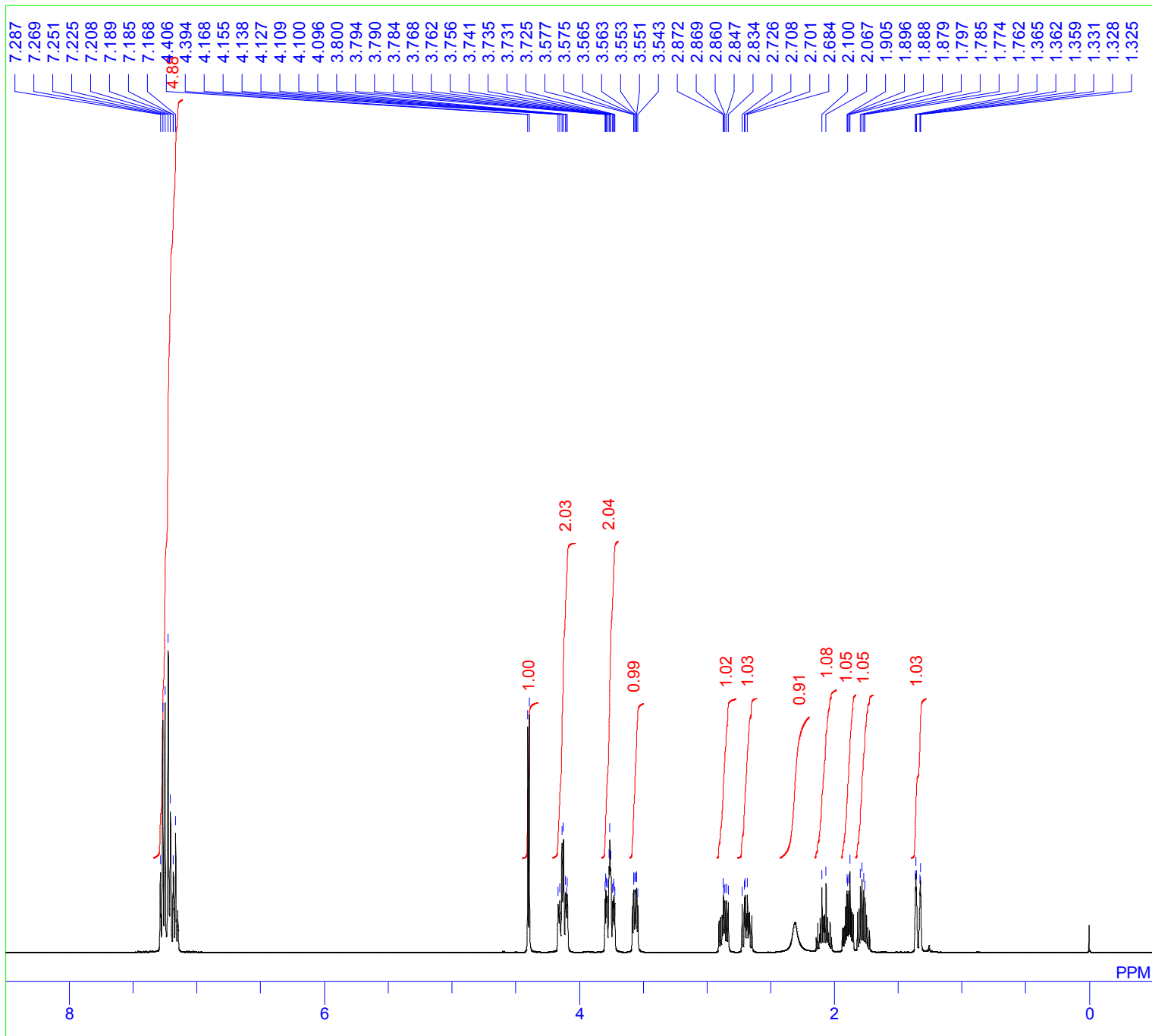
(S)-1d



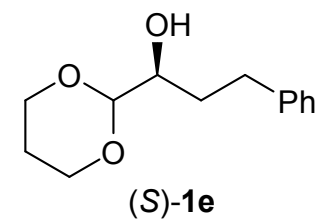
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1d
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



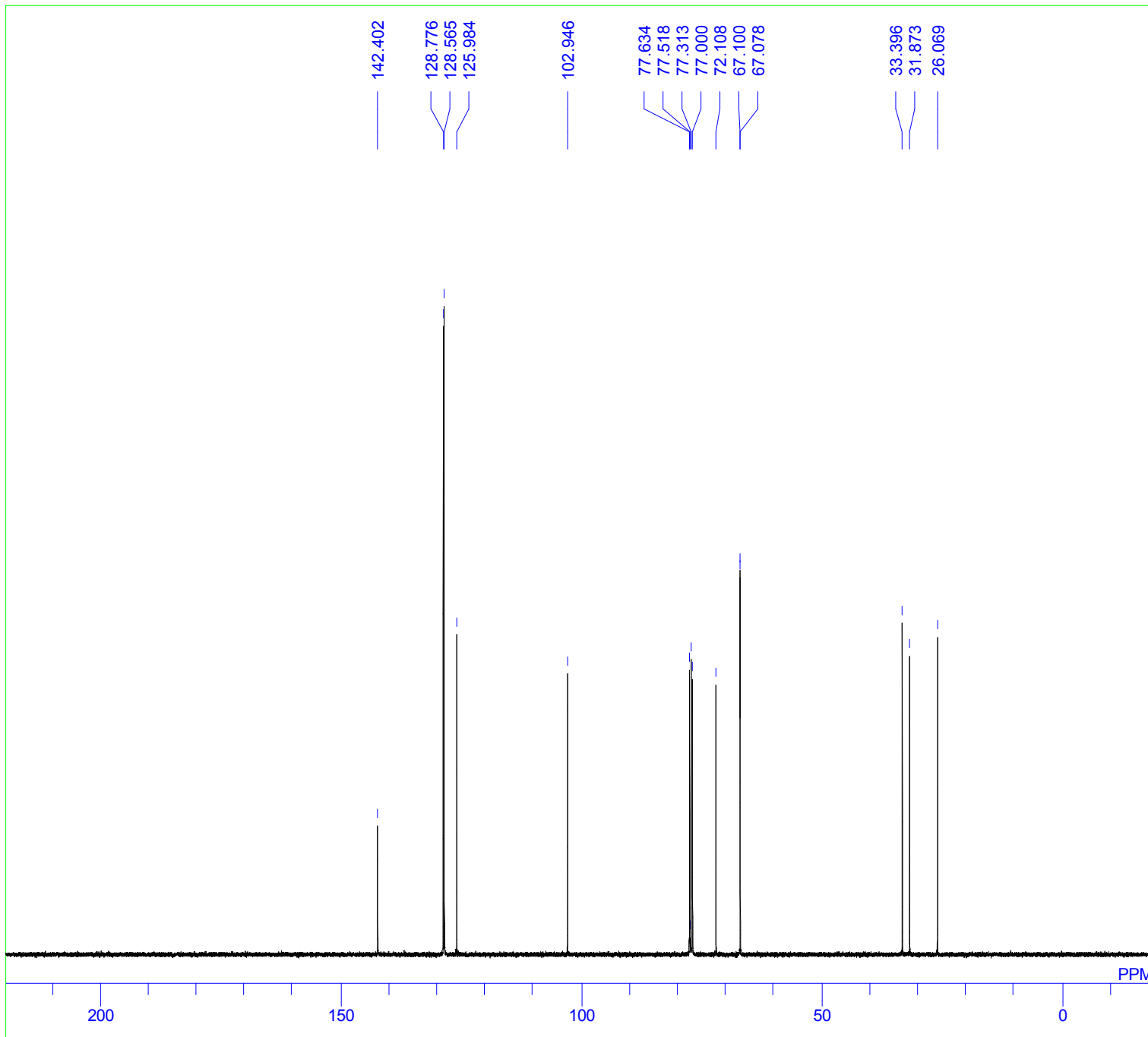
(S)-1e



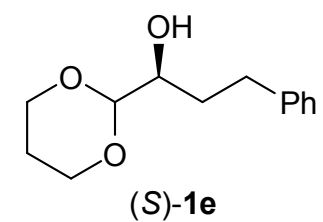
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1e
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



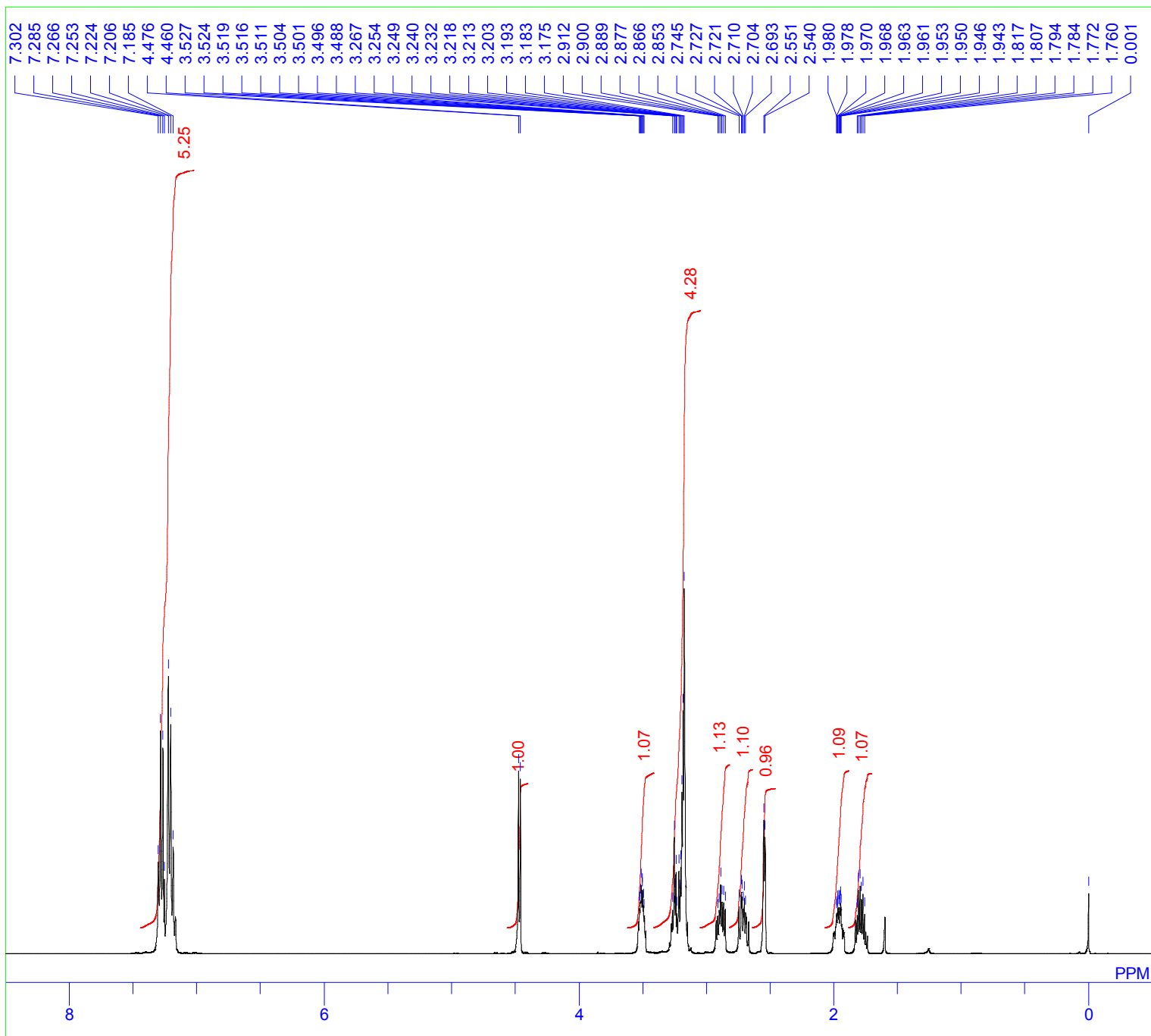
(S)-1e



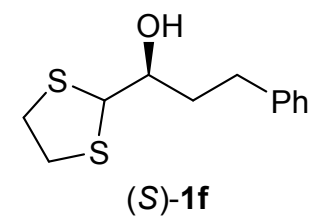
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1e
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



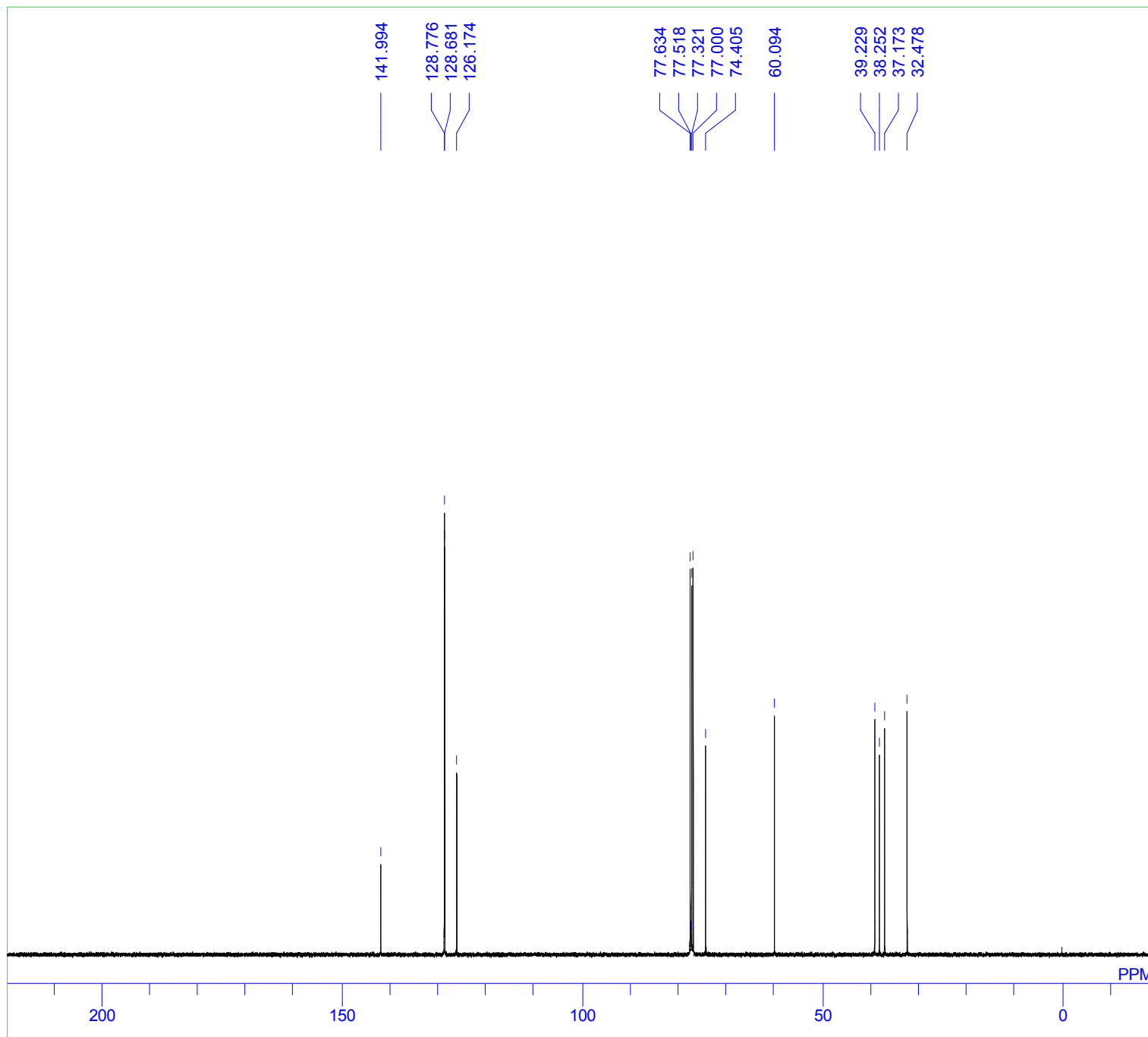
(S)-1f



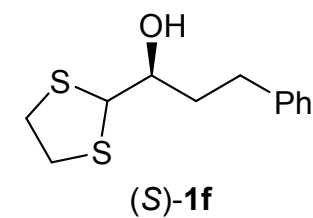
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1f
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



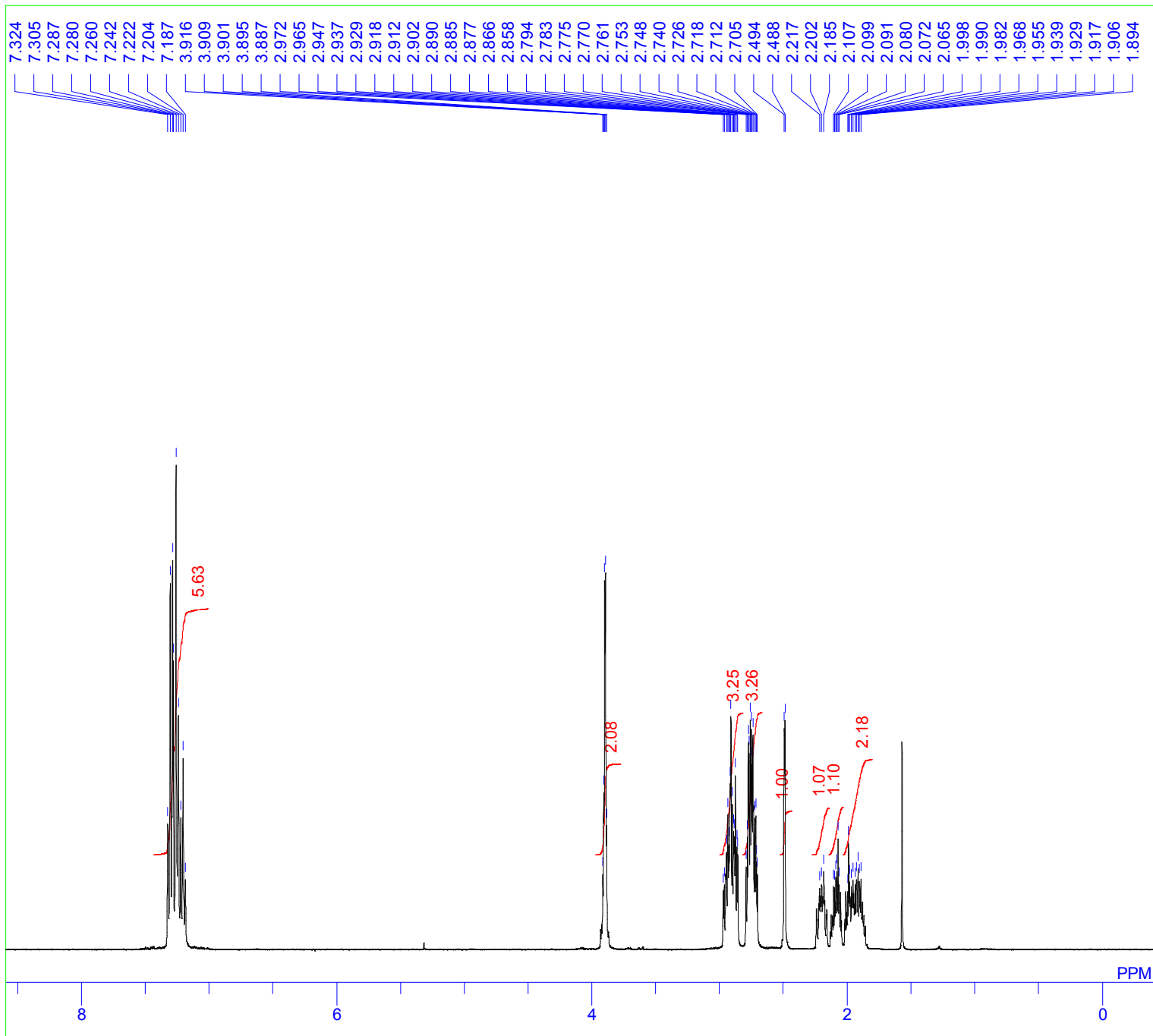
(S)-1f



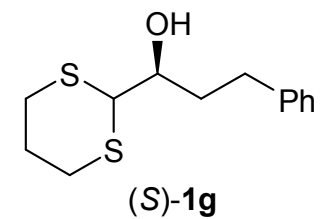
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1f
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



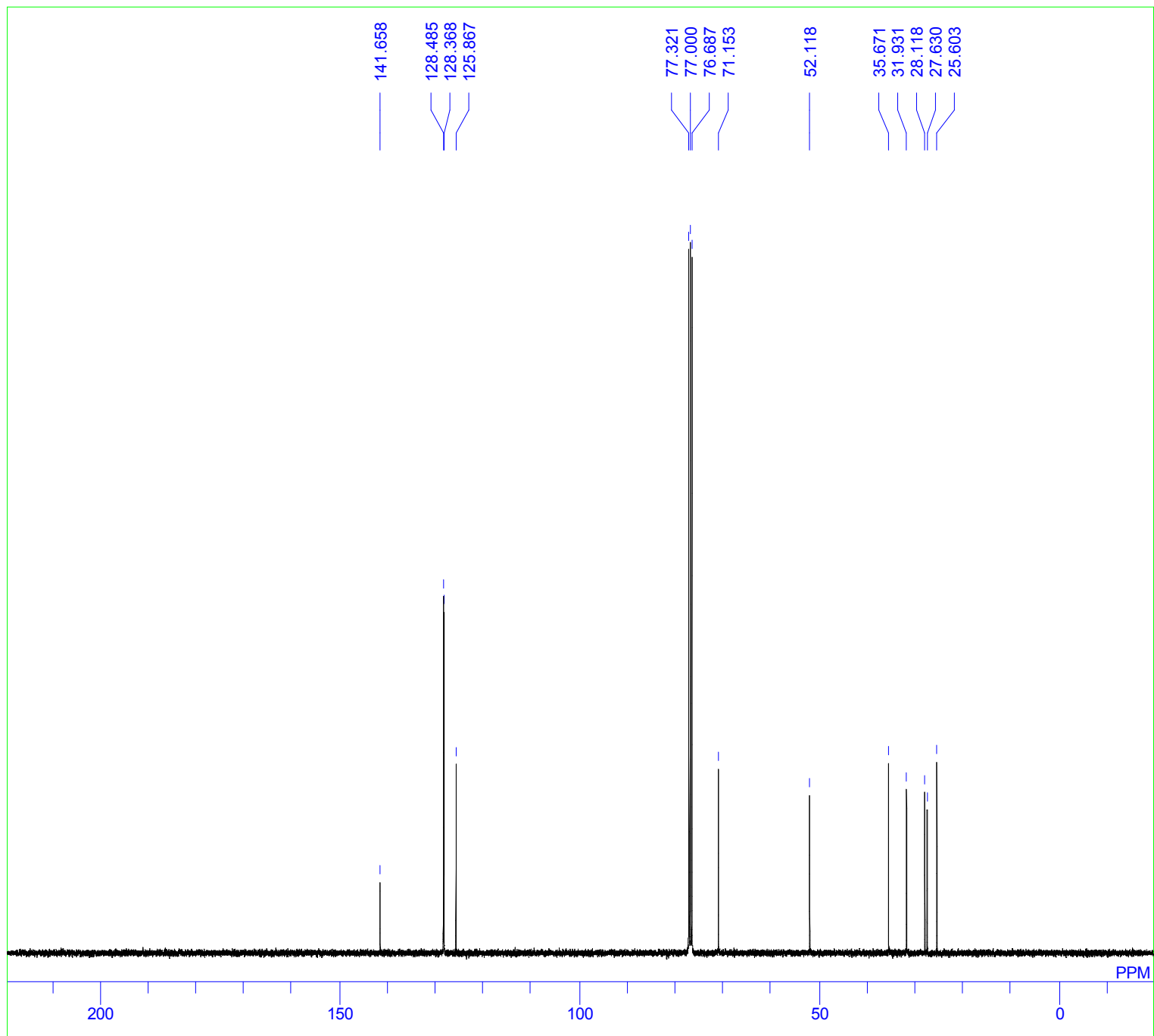
(S)-1g



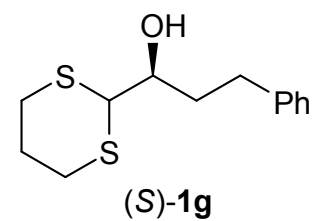
DFILE 1H.als
COMNT (S)-1g
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



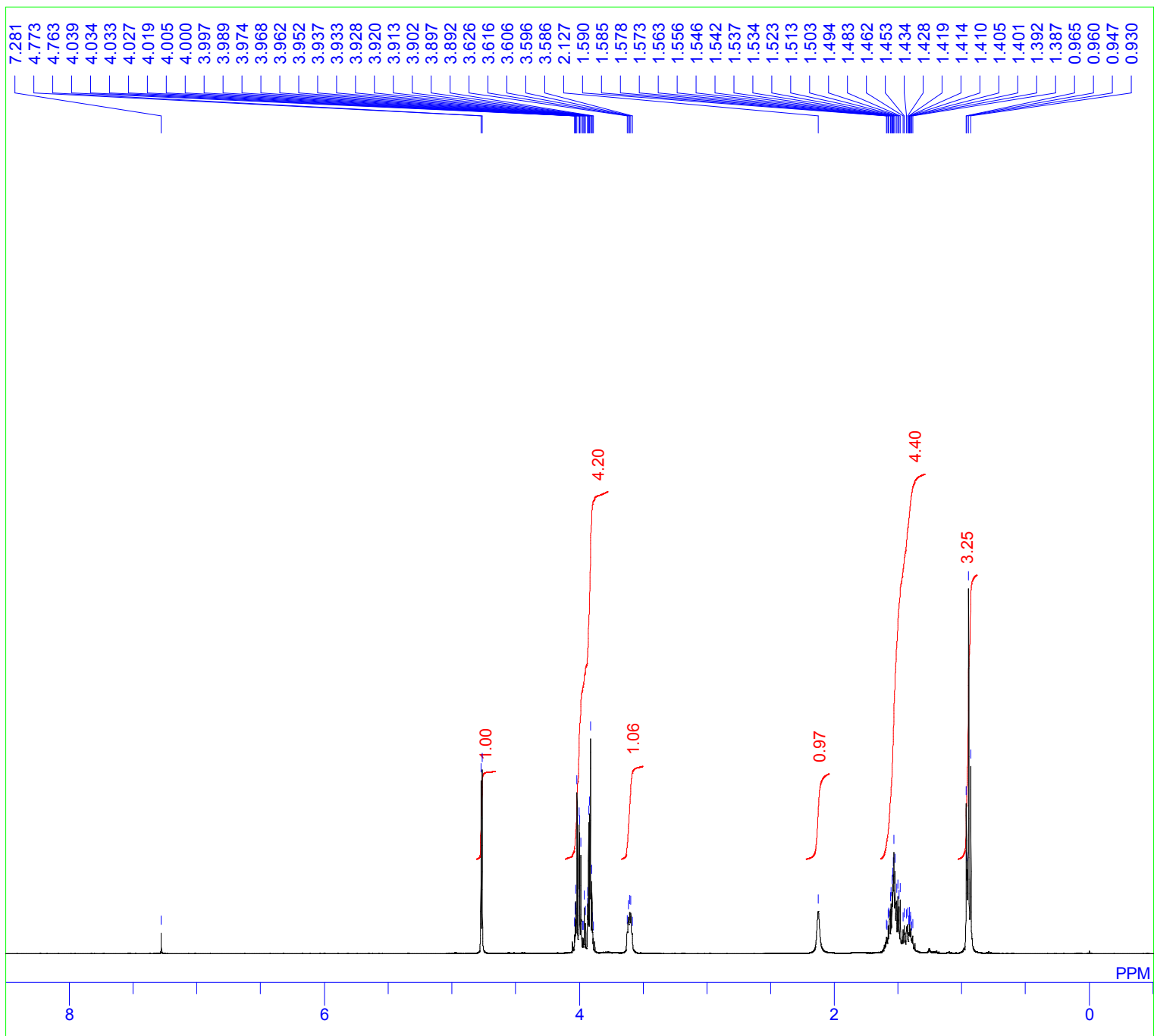
(S)-1g



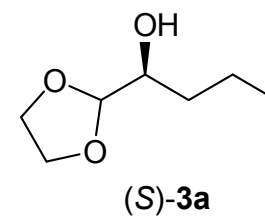
DFILE 13C.als
COMNT (S)-1g
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



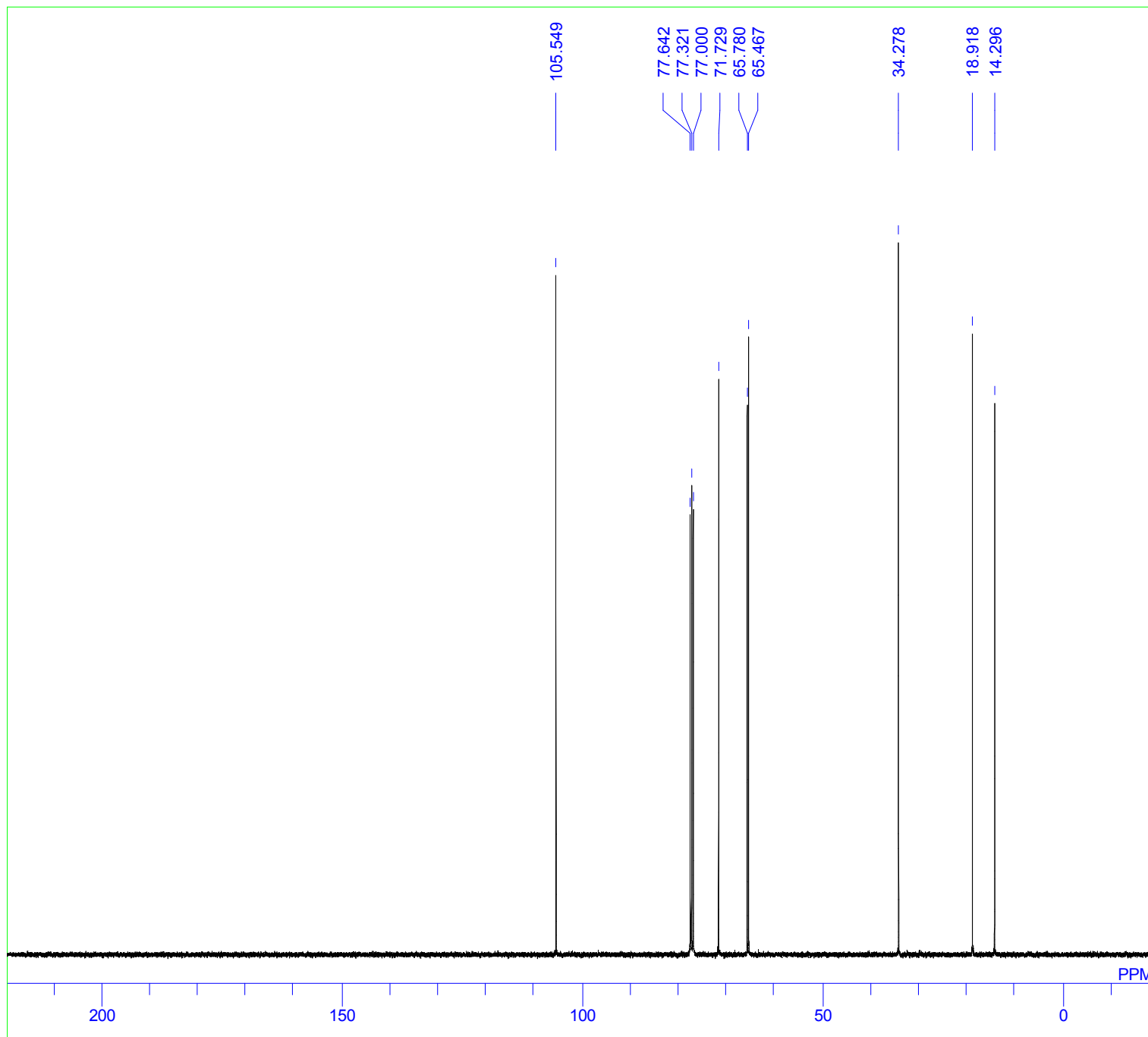
(S)-3a



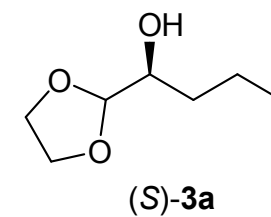
DFILE 1H.als
COMNT (S)-3a
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



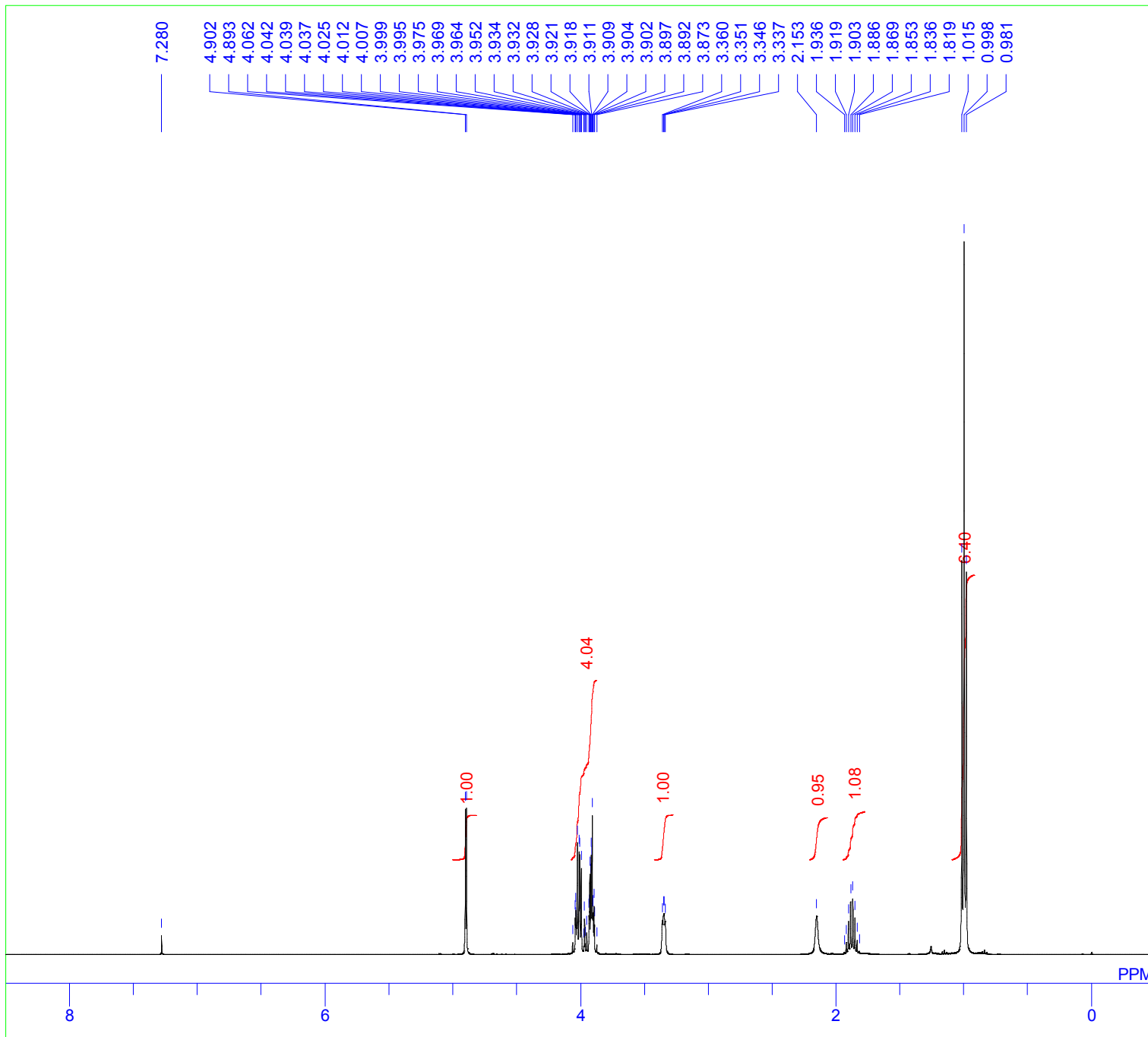
(S)-3a



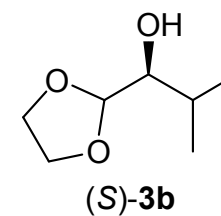
DFILE 13C.als
COMNT (S)-3a
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



