

Kinetic Resolution of Racemic 2-Hydroxy- γ -butyrolactones by Asymmetric Esterification Using Diphenylacetic Acid with Pivalic Anhydride and a Chiral Acyl-Transfer Catalyst

Kenya Nakata,[†] Kouya Gotoh,[‡] Keisuke Ono,[‡] Kengo Futami,[‡] and Isamu Shiina*[‡]

[†] Department of Chemistry, Graduate School of Science and Engineering, Shimane University, 1060 Nishikawatsu-cho, Matsue, Shimane 690-8504, Japan

[‡] Department of Applied Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science, 1-3 Kagurazaka, Shinjuku-ku, Tokyo 162-8601, Japan

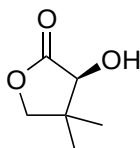
Supporting Information

S1	Table of Contents
S2	General Information
S2	Typical Procedure for Kinetic Resolution of Racemic 2-Hydroxy- γ -butyrolactones Using Pivalic Anhydride with (<i>R</i>)-BTM
S3–8	Analytical Data of Compounds 1a–1i (Chiral 2-Hydroxylactones)
S8–14	Analytical Data of Compounds 1a-benzoate–1i-benzoate
S14–20	Analytical Data of Compounds 2a–2i (Chiral 2-Acyloxylactones)
S21–26	Cartesian Coordinates of (<i>R</i>)- 1i-ts and (<i>S</i>)- 1i-ts
	HPLC Analyses of Racemic Compounds 1a-benzoate–1i-benzoate
	HPLC Analyses of Chiral Compounds 1a-benzoate–1i-benzoate
	HPLC Analyses of Racemic Compounds 2a–2i
	HPLC Analyses of Chiral Compounds 2a–2i
	Spectroscopic Data of Compounds

General Information. All melting points are uncorrected. ^1H and ^{13}C NMR spectra were recorded with chloroform (in chloroform-*d*) as internal standard. Thin layer chromatography was performed on Wakogel B5F. All reactions were carried out under argon atmosphere in dried glassware. Diethyl ether was distilled from sodium/benzophenone immediately prior to use. All reagents were purchased from Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd. (TCI), Kanto Chemical Co., Inc. or Aldrich Chemical Co., Inc., and used without further purification unless otherwise noted. 2,2-Dimethylpropanoic anhydride (Piv_2O), diphenylacetic acid, and (*R*)-BTM were purchased from TCI.

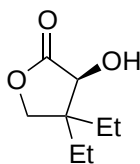
Typical Procedure: Asymmetric esterification of racemic pantolactone (($\pm$)-**1a**) with diphenylacetic acid by using Piv_2O in the presence of (*R*)-BTM was described (**Scheme 2**): To a solution of racemic pantolactone (($\pm$)-**1a**) (28.1 mg, 0.216 mmol) in diethyl ether (1.1 mL) at room temperature were successively added diphenylacetic acid (22.9 mg, 0.108 mmol), diisopropylethylamine (45.1 μL , 0.259 mmol), (*R*)-BTM (2.7 mg, 10.7 μmol), and Piv_2O (26.3 μL , 0.130 mmol). The reaction mixture was stirred for 12 h at the same temperature and then it was quenched with saturated aqueous NaHCO_3 . The organic layer was separated and the aqueous later was extracted with ethyl acetate. The combined organic layer was dried over Na_2SO_4 . After filtration of the mixture and evaporation of the solvent, the crude product was purified by preparative thin layer chromatography on silica to afford the corresponding optically active ester (*R*)-**2a** (33.3 mg, 48% yield, 98% ee) and the recovered optically active alcohol (*S*)-**1a** (14.3 mg, 51% yield, 98% ee) [$s = 384$].

(Optically Active 2-Hydroxylactones)



(S)-1a

(S)-Pantolactone ((S)-1a) [Scheme 2, 98% ee]: ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.11 (s, 1H, 2-H), 4.03 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 3.94 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 2.66 (br s, 1H, OH), 1.24 (s, 3H, Me), 1.08 (s, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.9, 76.4, 75.6, 40.8, 22.8, 18.8.

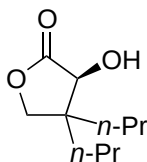


(S)-1b

(S)-3,3-Diethyl-2-hydroxy-γ-butyrolactone ((S)-1b) [Table 1, Entry 1, 99% ee]: ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.20 (d, J = 4.0 Hz, 1H, 2-H), 4.08 (d, J = 9.5 Hz, 1H, 4-H), 3.82 (d, J = 9.5 Hz, 1H, 4-H), 3.45 (d, J = 4.0 Hz, 1H, OH), 1.64–1.40 (m, 4H, CH_2CH_3), 0.91 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH_2CH_3), 0.84 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH_2CH_3); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.7, 74.5, 73.1, 46.4, 28.0, 21.5, 8.3, 8.0; HR MS: calcd for $\text{C}_8\text{H}_{14}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 181.0835, found 181.0830.

Analytical data on racemic compound: Mp: 49–50 °C (MTBE/hexane = 1/1); IR (KBr): 3433, 1774, 1196, 1111, 1011 cm^{-1} .

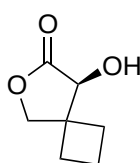
Enantiomeric excess of (S)-1b has been determined after converting into the corresponding benzoate.



(S)-1c

(S)-2-Hydroxy-3,3-di-*n*-propyl- γ -butyrolactone ((S)-1c) [Table 1, Entry 2, >99% ee]: IR (neat): 3433, 1774, 1119, 1003 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.15 (d, J = 3.5 Hz, 1H, 2-H), 4.09 (d, J = 10.0 Hz, 1H, 4-H), 3.82 (d, J = 10.0 Hz, 1H, 4-H), 3.28–3.23 (m, 1H, OH), 1.50–1.13 (m, 8H, *n*-Pr; CH_2CH_2), 0.92–0.83 (m, 6H, *n*-Pr; CH_3); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.6, 74.8, 73.8, 46.3, 38.4, 31.9, 17.3, 17.0, 14.7, 14.6; HR MS: calcd for $\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 209.1148, found 209.1154.

Enantiomeric excess of (S)-1c has been determined after converting into the corresponding benzoate.



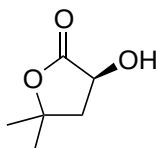
(S)-1d

(S)-5-Hydroxy-7-oxaspiro[3.4]octan-6-one ((S)-1d) [Table 1, Entry 3, 96% ee]:

^1H NMR (CDCl_3): δ 4.41 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 8-H), 4.19 (d, J = 3.6 Hz, 1H, 5-H), 4.10 (dd, J = 0.9, 9.0 Hz, 1H, 8-H), 3.22–3.06 (m, 1H, OH), 2.61–2.46 (m, 1H, cyclobutyl), 2.39–2.22 (m, 1H, cyclobutyl), 2.05–1.86 (m, 3H, cyclobutyl), 1.85–1.73 (m, 1H, cyclobutyl); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.4, 75.4, 72.9, 46.4, 26.1, 24.9, 15.5; HR MS: calcd for $\text{C}_7\text{H}_{10}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 165.0522, found 165.0524.

Analytical data on racemic compound: Mp: 62–63 $^{\circ}\text{C}$ (Et_2O /hexane = 1/1); IR (KBr): 3464, 2939, 2893, 1751, 1419, 1296, 1188, 1119, 980 cm^{-1} .

Enantiomeric excess of (S)-1d has been determined after converting into the corresponding benzoate.

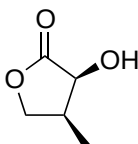


(S)-1e

(S)-2-Hydroxy-4,4-dimethyl- γ -butyrolactone ((S)-1e) [Table 1, Entry 4, 93% ee]: IR (neat): 3479, 1759, 1458, 1303, 949 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.65 (dd, J = 8.7, 9.9 Hz, 1H, 2-H), 3.36 (br s, 1H, OH), 2.50 (dd, J = 8.7, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 2.06 (d, J = 9.9,

12.9 Hz, 1H, 3-H), 1.50 (s, 3H, Me), 1.40 (s, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.7, 82.3, 68.6, 42.7, 28.9, 27.4; HR MS: calcd for $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 153.0522, found 153.0519.

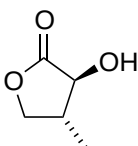
Enantiomeric excess of (*S*)-**1e** has been determined after converting into the corresponding benzoate.