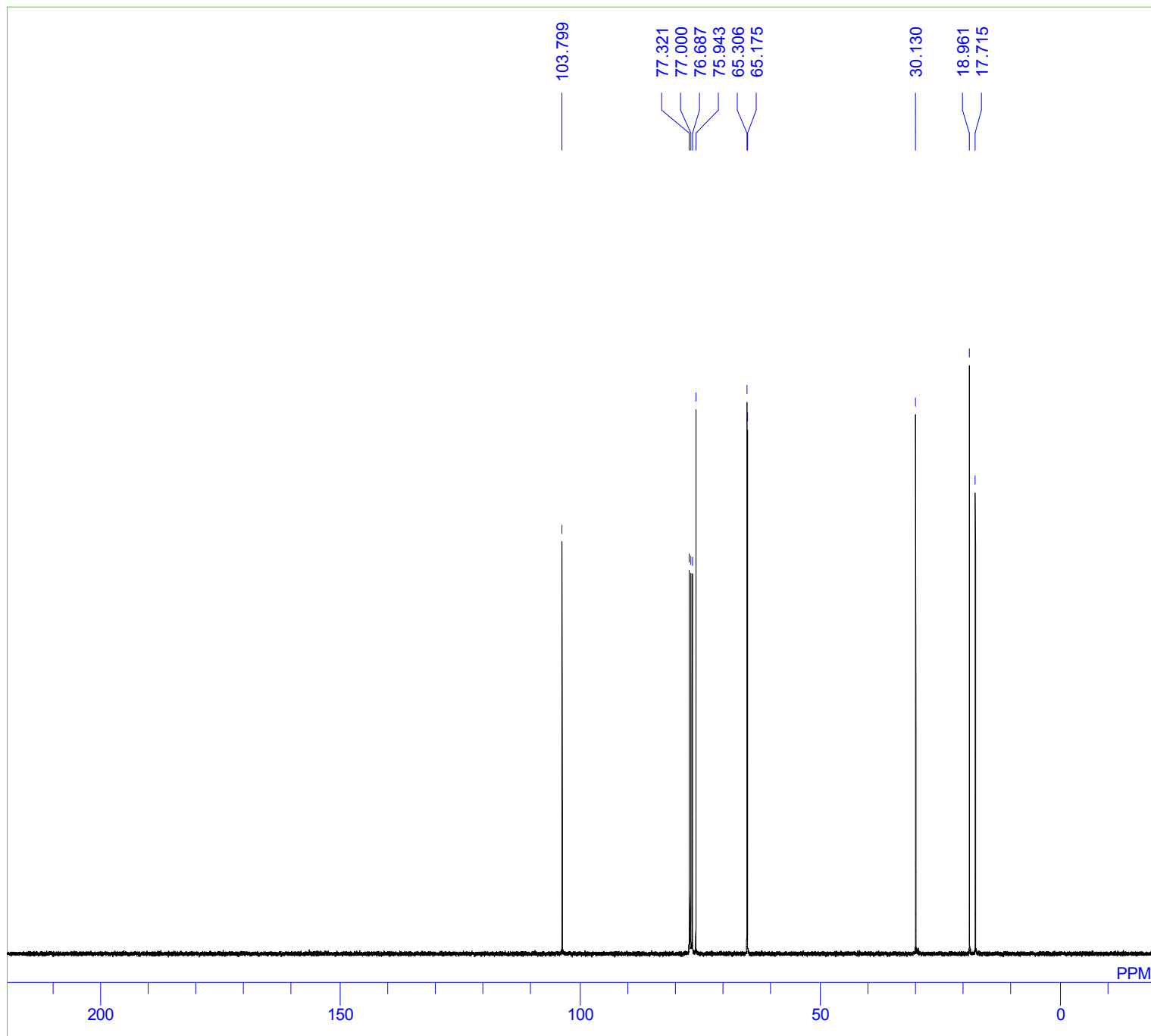
(S)-3b



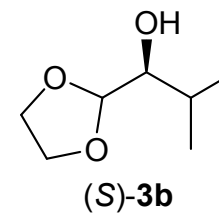
DFILE 1H.als
COMNT (S)-3b
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



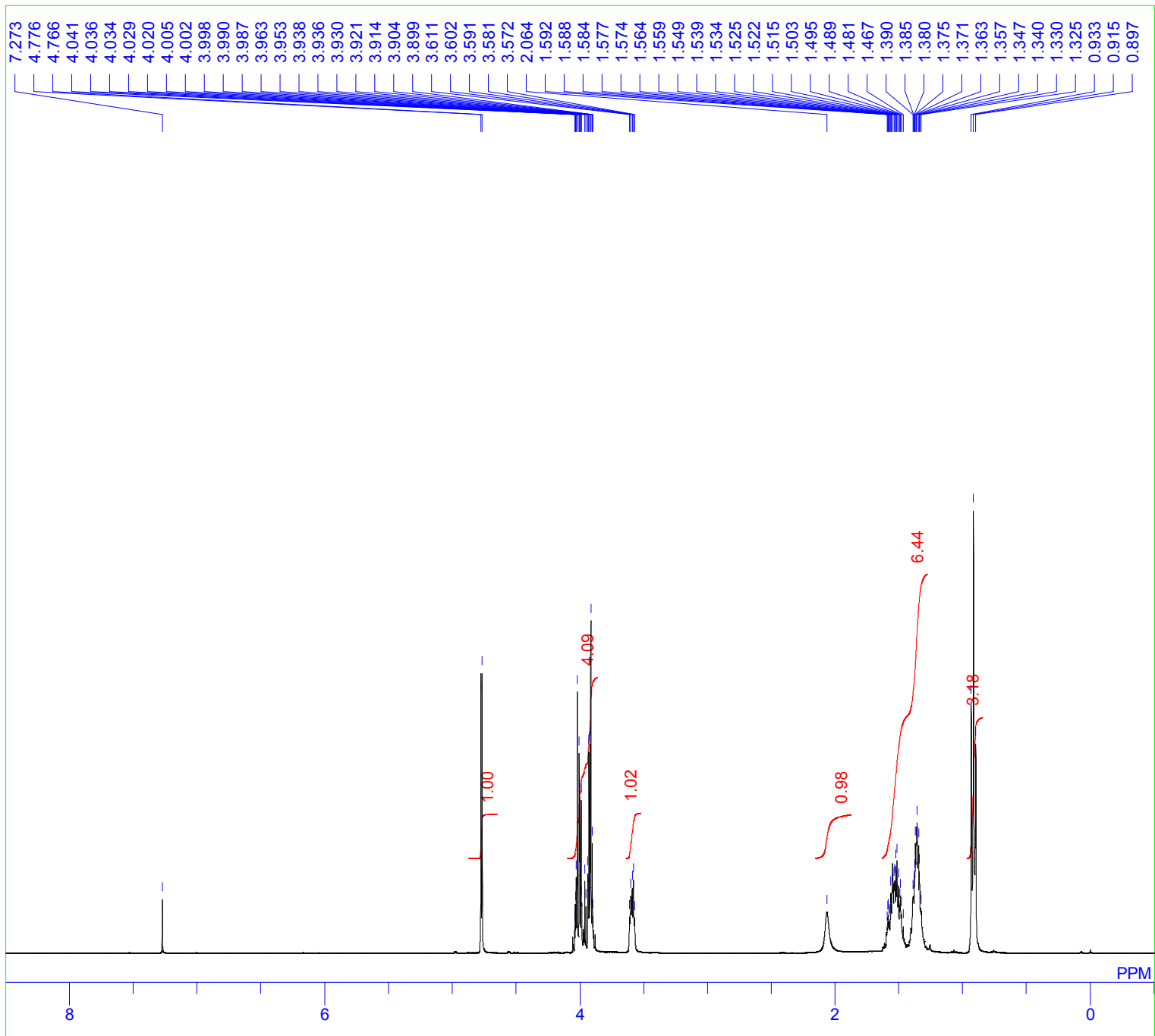
(S)-3b



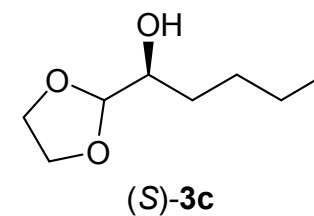
DFILE 13C.als
COMNT (S)-3b
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



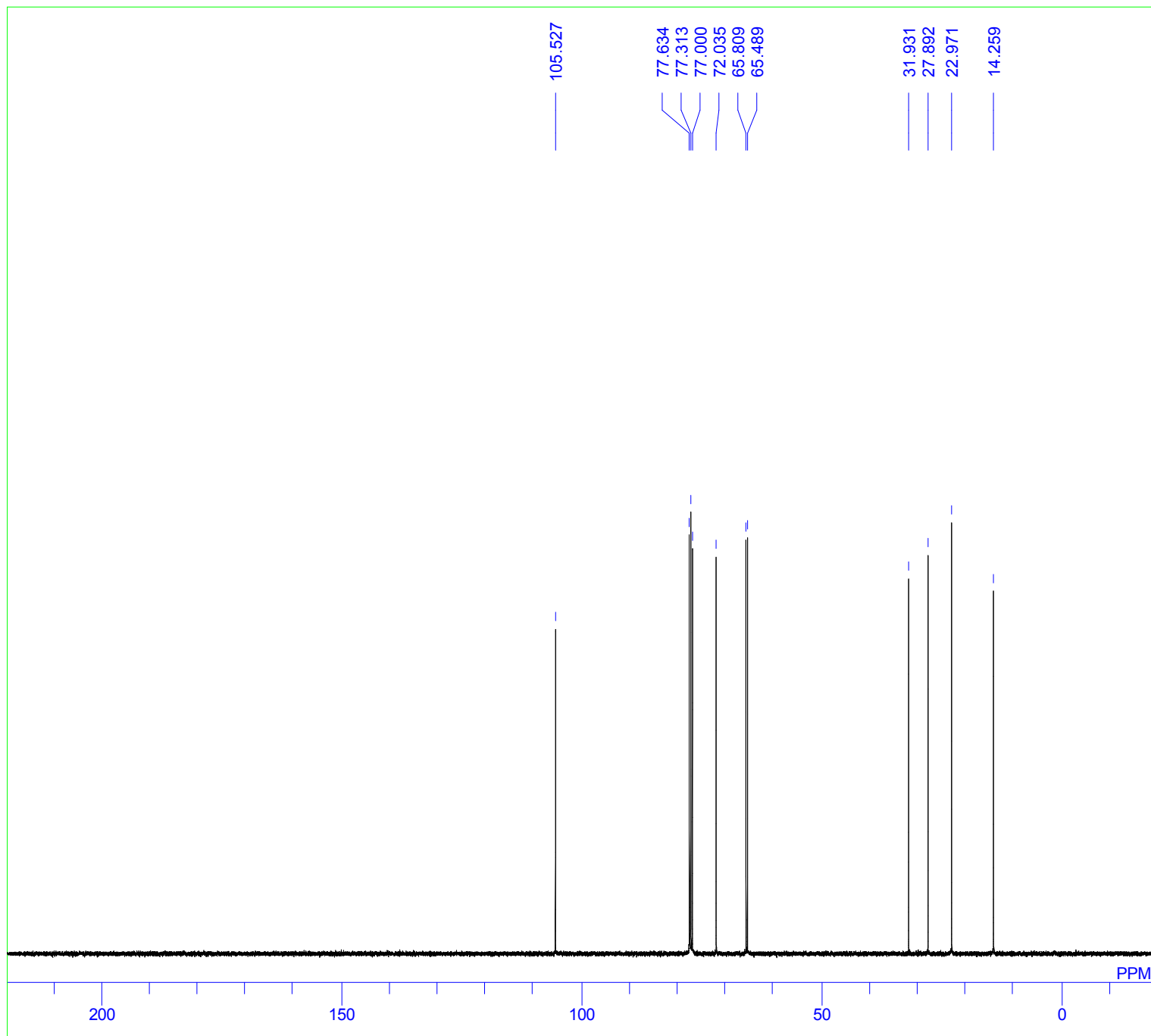
(S)-3c



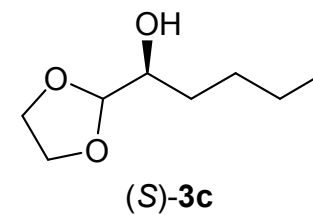
DFILE 1H.als
COMNT (S)-3c
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



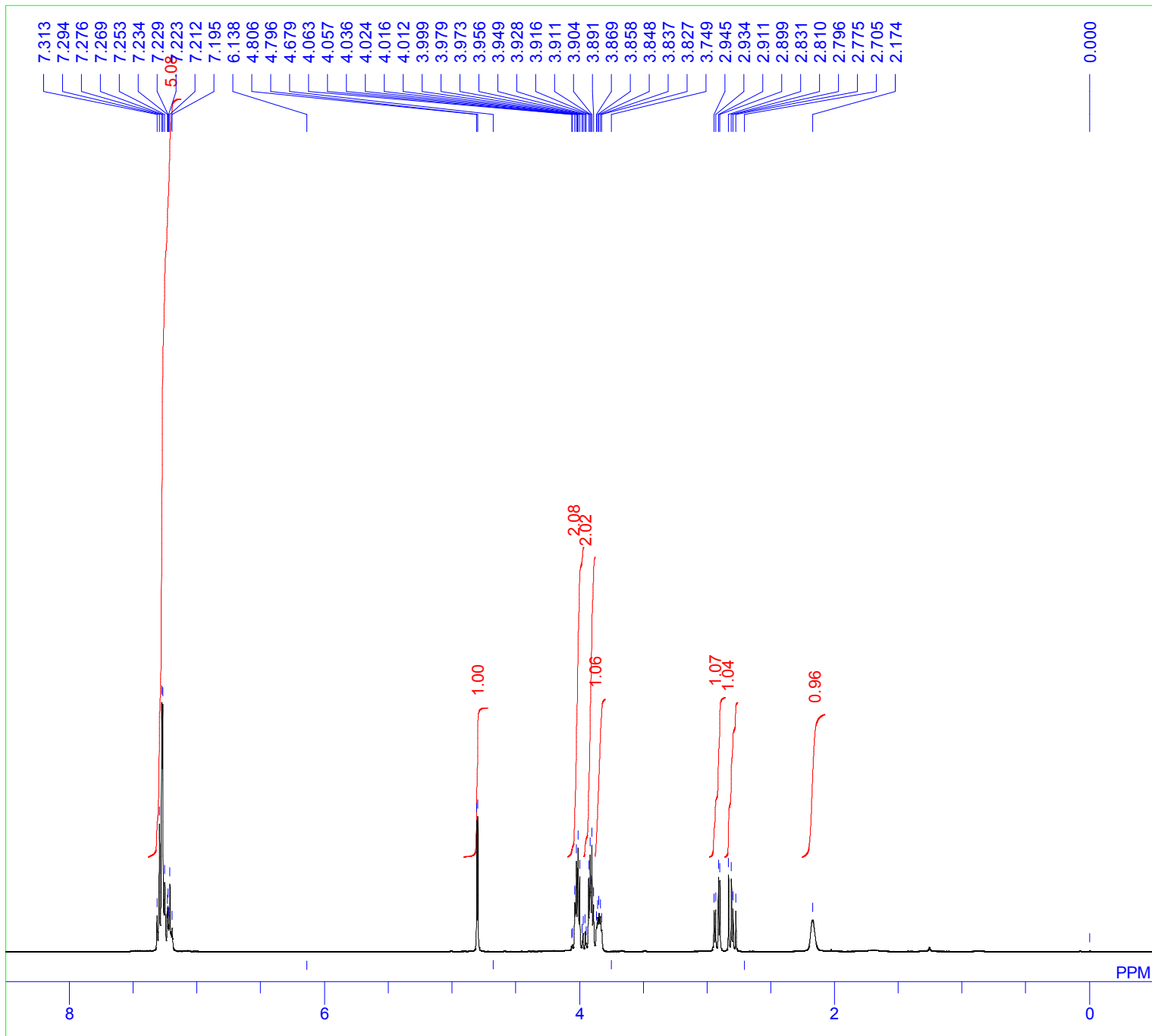
(S)-3c



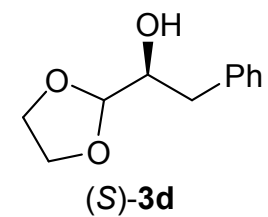
DFILE 13C.als
COMNT (S)-3c
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



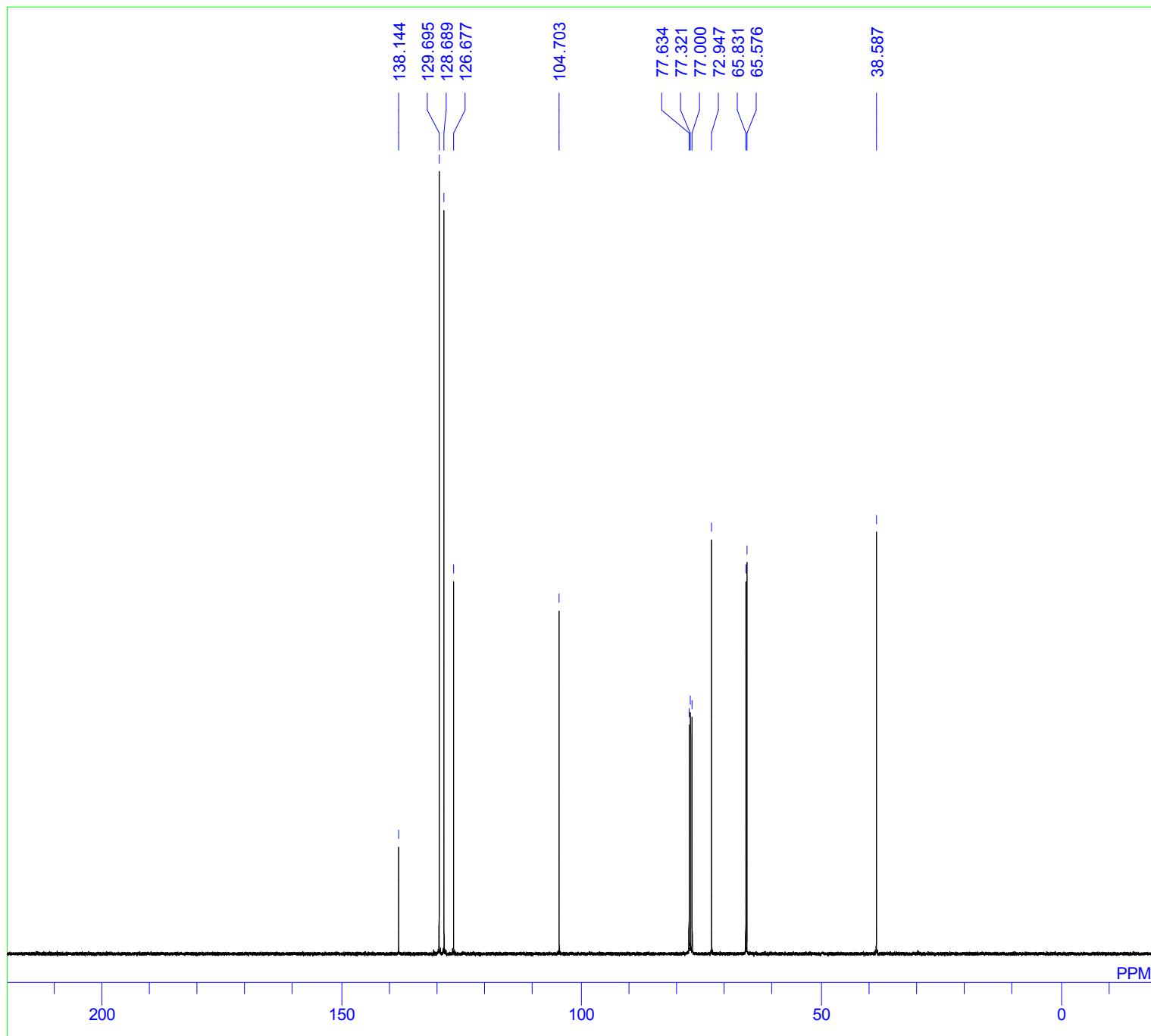
(S)-3d



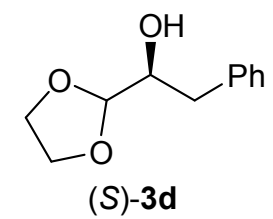
DFILE 1H.als
COMNT (S)-3d
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



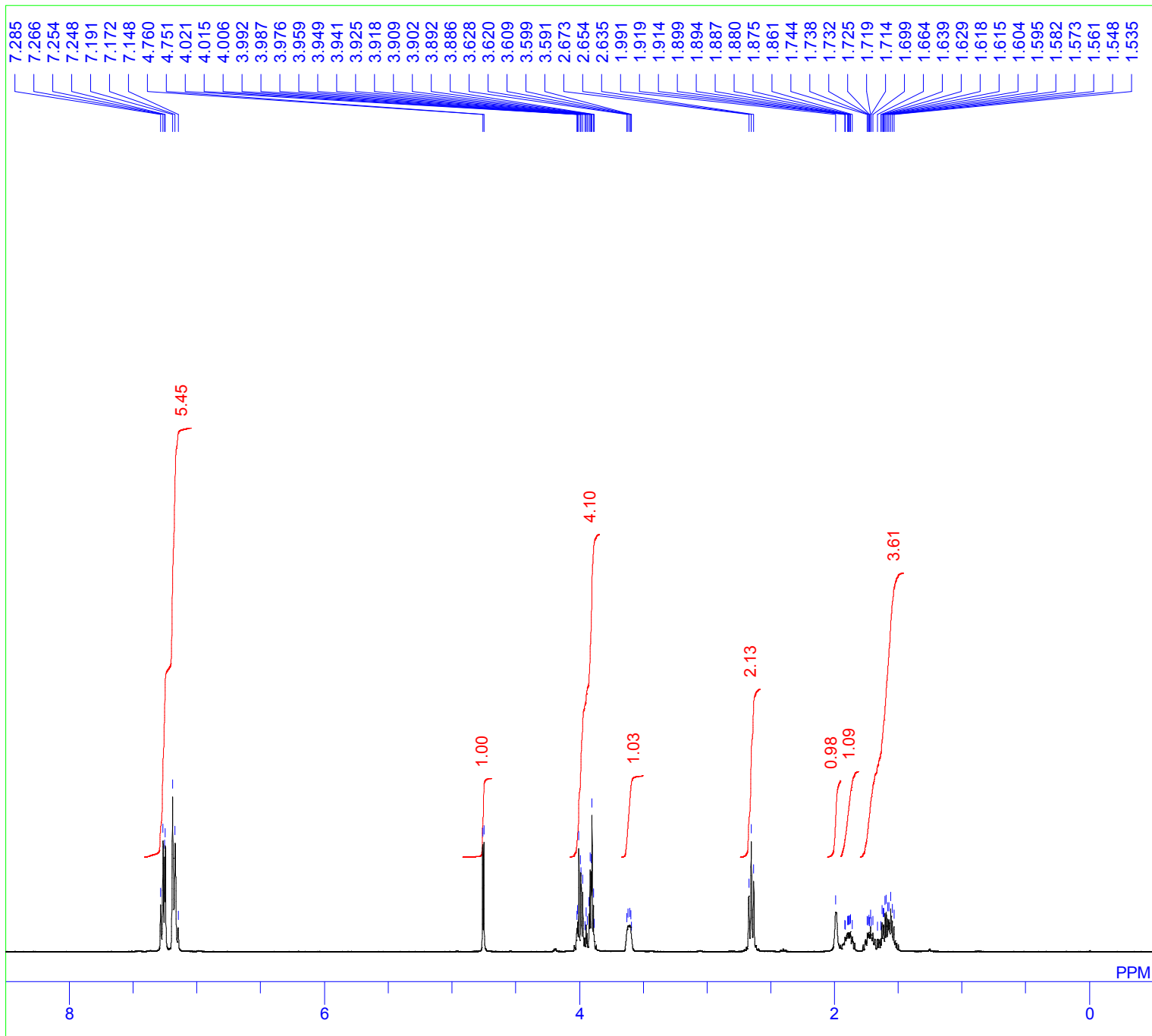
(S)-3d



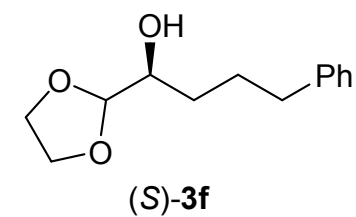
DFILE 13C.als
COMNT (S)-3d
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



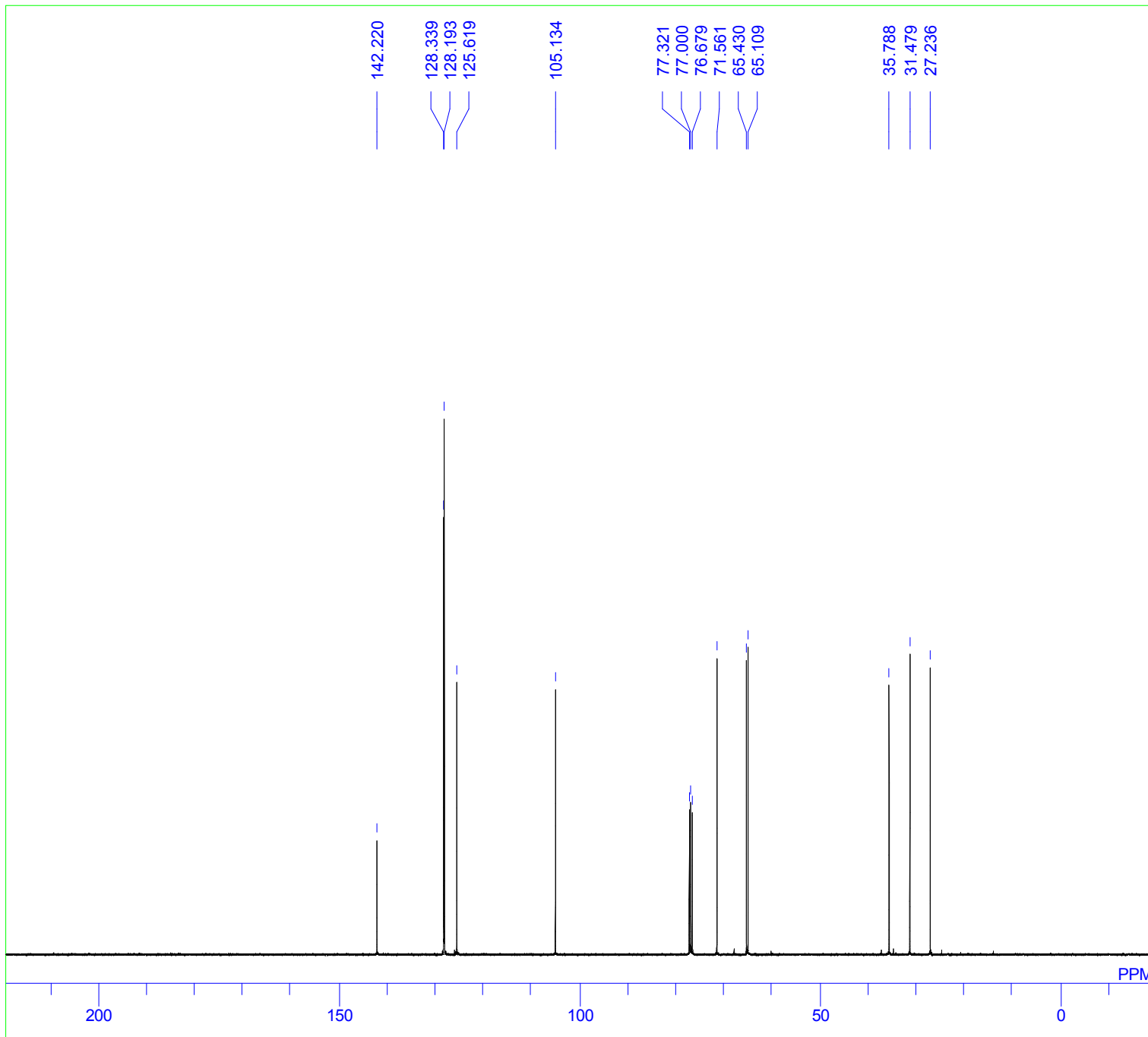
(S)-3f



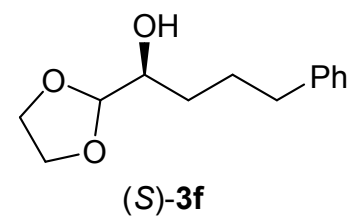
DFILE 1H.als
COMNT (S)-3f
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



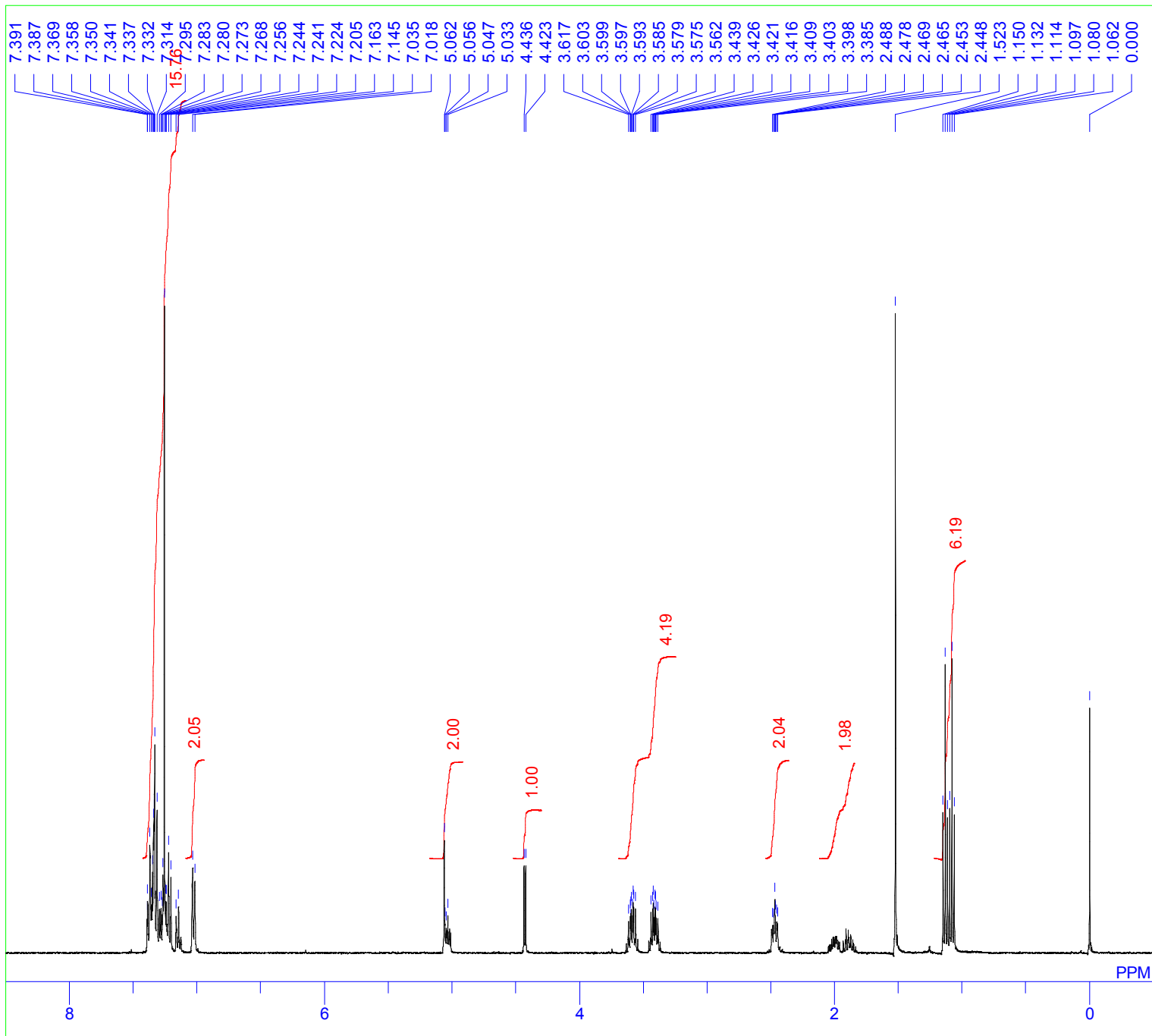
(S)-3f



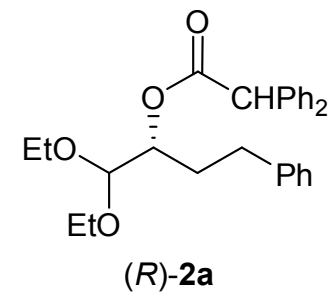
DFILE 13C.als
COMNT (S)-3f
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



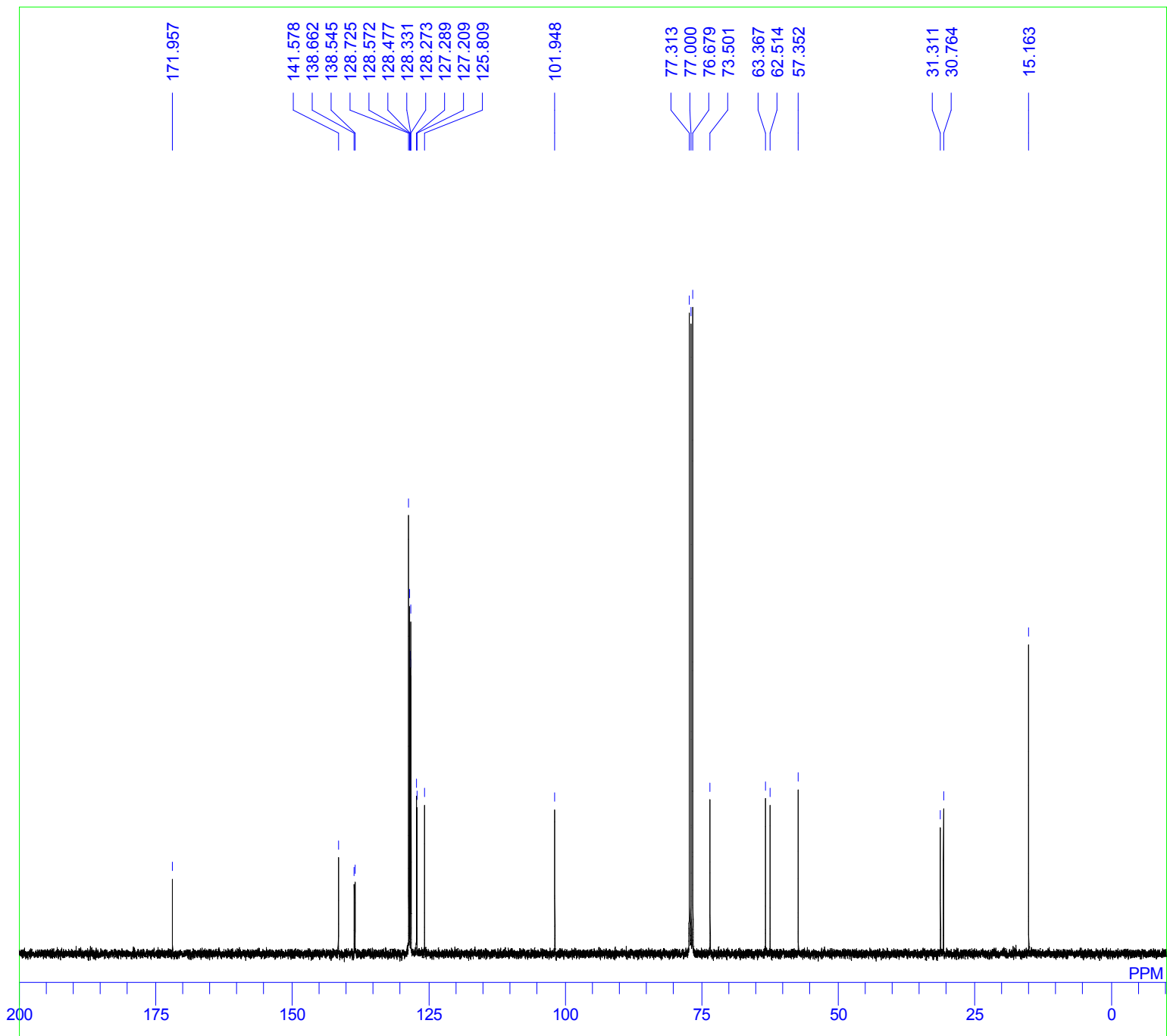
(R)-2a



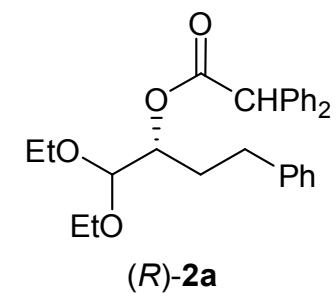
DFILE (R)-2a 1H.als
COMNT (R)-2a
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



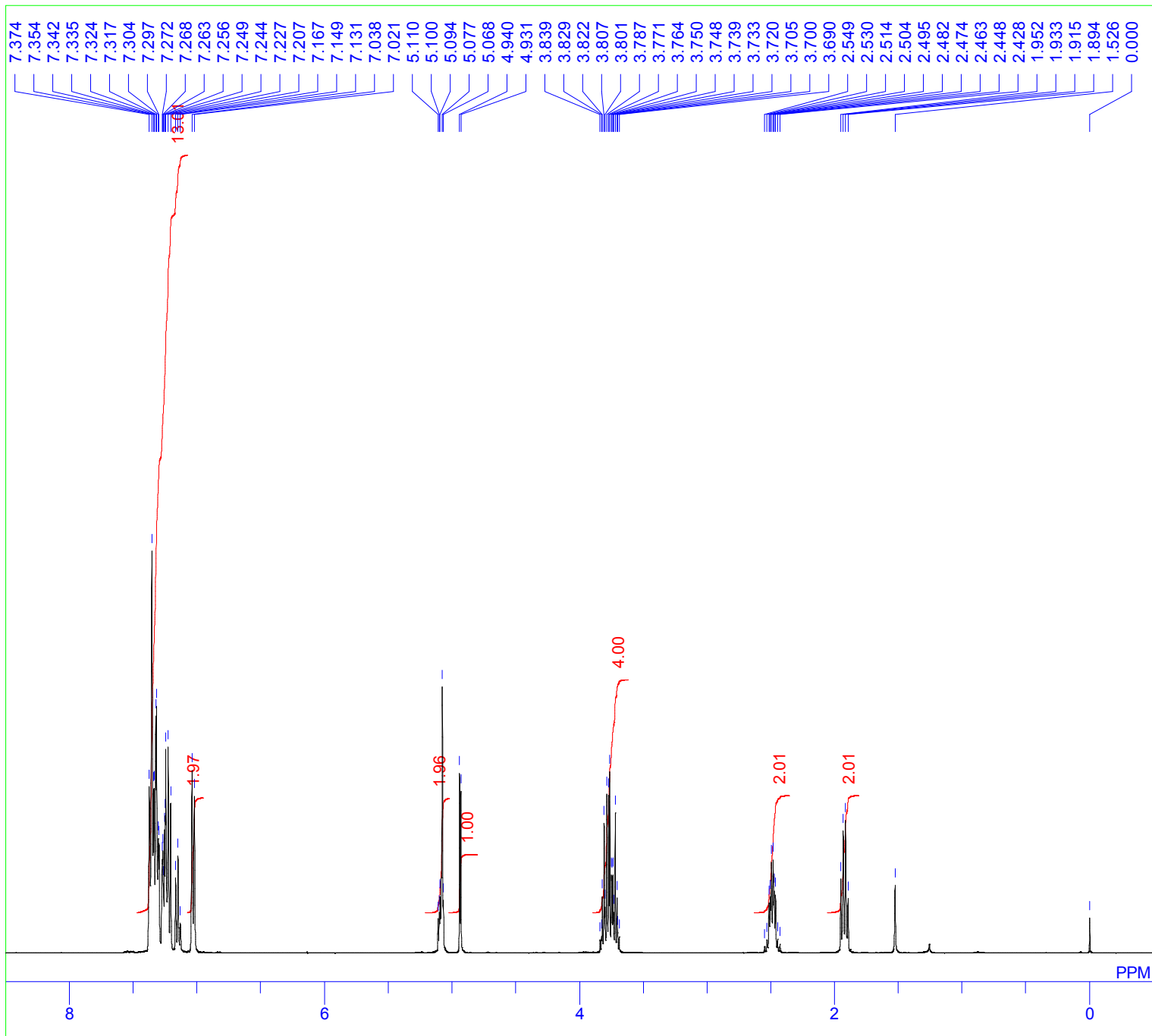
(R)-2a



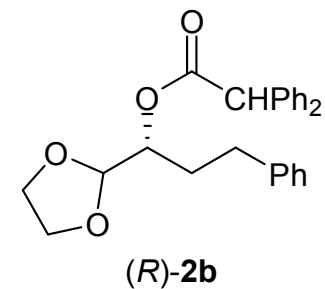
DFILE 13C re.als
COMNT (R)-2a
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