(*S*)-*cis*-**1f**

(2*S*,3*S*)-2-Hydroxy-3-methyl- γ -butyrolactone ((*S*)-*cis*-1f**)** [Table 1, Entry 5, 90% ee]: IR (neat): 3456, 1643 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.52 (d, J = 7.2 Hz, 1H, 2-H), 4.32 (dd, J = 5.4, 9.0 Hz, 1H, 4-H), 4.02 (dd, J = 2.1, 9.0 Hz, 1H, 4-H), 2.80–2.64 (m, 1H, 3-H), 2.12 (br s, 1H, OH), 1.07 (d, J = 7.2 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.0, 71.9, 69.9, 34.9, 11.4; HR MS: calcd for $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 139.0366, found 139.0371.

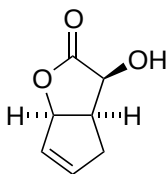
Enantiomeric excess of (*S*)-*cis*-**1f** has been determined after converting into the corresponding benzoate.



(*S*)-*trans*-**1f**

(2*S*,3*R*)-2-Hydroxy-3-methyl- γ -butyrolactone ((*S*)-*trans*-1f**)** [Table 1, Entry 6, 98% ee]: IR (neat): 3487, 1774, 1628, 1342, 1211, 1003 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.38 (dd, J = 7.8, 9.3 Hz, 1H, 4-H), 4.22 (br s, 1H, OH), 4.04 (d, J = 10.5 Hz, 1H, 2-H), 3.77 (dd, J = 9.3, 10.5 Hz, 1H, 4-H), 2.60–2.41 (m, 1H, 3-H), 1.20 (d, J = 6.6 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.2, 73.6, 70.7, 38.6, 14.1; HR MS: calcd for $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 139.0366, found 139.0370.

Enantiomeric excess of (*S*)-*trans*-**1f** has been determined after converting into the corresponding benzoate.



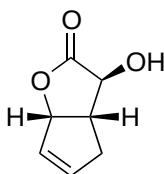
(S)-endo-1g

(3S,3aR,6aR)-3a,4-Dihydro-3-hydroxy-3H-cyclopenta[b]furan-2(6aH)-one

((S)-endo-1g) [Table 1, Entry 7, 99% ee]: $[\alpha]_D^{18} = -90.6$ (c 0.5, CHCl_3), $[\alpha]_D^{18} = -87.6$ (c 0.5, benzene), (lit¹) $[\alpha]_D^{28} = -94$ (c 1.0, CHCl_3), (>98% ee); ^1H NMR (CDCl_3): δ 6.26 (ddd, $J = 2.4, 2.7, 5.4$ Hz, 1H, 6-H), 5.93 (ddd, $J = 2.4, 5.1, 5.4$ Hz, 1H, 5-H), 5.33 (ddd, $J = 2.4, 2.4, 6.3$ Hz, 1H, 6a-H), 4.74 (d, $J = 9.3$ Hz, 1H, 3-H), 3.56 (br s, 1H, OH), 3.22 (dddd, $J = 5.7, 6.3, 9.0, 9.3$ Hz, 1H, 3a-H), 2.76 (ddd, $J = 5.1, 5.7, 18.2$ Hz, 1H, 4-H), 2.49 (ddd, $J = 2.7, 9.0, 18.2$ Hz, 1H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.5, 141.2, 127.5, 86.6, 69.2, 40.5, 30.8; HR MS: calcd for $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 163.0366, found 163.0363.

Analytical data on racemic compound: Mp: 61–63 °C (Et_2O /hexane = 1/1); IR (KBr): 3425, 1751, 1620, 1419, 1196, 1134, 987 cm^{-1} .

Enantiomeric excess of (S)-endo-1g has been determined after converting into the corresponding benzoate.



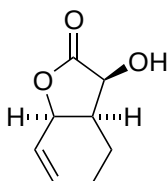
(S)-exo-1g

(3S,3aS,6aS)-3a,4-Dihydro-3-hydroxy-3H-cyclopenta[b]furan-2(6aH)-one

((S)-exo-1g) [Table 1, Entry 8, 95% ee]: $[\alpha]_D^{26} = +72.8$ (c 1.0, CHCl_3), $[\alpha]_D^{26} = +103.6$ (c 1.0, benzene), (lit¹) $[\alpha]_D^{28} = +70.9$ (c 1.0, CHCl_3), (93.2% ee) ; IR (neat): 3433, 1774, 1612, 1188, 1119, 987 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 6.90–5.97 (m, 1H, 6-H), 5.83 (ddd, $J = 1.8, 3.9, 5.7$ Hz, 1H, 5-H), 5.54–5.42 (m, 1H, 6a-H), 4.42 (br s, 1H, OH), 4.12 (d, $J = 7.2$ Hz, 1H, 3-H), 3.00 (ddt, $J = 1.8, 7.2, 7.2$ Hz, 1H, 3a-H), 2.77–2.60 (m, 1H, 4-H), 2.59–2.44 (m, 1H,

4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.2, 136.8, 129.1, 87.4, 74.2, 44.1, 36.5; HR MS: calcd for $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 163.0366, found 163.0359.

Enantiomeric excess of (*S*)-*exo*-**1g** has been determined after converting into the corresponding benzoate.



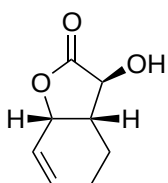
(*S*)-endo-1h

(3*S*,3*aR*,7*aR*)-3,3*a*,4,5-Tetrahydro-3-hydroxybenzofuran-2(7*aH*)-one ((*S*)-endo-1h)

[Table 1, Entry 9, 89% ee]: ^1H NMR (CDCl_3): δ 6.30–6.19 (m, 1H, 7-H), 5.99–5.87 (m, 1H, 6-H), 4.79–4.61 (m, 2H, 3-H, 7*a*-H), 3.23 (br s, 1H, OH), 2.80–2.61 (m, 1H, 3*a*-H), 2.31–2.13 (m, 1H, 5-H), 2.11–1.81 (m, 2H, 4-H, 5-H), 1.30–1.10 (m, 1H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.3, 136.6, 121.5, 71.8, 71.5, 39.1, 23.1, 17.2; HR MS: calcd for $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 177.0522, found 177.0514.

Analytical data on racemic compound: Mp: 100–102 °C (Et_2O /hexane = 1/1); IR (KBr): 3402, 1766, 1651, 1435, 1203, 1142, 1111, 980 cm^{-1} .

Enantiomeric excess of (*S*)-*endo*-**1h** has been determined after converting into the corresponding benzoate.



(*S*)-exo-1h

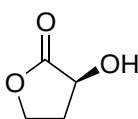
(3*S*,3*aS*,7*aS*)-3,3*a*,4,5-Tetrahydro-3-hydroxybenzofuran-2(7*aH*)-one ((*S*)-exo-1h)

[Table 1, Entry 10, 84% ee]: ^1H NMR (CDCl_3): δ 6.30–5.95 (m, 1H, 7-H), 5.76 (dd, J = 2.5, 10.0 Hz, 1H, 6-H), 5.00 (dd, J = 2.5, 7.5 Hz, 1H, 7*a*-H), 4.31 (dd, J = 3.5, 9.5 Hz, 1H, 3-H), 3.56 (d, J = 3.5 Hz, 1H, OH), 2.77–2.65 (m, 1H, 5-H), 2.28–2.06 (m, 2H, 5-H,

3a-H), 2.05–1.91 (m, 1H, 4-H), 1.90–1.80 (m, 1H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 177.8, 132.7, 124.2, 74.2, 68.5, 40.6, 20.13, 20.09; HR MS: calcd for $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_3\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 177.0522, found 177.0522.

Analytical data on racemic compound: Mp: 98–99 °C (Et_2O /hexane = 2/1); IR (KBr): 3463, 1782, 1651, 1335, 1188, 1126, 1095, 995 cm^{-1} .

Enantiomeric excess of (*S*)-*exo*-**1h** has been determined after converting into the corresponding benzoate.

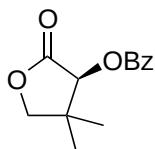


(S)-1i

(S)-2-Hydroxy-γ-butyrolactone ((S)-1i) [Scheme 3 (eq 2), 89% ee]: ^1H NMR (CDCl_3): δ 4.52 (dd, J = 5.4, 8.4 Hz, 1H, 2-H), 4.41 (dt, J = 1.8, 9.0 Hz, 1H, 4-H), 4.22 (ddd, J = 6.0, 9.0, 10.5 Hz, 1H, 4-H), 4.07 (br s, 1H, OH), 2.65–2.53 (m, 1H, 3-H), 2.35–2.18 (m, 1H, 3-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 178.4, 67.3, 65.3, 30.8.

Enantiomeric excess of (*S*)-**1i** has been determined after converting into the corresponding benzoate.