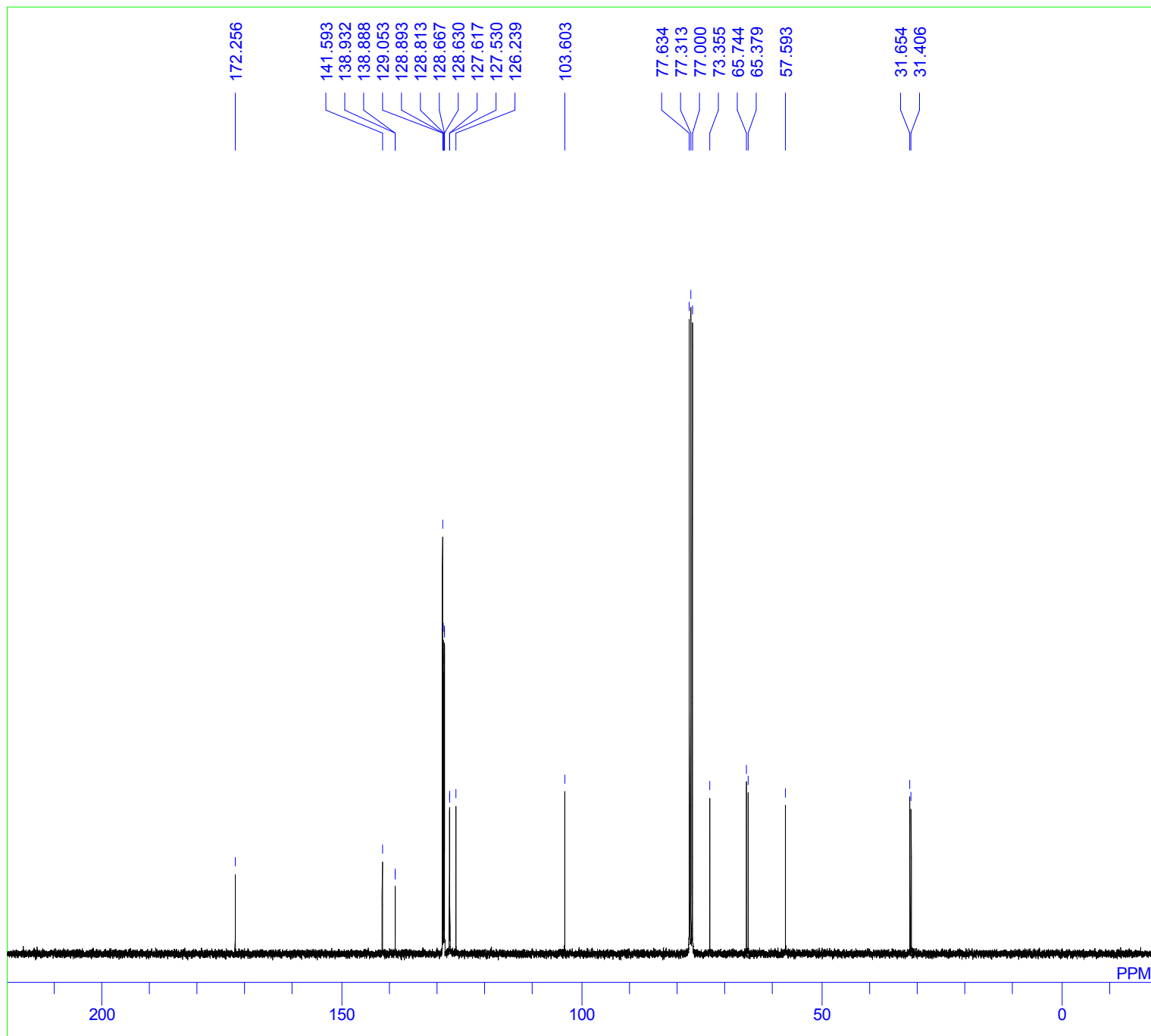
(R)-2b



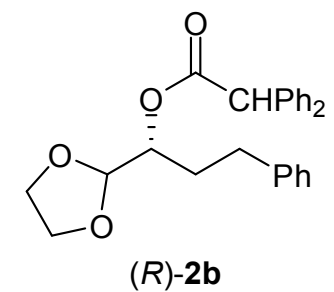
DFILE 1H.als
COMNT (R)-2b
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



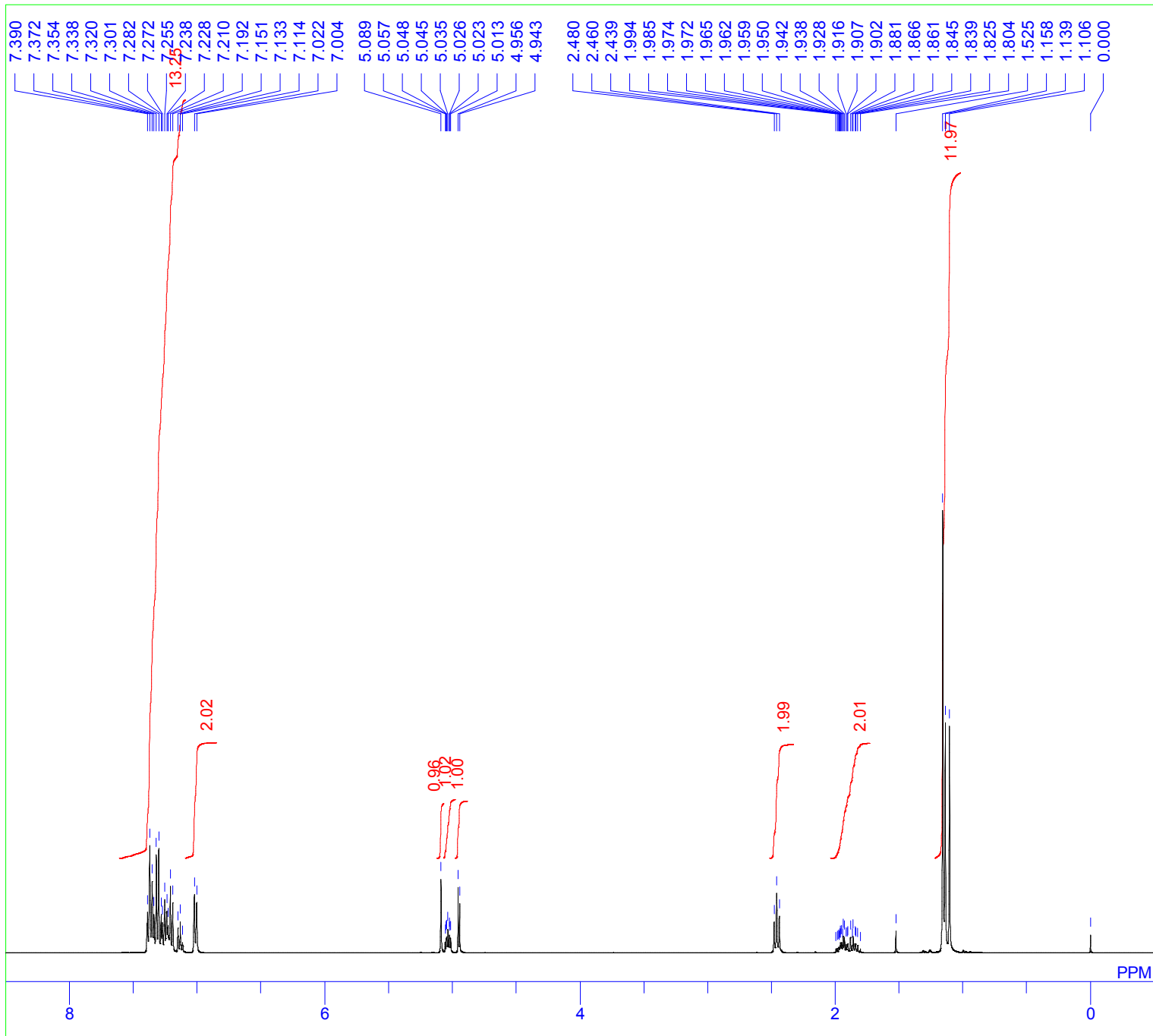
(R)-2b



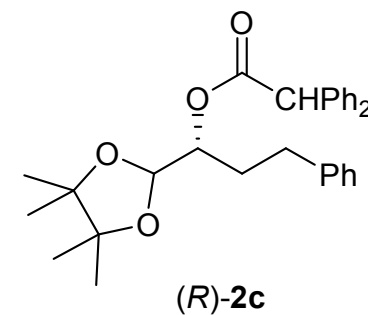
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2b
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



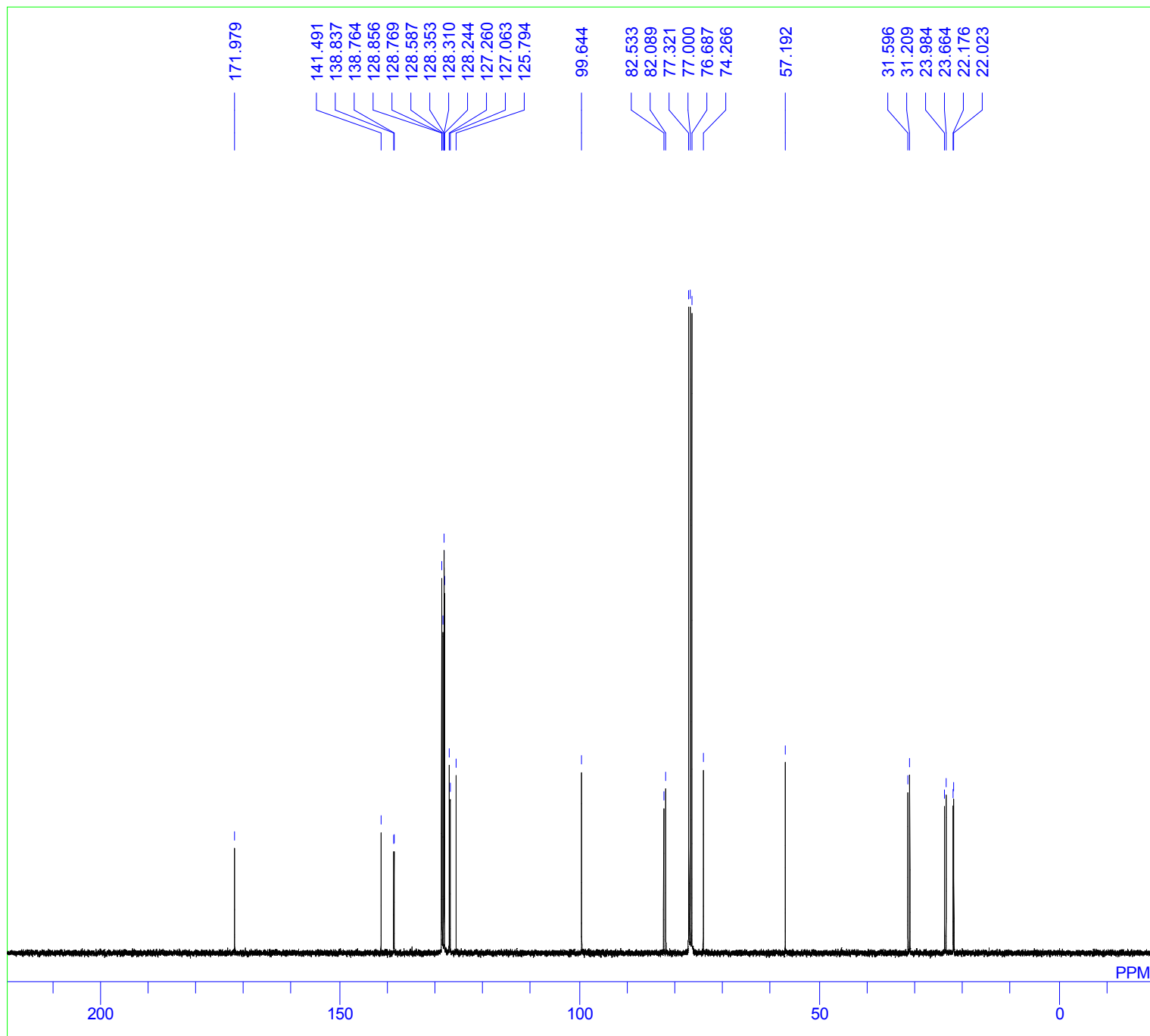
(R)-2c



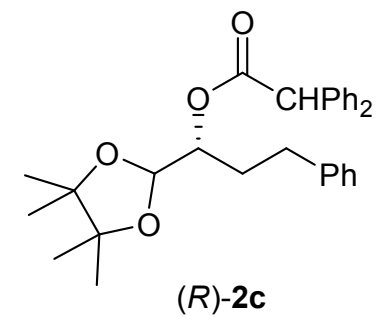
DFILE 1H.als
COMNT (R)-2c
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



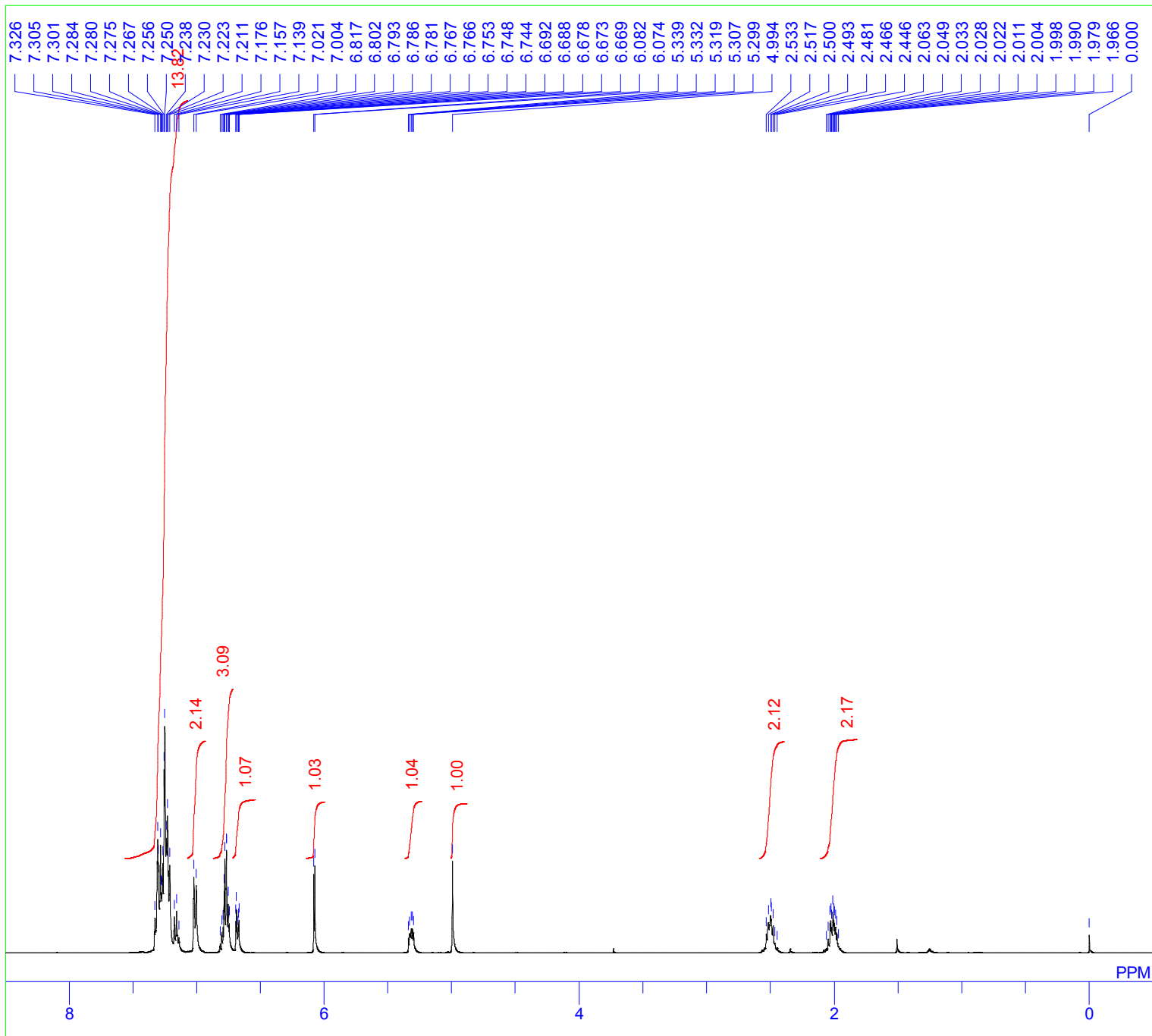
(R)-2c



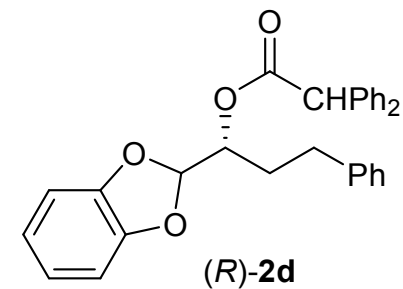
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2c
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



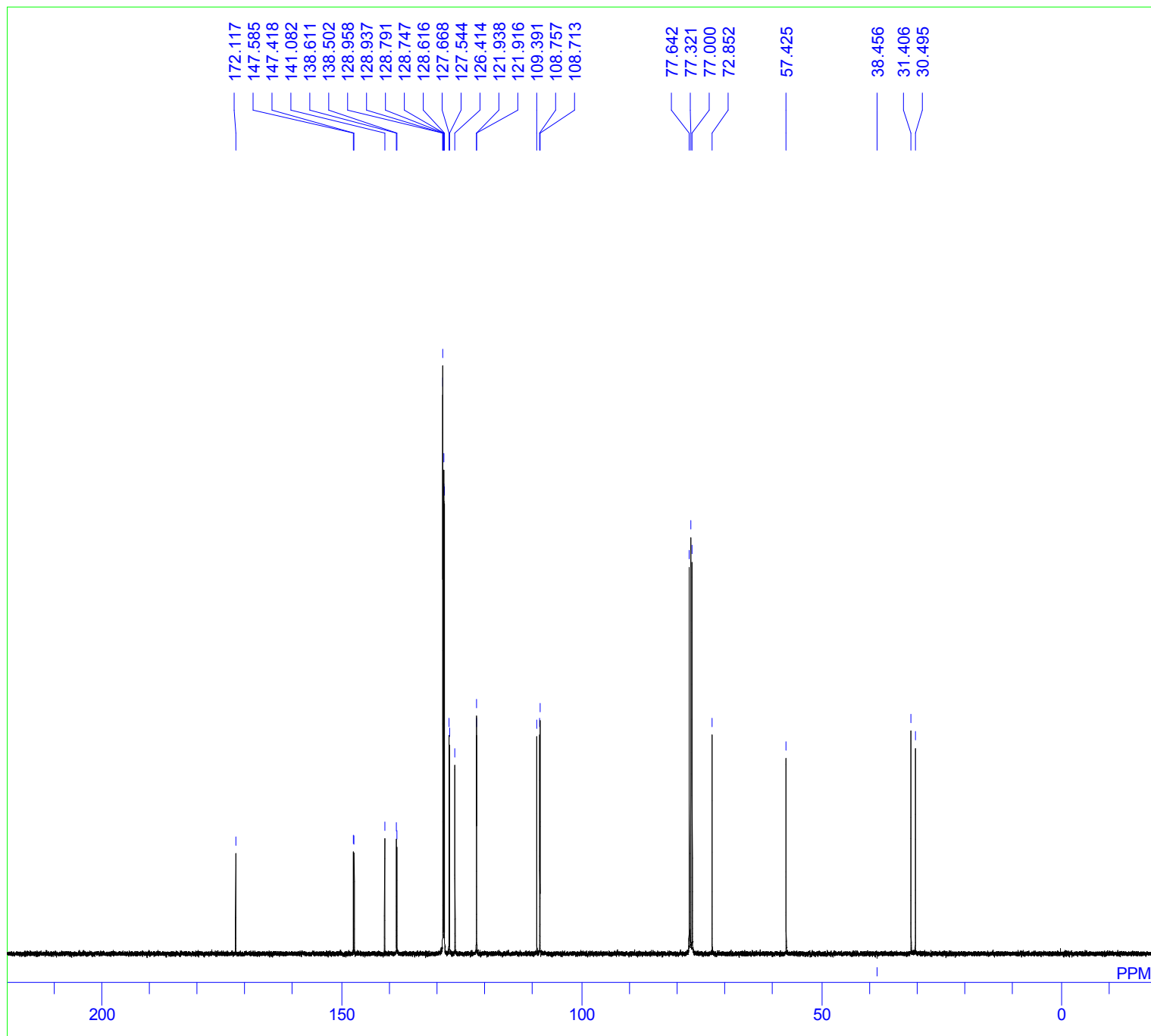
(R)-2d



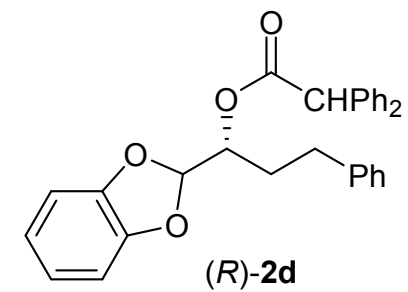
DFILE 1H .als
COMNT (R)-2d
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



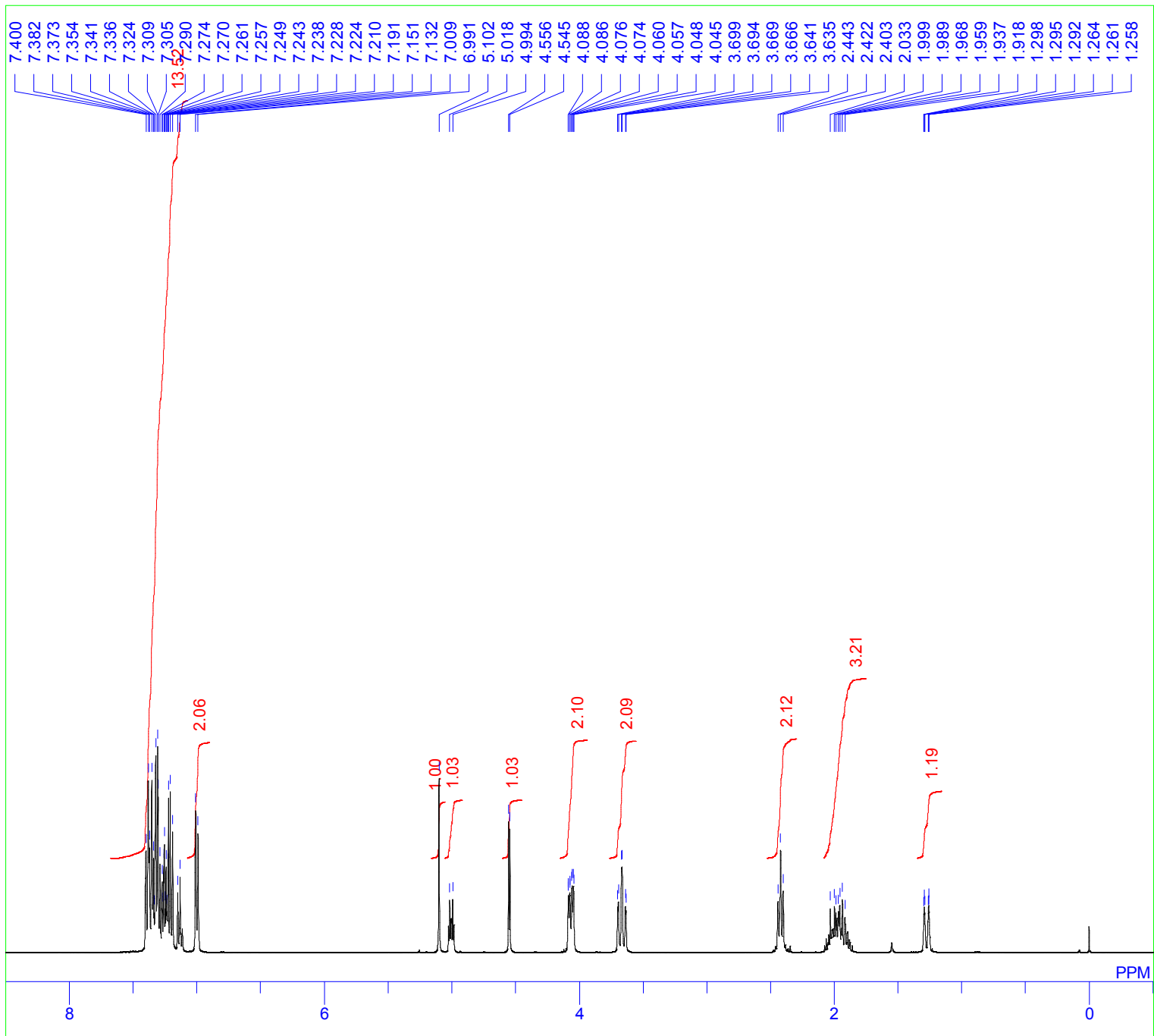
(R)-2d



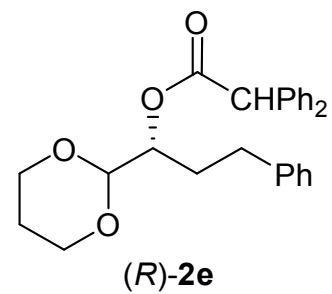
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2d
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



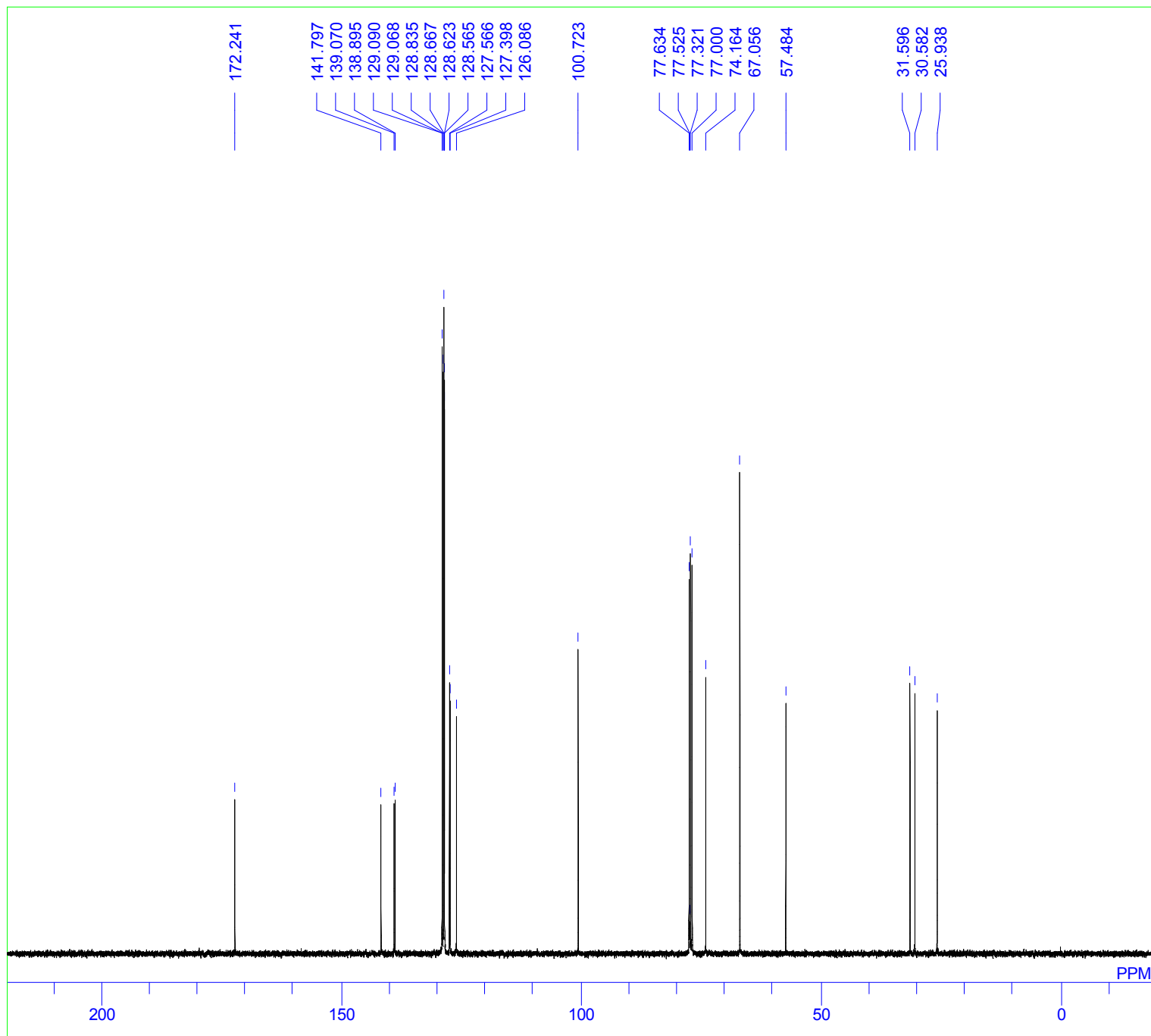
(R)-2e



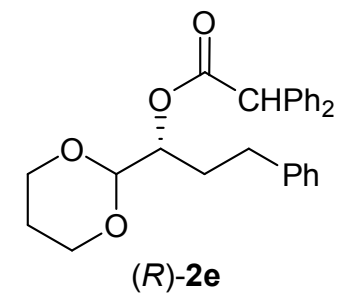
DFILE 1H.als
COMNT (R)-2e
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



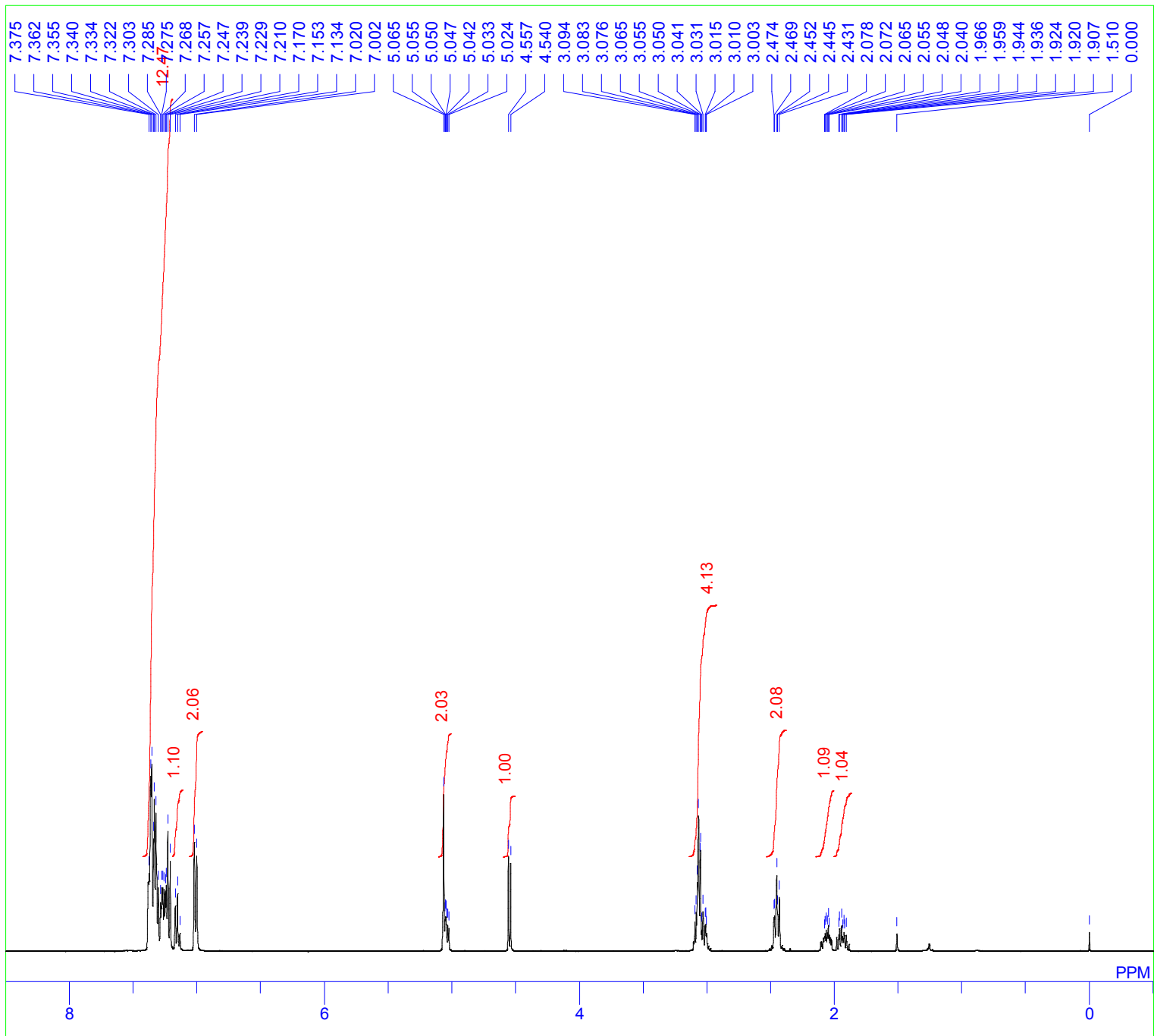
(R)-2e



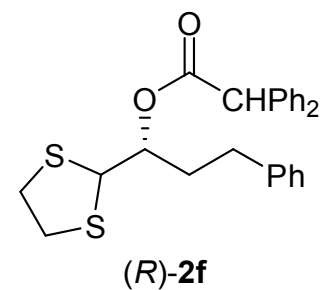
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2e
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



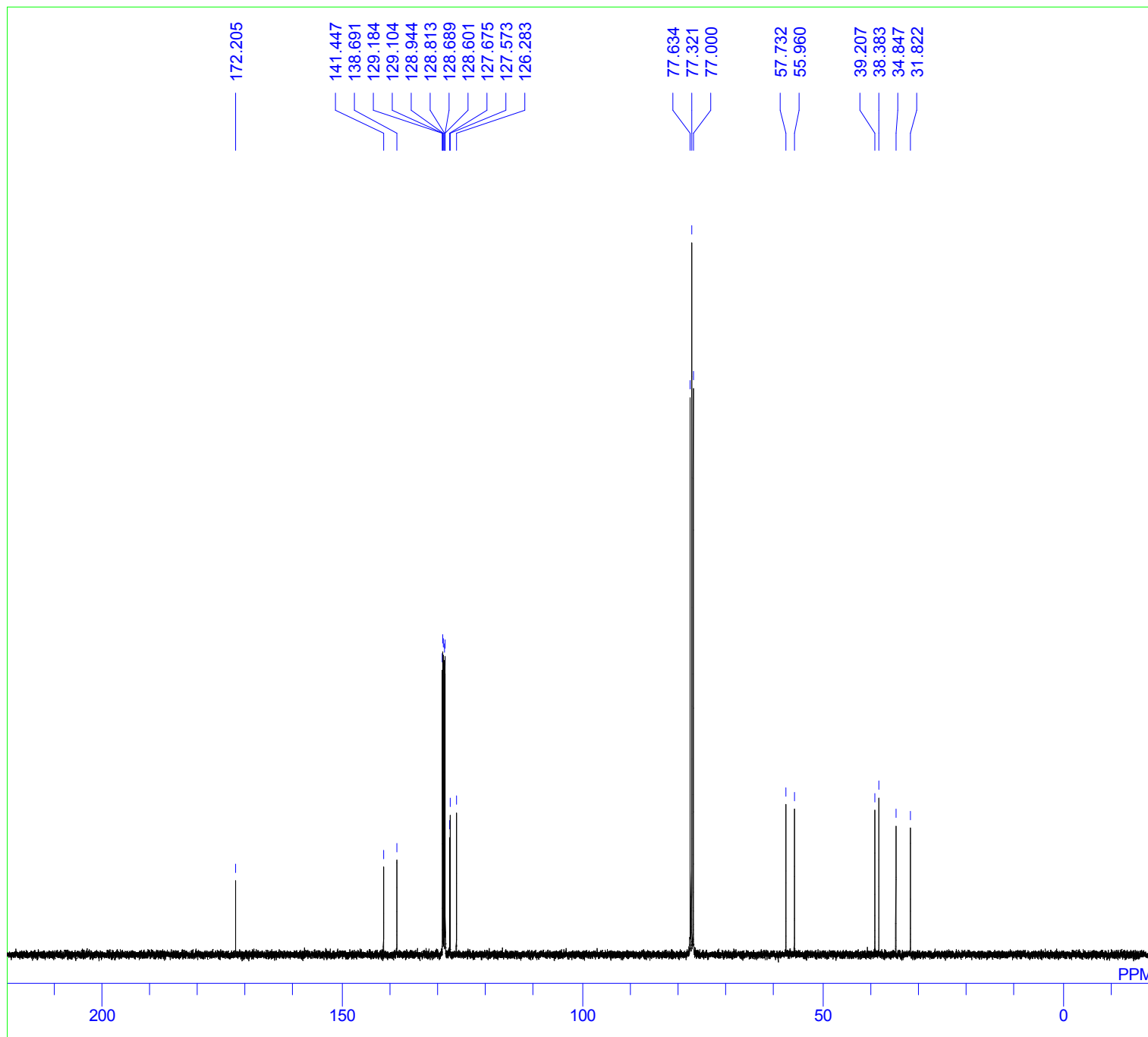
(R)-2f



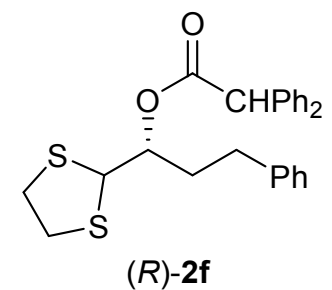
DFILE 1H.als
COMNT (R)-2f
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