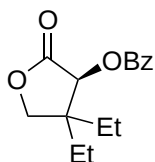
(Optically Active Benzoates Derived from Alcohols)



(S)-1a-benzoate

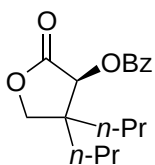
(S)-2-Benzoyloxy-3,3-dimethyl-γ-butyrolactone ((S)-1a-benzoate) [Scheme 2, 98% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/49, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 33.9 min (0.9%), t_R = 39.4 min (99.1%); IR (neat): 1790, 1728, 1265, 741, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.14–8.07 (m, 2H, Ph), 7.66–7.58 (m, 1H, Ph), 7.52–7.44 (m, 2H, Ph), 5.63 (s, 1H, 2-H), 4.14 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 4.10 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 1.29

(s, 3H, Me), 1.24 (s, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.3, 165.3, 133.7, 130.0, 128.7, 128.5, 76.2, 75.4, 40.5, 23.1, 20.0; HR MS: calcd for $\text{C}_{13}\text{H}_{15}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 258.0863, found 258.0864.



(S)-1b-benzoate

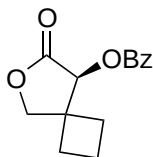
(S)-2-Benzoyloxy-3,3-diethyl- γ -butyrolactone ((S)-1b-benzoate) [Table 1, Entry 1, 99% ee]: HPLC (CHIRALPAK AS-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): t_{R} = 32.0 min (99.3%), t_{R} = 34.8 min (0.7%); IR (neat): 1790, 1736, 1466, 1373, 1265, 1157, 1126, 949, 818, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.11–8.04 (m, 2H, Ph), 7.64–7.57 (m, 1H, Ph), 7.51–7.43 (m, 2H, Ph), 5.77 (s, 1H, 2-H), 4.24 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 4.08 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 1.76–1.57 (m, 4H, CH_2CH_3), 1.01 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH_2CH_3), 0.93 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH_2CH_3); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.8, 165.1, 133.7, 129.9, 128.8, 128.5, 73.6, 72.9, 46.1, 27.9, 23.9, 8.22, 8.16; HR MS: calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{18}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 285.1097, found 285.1087.



(S)-1c-benzoate

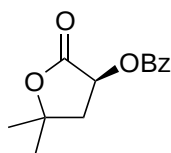
(S)-2-Benzoyloxy-3,3-di-*n*-propyl- γ -butyrolactone ((S)-1c-benzoate) [Table 1, Entry 2, >99% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.75 mL/min): t_{R} = 16.6 min (0.03%), t_{R} = 20.5 min (99.97%); IR (neat): 1797, 1728, 1458, 1265, 1119, 1011, 741, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.07 (d, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 7.61 (t, J = 7.5 Hz, 1H, Ph), 7.48 (t, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 5.74 (s, 1H, 2-H), 4.25 (d, J = 10.0 Hz, 1H, 4-H), 4.08 (d, J = 10.0 Hz, 1H, 4-H), 1.66–1.22 (m, 8H, *n*-Pr; $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), 0.99 (t, J = 7.5 Hz, 3H, *n*-Pr; $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$), 0.91 (t, J = 7.5 Hz, 3H, *n*-Pr; $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.9, 165.1, 133.7, 129.9, 128.9, 128.6, 74.1, 73.6, 45.9, 38.3, 33.7, 17.3, 17.2, 14.8, 14.6; HR MS: calcd for $\text{C}_{17}\text{H}_{22}\text{O}_4\text{Na}$

(M+Na⁺) 313.1410, found 313.1396.



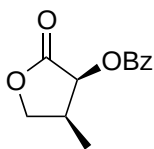
(S)-1d-benzoate

(S)-7-Oxa-6-oxospiro[3.4]oct-5-yl benzoate ((S)-1d-benzoate) [Table 1, Entry 3, 96% ee]: HPLC (CHIRALCEL OD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 10.3 min (1.9%), t_R = 11.6 min (98.1%); IR (neat): 1797, 1728, 1450, 1265, 1187, 1111, 995, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.14 (d, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 7.62 (t, J = 7.5 Hz, 1H, Ph), 7.49 (t, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 5.70 (s, 1H, 5-H), 4.50 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 8-H), 4.28 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 8-H), 2.70–2.45 (m, 1H, cyclobutyl), 2.42–2.29 (m, 1H, cyclobutyl), 2.12–1.80 (m, 4H, cyclobutyl); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 171.8, 165.5, 133.8, 130.0, 128.7, 128.6, 75.3, 73.0, 45.9, 27.0, 26.5, 15.8; HR MS: calcd for $\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{O}_4\text{Na}$ (M+Na⁺) 269.0784, found 269.0783.



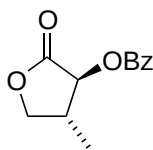
(S)-1e-benzoate

(S)-2-Benzoyloxy-4,4-dimethyl- γ -butyrolactone ((S)-1e-benzoate) [Table 1, Entry 4, 93% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 10.6 min (3.6%), t_R = 11.9 min (96.4%); IR (neat): 1790, 1720, 1581, 1450, 1373, 1257, 1111, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.14–8.00 (m, 2H, Ph), 7.60 (tt, J = 1.5, 7.5 Hz, 1H, Ph), 7.52–7.38 (m, 2H, Ph), 5.29 (dd, J = 8.7, 9.3 Hz, 1H, 2-H), 2.72 (dd, J = 8.7, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 2.20 (dd, J = 9.3, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 1.58 (s, 3H, Me), 1.51 (s, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.0, 165.4, 133.7, 130.0, 128.8, 128.5, 82.3, 69.7, 41.3, 29.1, 27.9; HR MS: calcd for $\text{C}_{13}\text{H}_{14}\text{O}_4\text{Na}$ (M+Na⁺) 257.0784, found 257.0786.



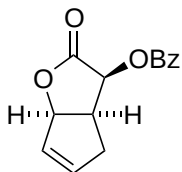
(S)-cis-1f-benzoate

(2S,3S)-2-Benzoyloxy-3-methyl- γ -butyrolactone ((S)-cis-1f-benzoate) [Table 1, Entry 5, 90% ee]: HPLC (CHIRALCEL OD-3, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): t_R = 27.3 min (4.9%), t_R = 30.3 min (95.1%); IR (neat): 1797, 1728, 1450, 1265, 1180, 1126, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.17–8.02 (m, 2H, Ph), 7.67–7.56 (m, 1H, Ph), 7.54–7.40 (m, 2H, Ph), 5.74 (d, J = 7.8 Hz, 1H, 2-H), 4.79 (dd, J = 5.7, 9.3 Hz, 1H, 4-H), 4.16 (dd, J = 2.1, 9.3 Hz, 1H, 4-H), 3.12–2.95 (m, 1H, 3-H), 1.15 (d, J = 7.2 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.3, 165.3, 133.8, 130.0, 128.6, 128.6, 71.6, 70.8, 33.8, 12.4; HR MS: calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 243.0628, found 243.0630.



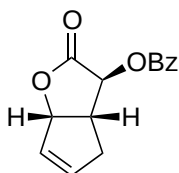
(S)-trans-1f-benzoate

(2S,3R)-trans-2-Benzoyloxy-3-methyl- γ -butyrolactone ((S)-trans-1f-benzoate) [Table 1, Entry 6, 98% ee]: HPLC (CHIRALPAK AS-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 25.8 min (1.0%), t_R = 30.9 min (99.0%); IR (neat): 1805, 1728, 1604, 1458, 1265, 995, 733, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.15–8.02 (m, 2H, Ph), 7.66–7.55 (m, 1H, Ph), 7.54–7.41 (m, 2H, Ph), 5.48 (d, J = 9.9 Hz, 1H, 2-H), 4.54 (dd, J = 8.1, 9.0 Hz, 1H, 4-H), 3.95 (dd, J = 9.0, 9.9 Hz, 1H, 4-H), 2.94–2.76 (m, 1H, 3-H), 1.29 (d, J = 6.9 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.5, 165.5, 133.7, 130.0, 128.7, 128.5, 73.8, 70.6, 37.0, 14.6; HR MS: calcd for $\text{C}_{12}\text{H}_{12}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 243.0628, found 263.0625.



(S)-endo-1g-benzoate

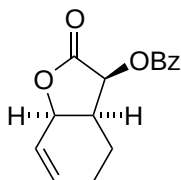
(3S,3aS,6aR)-3,3a,4,6a-Tetrahydro-2-oxo-2H-cyclopenta[b]furan-3-yl benzoate ((S)-endo-1g-benzoate) [Table 1, Entry 7, 99% ee]: $[\alpha]_D^{24} = +37.8$ (c 1.0, CHCl₃), $[\alpha]_D^{24} = -38.1$ (c 1.0, benzene); HPLC (CHIRALCEL OJ-H, *i*-PrOH/hexane = 1/4, flow rate = 1.0 mL/min): $t_R = 24.2$ min (0.6%), $t_R = 26.7$ min (99.4%); IR (neat): 1782, 1728, 1597, 1450, 1358, 1265, 1103, 710 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃): δ 8.09 (dd, $J = 1.2$, 8.4 Hz, 2H, Ph), 7.65–7.54 (m, 1H, Ph), 7.52–7.40 (m, 2H, Ph), 6.22 (ddd, $J = 2.4$, 2.4, 5.4 Hz, 1H, 6-H), 5.98 (ddd, $J = 2.4$, 4.8, 5.4 Hz, 1H, 5-H), 5.87 (d, $J = 9.3$ Hz, 1H, 3-H), 5.46 (ddd, $J = 2.4$, 2.4, 6.6 Hz, 6a-H), 3.50 (dddd, $J = 6.3$, 6.6, 9.0, 9.3 Hz, 1H, 3a-H), 2.64 (ddd, $J = 4.8$, 6.3, 18.0 Hz, 1H, 4-H), 2.47 (ddd, $J = 2.4$, 9.0, 18.0 Hz, 1H, 4-H); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 172.0, 165.3, 140.0, 133.7, 133.5, 129.9, 128.5, 128.4, 128.0, 86.4, 70.0, 39.3, 31.6; HR MS: calcd for C₁₄H₁₂O₄Na (M+Na⁺) 267.0628, found 267.0633.



(S)-exo-1g-benzoate

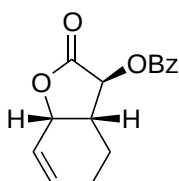
(3S,3aR,6aS)-3,3a,4,6a-Tetrahydro-2-oxo-2H-cyclopenta[b]furan-3-yl benzoate ((S)-exo-1g-benzoate) [Table 1, Entry 8, 95% ee]: $[\alpha]_D^{26} = +76.1$ (c 1.0, CHCl₃), $[\alpha]_D^{26} = +108.1$ (c 1.0, benzene), (lit¹) $[\alpha]_D^{28} = +78.4$ (c 1.0, CHCl₃) (99.3% ee), ; HPLC (CHIRALPAK IA, *i*-PrOH/hexane = 1/49, flow rate = 1.0 mL/min): $t_R = 27.0$ min (2.5%), $t_R = 30.3$ min (97.5%); IR (neat): 1782, 1728, 1604, 1358, 1265, 1189, 1026, 710 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃): δ 8.13–8.03 (m, 2H, Ph), 7.66–7.54 (m, 1H, Ph), 7.53–7.39 (m, 2H, Ph), 6.21–6.10 (m, 1H, 6-H), 5.94 (ddd, $J = 2.1$, 4.2, 5.7 Hz, 1H, 5-H), 5.72–5.62 (m, 1H, 6a-H), 5.31 (d, $J = 6.6$ Hz, 1H, 3-H), 3.28–3.13 (m, 1H, 3a-H),

2.87–2.77 (m, 2H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.6, 165.6, 137.0, 133.7, 130.0, 129.2, 128.7, 128.5, 87.4, 75.5, 42.8, 37.0; HR MS: calcd for $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 267.0628, found 267.0615.



(S)-endo-1h-benzoate

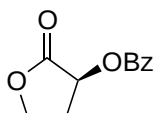
(3S,3aS,7aR)-2,3,3a,4,5,7a-Hexahydro-2-oxobenzofuran-3-yl benzoate ((S)-endo-1h-benzoate) [Table 1, Entry 9, 89% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 20.7 min (5.5%), t_R = 24.0 min (94.5%); IR (neat): 1790, 1736, 1604, 1450, 1265, 1172, 1126, 957, 733, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.01 (d, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 7.53 (t, J = 7.5 Hz, 1H, Ph), 7.39 (t, J = 7.5 Hz, 2H, Ph), 6.09–5.98 (m, 1H, 7-H), 5.82–5.71 (m, 1H, 6-H), 5.61 (d, J = 8.5 Hz, 1H, 3-H), 5.02 (d, J = 7.5 Hz, 1H, 7a-H), 2.86 (ddd, J = 2.5, 7.5, 8.5 Hz, 1H, 3a-H), 2.44–2.29 (m, 1H, 5-H), 2.17–2.03 (m, 1H, 5-H), 1.90–1.76 (m, 2H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.3, 165.7, 133.7, 133.2, 130.0, 128.7, 128.5, 123.8, 73.8, 69.6, 39.6, 20.5, 20.4; HR MS: calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{14}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 281.0784, found 281.0777.



(S)-exo-1h-benzoate

(3S,3aR,7aS)-2,3,3a,4,5,7a-Hexahydro-2-oxobenzofuran-3-yl benzoate ((S)-exo-1h-benzoate) [Table 1, Entry 10, 84% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 12.0 min (8.0%), t_R = 14.1 min (92.0%); IR (neat): 1790, 1728, 1597, 1450, 1265, 1180, 1126, 957, 764, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.08 (d, J = 7.0 Hz, 2H, Ph), 7.58 (dd, J = 7.0, 7.5 Hz, 1H, Ph), 7.44 (dd, J = 7.5, 8.5 Hz, 2H, Ph), 6.23 (dd, J = 5.0, 9.5 Hz, 1H, 7-H), 6.01–5.92 (m, 1H,

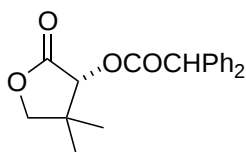
6-H), 5.87 (d, $J = 7.5$ Hz, 1H, 3-H), 4.78 (dd, $J = 4.0, 5.0$ Hz, 1H, 7a-H), 3.20–2.89 (m, 1H, 5-H), 2.10–1.90 (m, 2H, 5-H, 3a-H), 1.77–1.63 (m, 1H, 4-H), 1.38 (dddd, $J = 5.0, 12.8, 12.8, 13.5$ Hz, 1H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 171.7, 165.4, 136.1, 133.7, 130.0, 128.6, 128.5, 121.6, 72.2, 71.4, 37.9, 23.0, 17.8; HR MS: calcd for $\text{C}_{15}\text{H}_{14}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 281.0784, found 281.0778.



(S)-1i-benzoate

(S)-2-Benzoyloxy- γ -butyrolactone ((S)-1i-benzoate) [Scheme 3, (eq 2)], 89% ee]: HPLC (CHIRALPAK ID, *i*-PrOH/hexane = 1/4, flow rate = 0.5 mL/min): $t_R = 69.8$ min (5.6%), $t_R = 74.3$ min (94.4%); IR (neat): 1790, 1720, 1450, 1265, 1111, 1018, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 8.07 (d, $J = 8.5$ Hz, 2H, Ph), 7.59 (t, $J = 7.5$ Hz, 1H, Ph), 7.45 (dd, $J = 7.5, 8.5$ Hz, 2H, Ph), 5.65 (dd, $J = 8.5, 9.5$ Hz, 1H, 2-H), 4.53 (ddd, $J = 2.5, 8.5, 10.0$ Hz, 1H, 4-H), 4.36 (ddd, $J = 6.0, 9.5, 10.0$ Hz, 1H, 4-H), 2.82 (dddd, $J = 2.5, 6.0, 8.5, 13.0$ Hz, 1H, 3-H), 2.43 (dddd, $J = 8.5, 9.5, 9.5, 13.0$ Hz, 1H, 3-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.6, 165.4, 133.7, 129.9, 128.5, 128.4, 68.1, 65.1, 29.0; HR MS: calcd for $\text{C}_{11}\text{H}_{10}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 229.0471, found 229.0465.

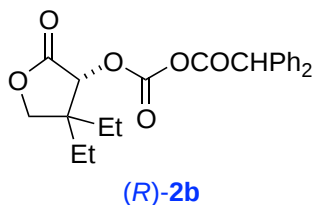
(Optically Active 2-Acyloxylactones)



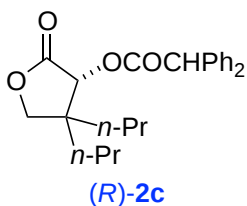
(R)-2a

(R)-2-Diphenylacetyloxy-3,3-dimethyl- γ -butyrolactone ((R)-2a) [Scheme 2, 98% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): $t_R = 33.5$ min (98.8%), $t_R = 45.1$ min (1.2%); IR (neat): 1790, 1720, 1581, 1720, 1581, 1450, 1373, 1257, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.32–7.18 (m, 10H, Ph), 5.36 (s, 1H, 2-H), 5.12 (s, 1H, 2'-H), 3.91 (s, 2H, 4-H), 1.02 (s, 3H, Me), 0.78 (s, 3H, Me); ^{13}C NMR

(CDCl₃): δ 172.0, 171.5, 137.9, 137.9, 128.8, 128.7, 128.6, 128.5, 127.6, 127.4, 76.1, 75.3, 56.7, 40.3, 23.0, 19.5; HR MS: calcd for C₂₀H₂₀O₄Na (M+Na⁺) 347.1254, found 347.1257.