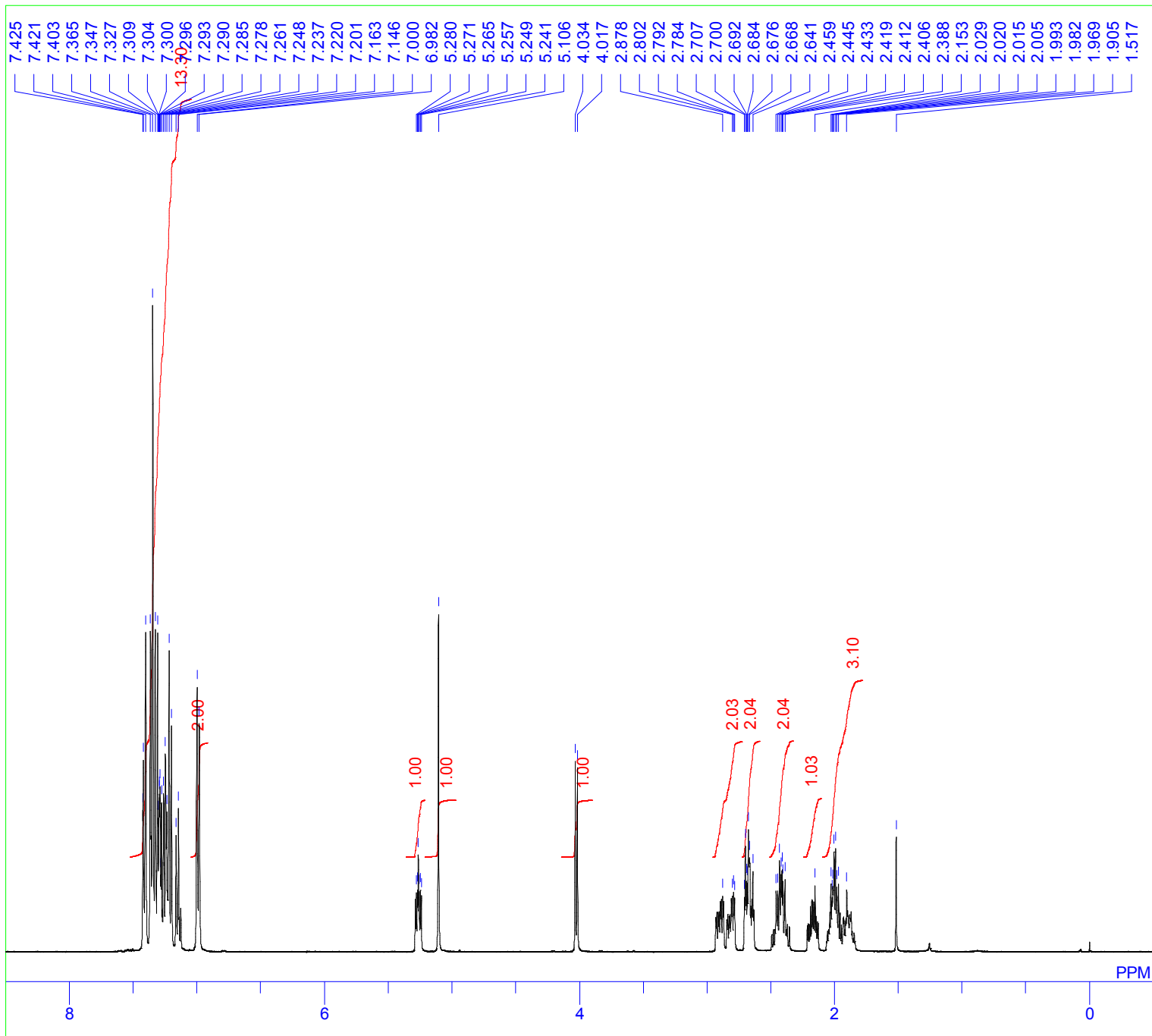
(R)-2f



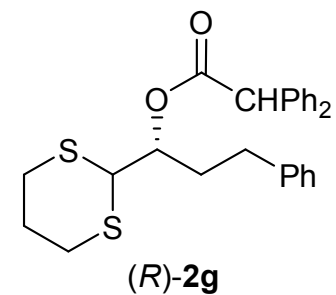
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2f
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 4.20 Hz
RGAIN 0



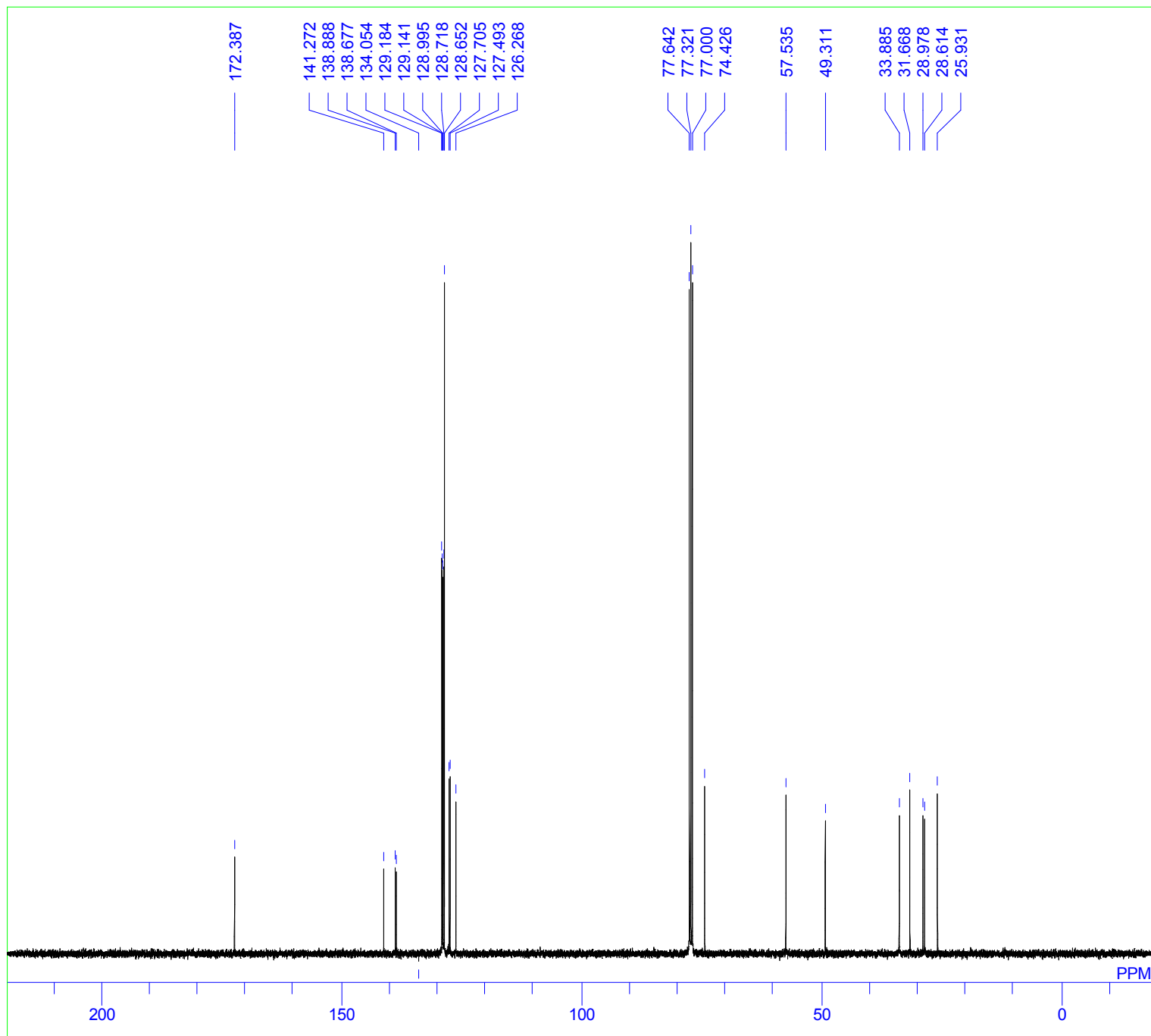
(R)-2g



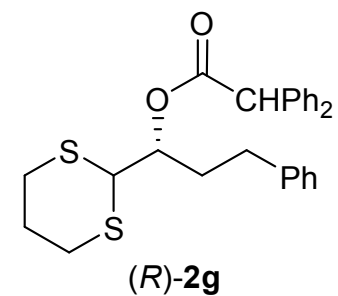
DFILE 1H.als
COMNT (R)-2g
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



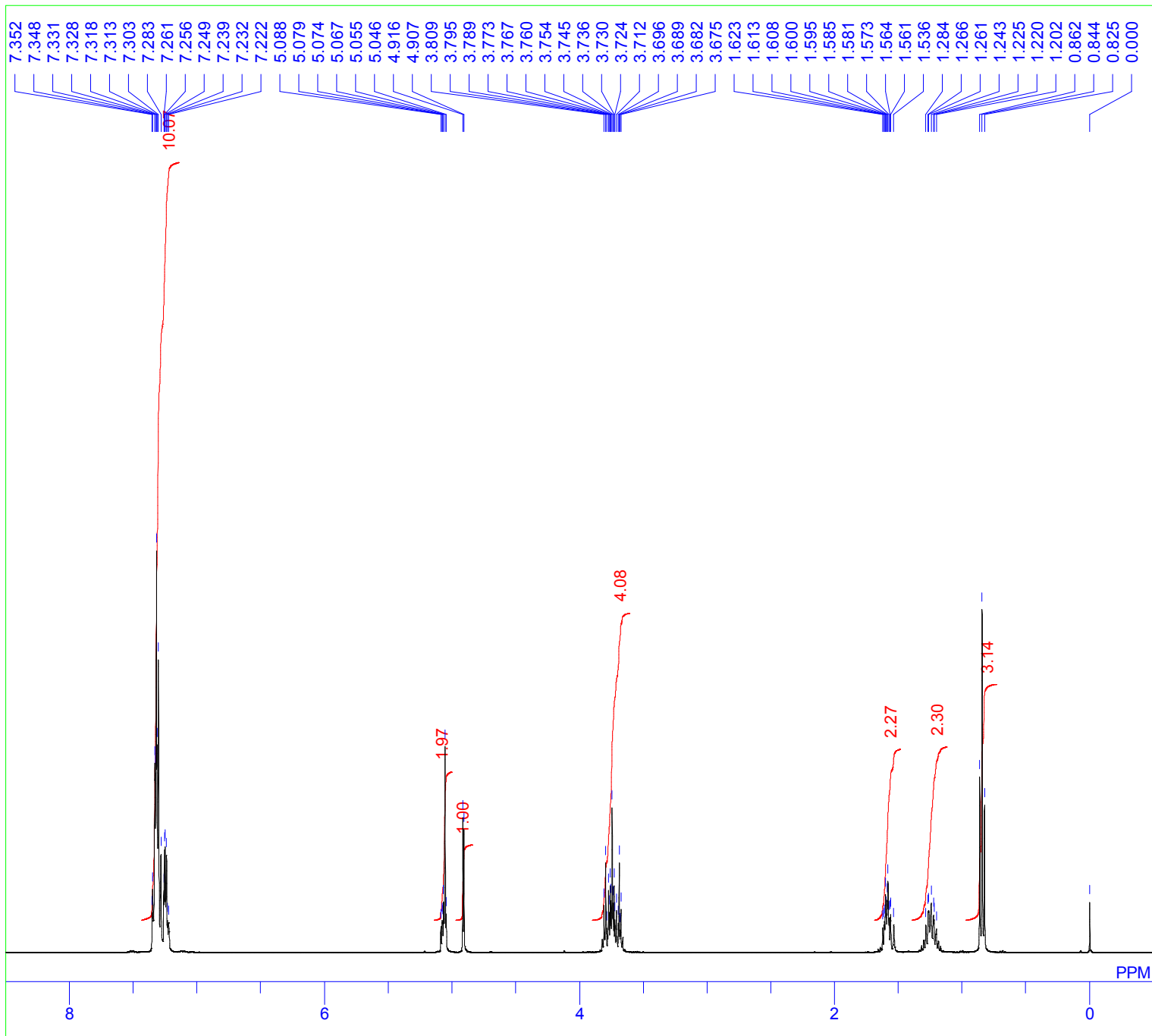
(R)-2g



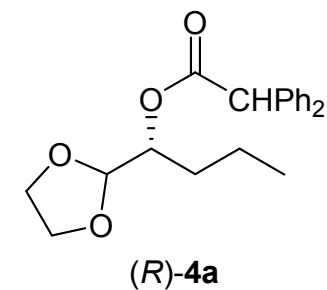
DFILE 13C.als
COMNT (R)-2g
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



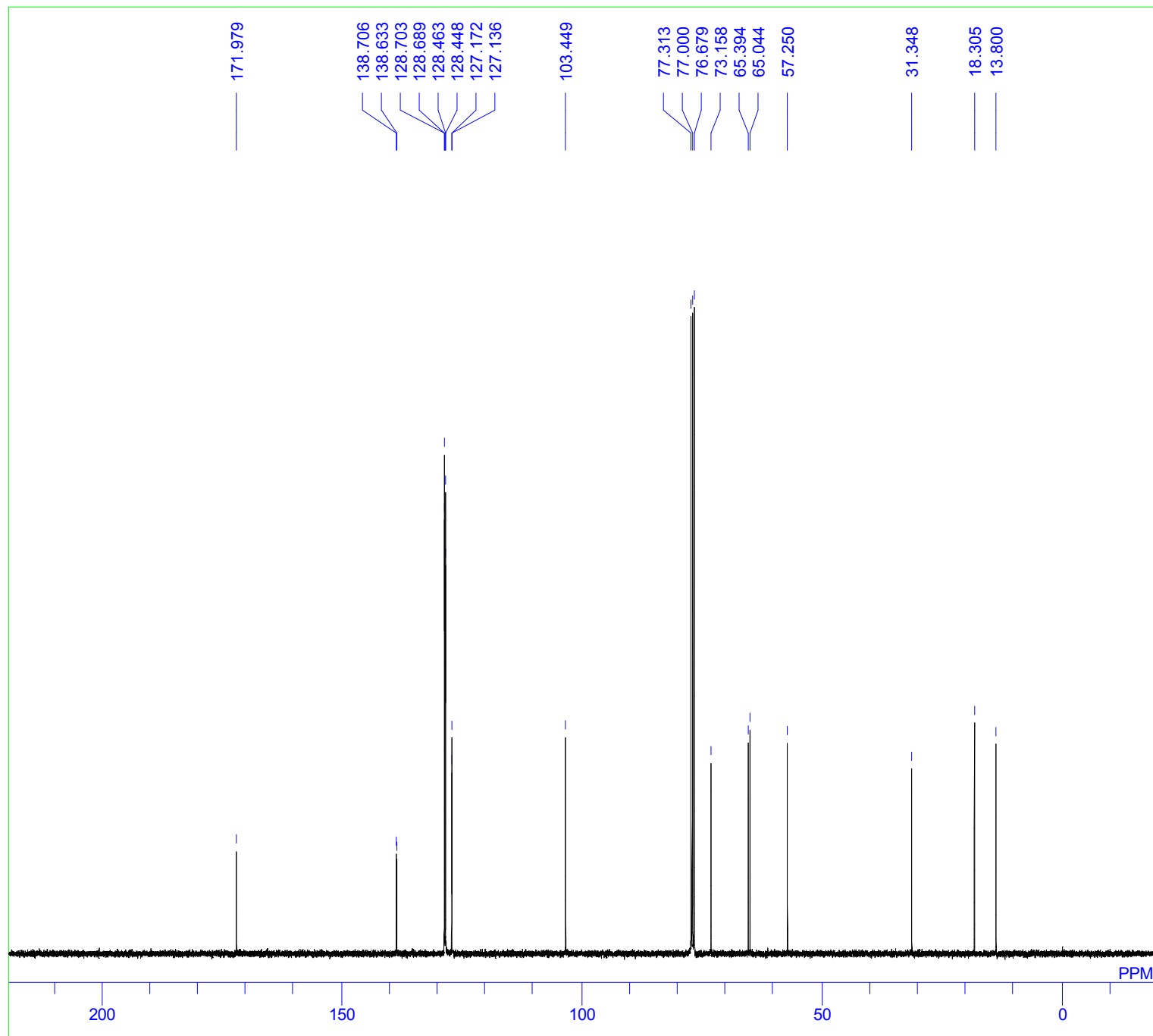
(R)-4a



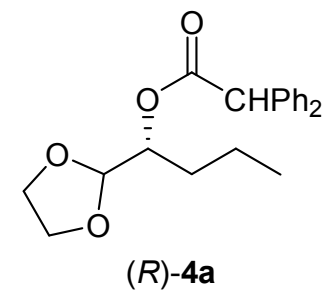
DFILE 1H.als
COMNT (R)-4a
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



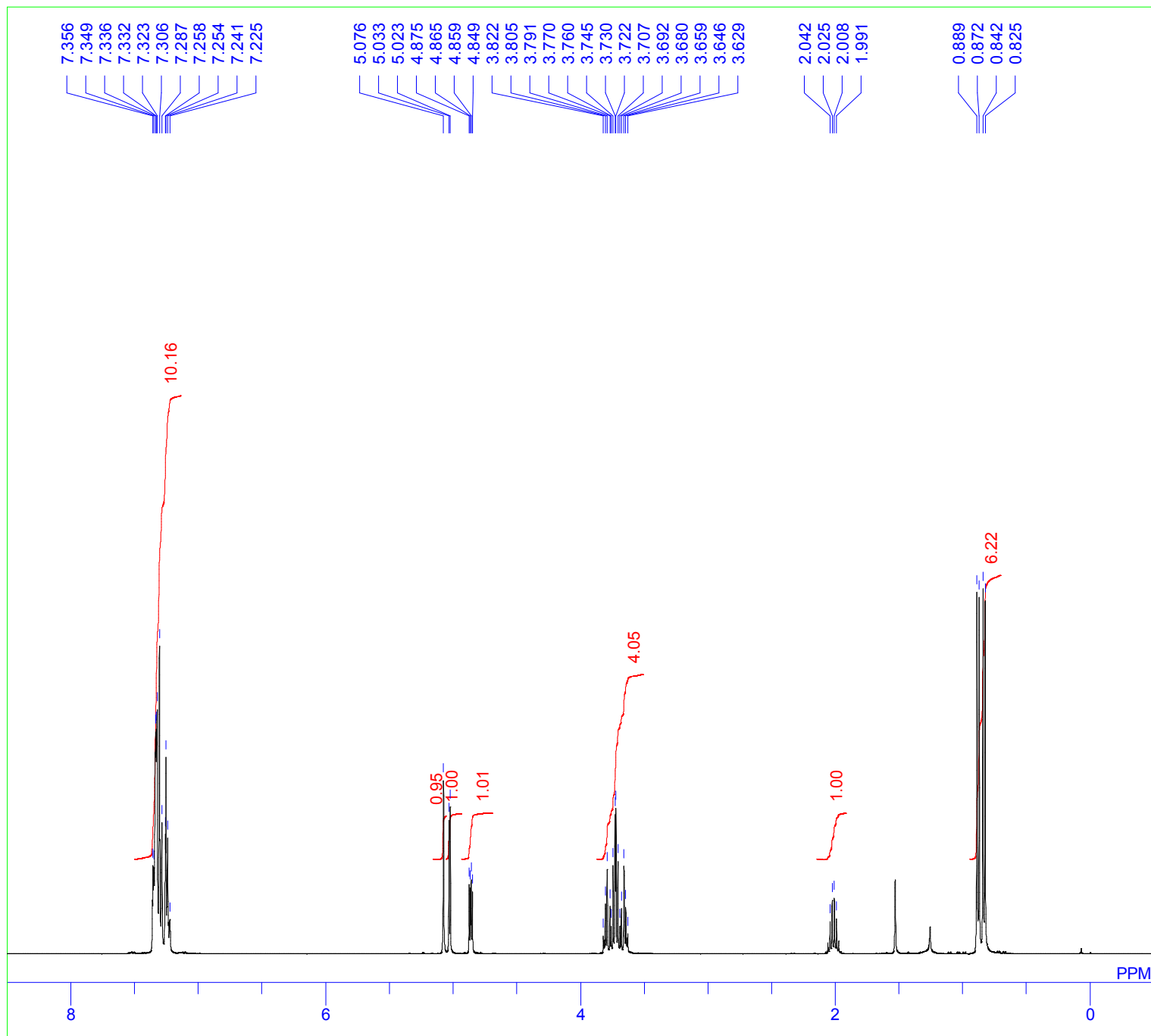
(R)-4a



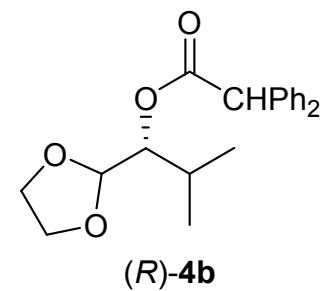
DFILE 13C.als
COMNT (R)-4a
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



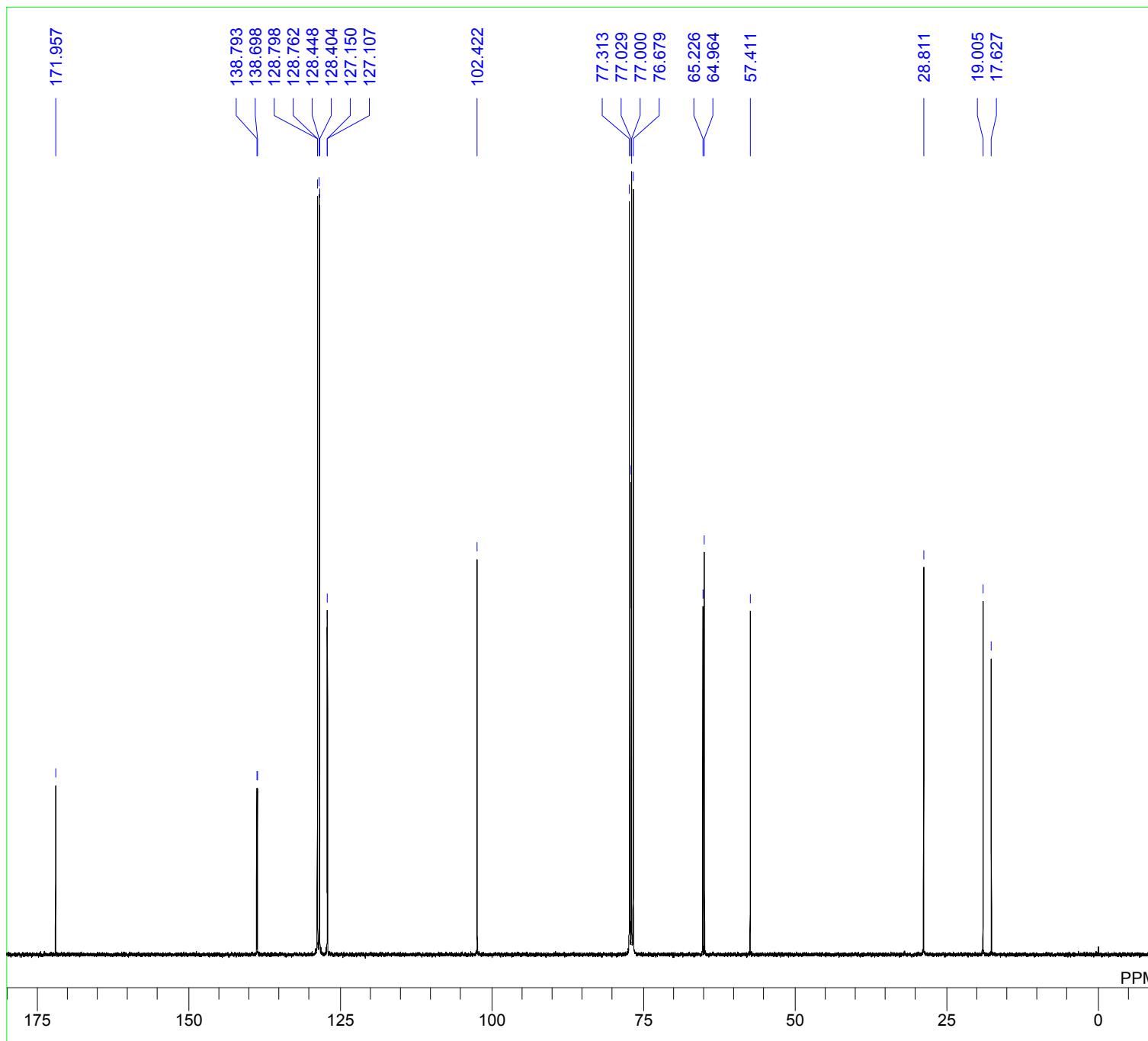
(R)-4b



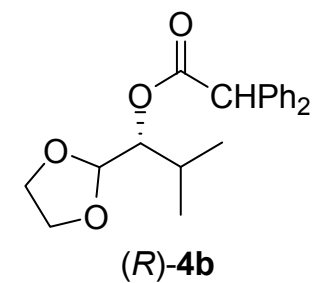
DFILE 1H.als
COMNT (R)-4b
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



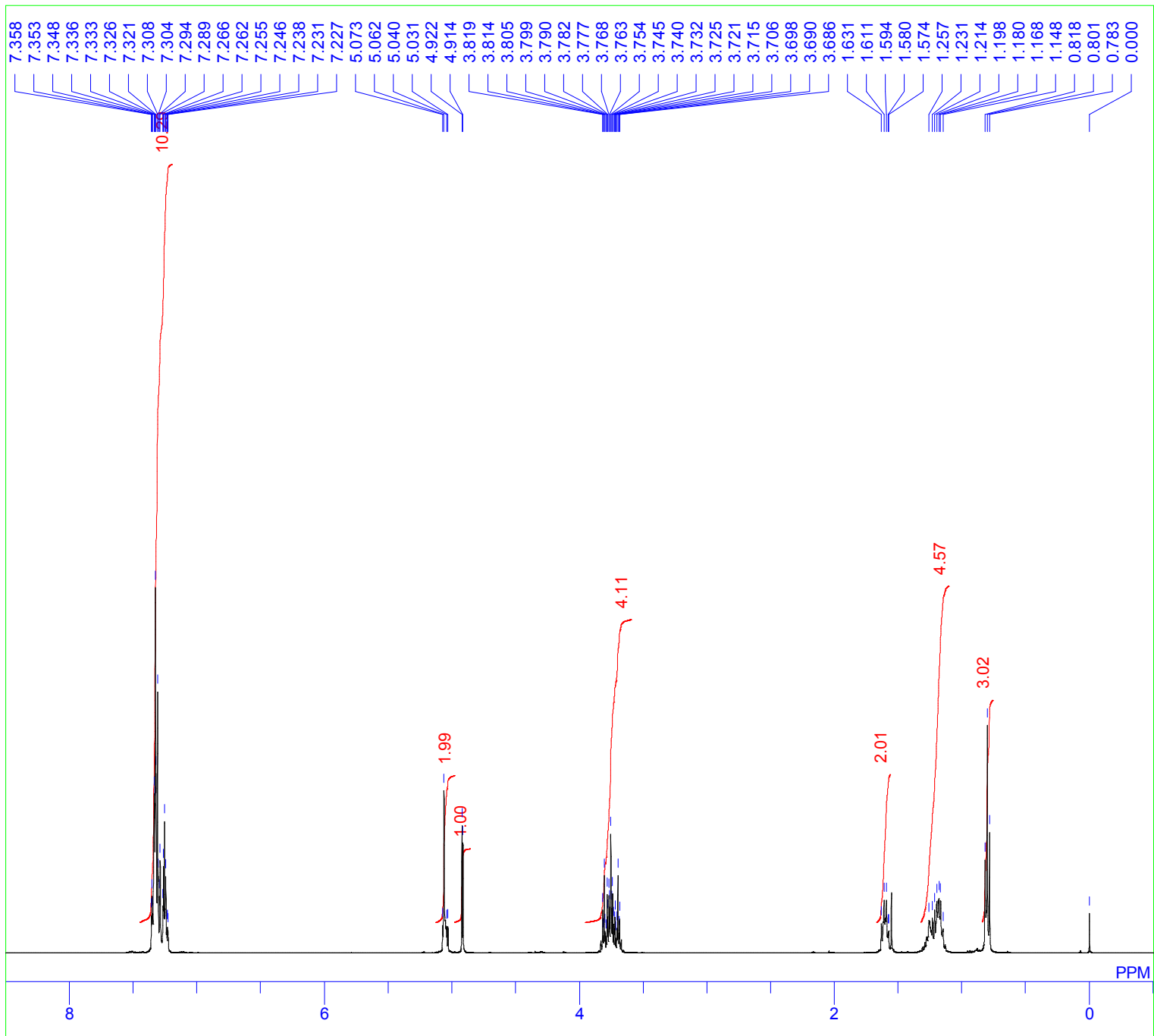
(R)-4b



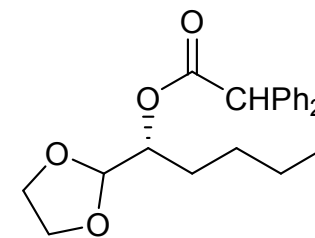
DFILE i Pr 13C rerere.als
COMNT (R)-4b
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 0



(R)-4c

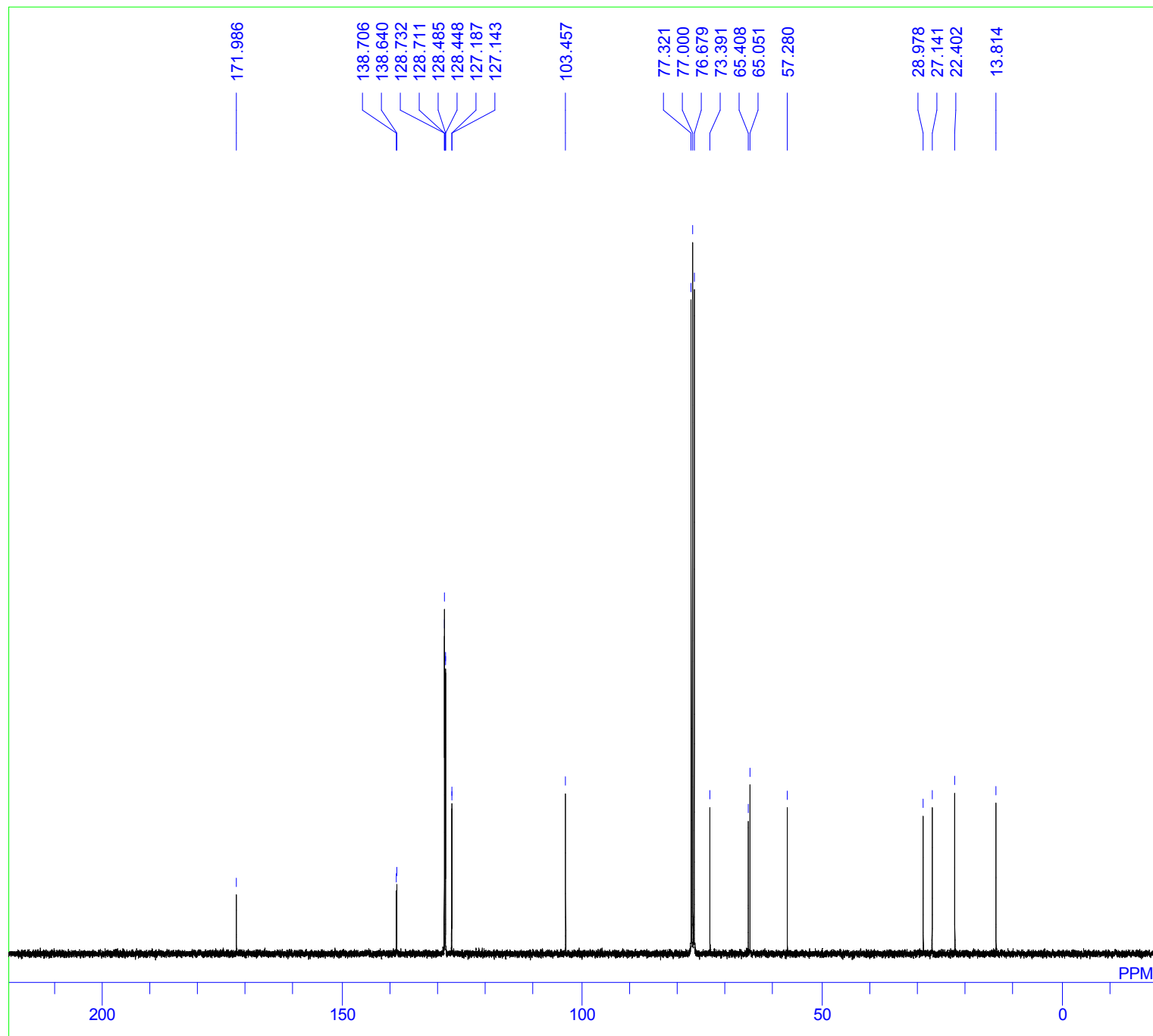


DFILE 1H.als
COMNT (R)-4c
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0

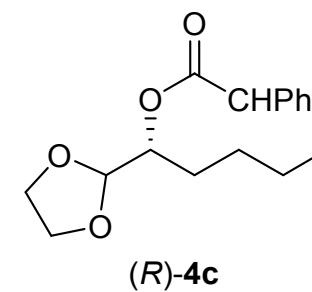


(R)-4c

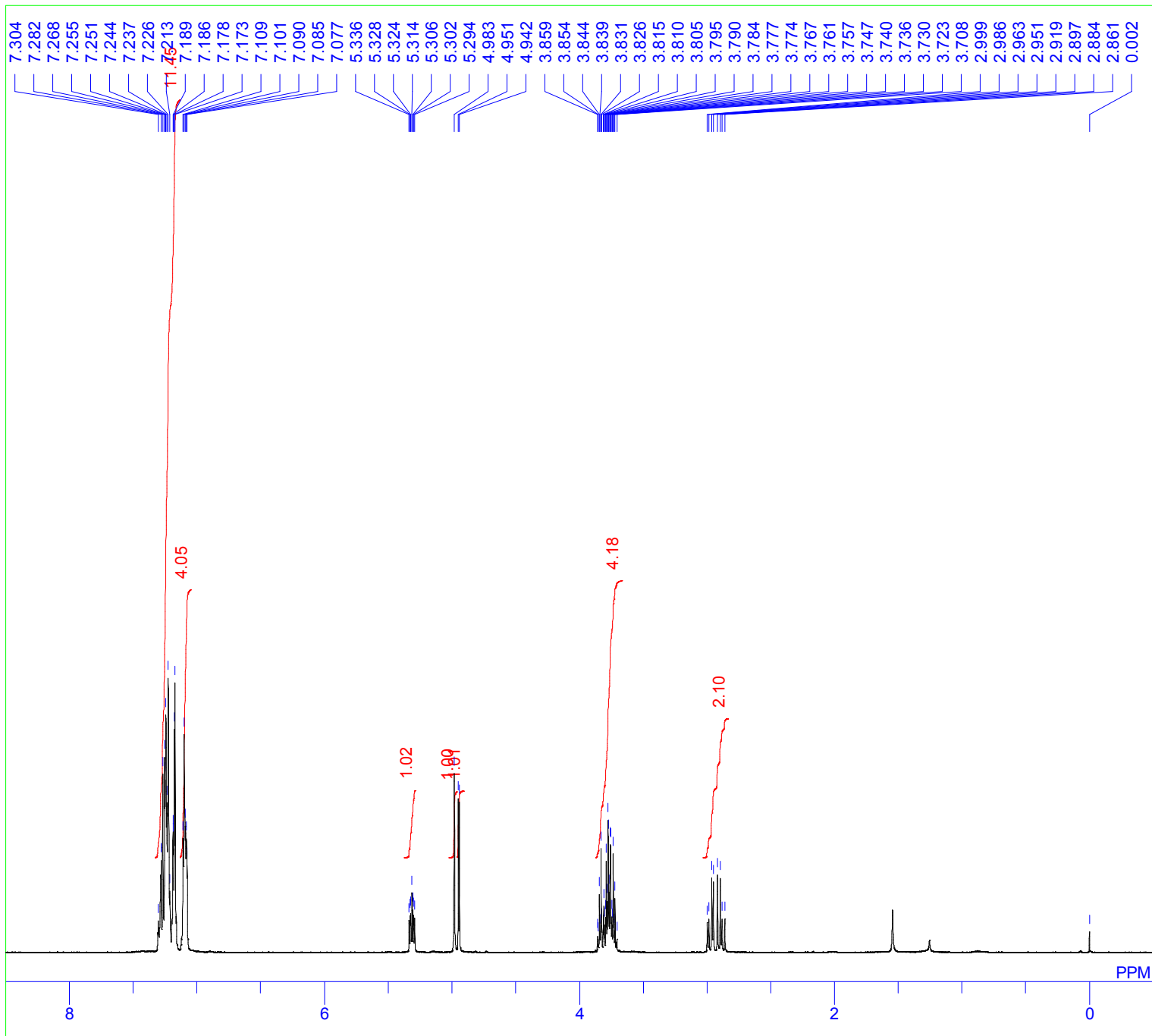
(R)-4c



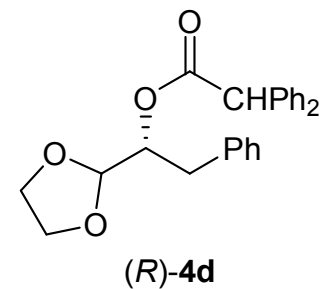
DFILE 13C.als
COMNT (R)-4c
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