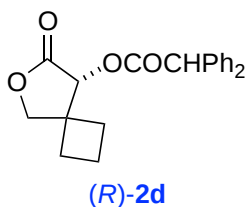
(R)-2-Diphenylacetyloxy-3,3-diethyl-γ-butyrolactone ((R)-2b) [Table 1, Entry 1, 98% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): t_R = 28.8 min (99.1%), t_R = 37.9 min (0.9%); IR (neat): 1797, 1743, 1597, 1458, 1188, 1142, 1080, 1011, 741, 702 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.33–7.15 (m, 10H, Ph), 5.47 (s, H, 2-H), 5.09 (s, 1H, 2'-H), 4.02 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 3.87 (d, J = 9.0 Hz, 1H, 4-H), 1.34 (q, J = 7.5 Hz, 2H, CH₂CH₃), 1.20 (dq, J = 15.0, 7.5 Hz, 1H, CH₂CH₃), 1.14 (dq, J = 15.0, 7.5 Hz, 1H, CH₂CH₃), 0.66 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH₂CH₃), 0.64 (t, J = 7.5 Hz, 3H, CH₂CH₃); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 172.6, 171.1, 138.0, 137.8, 128.74, 128.74, 128.71, 128.5, 127.5, 127.3, 73.7, 72.9, 57.0, 45.9, 28.0, 23.1, 8.1, 8.0; HR MS: calcd for C₂₂H₂₄O₄Na (M+Na⁺) 375.1567, found 375.1578.



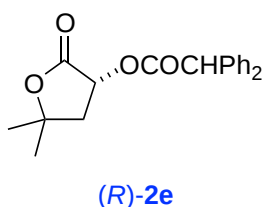
(R)-2-Diphenylacetyloxy-3,3-di-*n*-propyl-γ-butyrolactone ((R)-2c) [Table 1, Entry 2, >99% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.75 mL/min): t_R = 12.4 min (0.02%), t_R = 15.2 min (99.98%); ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.38–7.17 (m, 10H, Ph), 5.47 (s, 1H, 2-H), 5.12 (s, 1H, 2'-H), 4.06 (d, J = 9.3 Hz, 1H, 4-H), 3.90 (d, J = 9.3 Hz, 1H, 4-H), 1.37–1.22 (m, 2H, *n*-Pr; CH₂CH₂CH₃), 1.16–0.90 (m, 6H, *n*-Pr; CH₂CH₂CH₃), 0.84–0.62 (m, 6H, *n*-Pr; CH₂CH₂CH₃); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 172.6, 171.0, 137.9, 137.7, 128.74, 128.74, 128.71, 128.4, 127.5, 127.3, 74.0, 73.7, 57.0, 45.6, 38.2, 33.2, 17.0, 16.9, 14.5, 14.5; HR MS: calcd for C₂₄H₂₈O₄Na

(M+Na⁺) 403.1880, found 403.1876.

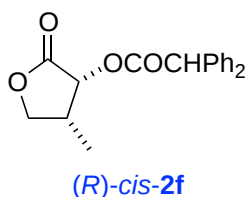
Analytical data on racemic compound: Mp: 103–104 °C; IR (KBr): 1782, 1736, 1496, 1458, 1227, 1157, 1080, 995, 748, 702 cm⁻¹.



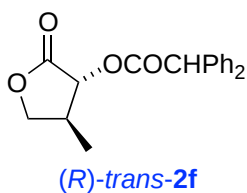
(R)-7-Oxa-6-oxospiro[3.4]oct-5-yl 2,2-diphenylacetate ((R)-2d) [Table 1, Entry 3, 97% ee]: HPLC (CHIRALCEL OD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): *t*_R = 15.2 min (1.3%), *t*_R = 19.4 min (98.7%); IR (neat): 1797, 1743, 1597, 1496, 1373, 1142, 1072, 1003, 741, 702 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.37–7.12 (m, 10H, Ph), 5.41 (s, 1H, 5-H), 5.15 (s, 1H, 2'-H), 4.26 (d, *J* = 10.0 Hz, 1H, 8-H), 4.04 (d, *J* = 10.0 Hz, 1H, 8-H), 2.18–1.90 (m, 2H, cyclobutyl), 1.87–1.77 (m, 1H, cyclobutyl), 1.72–1.55 (m, 2H, cyclobutyl), 1.45–1.32 (m, 1H, cyclobutyl); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 171.54, 171.51, 137.91, 137.90, 128.8, 128.7, 128.6, 128.5, 127.6, 127.4, 75.2, 72.9, 56.8, 45.5, 26.7, 26.0, 15.3; HR MS: calcd for C₂₁H₂₀O₄Na (M+Na⁺) 359.1254, found 359.1263.



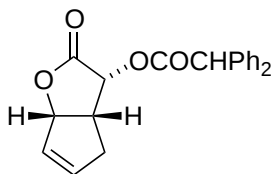
(R)-2-Diphenylacetyloxy-4,4-dimethyl-γ-butyrolactone ((R)-2e) [Table 1, Entry 4, 87% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): *t*_R = 14.5 min (93.6%), *t*_R = 16.4 min (6.4%); IR (neat): 1782, 1743, 11496, 1450, 1373, 1273, 1188, 1142, 741, 702 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.33–7.14 (m, 10H, Ph), 5.56 (dd, *J* = 8.7, 9.3 Hz, 1H, 2-H), 5.07 (s, 1H, 2'-H), 2.46 (dd, *J* = 8.7, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 1.92 (dd, *J* = 9.3, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 1.35 (s, 3H, Me), 1.34 (s, 3H, Me); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 171.6, 171.3, 137.82, 137.77, 128.7, 128.5, 128.53, 128.51, 127.4, 127.4, 82.2, 69.8, 56.4, 40.7, 28.7, 27.8; HR MS: calcd for C₁₅H₁₈O₄Na (M+Na⁺) 285.1097, found 285.1084.



(2R,3R)-2-Diphenylacetyloxy-3-methyl-γ-butyrolactone ((R)-cis-2f) [Table 1, Entry 5, 97% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-3, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): t_R = 42.9 min (98.6%), t_R = 45.6 min (1.4%); IR (neat): 1797, 1728, 1496, 1450, 1373, 1265, 741, 702 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.41–7.24 (m, 10H, Ph), 5.57 (d, J = 7.5 Hz, 1H, 2-H), 5.18 (s, 1H, 2'-H), 4.38 (dd, J = 6.0, 9.5 Hz, 1H, 4-H), 4.02 (dd, J = 2.5, 9.5 Hz, 1H, 4-H), 2.89–2.79 (m, 1H, 3-H), 0.82 (d, J = 7.5 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.0, 171.4, 137.8, 128.8, 128.63, 128.61, 128.58, 128.57, 127.6, 127.5, 71.6, 70.7, 56.6, 33.6, 11.9; HR MS: calcd for $\text{C}_{19}\text{H}_{18}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 333.1097, found 333.1112.



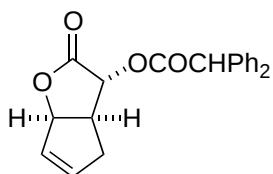
(2R,3S)-2-Diphenylacetyloxy-3-methyl-γ-butyrolactone ((R)-trans-2f) [Table 1, Entry 6, 83% ee]: HPLC (CHIRALCEL OD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 1.0 mL/min): t_R = 17.8 min (91.1%), t_R = 24.0 min (8.9%); IR (neat): 1790, 1651, 1466, 1265, 1157, 1126, 949, 741, 710 cm^{-1} ; ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.39–7.24 (m, 10H, Ph), 5.28 (d, J = 11.0 Hz, 1H, 2-H), 5.15 (s, 1H, 2'-H), 4.42 (dd, J = 8.5, 8.5 Hz, 1H, 4-H), 3.85 (dd, J = 8.5, 10.0 Hz, 1H, 4-H), 2.69–2.56 (m, 1H, 3-H), 1.13 (d, J = 7.0 Hz, 3H, Me); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.0, 171.6, 137.93, 137.88, 128.7, 128.64, 128.59, 128.59, 127.51, 127.4, 73.8, 70.5, 56.6, 36.6, 14.4; HR MS: calcd for $\text{C}_{19}\text{H}_{18}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 333.1097, found 333.1084.



(*R*)-endo-2g

(3*R*,3*aR*,6*aS*)-3,3*a*,4,6*a*-Tetrahydro-2-oxo-2*H*-cyclopenta[*b*]furan-3-yl

2,2-diphenylacetate ((*S*)-endo-2g) [Table 1, Entry 7, 89% ee]: $[\alpha]_{\text{D}}^{18} = +33.2$ (c 1.0, CHCl₃), $[\alpha]_{\text{D}}^{18} = +15.8$ (c 1.0, benzene); HPLC (CHIRALPAK ID, *i*-PrOH/hexane = 1/1, flow rate = 0.5 mL/min): $t_{\text{R}} = 29.5$ min (94.4%), $t_{\text{R}} = 35.9$ min (5.6%); IR (neat): 1779, 1739, 1601, 1495, 1451, 1359, 1077, 741, 700 cm⁻¹. ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.34–7.14 (m, 10H, Ph), 6.02–5.95 (m, 1H, 6-H), 5.84–5.77 (m, 1H, 5-H), 5.64 (d, $J = 9.5$ Hz, 1H, 3-H), 5.24 (d, $J = 6.0$ Hz, 1H, 6a-H), 5.12 (s, 1H, 2'-H), 3.37–3.16 (m, 1H, 3a-H), 2.17–1.97 (m, 2H, 4-H); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 171.6, 171.3, 140.0, 137.8, 137.7, 128.7, 128.58, 128.56, 128.46, 127.7, 127.5, 127.3, 86.2, 70.0, 56.5, 39.1, 31.1; HR MS: calcd for C₂₁H₁₈O₄Na (M+Na⁺) 357.1097, found 357.1112.

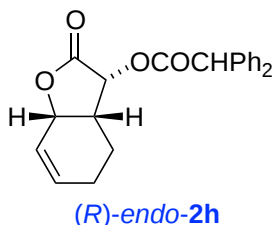


(*R*)-exo-2g

(3*R*,3*aS*,6*aR*)-3,3*a*,4,6*a*-Tetrahydro-2-oxo-2*H*-cyclopenta[*b*]furan-3-yl

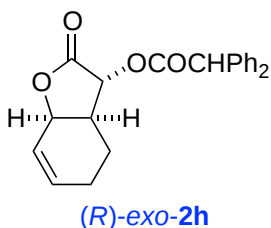
2,2-diphenylacetate ((*R*)-exo-2g) [Table 1, Entry 8, 85% ee]: $[\alpha]_{\text{D}}^{26} = +15.1$ (c 1.2, CHCl₃), $[\alpha]_{\text{D}}^{26} = +53.5$ (c 1.2, benzene); HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): $t_{\text{R}} = 30.2$ min (7.6%), $t_{\text{R}} = 33.2$ min (92.4%); ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.33–7.13 (m, 10H, Ph), 6.05–5.96 (m, 1H, 6-H), 5.81 (ddd, $J = 1.8, 4.2, 5.7$ Hz, 1H, 5-H), 5.50–5.42 (m, 1H, 3-H), 5.07 (s, 1H, 2'-H), 5.05 (d, $J = 6.6$ Hz, 1H, 6a-H), 2.96–2.83 (m, 1H, 3a-H), 2.74–2.52 (m, 2H, 4-H); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 172.2, 171.7, 137.82, 137.79, 136.8, 129.1, 128.7, 128.60, 128.57, 128.51, 127.49, 127.43, 87.4, 75.7, 56.4, 42.3, 37.0; HR MS: calcd for C₂₁H₁₈O₄Na (M+Na⁺) 357.1097, found 357.1093.

Analytical data on racemic compound: Mp: 120–122 °C (CH₂Cl₂/hexane = 1/2); IR (KBr): 1781, 1743, 1604, 1496, 1450, 1381, 1196, 1149, 1026, 987, 748, 702 cm⁻¹.



(3R,3aR,7aS)-2,3,3a,4,5,7a-Hexahydro-2-oxobenzofuran-3-yl 2,2-diphenylacetate ((R)-endo-2h) [Table 1, Entry 9, 90% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.75 mL/min): *t*_R = 30.2 min (94.8%), *t*_R = 45.3 min (5.2%); ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.36–7.13 (m, 10H, Ph), 6.14–6.09 (m, 1H, 7-H), 5.87–5.77 (m, 1H, 6-H), 5.66 (d, *J* = 7.0 Hz, 1H, 3-H), 5.11 (s, 1H, 2'-H), 4.64–4.56 (m, 1H, 7a-H), 2.74–2.62 (m, 1H, 3a-H), 2.05–1.90 (m, 1H, 5-H), 1.84–1.68 (m, 1H, 5-H), 1.24–1.10 (m, 1H, 4-H), 1.02 (dddd, *J* = 5.0, 13.0, 13.0, 13.0 Hz, 1H, 4-H); ¹³C NMR (CDCl₃): δ 171.4, 171.3, 137.86, 137.85, 136.0, 128.7, 128.62, 128.58, 128.50, 127.5, 127.4, 121.5, 72.1, 71.2, 56.5, 37.6, 22.8, 17.3; HR MS: calcd for C₂₂H₂₀O₄Na (M+Na⁺) 371.1254, found 371.1269.

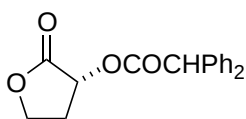
Analytical data on racemic compound: Mp: 161–162 °C (CH₂Cl₂/hexane = 1/1); IR (KBr): 1790, 1743, 1496, 1450, 1180, 1149, 987, 748, 702 cm⁻¹.



(3R,3aS,7aR)-2,3,3a,4,5,7a-Hexahydro-2-oxobenzofuran-3-yl 2,2-diphenylacetate ((R)-exo-2h) [Table 1, Entry 10, 81% ee]: HPLC (CHIRALPAK AD-H, *i*-PrOH/hexane = 1/9, flow rate = 0.5 mL/min): *t*_R = 27.0 min (90.3%), *t*_R = 29.0 min (9.7%); ¹H NMR (CDCl₃): δ 7.45–7.20 (m, 10H, Ph), 6.08–5.97 (m, 1H, 7-H), 5.81–5.70 (m, 1H, 6-H), 5.48 (d, *J* = 8.5 Hz, 1H, 3-H), 5.13 (s, 1H, 2'-H), 4.93 (d, *J* = 7.0 Hz, 1H, 7a-H),

2.74–2.63 (m, 1H, 3a-H), 2.38–2.20 (m, 1H, 5-H), 2.16–2.10 (m, 1H, 5-H), 1.84–1.62 (m, 2H, 4-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 171.9, 171.7, 138.0, 137.9, 133.1, 128.8, 128.61, 128.61, 128.55, 127.53, 127.45, 123.8, 73.7, 70.0, 56.6, 53.4, 39.2, 20.4; HR MS: calcd for $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 371.1254, found 371.1267.

Analytical data on racemic compound: Mp: 114–116 °C ($\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{hexane} = 1/1$); IR (KBr): 1790, 1751, 1496, 1450, 1187, 1157, 1080, 964, 748, 702 cm^{-1} .



(*R*)-2i

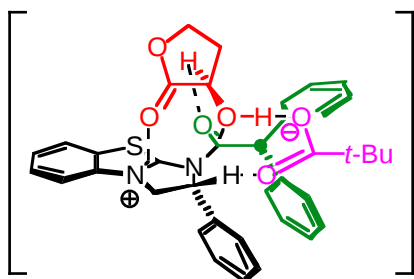
(*R*)-2-Diphenylacetyloxy- γ -butyrolactone ((*R*)-2i) [Scheme 3 (eq 2), 86% ee]: HPLC (CHIRALPAK IC-3, *i*-PrOH/hexane = 1/1, flow rate = 0.35 mL/min): t_R = 45.7 min (6.9%), t_R = 55.0 min (93.1%); ^1H NMR (CDCl_3): δ 7.33–7.15 (m, 10H, Ph), 5.40 (dddd, J = 0.6, 0.6, 8.7, 9.3 Hz, 1H, 2-H), 5.07 (s, 1H, 2'-H), 4.34 (dddd, J = 0.6, 2.7, 9.1, 9.3 Hz, 1H, 4-H), 4.19 (dddd, J = 0.6, 6.3, 9.3, 9.3 Hz, 1H, 4-H), 2.60 (dddd, J = 2.7, 6.3, 8.7, 12.9 Hz, 1H, 3-H), 2.15 (dddd, J = 9.1, 9.3, 9.3, 12.9 Hz, 1H, 3-H); ^{13}C NMR (CDCl_3): δ 172.3, 171.5, 137.8, 128.7, 128.60, 128.58, 128.58, 128.53, 127.5, 127.4, 68.2, 65.0, 56.4, 28.5; HR MS: calcd for $\text{C}_{18}\text{H}_{16}\text{O}_4\text{Na}$ ($\text{M}+\text{Na}^+$) 319.0941, found 319.0929.