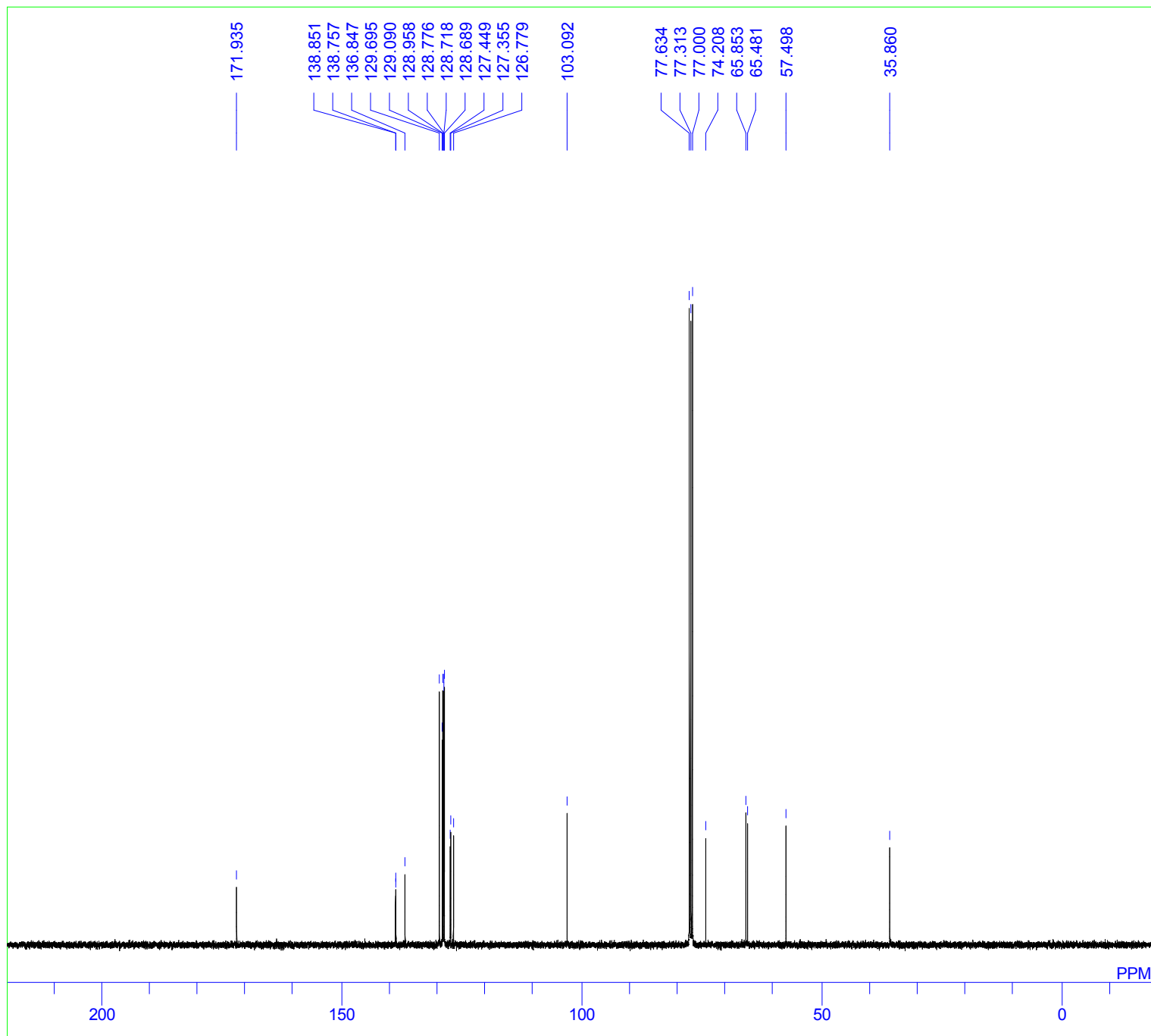
(R)-4d



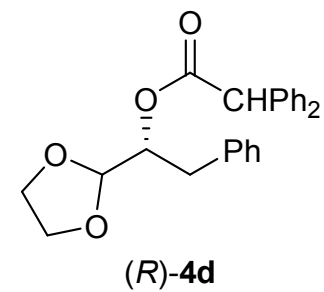
DFILE 1H.als
COMNT (R)-4d
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



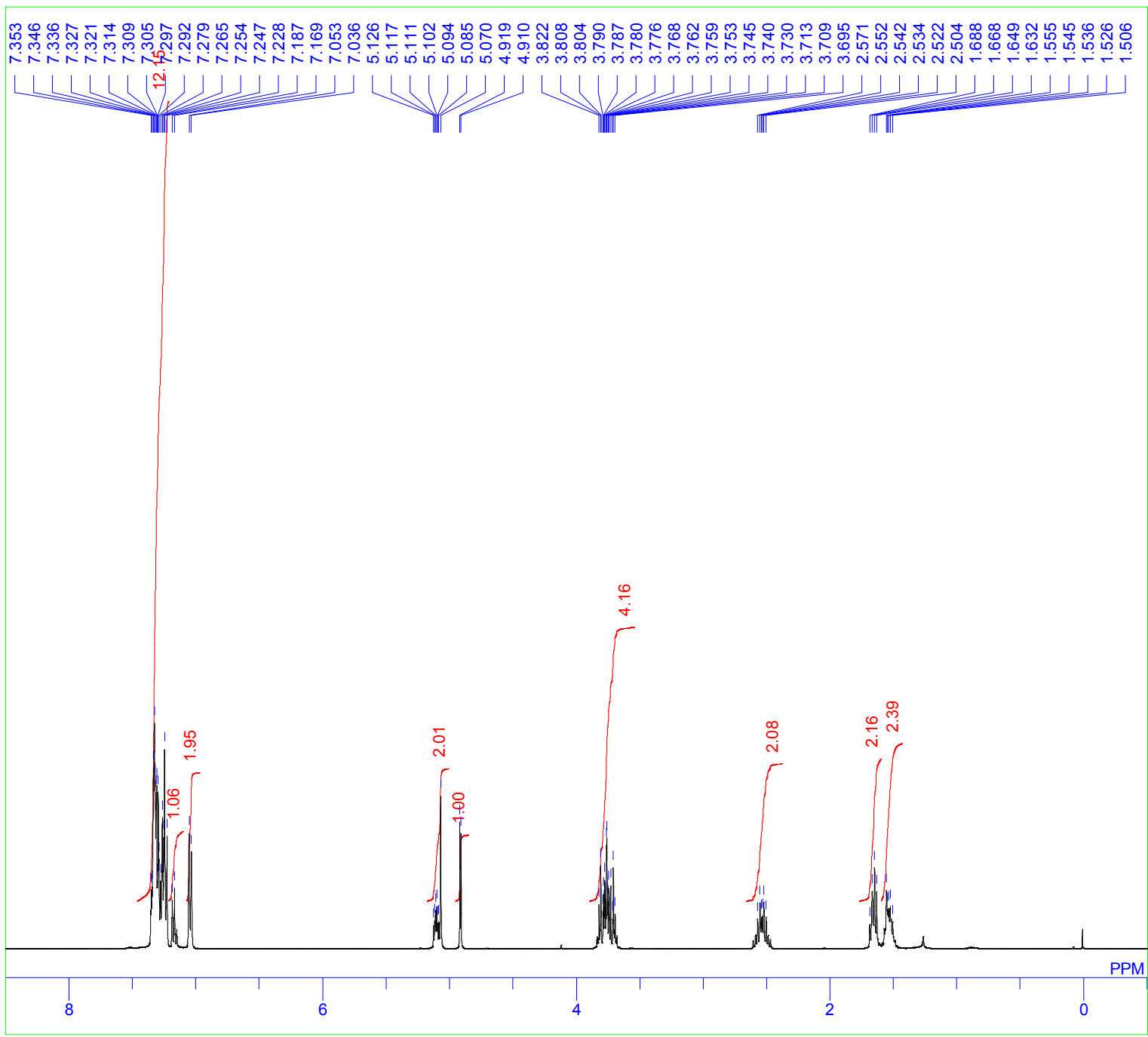
(R)-4d



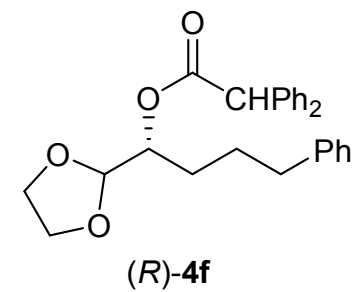
DFILE 13C.als
COMNT (R)-4d
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



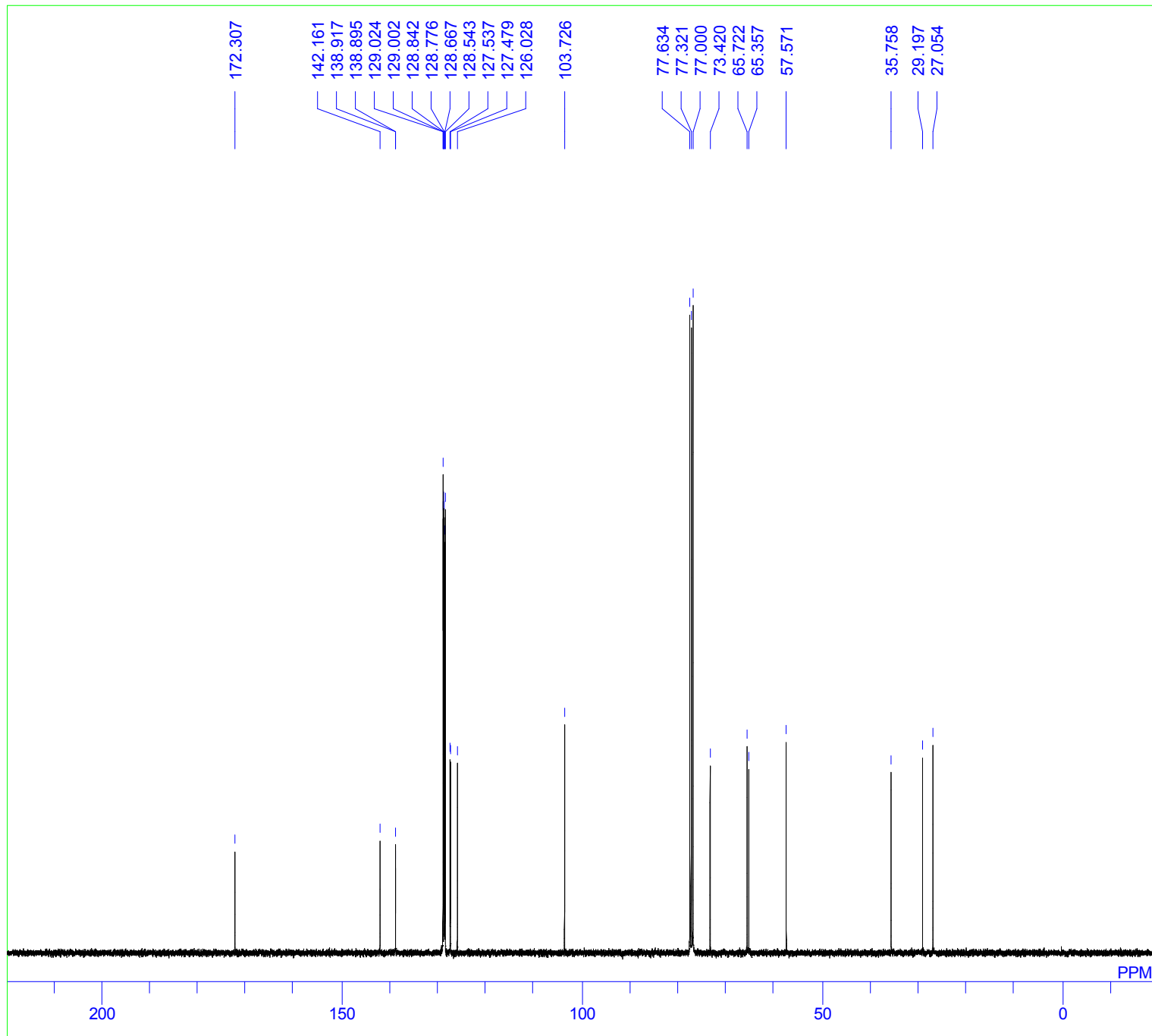
(R)-4f



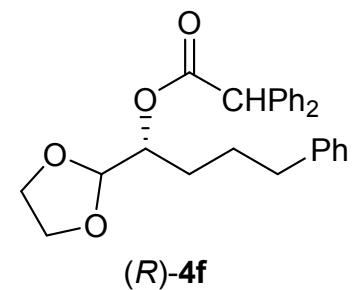
DFILE 1H.als
COMNT (R)-4f
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



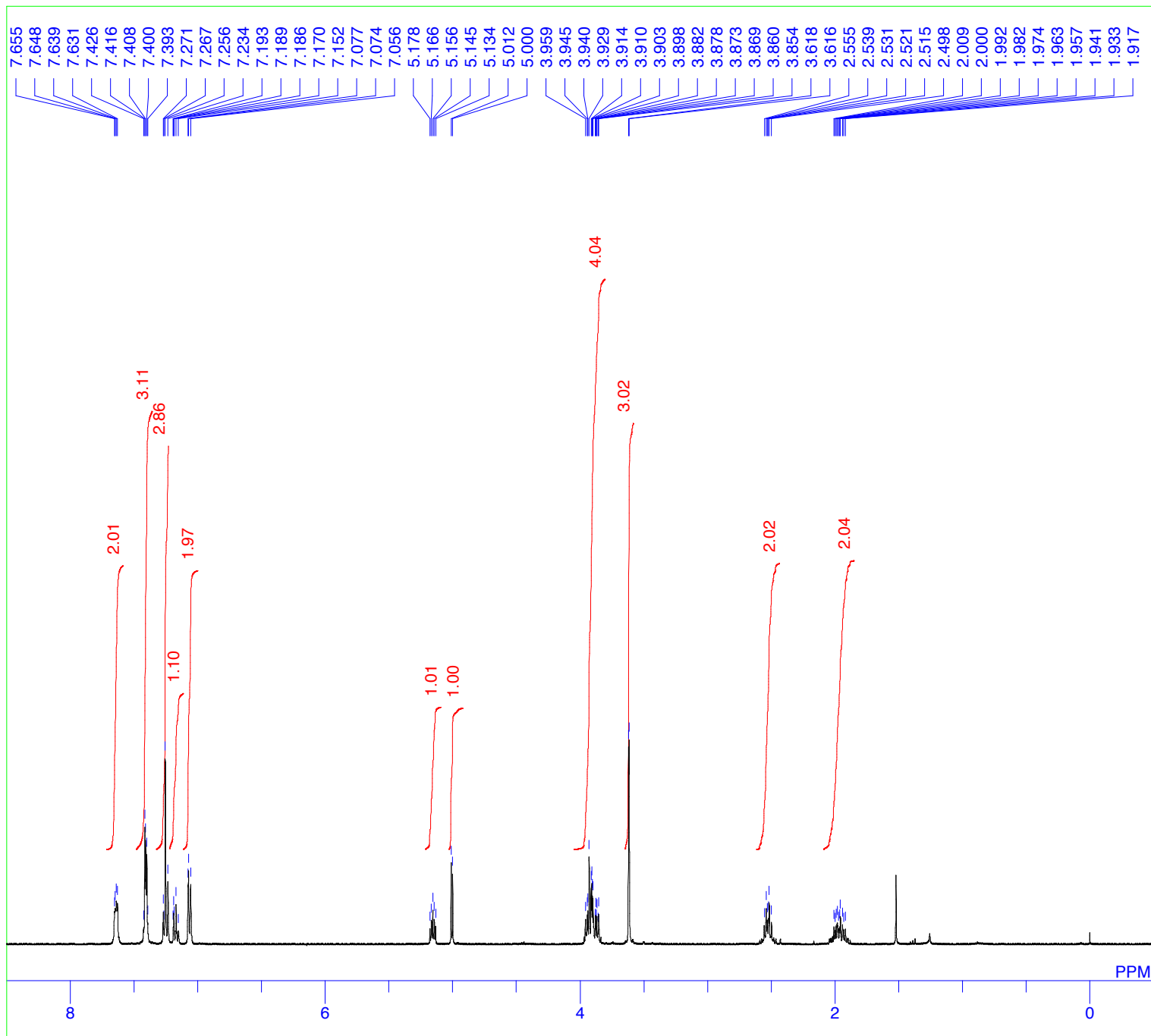
(R)-4f



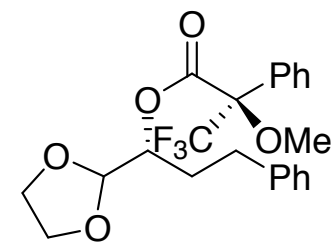
DFILE 13C.als
COMNT (R)-4f
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



(R)-MTPA ester

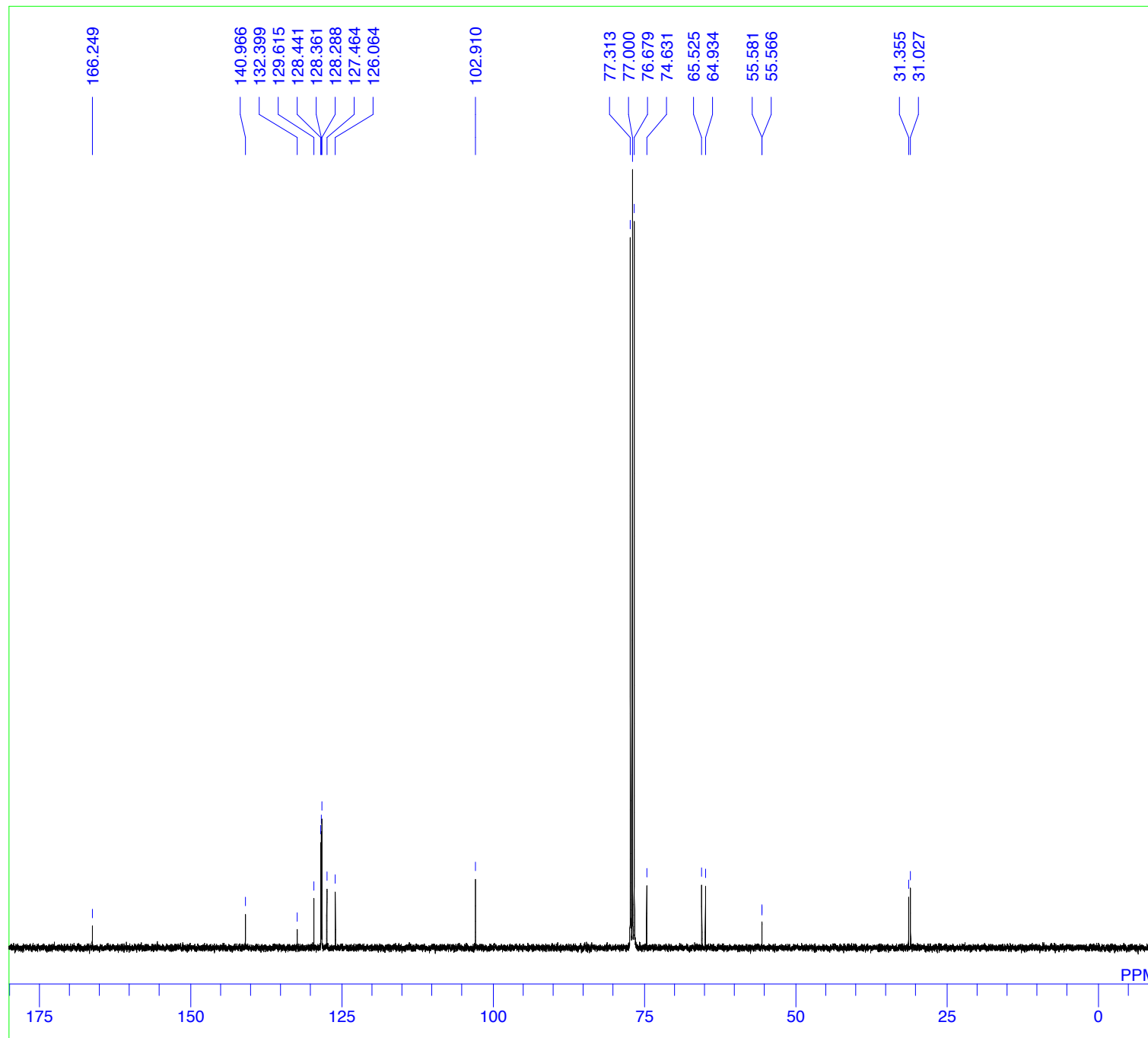


DFILE (R)-MTPA ester 1H.als
COMNT (R)-MTPA ester
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.13 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.00 Hz
POINT 32768
FREQU 8278.15 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0

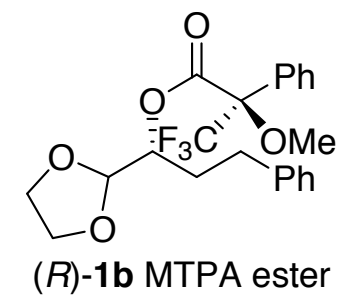


(R)-1b MTPA ester

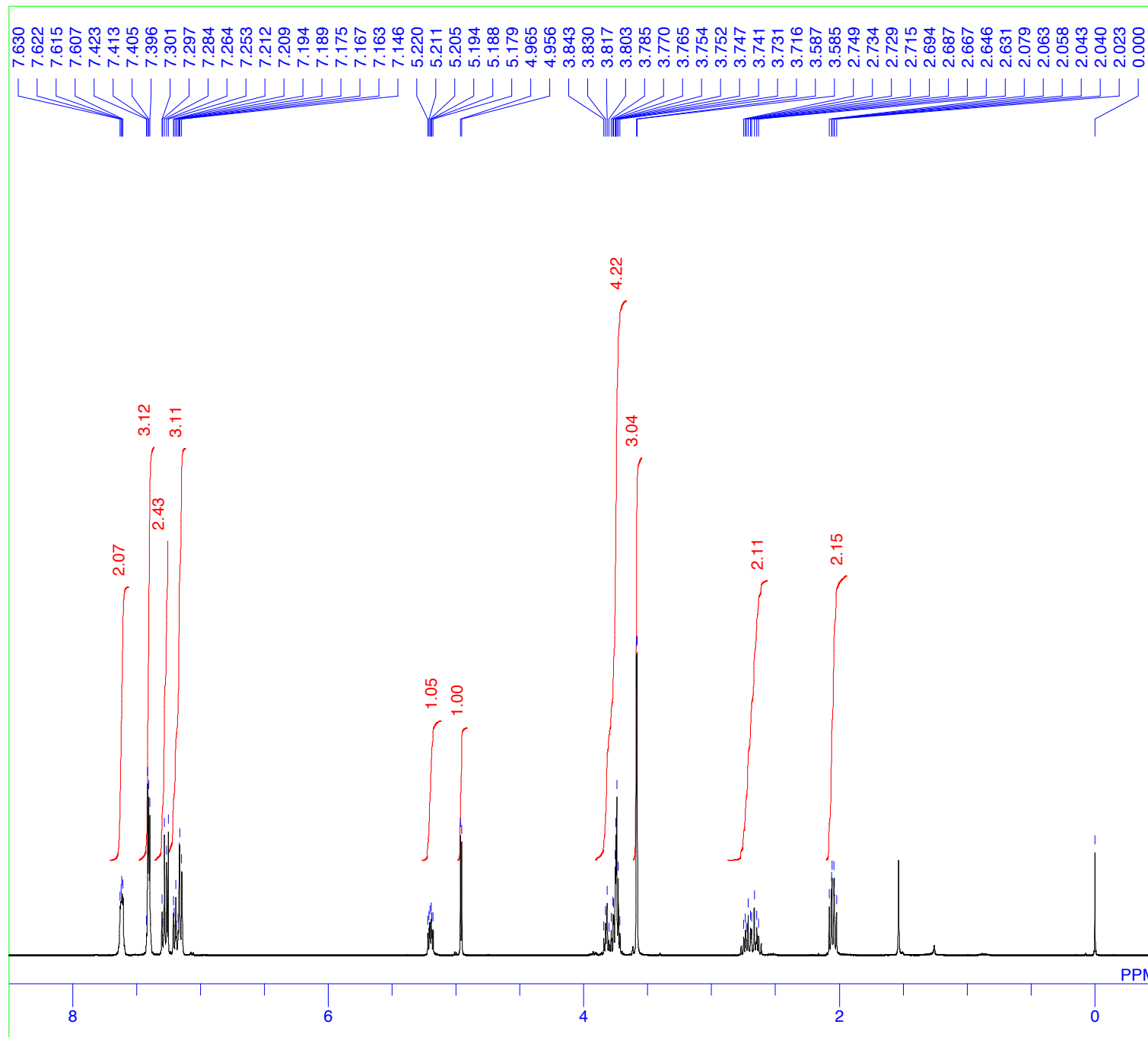
(R)-MTPA ester



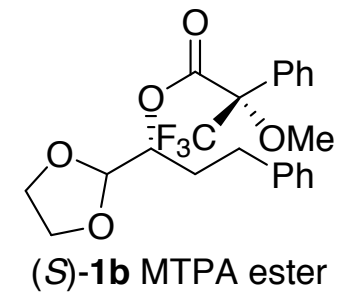
DFILE (R)-MTPA ester 13C.als
COMNT (R)-MTPA ester
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



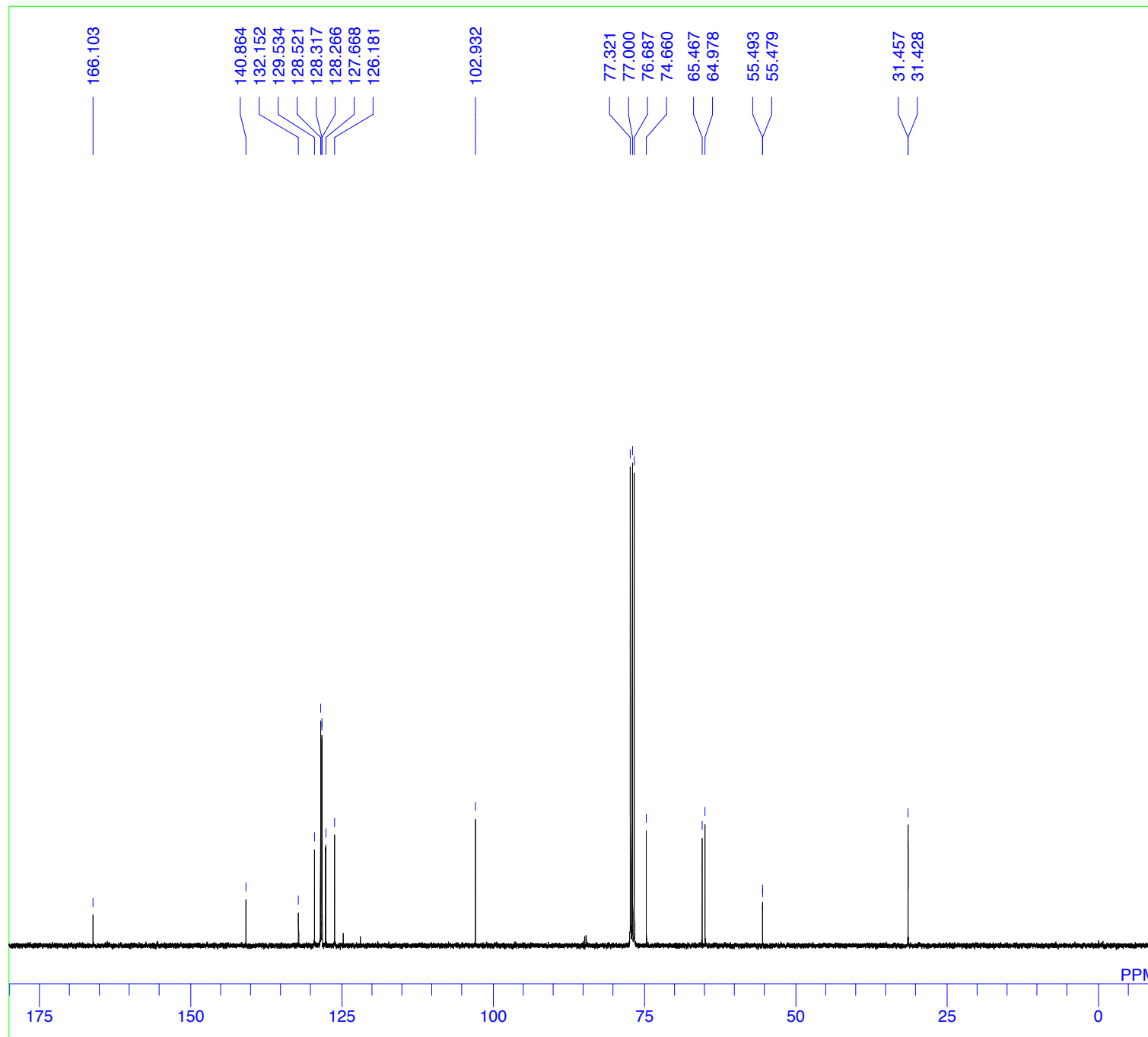
(S)-MTPA ester



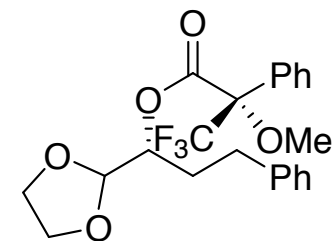
DFILE (S)-MTPA ester 1H.als
COMNT (S)-MTPA ester
DATIM
OBNUC 1H
EXMOD
OBFRQ 400.18 MHz
OBSET 2.47 KHz
OBFIN 1.30 Hz
POINT 32768
FREQU 8223.68 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 0.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



(S)-MTPA ester



DFILE (S)-MTPA ester 13C.als
COMNT (S)-MTPA ester
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD
OBFRQ 100.63 MHz
OBSET 5.40 KHz
OBFIN 3.60 Hz
POINT 32768
FREQU 24038.46 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 10.00 usec
IRNUC
CTEMP 0.0 c
SLVNT
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 0



(S)-1b MTPA ester

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/10/19 18:57

作成日時: 2016/01/08 12:21

処理日時: 2016/01/08 12:21

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-114 a

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-114 a

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

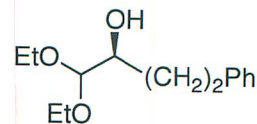
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-1a

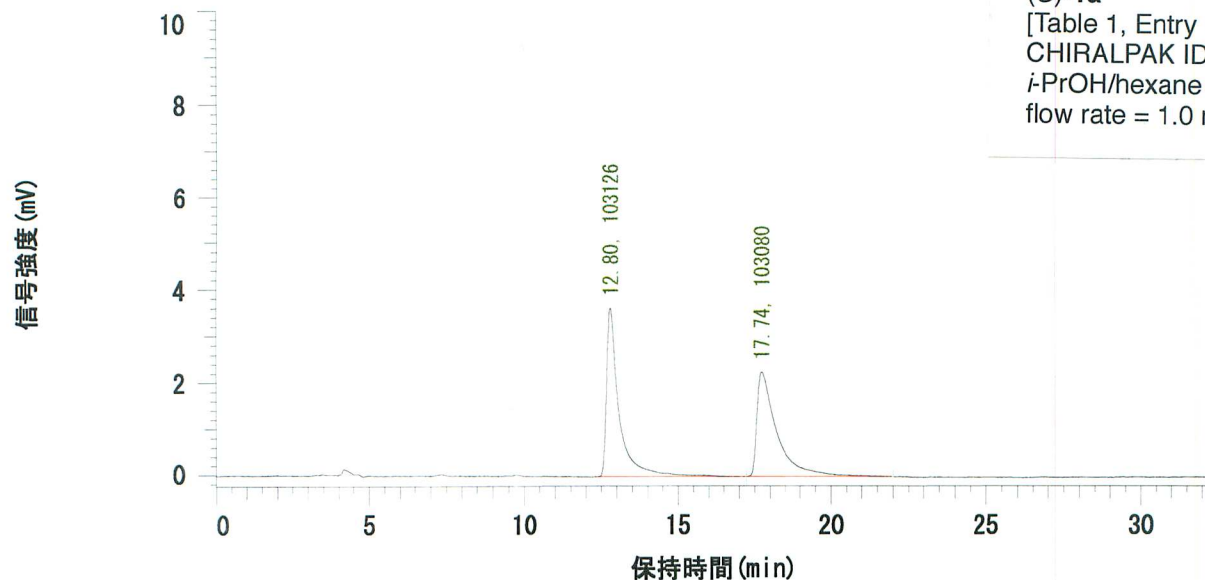
[Table 1, Entry 1, 0% ee]

CHIRALPAK ID

i-PrOH/hexane = 1/99

flow rate = 1.0 mL/min

カラムタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: ID

メソッド作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液 D:

分析ファイルコメント:

カラムタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	12.80	103126	50.011	BB
2	17.74	103080	49.989	BB
		206206	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/10/20 10:53

作成日時: 2016/01/08 12:23

処理日時: 2016/01/08 12:23

データパス名: C:\¥WIN32APP¥D2000HSM_2¥T_Nakahara¥DATA¥1-114 e¥

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-114 e

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

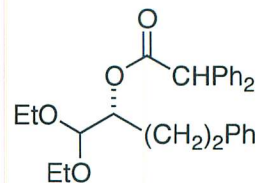
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(R)-2a

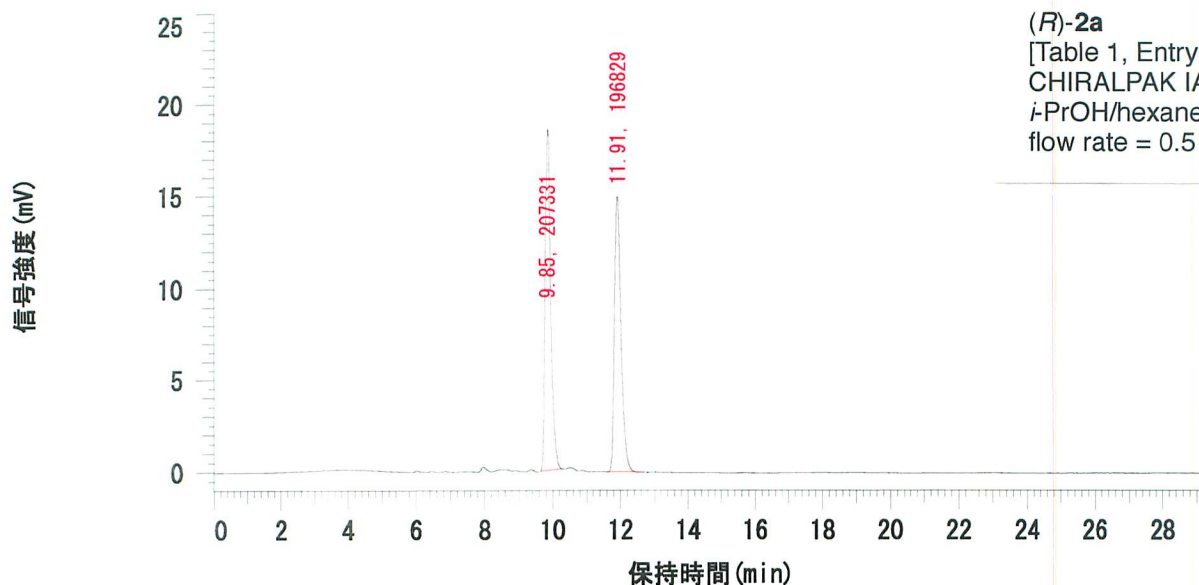
[Table 1, Entry 1, 3% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	9.85	207331	51.299	MC
2	11.91	196829	48.701	MC
		404160	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/07/04 15:44

作成日時: 2016/01/08 11:48

処理日時: 2016/01/08 11:48

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-39 alcohol\

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-39 alcohol

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

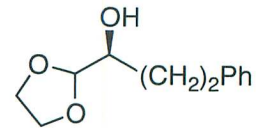
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

**(S)-1b (= 3e)**

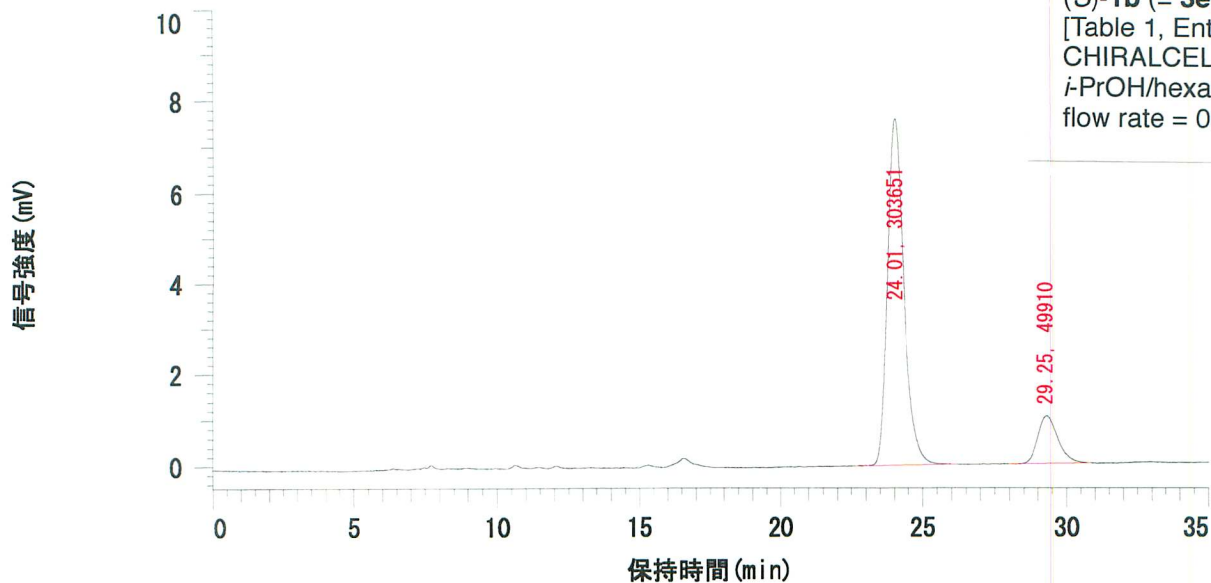
[Table 1, Entry 2, 72% ee]

CHIRALCEL OD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/I/MEA=75/25/0.1

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	24.01	303651	85.883	MC
2	29.25	49910	14.117	MC
		353561	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/07/04 13:02