Analytical data on racemic compound: Mp: 97–98 °C ($\text{EtOH}/\text{hexane} = 1/1$); IR (KBr): 1790, 1736, 1496, 1227, 1188, 1080, 1003, 748, 702 cm^{-1} ;

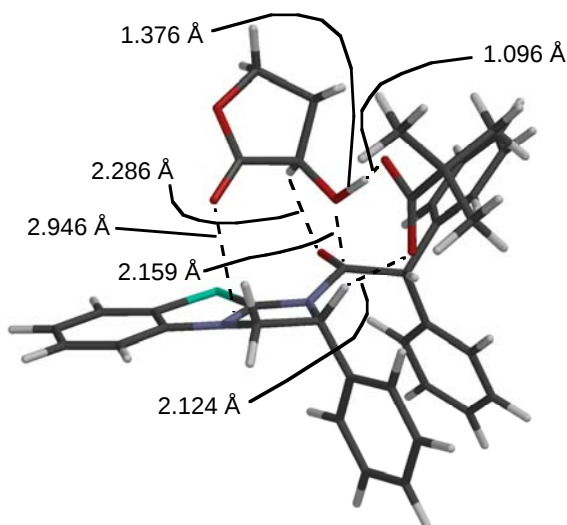
Lit¹⁾ MacKeith, R. A.; McCague, R.; Olivo, H. F.; Roberts, S. M.; Taylor, S. J. C.; Xiong, H. *Bioorg. Med. Chem.* **1994**, 2, 387.

(Cartesian Coordinates of (*R*)-**1i**-ts and (*S*)-**1i**-ts)

All calculations were performed with the program package *Spartan '10* 1.1.0 of Wavefunction Inc. (<http://www.wavefun.com>). All structures were optimized and subjected to frequency analysis with the B3LYP/6-31G* method, followed by single point B3LYP/6-31G* calculation to provide the thermodynamic properties at 298.15 K.



Transition state ((*R*)-**1i**-ts)



Transition Structure (*R*)-**1i**-ts

($\nu_{\text{ts}} = 139i \text{ cm}^{-1}$)

$E(\text{B3LYP/6-31G}^*) = -2429.991809 \text{ au}$

($E_{\text{rel}} = 0 \text{ kcal/mol}$)

Cartesian Coordinates (Angstroms)

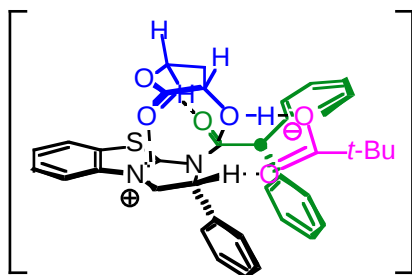
Atom	X	Y	Z
6	-0.138136619	0.433114585	1.283825481
6	1.221736770	1.109862739	1.144452264

1	1.554833738	0.972597642	0.113840458
8	-0.687586302	0.184090257	2.353629729
7	-1.034364927	0.566969621	0.143721216
6	-2.302329010	0.178881055	0.254343179
7	-2.897910061	-0.032743237	-0.925745904
6	-1.886400612	-0.077092204	-1.991385569
6	-0.674077808	0.640495673	-1.311608437
1	0.237120086	0.060265451	-1.467526987
1	-1.673829523	-1.126988518	-2.210674977
1	-2.226108298	0.454258554	-2.881599309
8	0.575009422	-1.452270731	0.511645546
6	0.018204144	-2.482520639	1.225220708
6	-1.095263916	-3.233285561	0.468565145
8	-1.114914463	-4.537982426	0.835818462
8	-1.885271458	-2.788390811	-0.337724657
1	-0.470130234	-2.081562168	2.138351568
6	0.937395756	-3.651056727	1.650201667
1	1.496550438	-3.445345120	2.566235556
1	1.648994569	-3.867029988	0.847326876
1	1.548333640	-1.868964997	-0.366744072
8	2.316002011	-2.304469506	-1.016309610
6	2.665938349	-1.510617736	-1.996038363
6	3.762724832	-2.093226142	-2.907155874
8	2.187444982	-0.386396726	-2.179658314
16	-3.318869638	-0.113208563	1.621012477
6	-4.212028983	-0.482315608	-0.842399564
6	-4.635908422	-0.550073614	0.496506278
6	-5.930011925	-0.953161511	0.810466151
1	-6.260786661	-1.010232941	1.843035813
6	-5.066356794	-0.819074363	-1.890329628
1	-4.730116822	-0.771741604	-2.921103235
6	-6.360288425	-1.225704970	-1.568399261
1	-7.043852163	-1.498622024	-2.366517640
6	-6.790262236	-1.288854252	-0.236638232
1	-7.803794525	-1.606973489	-0.012596452
6	3.294104230	-3.460045607	-3.450052872
1	4.072094503	-3.898530711	-4.087139698
1	2.384497837	-3.358047370	-4.054644444
1	3.081082480	-4.153876805	-2.632455910
6	5.037871058	-2.287292102	-2.056879161
1	5.837834830	-2.719502563	-2.670282495
1	4.847680223	-2.955253494	-1.212023744
1	5.398363495	-1.329187434	-1.662768079
6	4.044354917	-1.127885720	-4.067721351
1	4.835622141	-1.531413368	-4.710957946
1	4.362213115	-0.147924543	-3.698701212
1	3.149866048	-0.973572139	-4.680572544
6	2.290017712	0.489597156	2.044529279

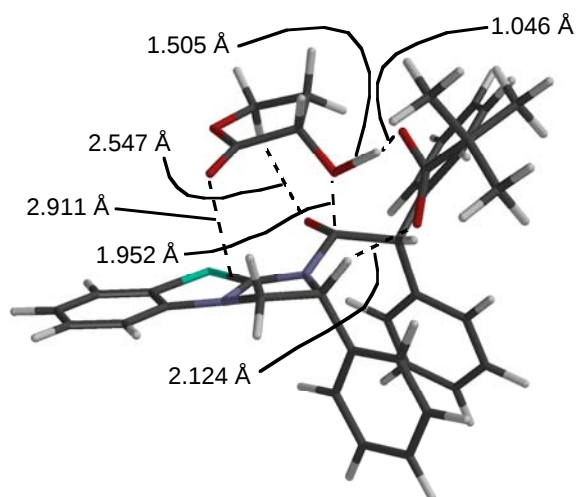
6	4.355748758	-0.568754145	3.632937619
6	3.474909384	0.025495209	1.461614666
6	2.154229119	0.424422678	3.437014143
6	3.177083272	-0.107748352	4.222763942
6	4.502240336	-0.497551122	2.247411172
1	3.587924179	0.068884772	0.381837521
1	1.244273899	0.779632375	3.907051488
1	3.053408086	-0.156090466	5.301947357
1	5.412943582	-0.855023262	1.773522061
1	5.153106494	-0.977543597	4.248447206
6	1.099245449	2.621684907	1.399214537
6	1.028142070	5.398430487	1.851333592
6	0.226599080	3.167583298	2.349946483
6	1.932594866	3.487926023	0.678011118
6	1.901095372	4.862958631	0.902258007
6	0.191781481	4.546019145	2.572048601
1	-0.430073804	2.514393233	2.915482872
1	2.612241625	3.077595237	-0.064173523
1	2.555968467	5.516589757	0.331889697
1	-0.492249801	4.952128379	3.313180812
1	1.000637360	6.470786526	2.026794997
6	-0.064904692	-4.795162285	1.809703022
1	0.335217370	-5.788214480	1.592512023
1	-0.526362828	-4.809293986	2.804635809
1	-2.021416148	2.956849740	-0.578011351
6	-1.291938220	3.119942750	-1.366817637
6	0.624858530	3.581657581	-3.337599325
6	-1.140936344	4.396406241	-1.906894004
6	-0.486990554	2.062896650	-1.809903930
6	0.481207768	2.303622251	-2.794074371
6	-0.186756336	4.628944982	-2.899380323
1	-1.764369075	5.210398398	-1.547043776
1	1.132916229	1.493694070	-3.109092976
1	-0.069095709	5.624382258	-3.319406824
1	1.381481162	3.759119923	-4.097408759

 Requested basis set is 6-31G(d)