作成日時: 2016/01/08 11:52

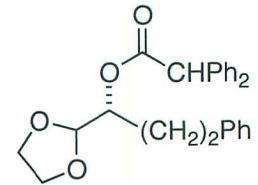
処理日時: 2016/01/08 11:52

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-39 ester¥

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

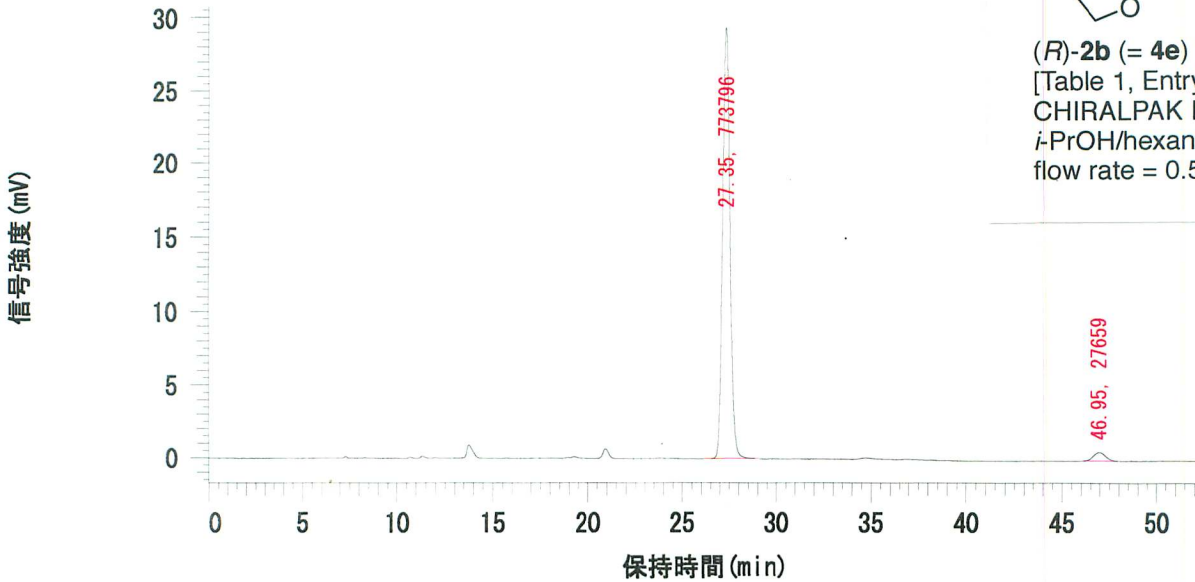
システム(データ収集): Sys 2
 アプリケーション(データ): saito
 サンプル名: 未知試料001
 注入回数: 1 of 1
 サンプルコメント:

シリーズ: 001-39 ester
 バイアル: 1
 バイアルタイプ: UNK
 注入量: 10.0 ul



(*R*)-**2b** (= **4e**)
 [Table 1, Entry 2, 93% ee]
 CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
 flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	27.35	773796	96.549	MC
2	46.95	27659	3.451	MC
		801455	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/15 16:12

作成日時: 2016/01/08 12:25

処理日時: 2016/01/08 12:25

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-155 a

データベース処理用分析ファイル: default

システム(データベース): Sys 2

シリーズ: 1-155 a

アプリケーション(データベース): T_Nakahara

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

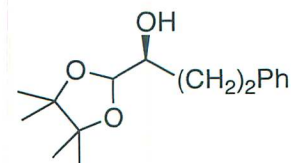
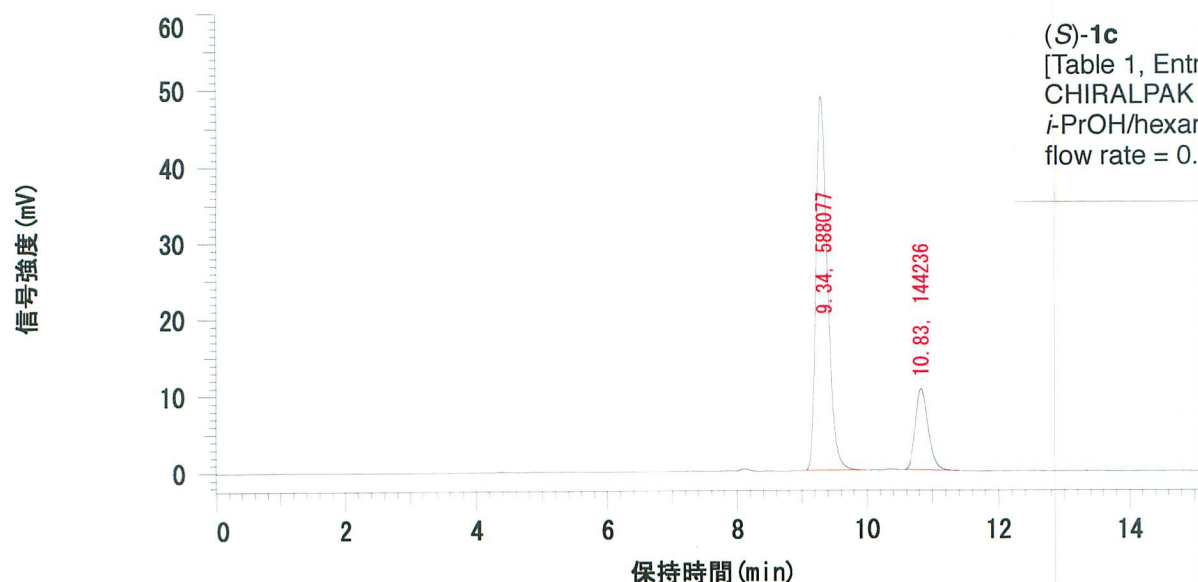
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

カラムタイプ: HPLC チャンネル : 1



(S)-1c

[Table 1, Entry 3, 61% ee]

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.7 mL/min

データベース処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

カラムタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	9.34	588077	80.304	MC
2	10.83	144236	19.696	MC
		732313	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/15 14:32

作成日時: 2016/01/08 12:27

処理日時: 2016/01/08 12:27

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-155 e\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-155 e

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

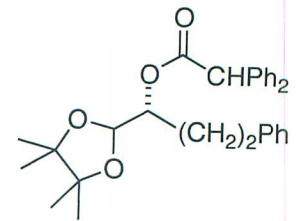
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

**(R)-2c**

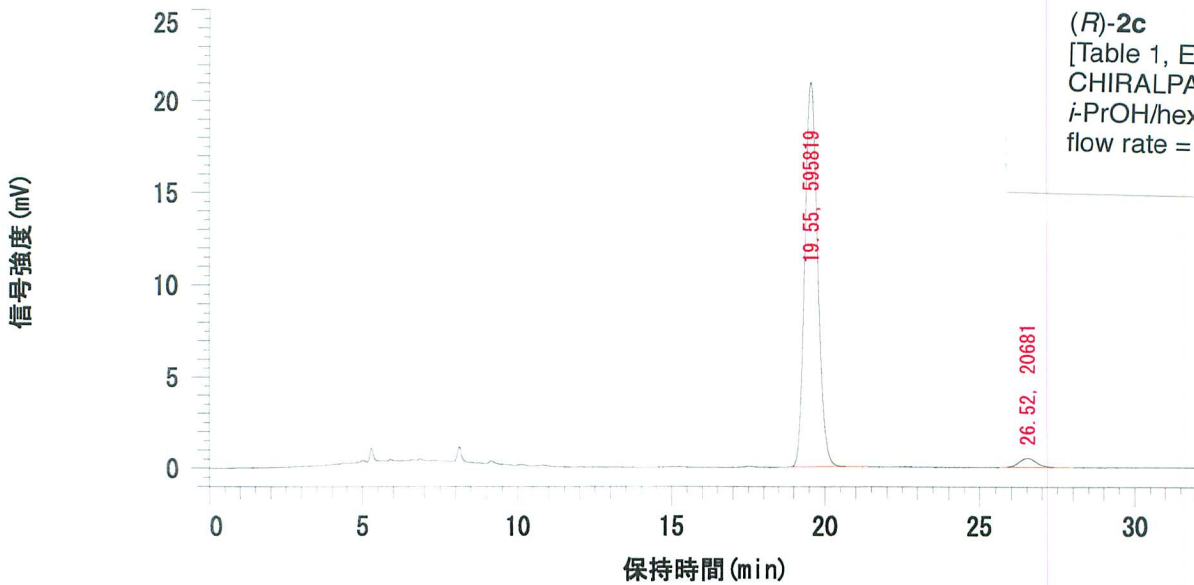
[Table 1, Entry 3, 93% ee]

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

レポート作成者:

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	19.55	595819	96.645	MC
2	26.52	20681	3.355	MC
		616500	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/11 20:00

作成日時: 2016/01/08 12:28

処理日時: 2016/01/08 12:28

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-001 a\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-001 a

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

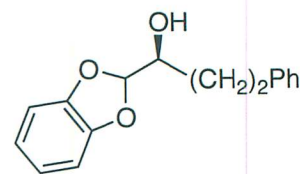
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-1d

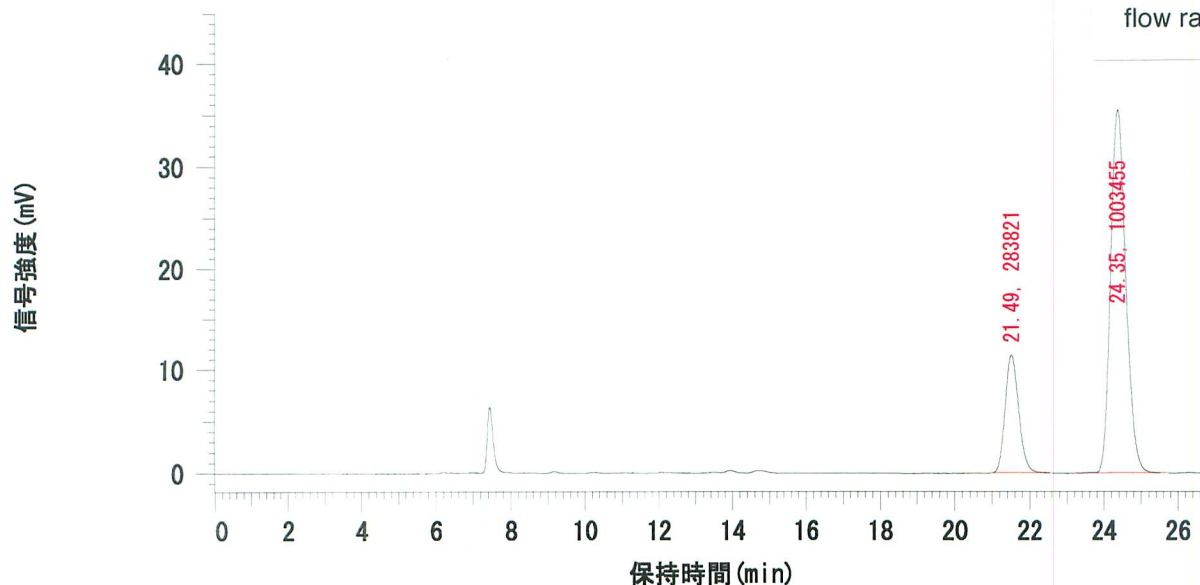
[Table 1, Entry 4, 56% ee]

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	21.49	283821	22.048	MC
2	24.35	1003455	77.952	MC
		1287276	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/11 19:05

作成日時: 2016/01/08 12:30

処理日時: 2016/01/08 12:30

データパス名: C:\¥WIN32APP¥D2000HSM_2¥T_Nakahara¥DATA¥2-001 e¥

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-001 e

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

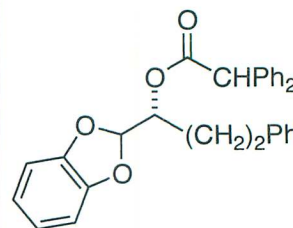
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

**(R)-2d**

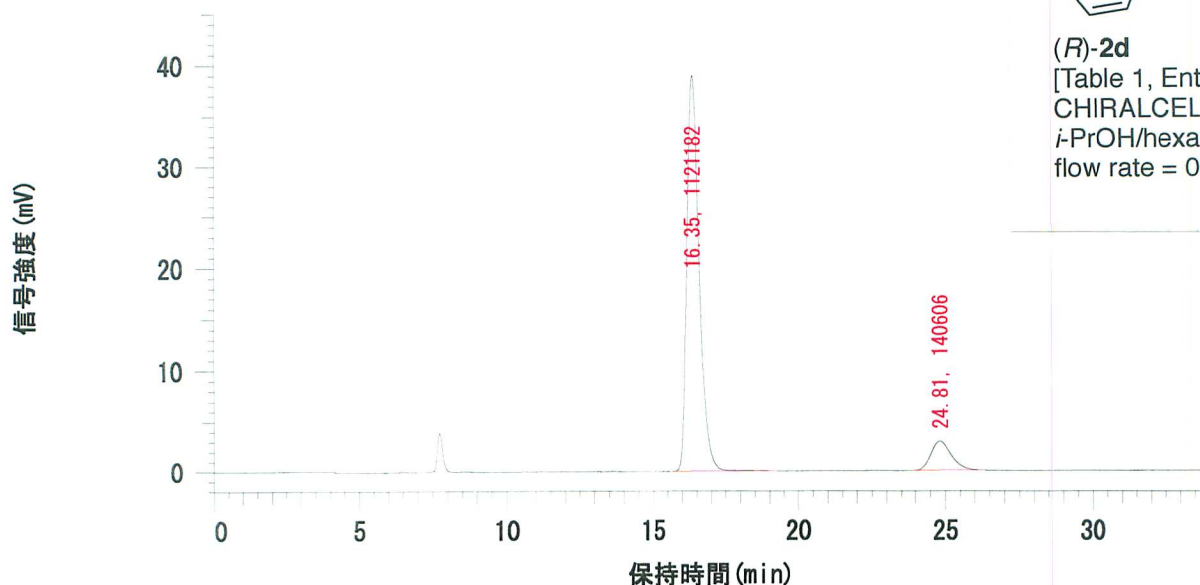
[Table 1, Entry 4, 78% ee]

CHIRALCEL OD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: OD-H

ポンプA(メイン): L-2130

レポート作成者:

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	16.35	1121182	88.857	MC
2	24.81	140606	11.143	MC
		1261788	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/13 16:04

作成日時: 2016/01/08 12:31

処理日時: 2012/11/13 16:42

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-150 a\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-150 a

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

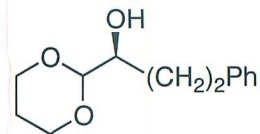
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-1e

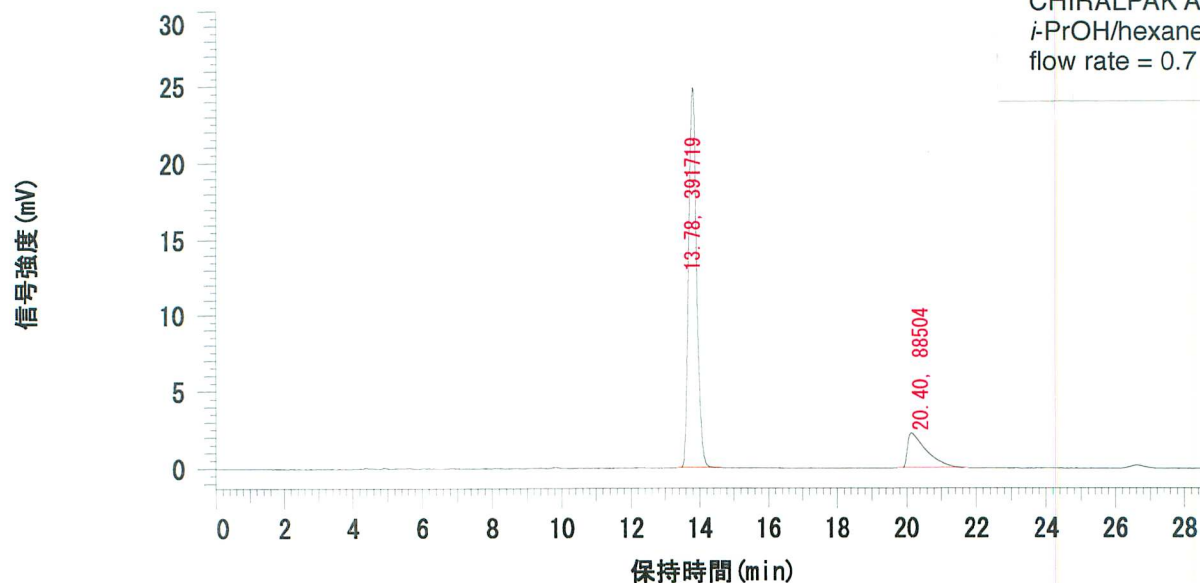
[Table 1, Entry 5, 63% ee]

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	13.78	391719	81.570	MC
2	20.40	88504	18.430	MC
		480223	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/13 14:07

作成日時: 2016/01/08 12:33

処理日時: 2016/01/08 12:33

データベース名: C:\WIN32APP\HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-150 e\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-150 e

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

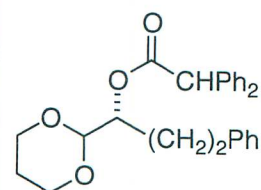
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(R)-2e

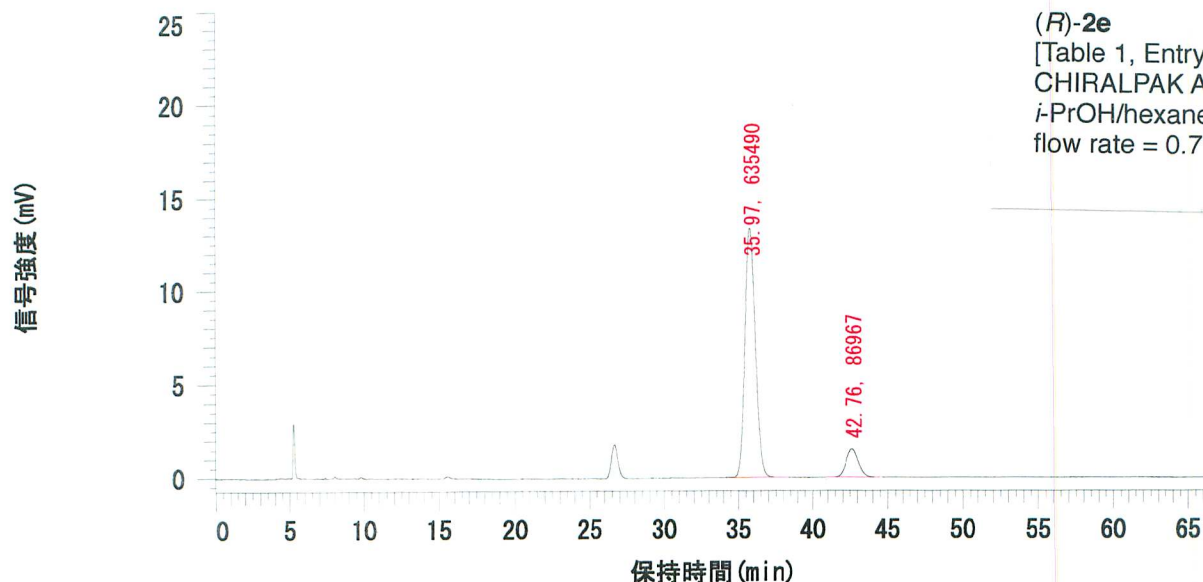
[Table 1, Entry 5, 76% ee]

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	35.97	635490	87.962	MC
2	42.76	86967	12.038	MC
		722457	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 17:22

作成日時: 2016/01/08 12:34

処理日時: 2016/01/08 12:34

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-012 a\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-012 a

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイル: 1

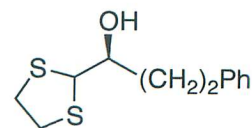
サンプル名: 未知試料001

バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-1f

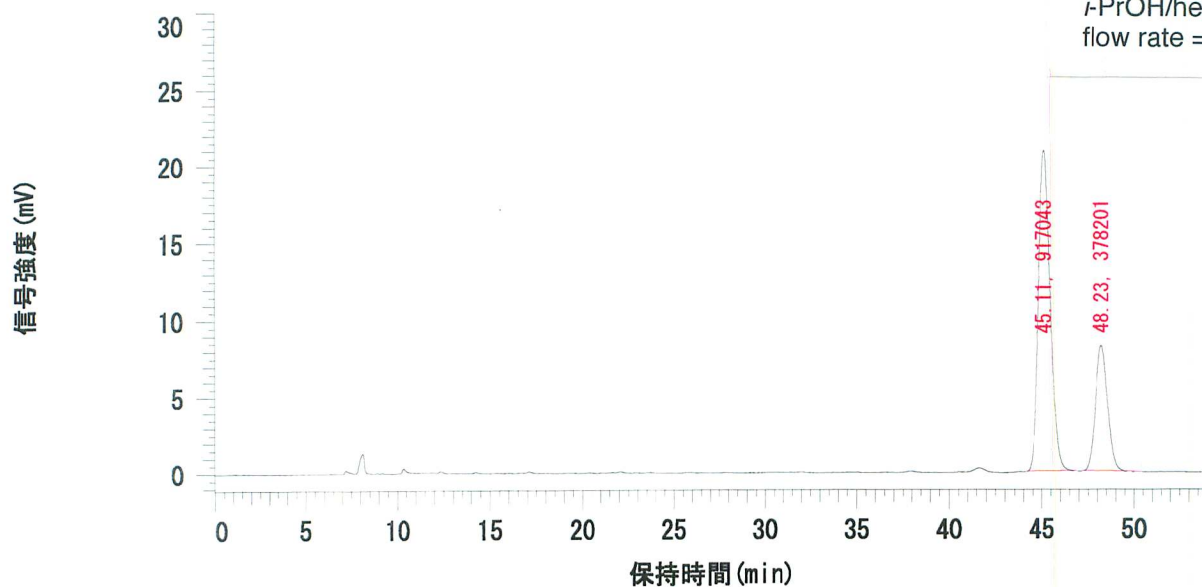
[Table 1, Entry 6, 42% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	45.11	917043	70.801	MC
2	48.23	378201	29.199	MC
		1295244	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 13:56

作成日時: 2016/05/22 22:12

処理日時: 2016/05/22 22:12

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-012 e\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): T_Nakahara

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

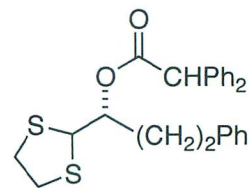
サンプルコメント:

シーナス: 2-012 e

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



(R)-2f

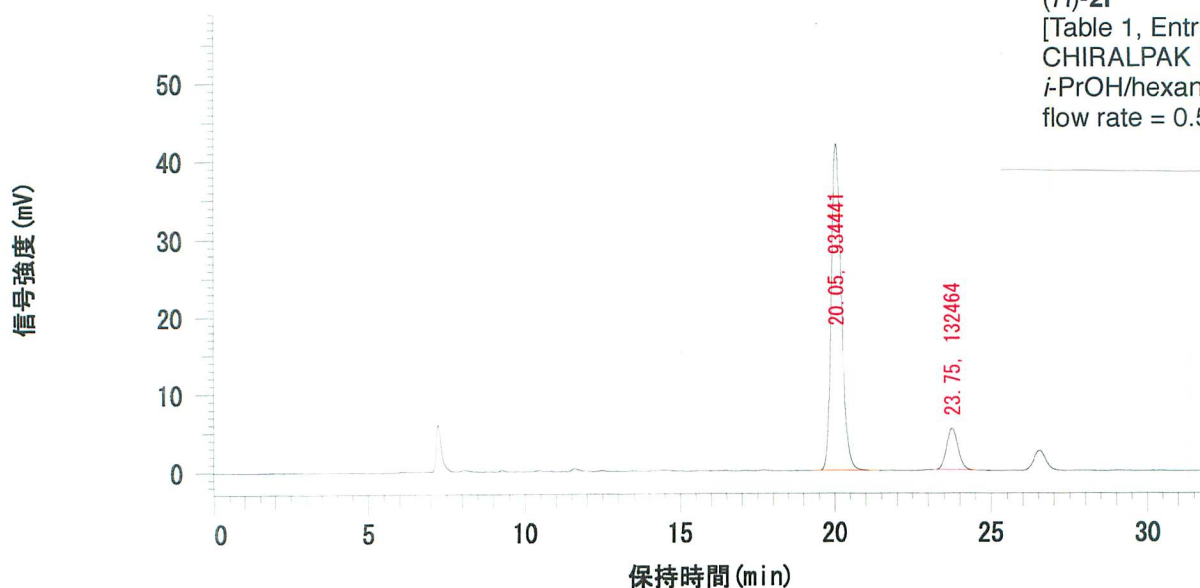
[Table 1, Entry 6, 75% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	20.05	934441	87.584	MC
2	23.75	132464	12.416	MC
		1066905	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 20:41

作成日時: 2016/01/08 12:38

処理日時: 2016/01/08 12:38

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-015 a

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-015 a

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイル: 1

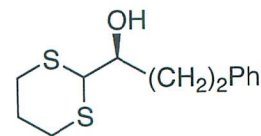
サンプル名: 未知試料001

バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

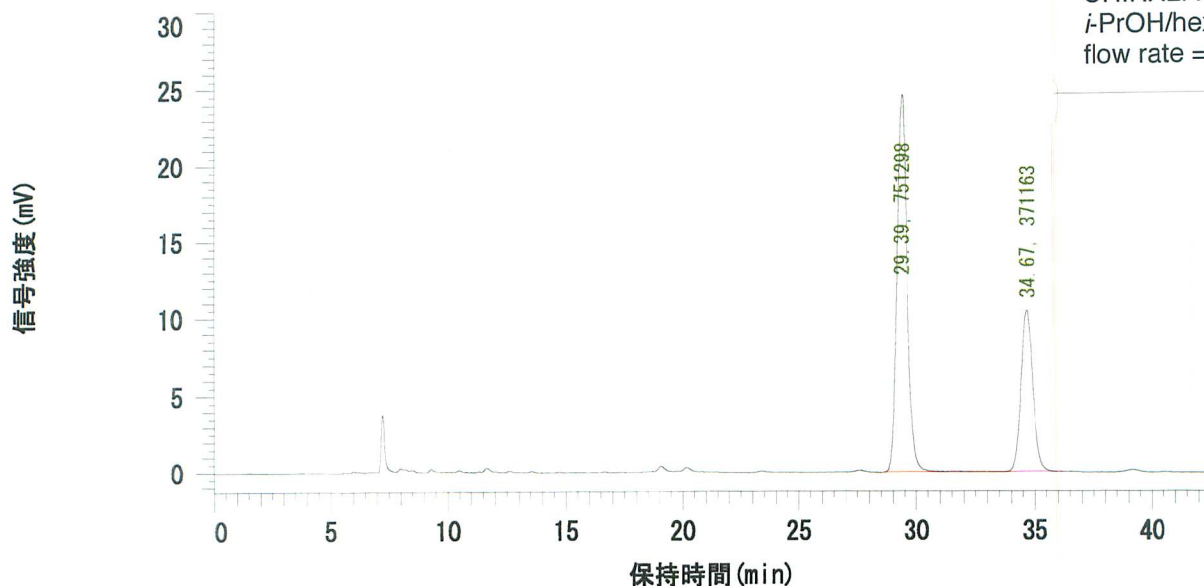
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-1g
 [Table 1, Entry 7, 34% ee]
 CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
 flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: default

グラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	29.39	751298	66.933	BV
2	34.67	371163	33.067	BB
		1122461	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 19:29

作成日時: 2016/01/08 12:40

処理日時: 2016/01/08 12:40

データベース名: C:\WIN32APP\HSM\2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-015 e

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-015 e

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

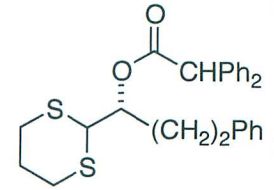
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(R)-2g

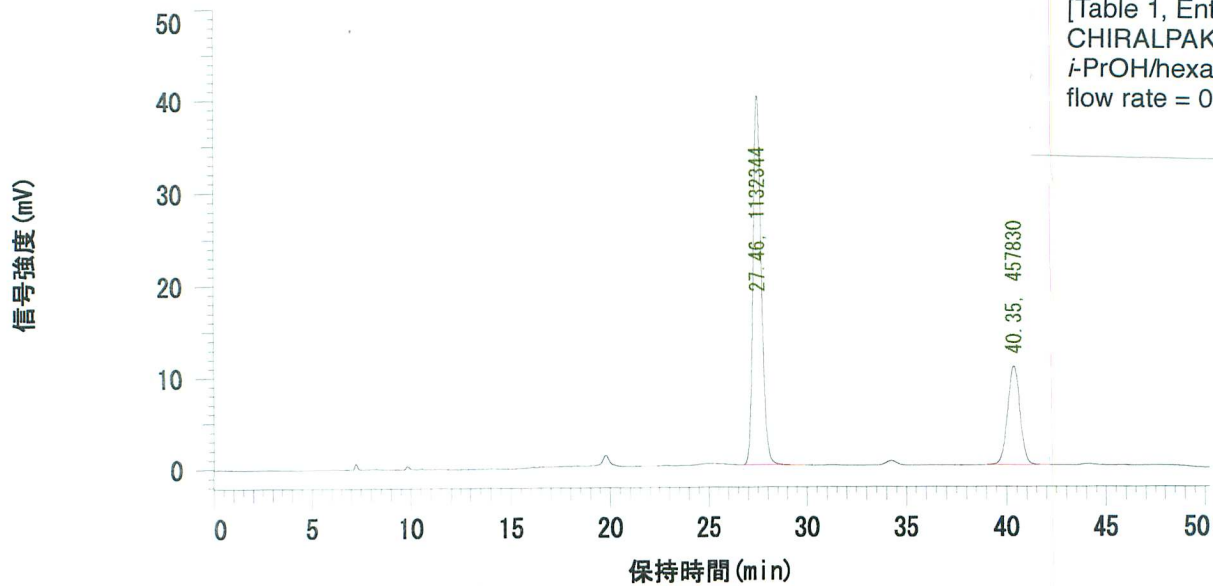
[Table 1, Entry 7, 42% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	27.46	1132344	71.209	BB
2	40.35	457830	28.791	BB
		1590174	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2015/01/21 12:21

作成日時: 2015/11/27 10:07

処理日時: 2015/11/27 10:07

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-126

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): saito

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

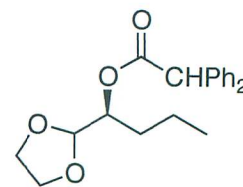
サンプルコメント:

シリーズ: 001-126

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



(S)-3a

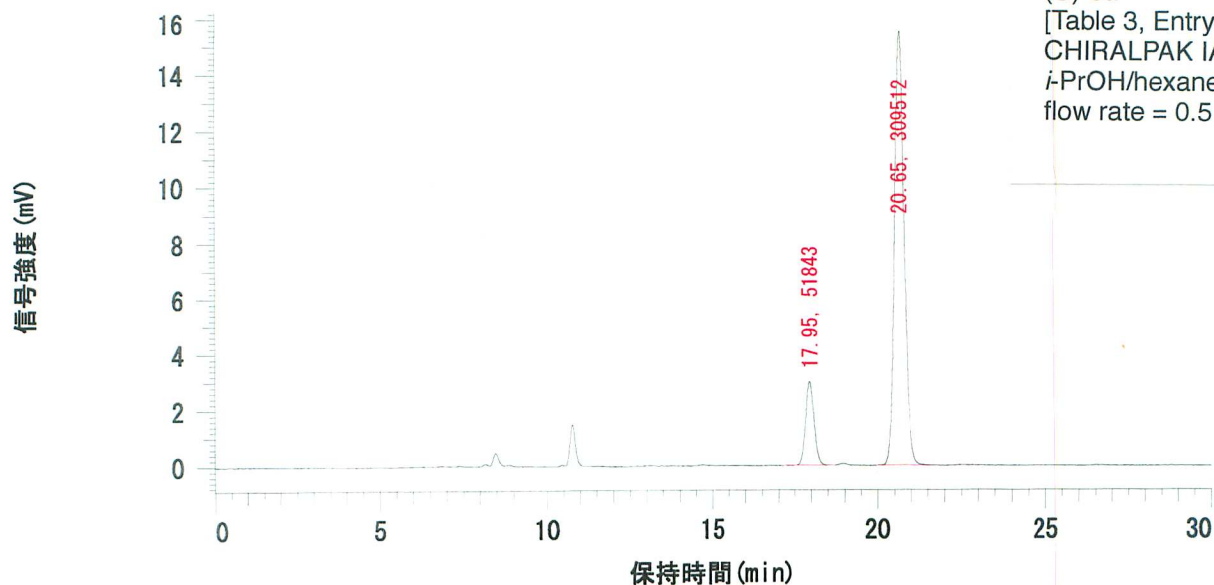
[Table 3, Entry 1, 71% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	17.95	51843	14.347	MC
2	20.65	309512	85.653	MC
		361355	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2015/01/16 18:02

作成日時: 2016/03/09 01:01

処理日時: 2016/03/09 01:01

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\Saito\DATA\001-125 ester\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-125 ester

アプリケーション(データ): Saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

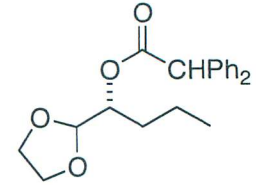
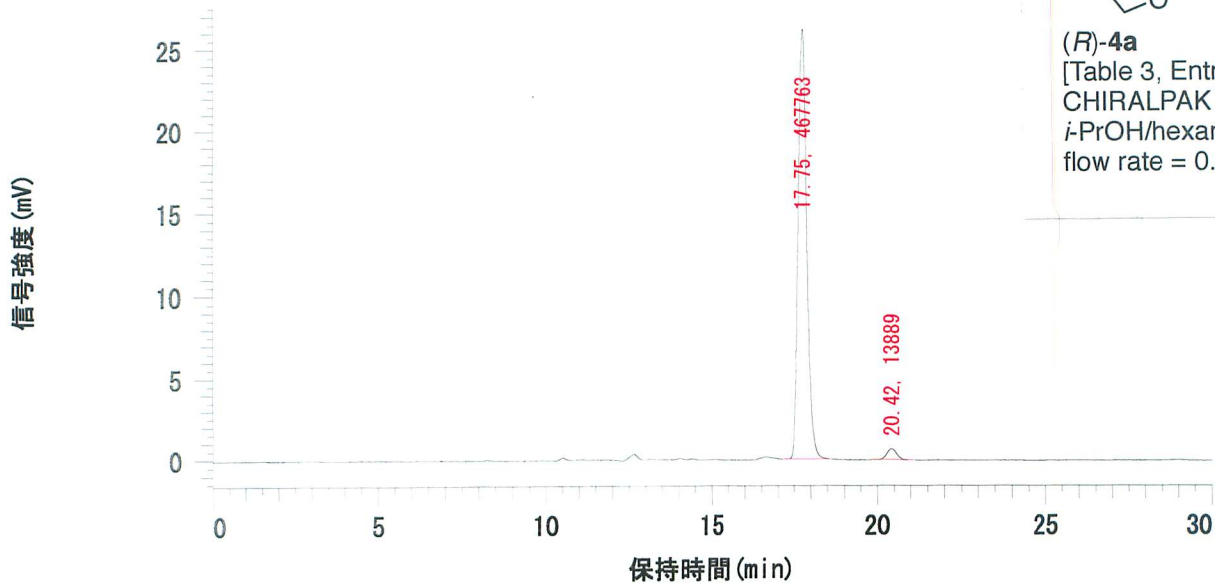
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



(R)-4a

[Table 3, Entry 1, 94% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: MeOH/EA

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	17.75	467763	97.116	MC
2	20.42	13889	2.884	MC
			481652	100.000

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2015/11/27 12:06

作成日時: 2015/11/27 17:25

処理日時: 2015/11/27 17:20

データパス名: C:\WIN32APP\¥D2000HSM_2¥saito¥DATA¥001-113 re¥

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): saito

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

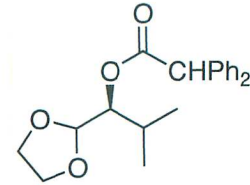
サンプルコメント:

シリーズ: 001-113 re

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

**(S)-3b**

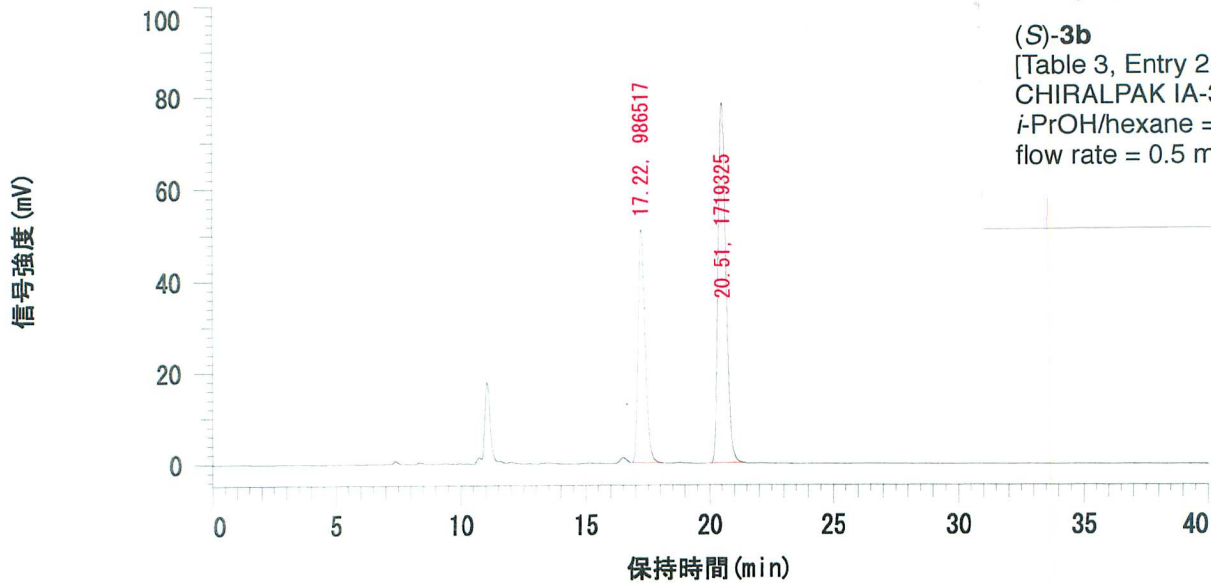
[Table 3, Entry 2, 27% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	17.22	986517	36.459	MC
2	20.51	1719325	63.541	MC
		2705842	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/11/11 18:48

作成日時: 2015/11/27 10:00

処理日時: 2014/11/11 19:24

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-102 ester\

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-102 ester

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

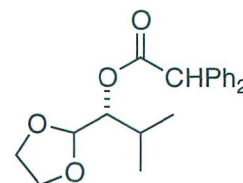
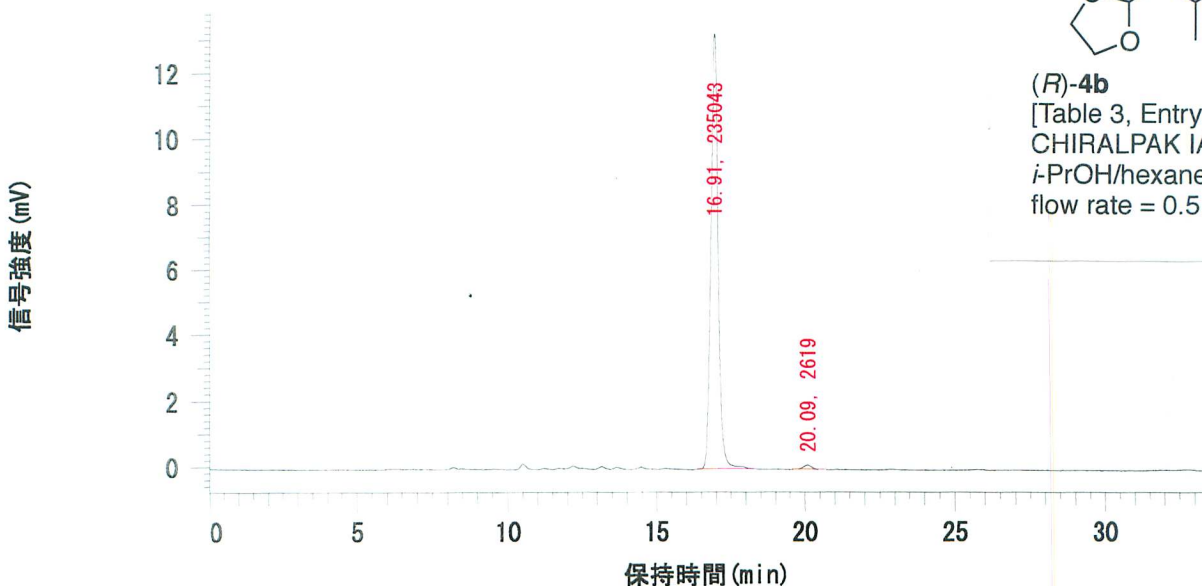
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



(R)-4b
[Table 3, Entry 2, 98% ee]
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	16.91	235043	98.898	MC
2	20.09	2619	1.102	MC
		237662	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/11/12 12:13

作成日時: 2015/11/27 10:04

処理日時: 2015/11/27 10:04

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-101 ester

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-101 ester

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

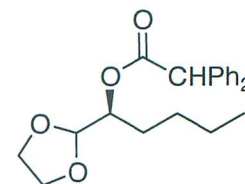
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-3c

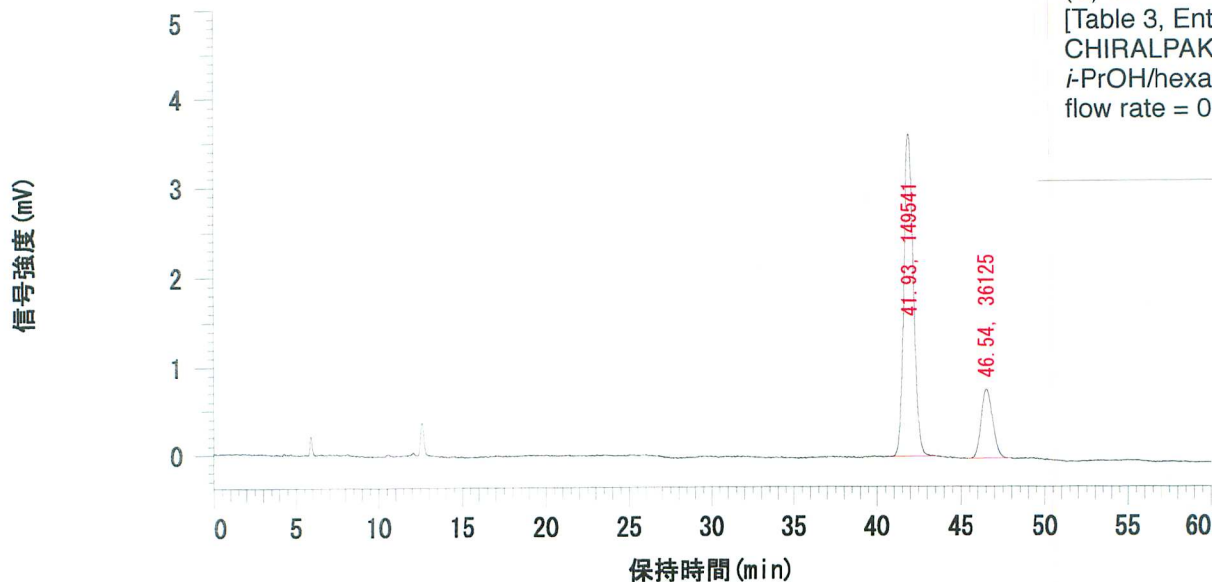
[Table 3, Entry 3, 61% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/99

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	41.93	149541	80.543	MC
2	46.54	36125	19.457	MC
		185666	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/11/12 14:01

作成日時: 2016/05/22 20:43

処理日時: 2016/05/22 20:42

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-100 ester'

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): saito

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

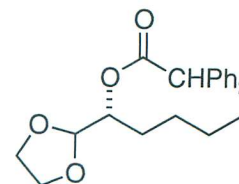
サンプルコメント:

シリーズ: 001-100 ester'

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

**(R)-4c**

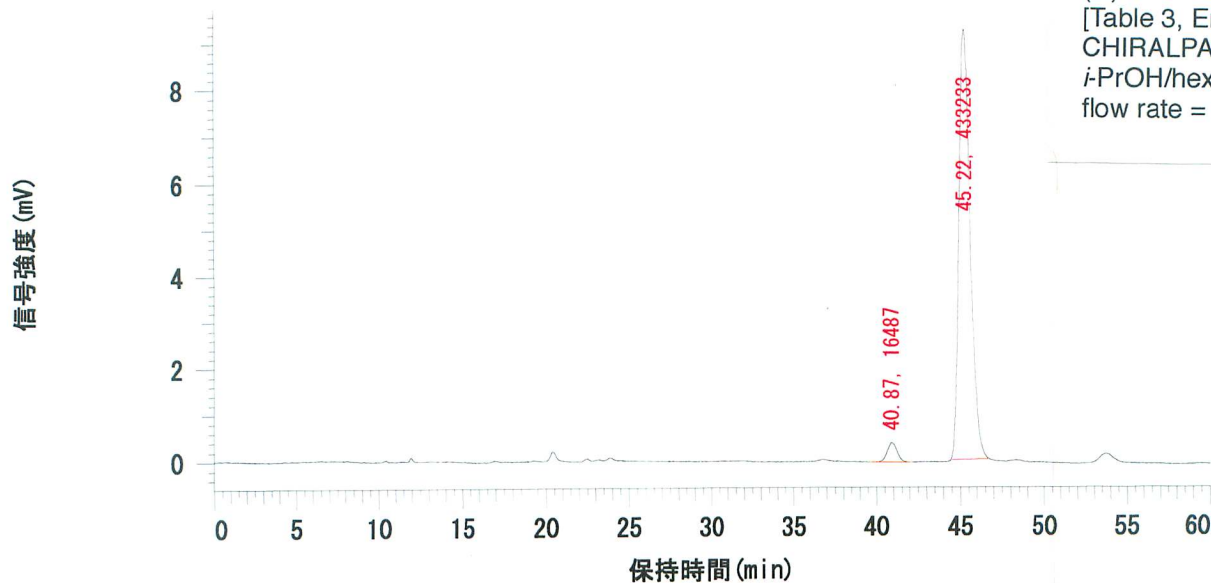
[Table 3, Entry 3, 93% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/99

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H₂O/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	40.87	16487	3.666	MC
2	45.22	433233	96.334	MC
		449720	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/10/07 18:55

作成日時: 2015/11/27 09:38

処理日時: 2015/11/27 09:37

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-76 alcohol

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): saito

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

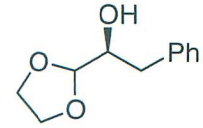
サンプルコメント:

シリーズ: 001-76 alcohol

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

**(S)-3d**

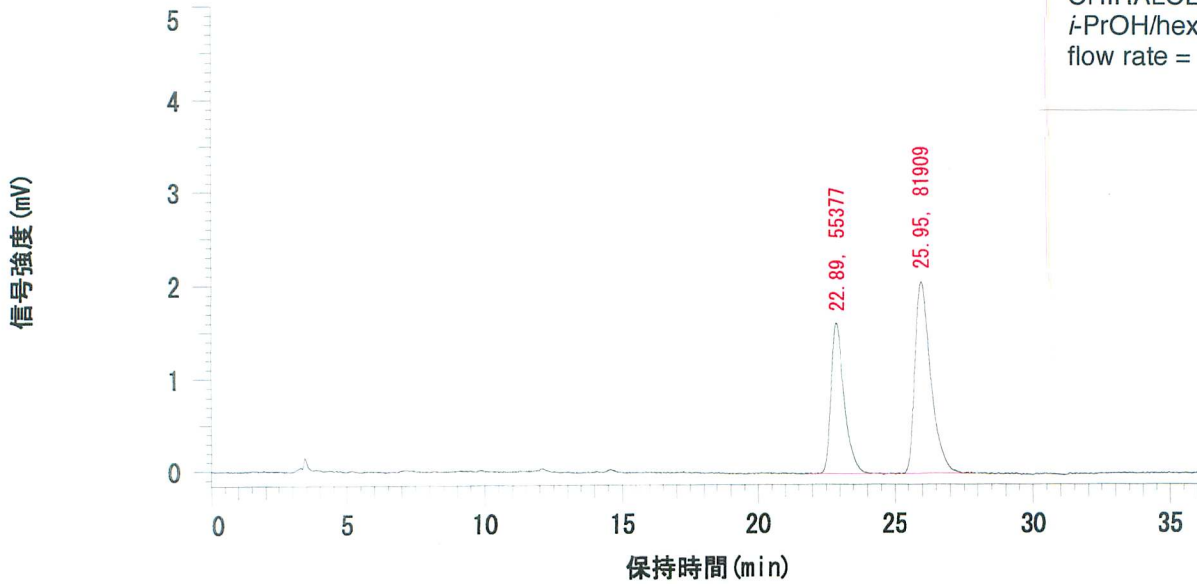
[Table 3, Entry 4, 19% ee]

CHIRALCEL OJ-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 1.0 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H/I/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	22.89	55377	40.337	MC
2	25.95	81909	59.663	MC
		137286	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/10/07 12:24

作成日時: 2015/11/27 09:35

処理日時: 2015/11/27 09:35

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-76 ester\

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-76 ester

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

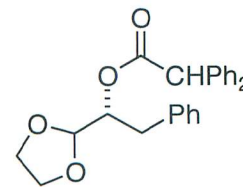
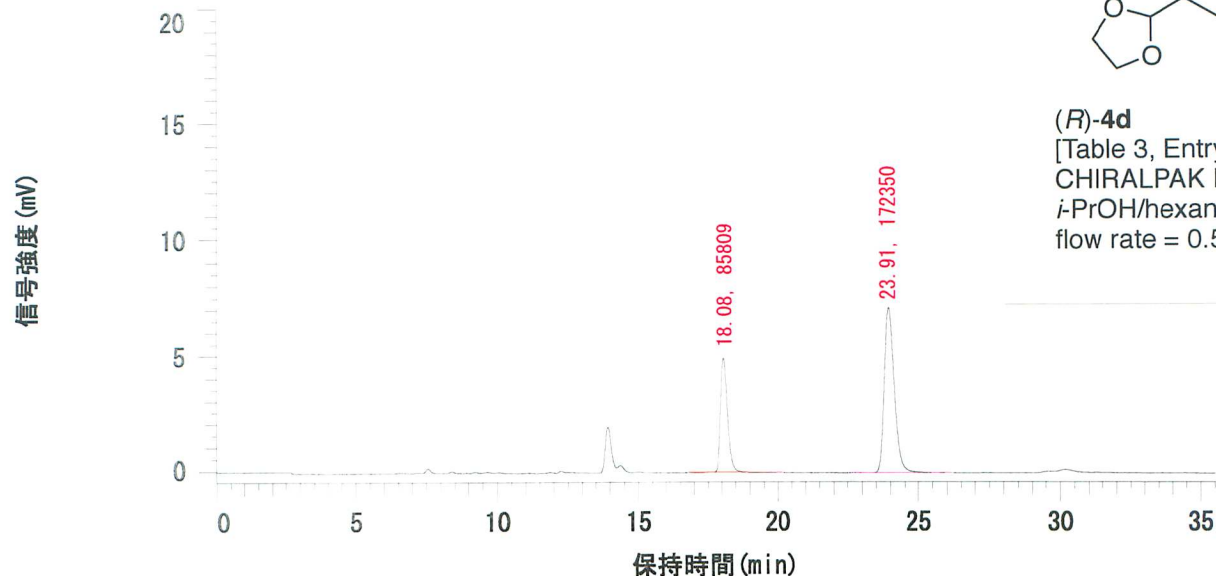
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

**(R)-4d**

[Table 3, Entry 4, 34% ee]

CHIRALPAK IB-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

メソッド作成者: Kitajima

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/I/MEA=75/25/0.1

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	18.08	85809	33.239	MC
2	23.91	172350	66.761	MC
		258159	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/10/25 10:53

作成日時: 2015/11/27 10:07

処理日時: 2015/11/27 10:07

データパス名: C:\WIN32APP\DATA\2000HSM\saito\DATA\001-89 alcohol

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-89 alcohol

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

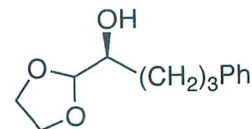
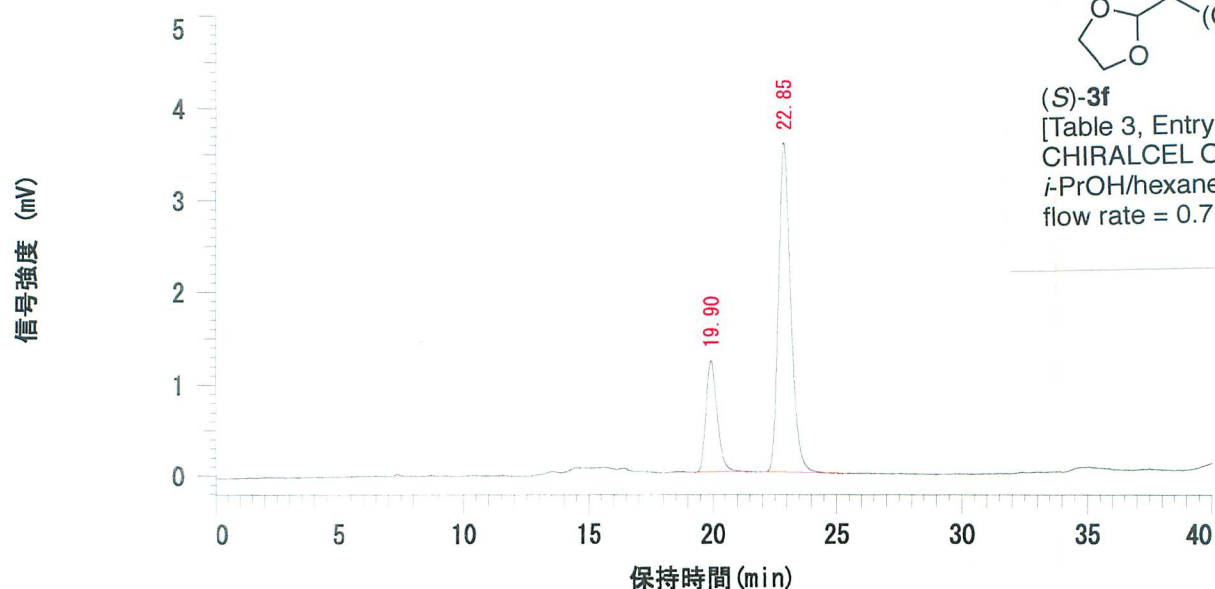
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm



(S)-3f

[Table 3, Entry 6, 54% ee]

CHIRALCEL OD-H

i-PrOH/hexane = 5/95

flow rate = 0.75 mL/min

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	19.90	37968	22.895		MC
2	22.85	127865	77.105		MC
		165833	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/10/24 14:23

作成日時: 2015/11/27 09:56

処理日時: 2015/11/27 09:56

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-89 ester¥

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-89 ester

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

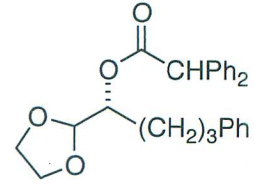
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 µl

サンプルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

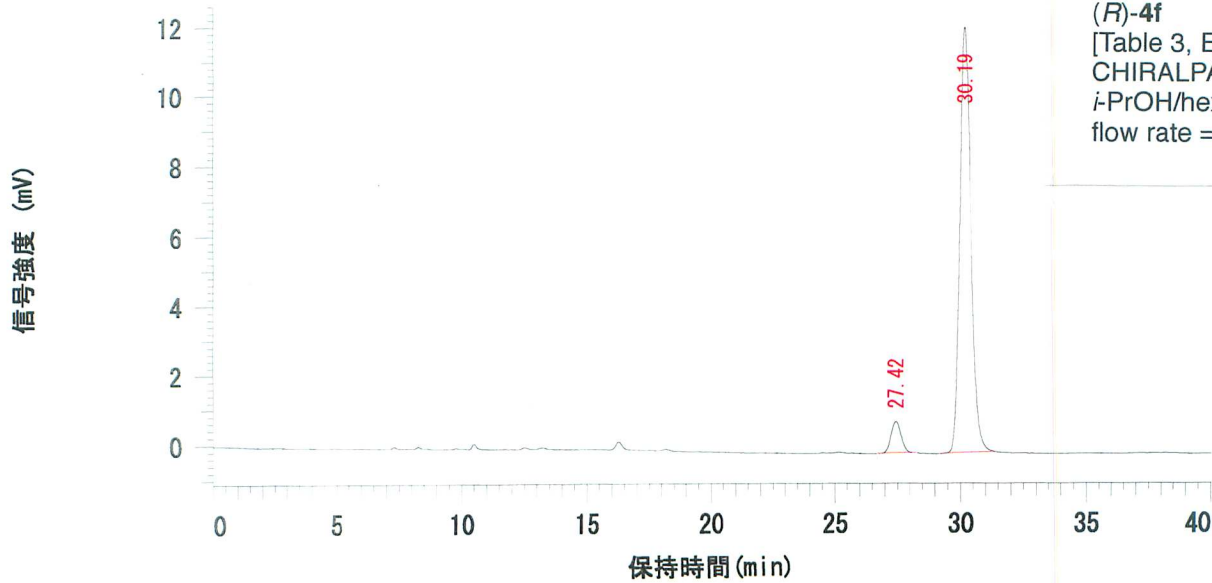
*(R)*-4f

[Table 3, Entry 6, 88% ee]

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	27.42	24646	6.167	0.9997	MC
2	30.19	375010	93.833	0.9977	MC
		399656	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/10/19 17:11

作成日時: 2016/03/08 22:55

処理日時: 2016/03/08 22:55

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-113

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-113

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

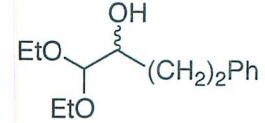
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

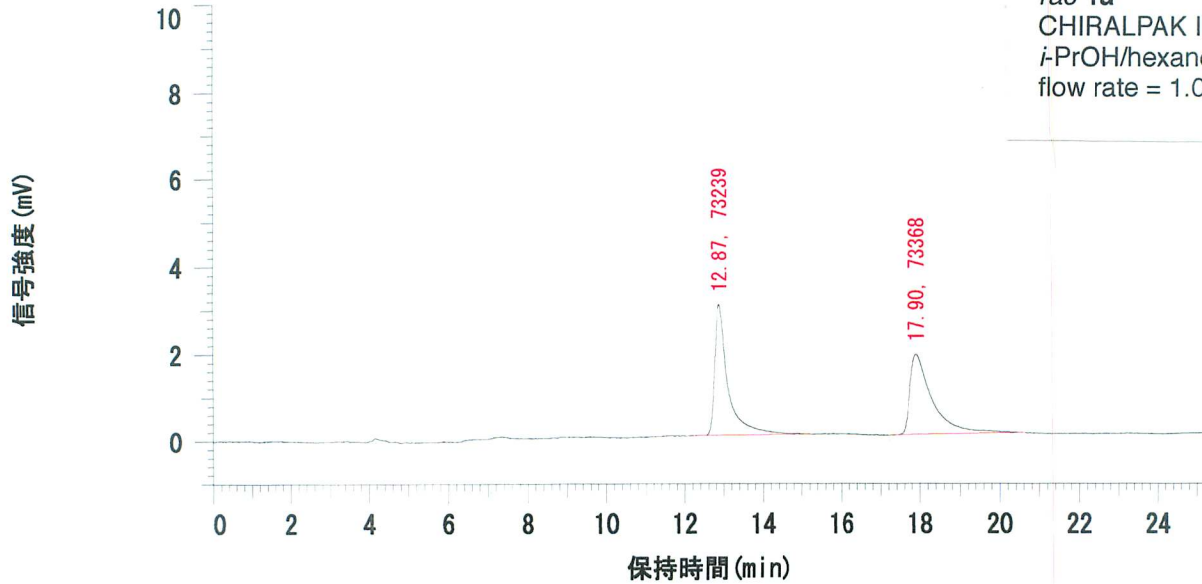
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1a
CHIRALPAK ID
i-PrOH/hexane = 1/99
flow rate = 1.0 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: ID

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液 D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	12.87	73239	49.956	MC
2	17.90	73368	50.044	MC
		146607	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/07/02 20:03

作成日時: 2016/03/08 23:03

処理日時: 2016/03/08 23:02

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-053 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シーナス: 1-053 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

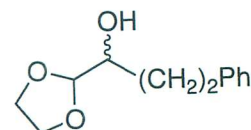
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

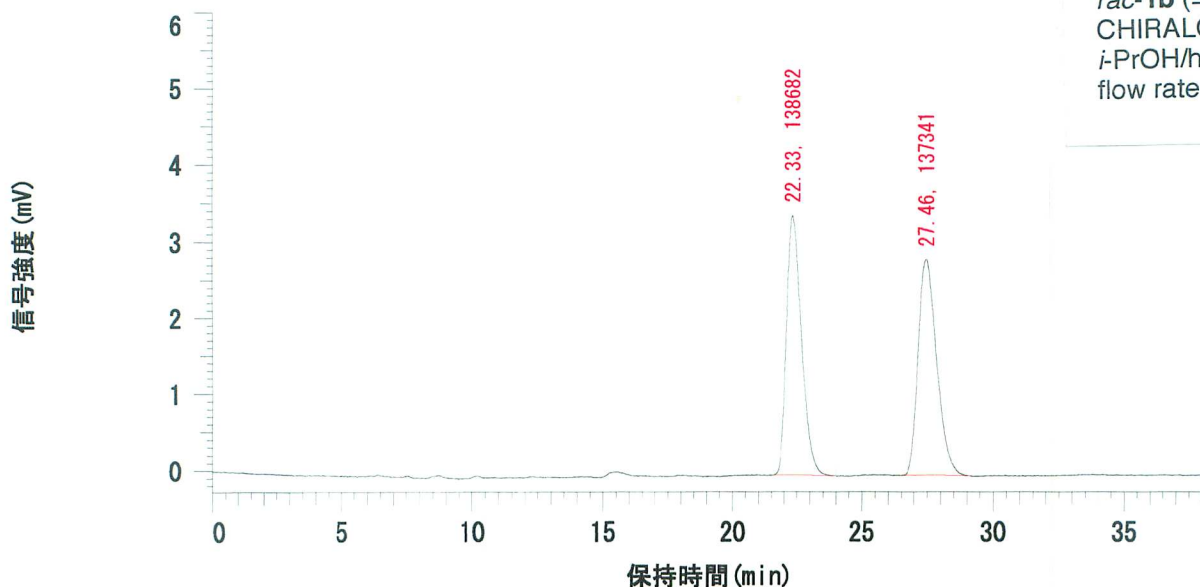
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-**1b** (= **3e**)
 CHIRALCEL OD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
 flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 C: Hex/Et/DEA=50/50/0.1

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	22.33	138682	50.243	MC
2	27.46	137341	49.757	MC
			100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/13 17:47

作成日時: 2016/03/08 23:20

処理日時: 2016/03/08 23:20

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-154 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シーナス: 1-154 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイル: 1

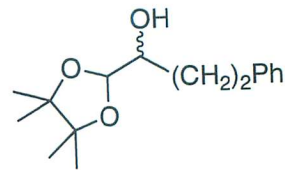
サンプル名: 未知試料001

バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

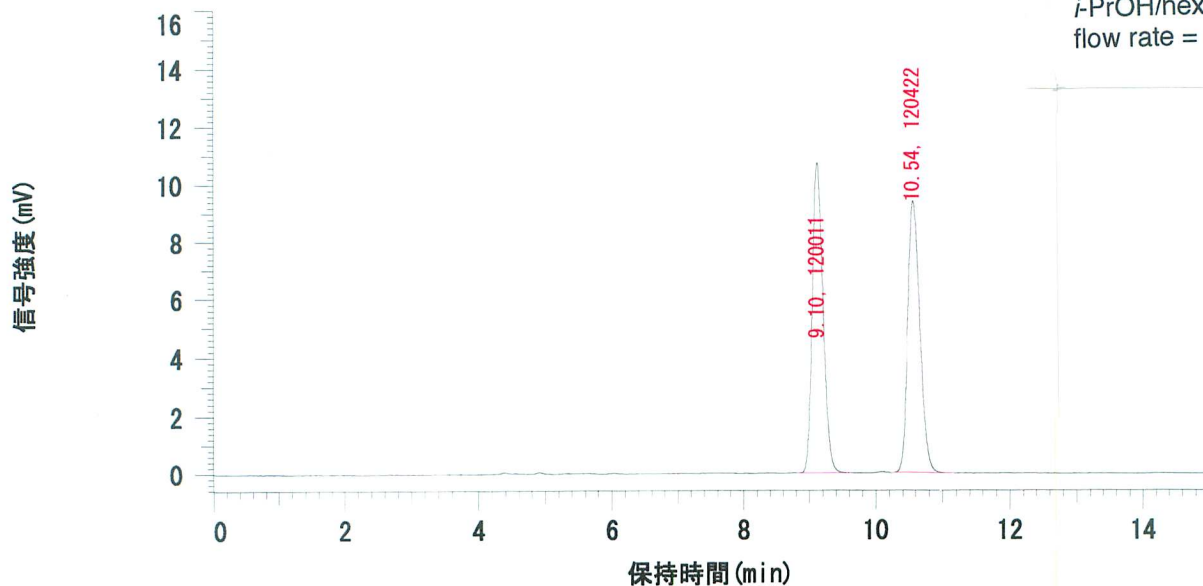
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1c
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	9.10	120011	49.915	MC
2	10.54	120422	50.085	MC
		240433	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/09 11:31

作成日時: 2016/03/08 23:24

処理日時: 2016/03/08 23:24

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-193 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-193 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

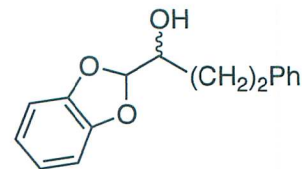
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

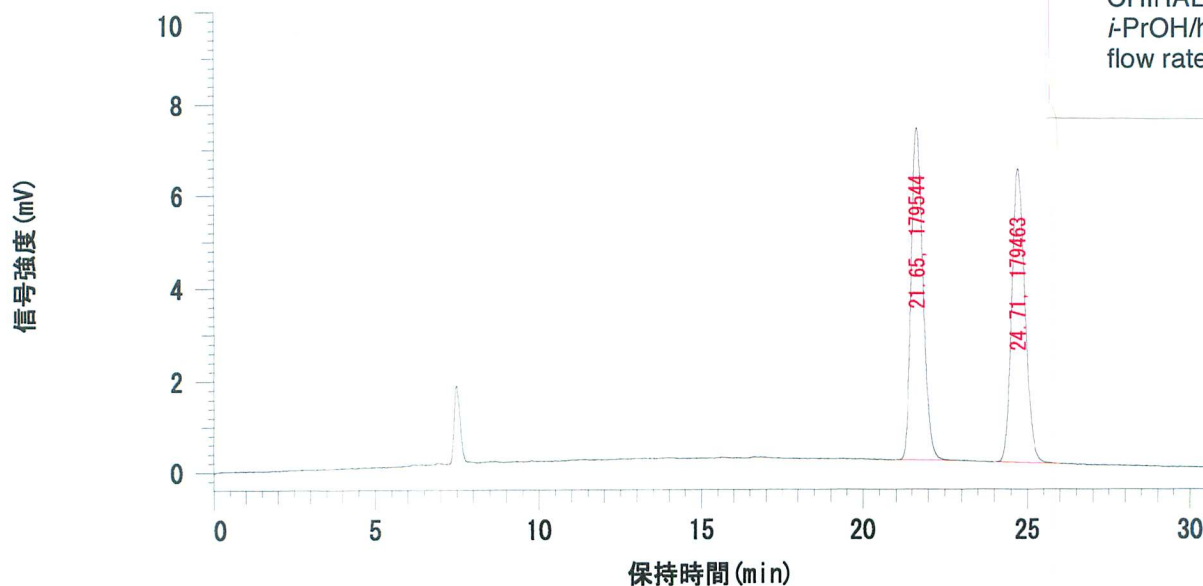
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1d
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	21.65	179544	50.011	MC
2	24.71	179463	49.989	MC
		359007	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/13 09:31

作成日時: 2016/03/08 23:16

処理日時: 2016/03/08 23:16

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-146 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-146 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

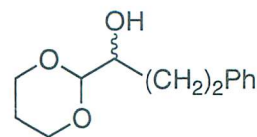
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

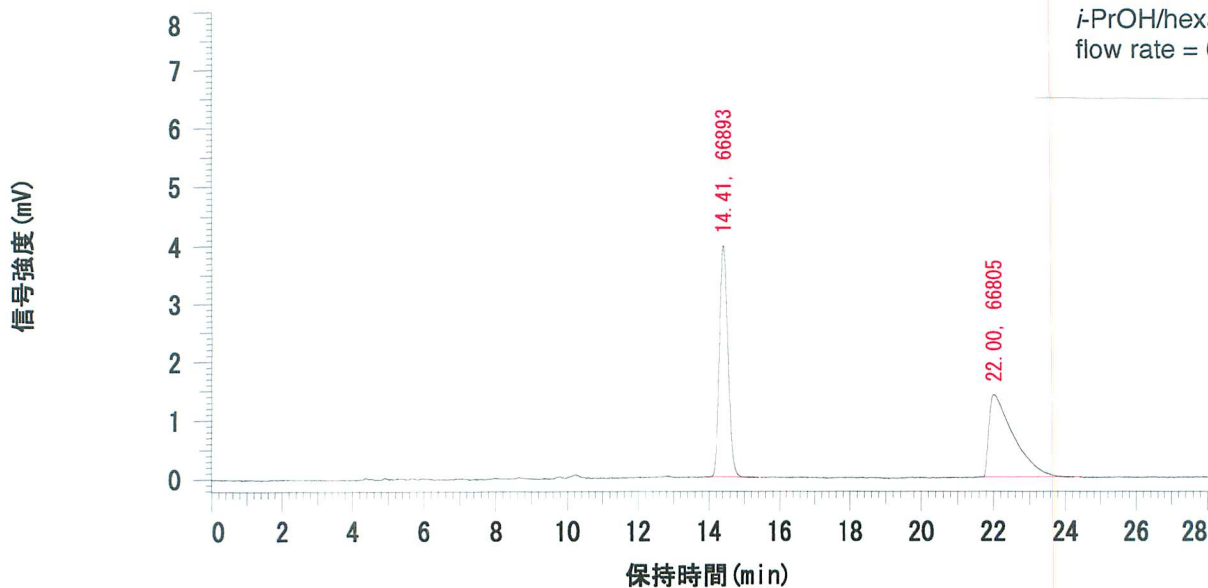
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1e
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液 D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	14.41	66893	50.033	MC
2	22.00	66805	49.967	MC
		133698	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 15:58

作成日時: 2016/03/08 23:31

処理日時: 2016/03/08 23:31

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-011 50\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-011 50

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

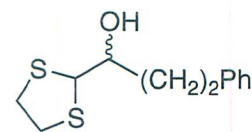
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

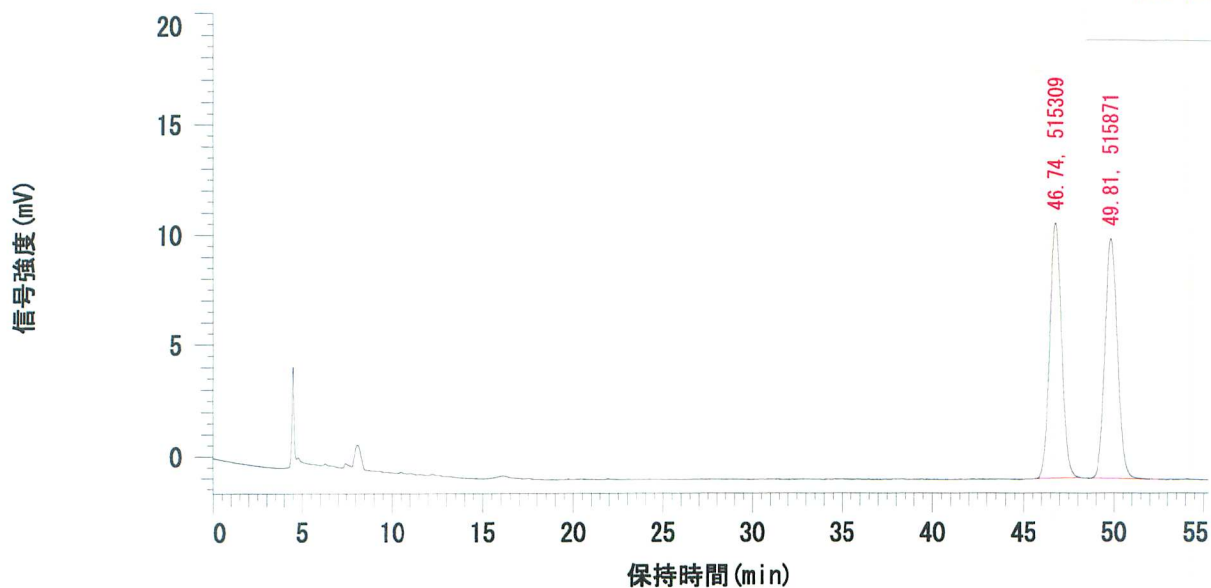
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1f
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A(メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	46.74	515309	49.973	MC
2	49.81	515871	50.027	MC
		1031180	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/21 13:42

作成日時: 2016/03/08 23:29

処理日時: 2016/03/08 23:29

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-005 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-005 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

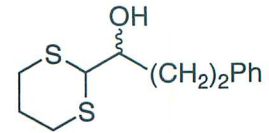
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

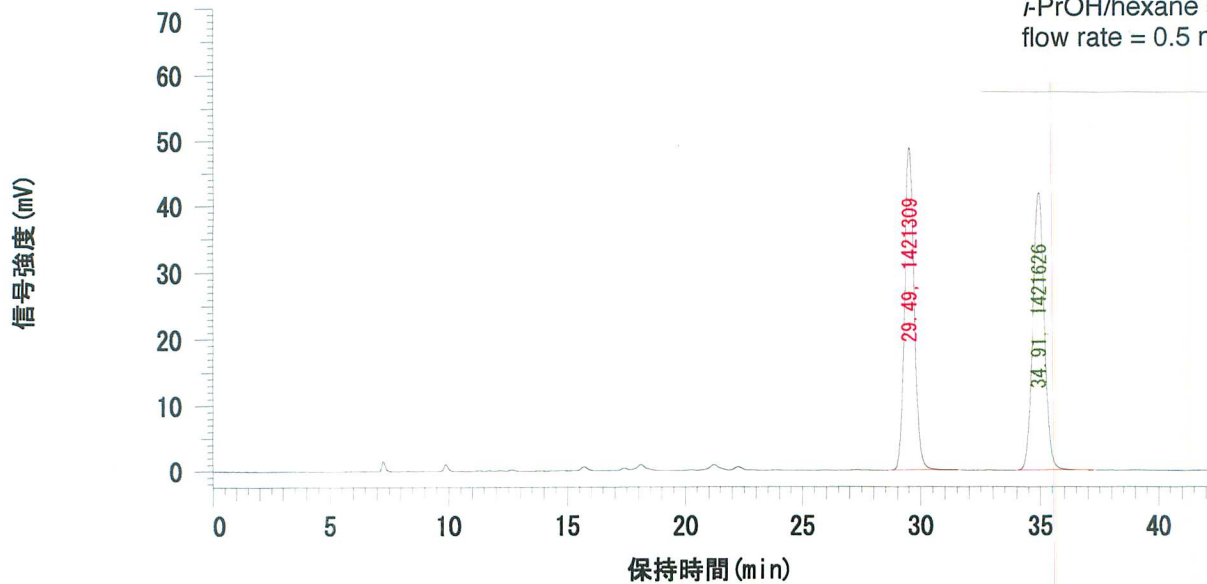
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-1g
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液 D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	29.49	1421309	49.994	MC
2	34.91	1421626	50.006	BB
		2842935	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/10/03 18:35

作成日時: 2016/03/18 08:19

処理日時: 2016/03/18 08:19

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-62 OJ-H 1.0 pure

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-62 OJ-H 1.0 pure

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

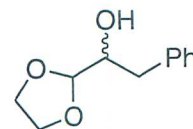
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

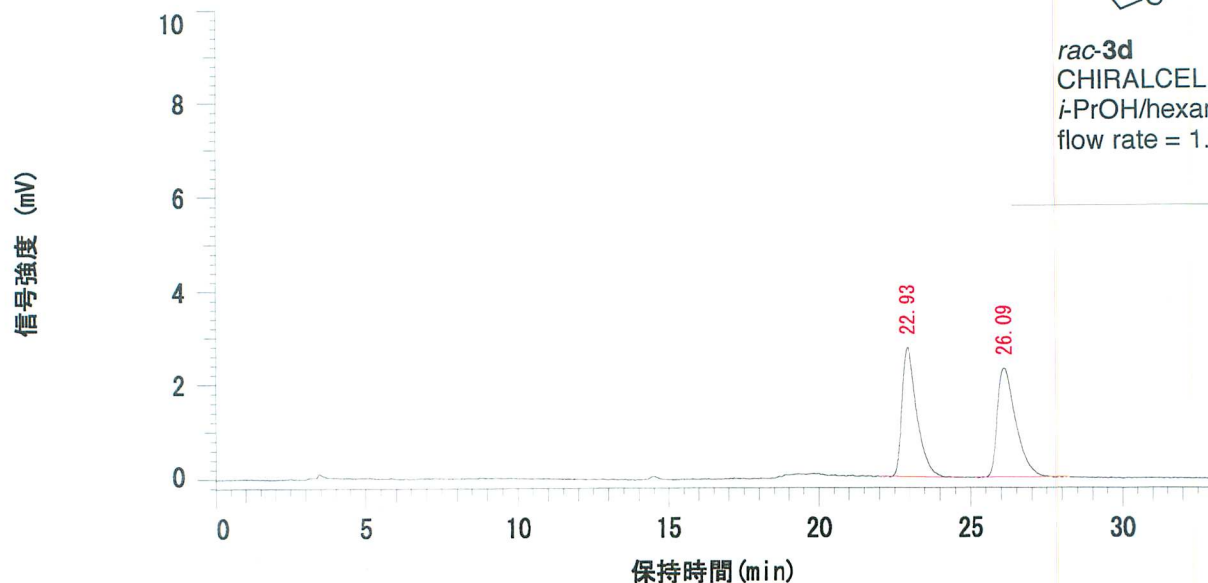
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm



rac-3d
CHIRALCEL OJ-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 1.0 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプ A 溶離液 D:

分析ファイルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	22.93	96016	50.164		MC
2	26.09	95387	49.836		MC
		191403	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/10/04 15:10

作成日時: 2016/03/18 08:13

処理日時: 2016/03/18 08:13

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-72AD-H 0.75

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-72AD-H 0.75

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

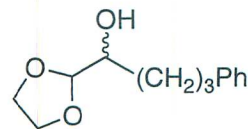
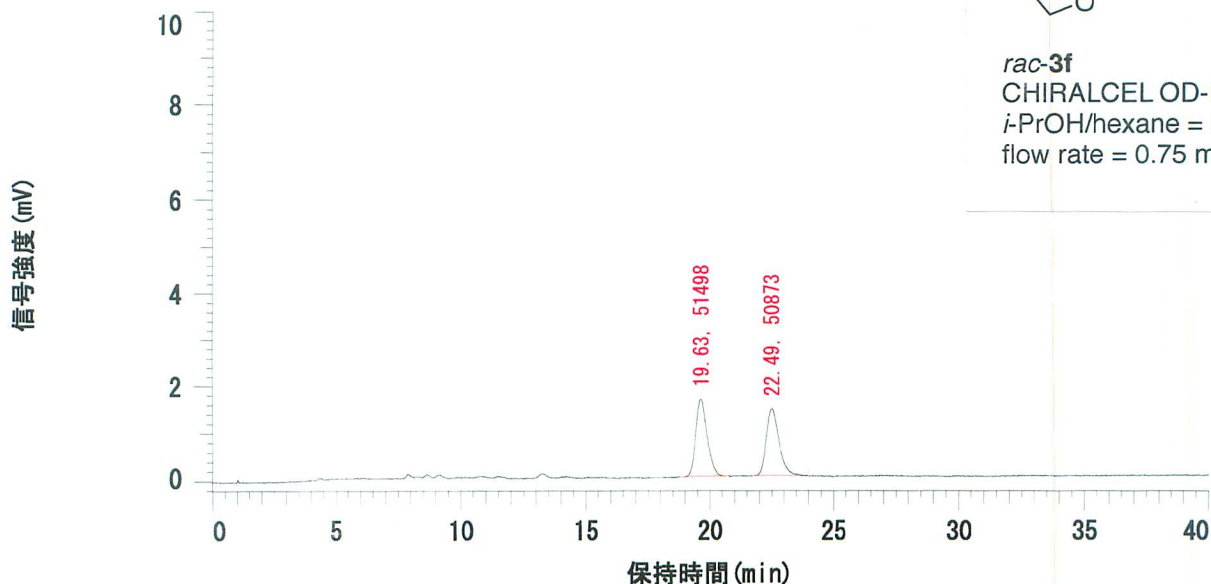
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



rac-3f
 CHIRALCEL OD-H
i-PrOH/hexane = 5/95
 flow rate = 0.75 mL/min

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/I/MEA=75/25/0.1

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	19.63	51498	50.305	MC
2	22.49	50873	49.695	MC
		102371	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/10/20 10:02

作成日時: 2016/03/08 22:57

処理日時: 2012/10/20 10:26

データベース名: C:\WIN32APP\DATA\2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\0007

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 0007

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

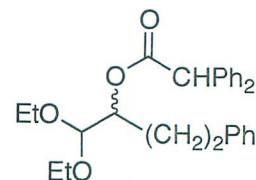
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

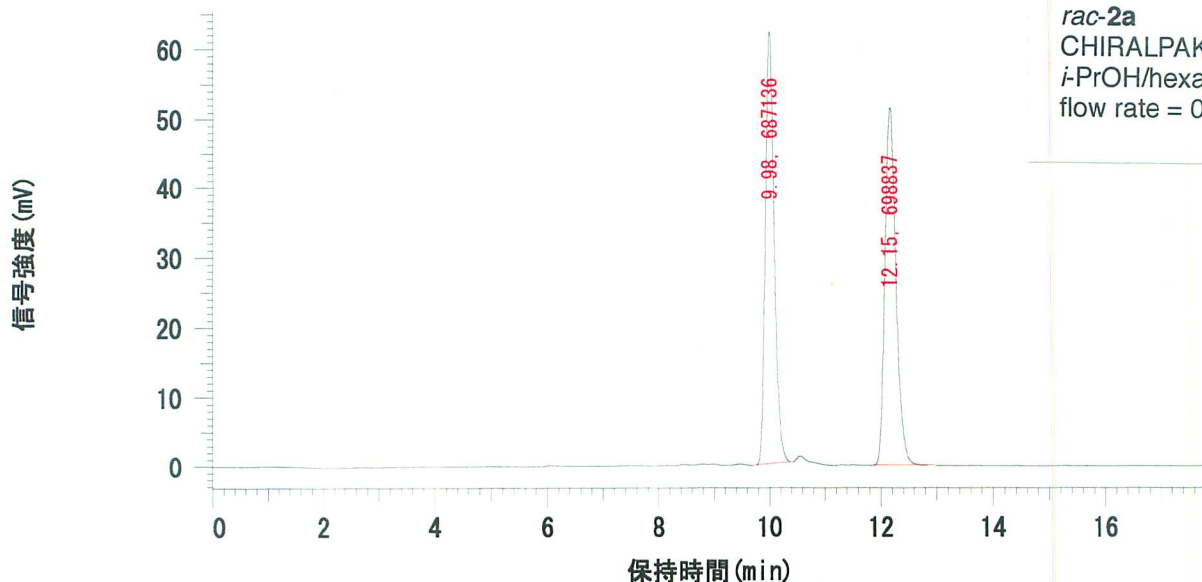
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-2a
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液 A: Hexane

ポンプ A 溶離液 C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液 B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液 D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	9.98	687136	49.578	MC
2	12.15	698837	50.422	MC
		1385973	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/05/13 17:25

作成日時: 2016/03/09 00:09

処理日時: 2016/03/09 00:09

データパス名: C:\¥WIN32APP¥D2000HSM¥saito¥DATA¥17 IA-3'¥

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 17 IA-3'

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

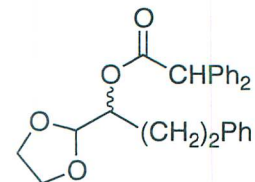
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

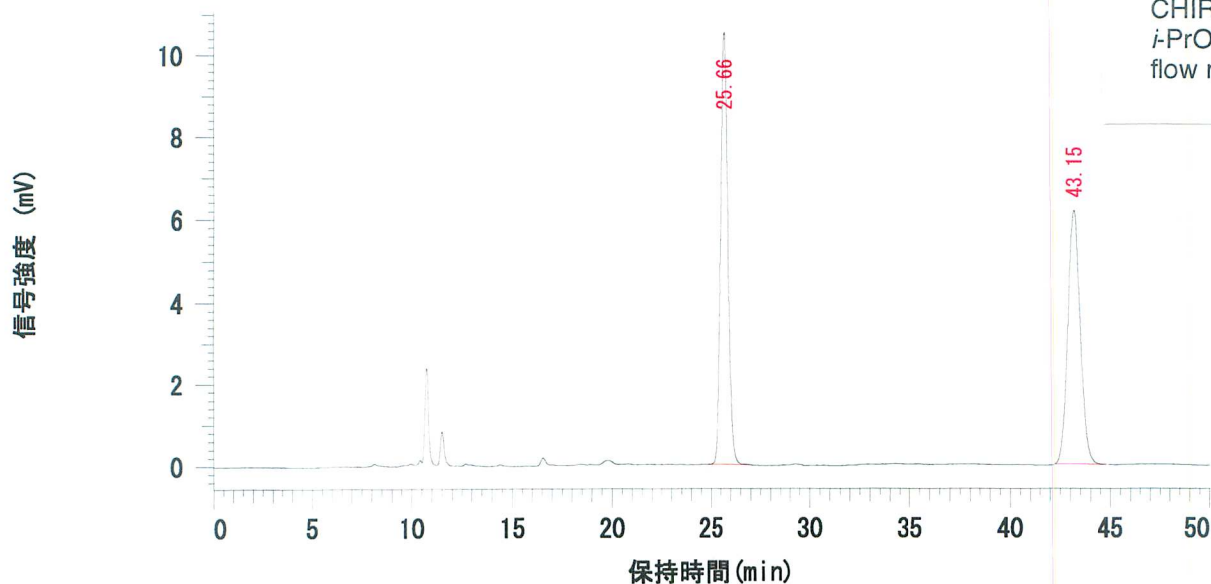
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-**2b** (= **4e**)
 CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
 flow rate = 0.5 mL/min

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	25.66	261997	49.926	1.0000	MC
2	43.15	262769	50.074		MC
		524766	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/15 15:16

作成日時: 2016/03/08 23:18

処理日時: 2016/03/08 23:18

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-151\

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-151

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

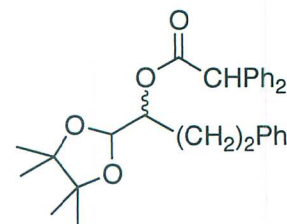
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

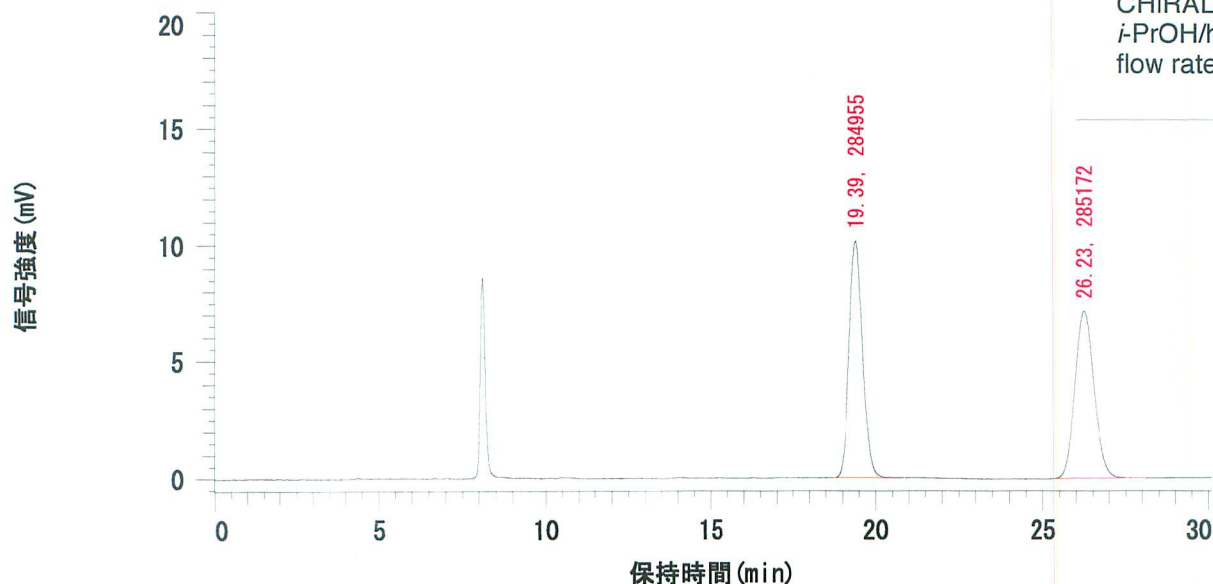
注入量: 10.0 μ l

サンプルコメント:



rac-2c
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

レポート作成者:

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	19.39	284955	49.981	MC
2	26.23	285172	50.019	MC
		570127	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/12/21 12:42

作成日時: 2016/03/08 23:22

処理日時: 2016/03/08 23:22

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-168 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シーす: 1-168 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイル: 1

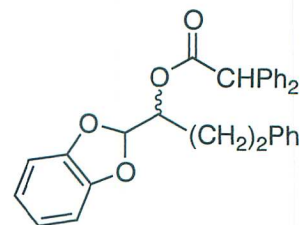
サンプル名: 未知試料001

バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

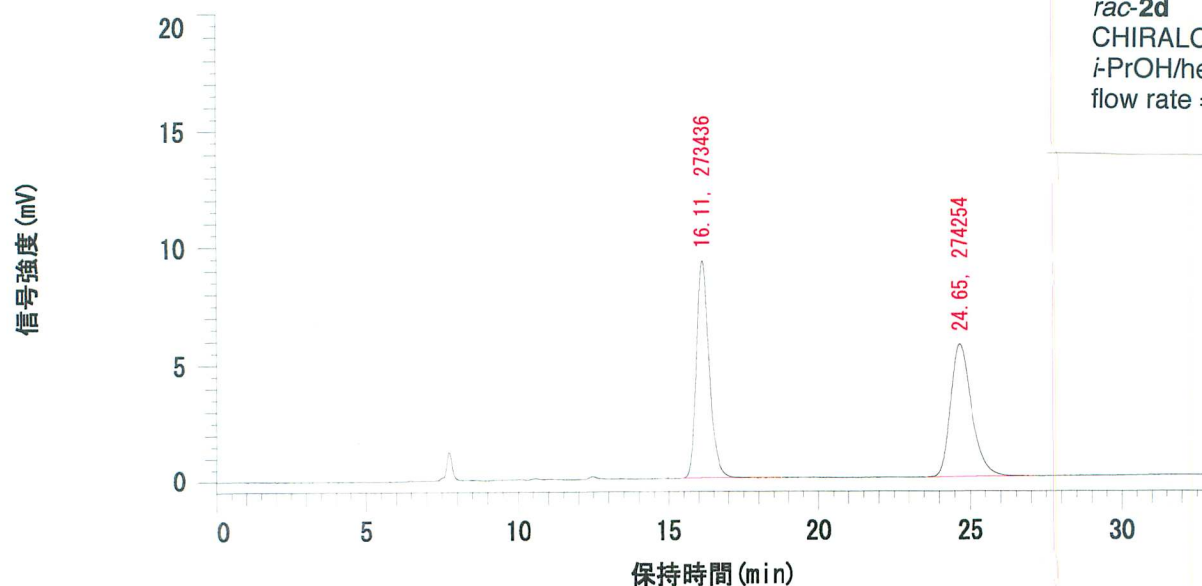
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-2d
CHIRALCEL OD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: AD-H

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液C: Hex/*i*PrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	16.11	273436	49.925	MC
2	24.65	274254	50.075	MC
547690			100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2012/11/13 12:55

作成日時: 2016/03/08 23:13

処理日時: 2016/03/08 23:13

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\1-131 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 1-131 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

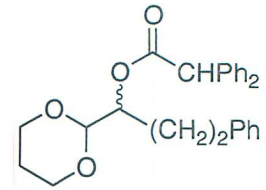
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



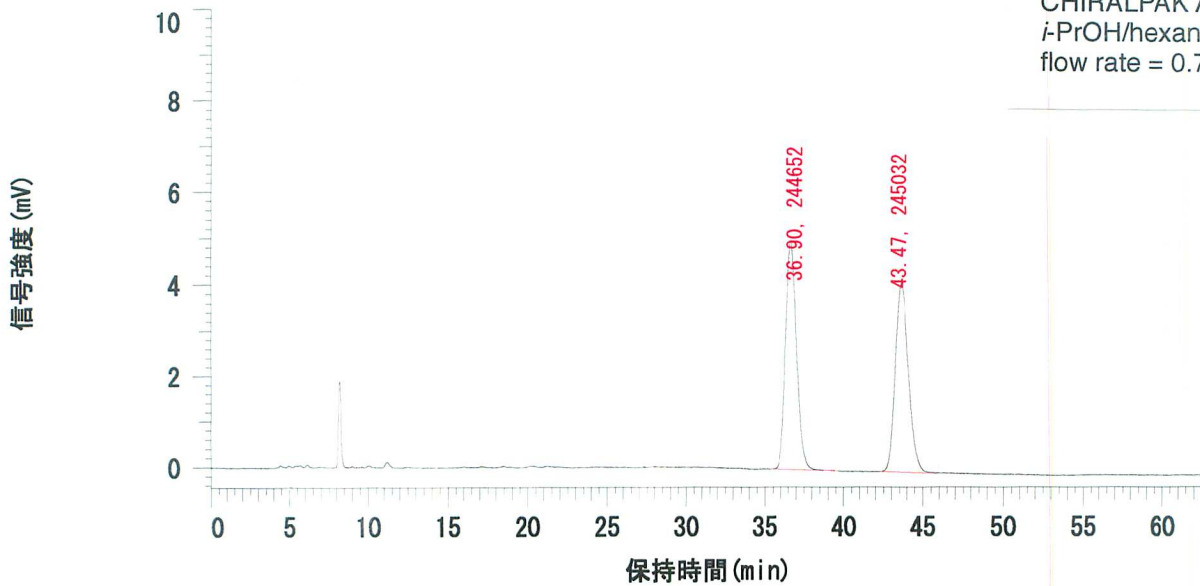
rac-2e

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.7 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプ A 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	36.90	244652	49.961	MC
2	43.47	245032	50.039	MC
		489684	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/25 10:38

作成日時: 2016/03/08 23:35

処理日時: 2016/03/08 23:35

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\T_Nakahara\DATA\2-013 r

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-013 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

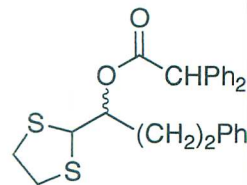
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

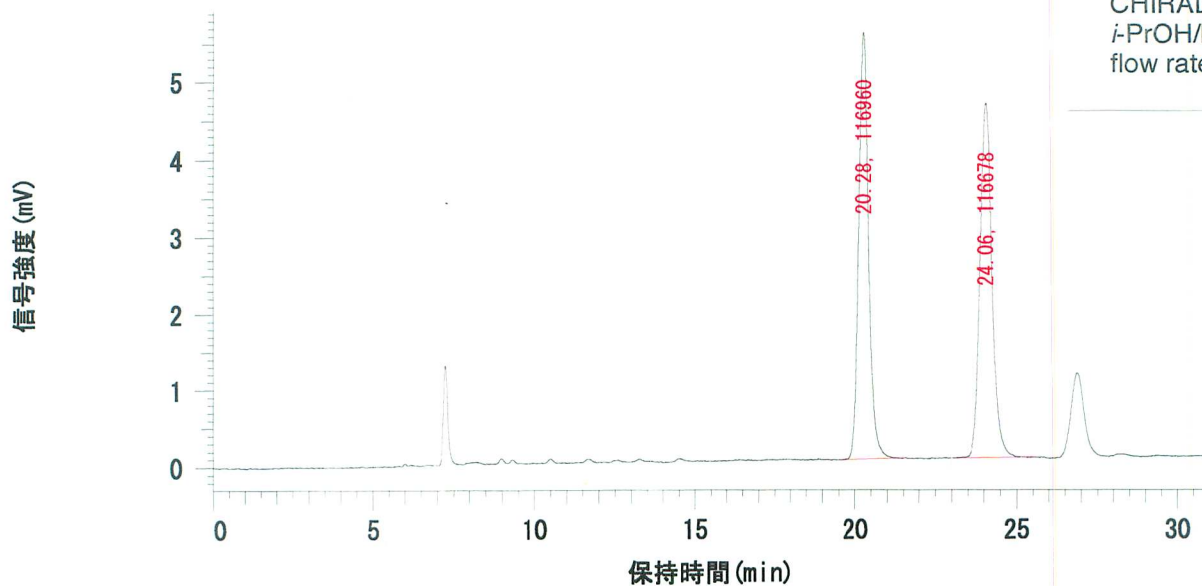
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-2f
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

レポート作成者:

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル: 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	20.28	116960	50.060	MC
2	24.06	116678	49.940	MC
			233638	100.000

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/21 09:35

作成日時: 2016/03/08 23:27

処理日時: 2016/03/08 23:27

データパス名: C:\¥WIN32APP¥D2000HSM_2¥T_Nakahara¥DATA¥2-004 r¥

データ処理用分析ファイル: default

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 2-004 r

アプリケーション(データ): T_Nakahara

バイアル: 1

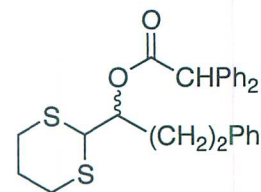
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

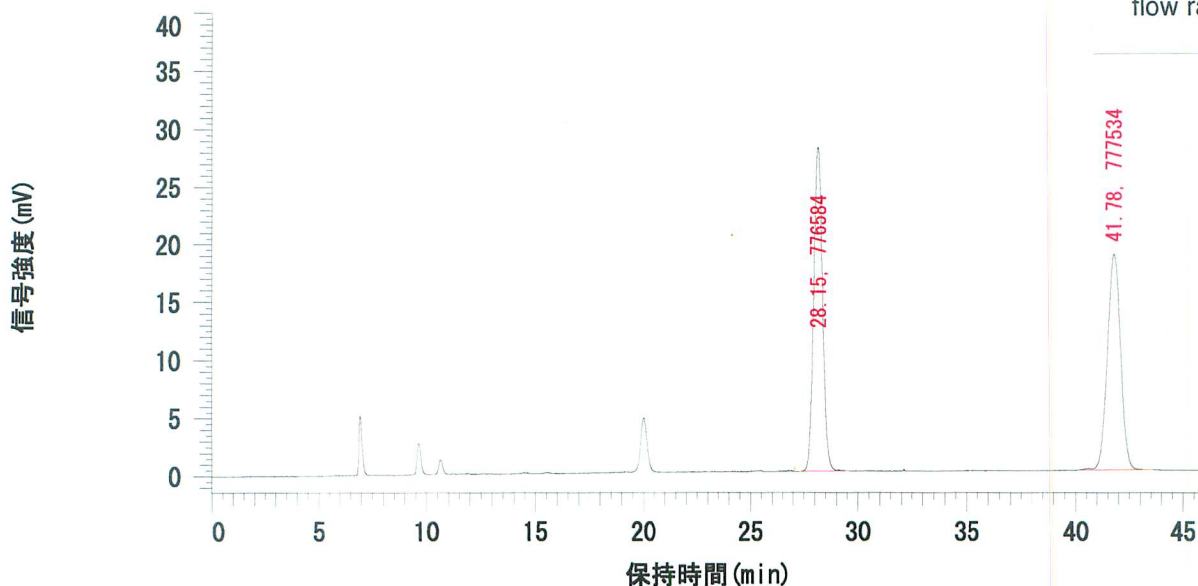
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-2g
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: default

カラム名: IA-3

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

ポンプ A 溶離液C: Hex/iPrOH/DEA=9/1/0.01

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	28.15	776584	49.969	MC
2	41.78	777534	50.031	MC
			100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2015/01/10 16:05

作成日時: 2016/03/09 00:59

処理日時: 2016/03/09 00:59

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-120 IA-

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-120 IA-

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

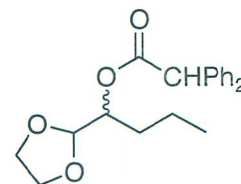
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

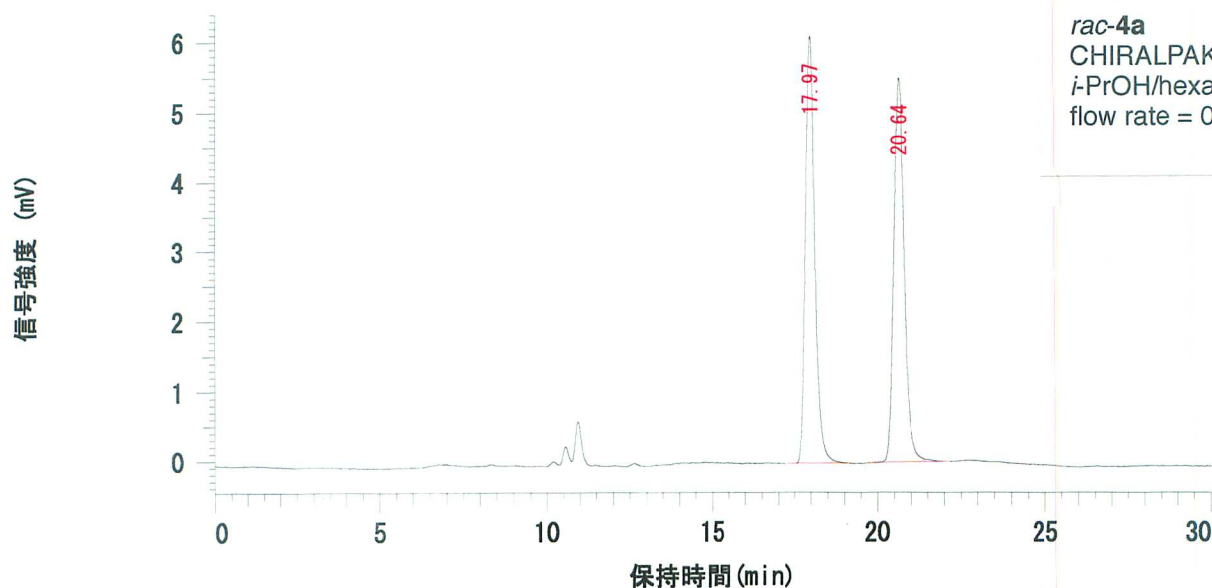
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

加マトタイプ: 固定波長加マト, 254 nm



rac-4a
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

加マトタイプ: 固定波長加マト, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	17.97	118807	49.716		MC
2	20.64	120165	50.284		MC
		238972	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システムマネージャレポート

分析日時: 2014/11/05 16:47

作成日時: 2016/03/08 23:52

処理日時: 2016/03/08 23:52

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\saito\DATA\001-97 IA-3 0.5\

データ処理用分析ファイル: For HPLC D

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: 001-97 IA-3 0.5

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

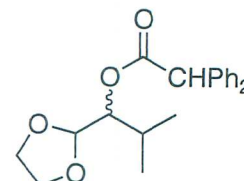
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



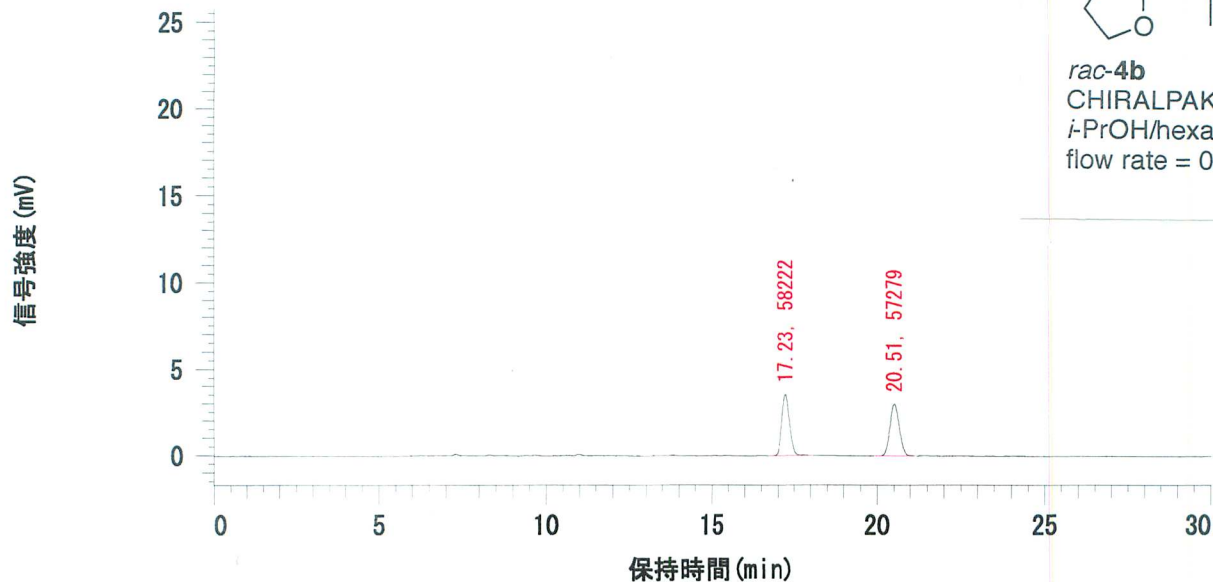
rac-4b

CHIRALPAK IA-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1



データ処理用分析ファイル: For HPLC D

カラム名: IA-3

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液C: H/1/MEA=75/25/0.1

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: Kitajima

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

クロマトタイプ: HPLC チャンネル : 1

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	BC
1	17.23	58222	50.408	MC
2	20.51	57279	49.592	MC
		115501	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2016/06/06 16:57

作成日時: 2016/06/06 18:23

処理日時: 2016/06/06 18:22

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-73 IA3 0.5 99.1

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-73 IA3 0.5 99.1

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

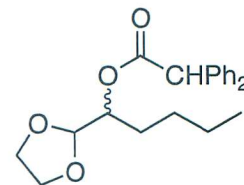
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

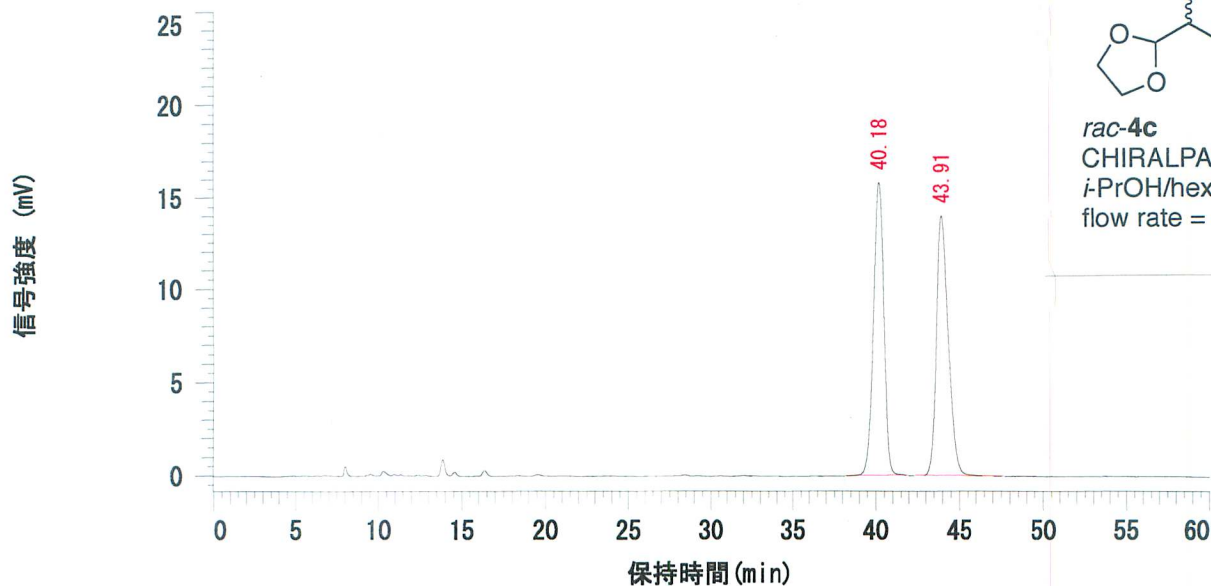
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検体タイプ: 固定波長検体, 254 nm



rac-4c
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/99
flow rate = 0.5 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検体タイプ: 固定波長検体, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	40.18	670793	50.063		MC
2	43.91	669098	49.937		MC
		1339891	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/10/01 14:21

作成日時: 2016/03/09 00:50

処理日時: 2016/03/09 00:50

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-68 IB-3 0.5

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-68 IB-3 0.5

アプリケーション(データ): saito

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

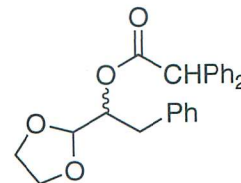
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

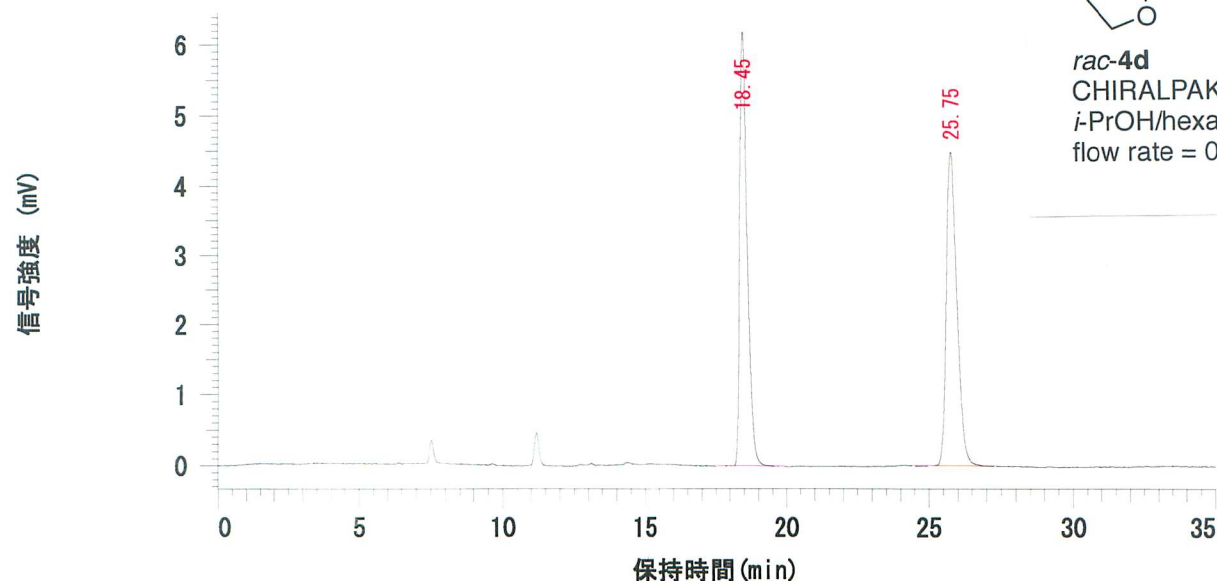


rac-4d

CHIRALPAK IB-3

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	18.45	111133	49.965		MC
2	25.75	111287	50.035		MC
		222420	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2014/10/06 18:58

作成日時: 2016/03/09 00:52

処理日時: 2016/03/09 00:52

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\saito\DATA\001-77 IA-3 0.5\

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 001-77 IA-3 0.5

アプリケーション(データ): saito

バイル: 1

サンプル名: 未知試料001

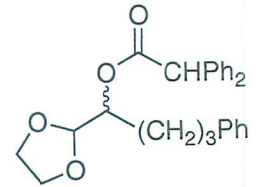
バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

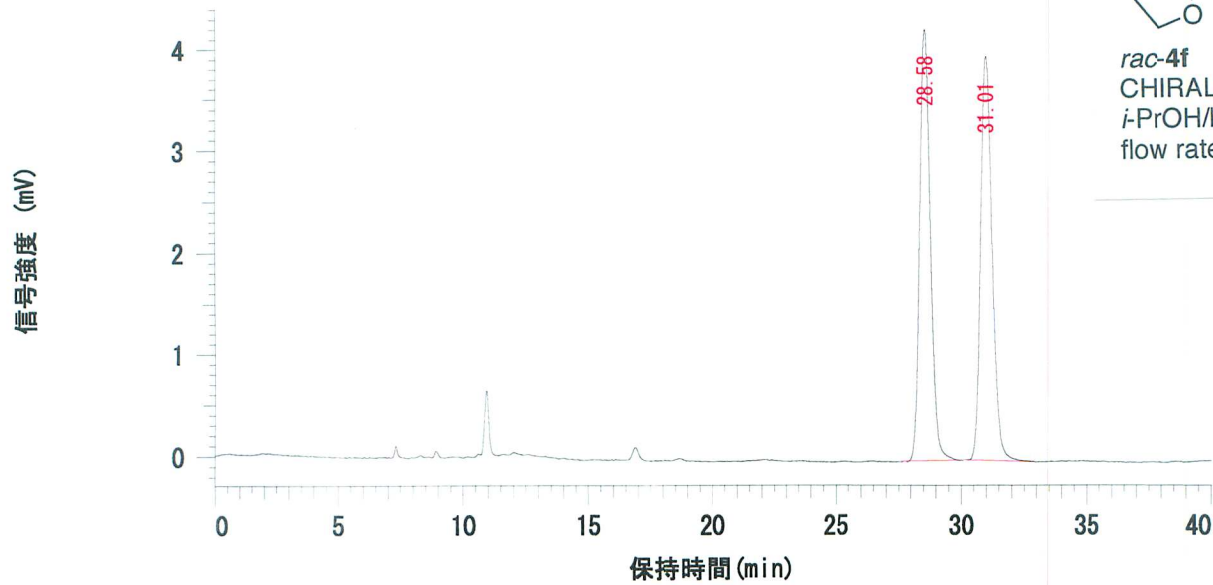
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm



rac-4f
CHIRALPAK IA-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC-3

レポート作成者: futami

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液C: H/Et/DEA=90/10/0.2

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	28.58	122778	49.833		MC
2	31.01	123601	50.167		MC
		246379	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0