There are 265 shells and 785 basis functions



Transition state ((S)-**1i-ts**)



Transition Structure (S)-**1i-ts**

($\nu_{\text{ts}} = 159i \text{ cm}^{-1}$)

$E(\text{B3LYP}/6\text{-}31\text{G}^*) = -2429.983640 \text{ au}$

($E_{\text{rel}} = +5.13 \text{ kcal/mol}$)

Cartesian Coordinates (Angstroms)

Atom	X	Y	Z
6	0.029519899	0.337271572	1.107818311
7	0.855107583	-0.595641497	0.296915326
6	2.179922974	-0.539967273	0.391487599
7	2.811409135	-1.026192564	-0.690387185
16	3.245971921	0.041712398	1.620991802
6	1.843075053	-1.197292265	-1.784314702
6	0.496353807	-1.263554392	-0.997460868
1	-0.259142759	-0.660538355	-1.500076429
6	-0.002060516	-2.688474708	-0.810051834
6	0.605045712	-3.576298579	0.088366373
6	0.165237163	-4.895410449	0.184865876
6	-0.885125632	-5.345129090	-0.618416229
6	-1.494870388	-4.466299325	-1.513447074

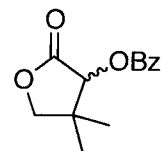
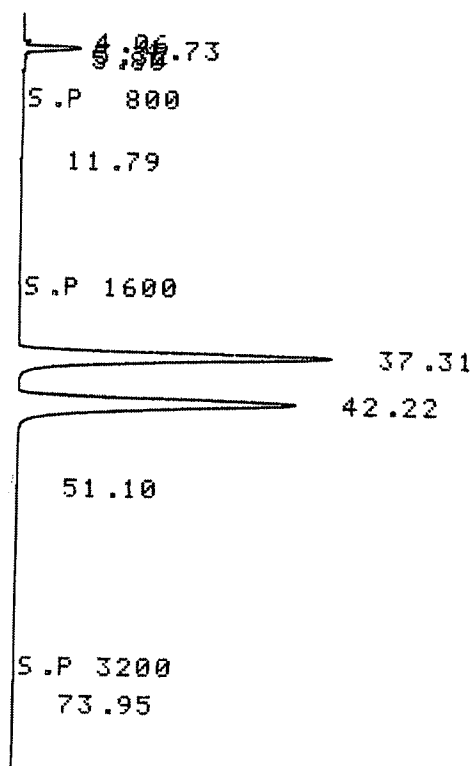
6	-1.058291264	-3.143332514	-1.610204335
1	-1.544469966	-2.452724850	-2.292184092
1	-2.321654071	-4.805196123	-2.132054950
1	-1.230746869	-6.372611404	-0.538351031
1	0.637460618	-5.569667235	0.894276462
1	1.408457730	-3.235658087	0.735134702
1	1.900163503	-0.317150504	-2.432130496
1	2.033702207	-2.112638918	-2.346812916
6	-1.452965738	-0.057964702	1.227008094
1	-1.831731282	-0.239113256	0.217936547
8	0.657998250	0.870281192	2.030212706
8	-0.263230994	1.582529015	-0.366012072
6	0.409624882	2.802183775	-0.337874771
6	1.940791504	2.638604703	-0.325259216
8	2.498683447	3.347475510	0.678373222
8	2.609056379	1.975602097	-1.091726608
6	0.138063517	3.758116744	0.851602627
1	-0.177155116	4.741141917	0.487665412
1	-0.645668595	3.360608714	1.496331879
1	0.182917462	3.321065760	-1.284104317
1	-1.338056379	1.715206416	-1.411670490
8	-2.030216549	1.971935254	-2.153181009
6	-2.414096558	0.913767974	-2.844966984
6	-3.432671276	1.240342493	-3.947335061
8	-2.004970968	-0.224341361	-2.629169500
6	4.626207737	-0.365498270	0.566999329
6	4.197227119	-0.905597372	-0.658262886
6	5.979462898	-0.155805064	0.812262240
1	6.314786379	0.275477052	1.750557035
6	5.107170093	-1.252439338	-1.654907984
1	4.767949148	-1.664930657	-2.599682045
6	6.894652412	-0.498672473	-0.184725892
1	7.954554086	-0.336924507	-0.013464444
6	6.461743347	-1.037816437	-1.402723242
1	7.190053069	-1.290354698	-2.167314097
6	1.484221964	3.857085543	1.586602147
1	1.508446361	3.228473343	2.478543374
1	1.778097856	4.877249387	1.844749184
6	-1.643953656	-1.351838296	2.025550412
6	-2.186358062	-3.689434851	3.498517240
6	-0.820844672	-1.729212531	3.094114599
6	-2.735952446	-2.169550759	1.701614737
6	-3.009218819	-3.324722287	2.430831837
6	-1.090644782	-2.890017094	3.822873869
1	0.035390874	-1.115501320	3.356959706
1	-3.380078969	-1.890935536	0.870953619
1	-3.862748769	-3.941760987	2.161566968
1	-0.440121304	-3.167043690	4.648791984

1	-2.396945727	-4.590698420	4.068500410
6	-2.277612840	1.076272858	1.837674986
6	-3.842997689	3.143014351	2.941704594
6	-3.250160076	1.728747012	1.071053012
6	-2.104415138	1.471826869	3.171521274
6	-2.876210435	2.498010729	3.716187443
6	-4.027352325	2.752845678	1.615387007
1	-3.388891182	1.451058746	0.031159026
1	-1.358833431	0.980450990	3.785741424
1	-2.723698591	2.790501140	4.752149207
1	-4.772672939	3.247084213	0.997414012
1	-4.445641974	3.940395089	3.368924423
6	-2.759228647	2.187559857	-4.965395671
1	-3.471875111	2.460698587	-5.752974136
1	-1.898150062	1.706417807	-5.444797521
1	-2.412993806	3.104096997	-4.479436834
6	-4.648074229	1.946008382	-3.308356679
1	-5.389046765	2.184955949	-4.080235025
1	-4.347681705	2.872582574	-2.811982283
1	-5.133445261	1.300202498	-2.566615599
6	-3.875153554	-0.056544214	-4.640042859
1	-4.598781023	0.170502048	-5.431657943
1	-4.347303488	-0.743394036	-3.929941513
1	-3.022833263	-0.577904061	-5.086059368

Requested basis set is 6-31G(d)

There are 265 shells and 785 basis functions

**HPLC Analyses of
Racemic Compounds 1a-benzoate–1i-benzoate**



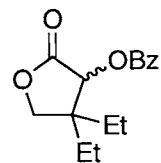
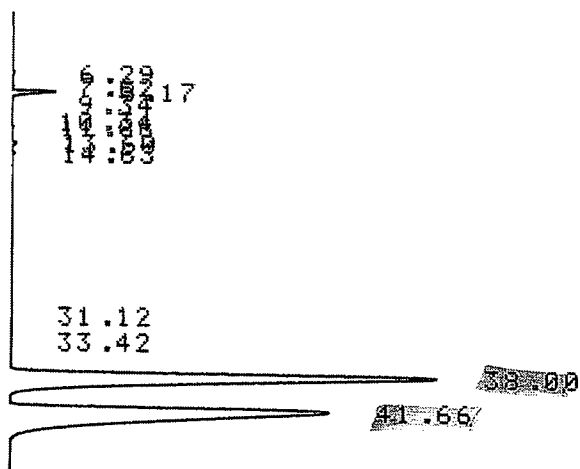
rac-1a-benzoate
 CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/50
 flow rate = 1.0 mL/min

D-2500

METHOD: TAG: 4 CH: 1

FILE: 1 CALC-METHOD: AREA% TABLE:

NO.	RT	AREA	CONC	BC
6	37.31	1064888	49.306	BB
7	42.22	1094867	50.694	BB
TOTAL		2159755	100.000	
PEAK REJ :		100000		



rac-1b-benzoate
 CHIRALPAK AS-H
i-PrOH/hexane = 1/9
 flow rate = 0.5 mL/min

D-2500

METHOD: TAG: 4 CH: 1

FILE: 0 CALC-METHOD: AREA% TABLE: 0

NO.	RT	AREA	CONC	BC
11	38.00	2868830	50.019	BU
12	41.66	2866659	49.981	UB

TOTAL
 5735489 100.000

PEAK REJ : 100000

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/10/14 11:47

作成日時: 2011/10/14 12:22

処理日時: 2011/10/14 12:22

データパス名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\K_Gotoh\DATA\No. 3-059

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

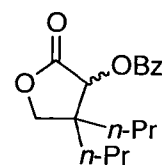
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-059

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



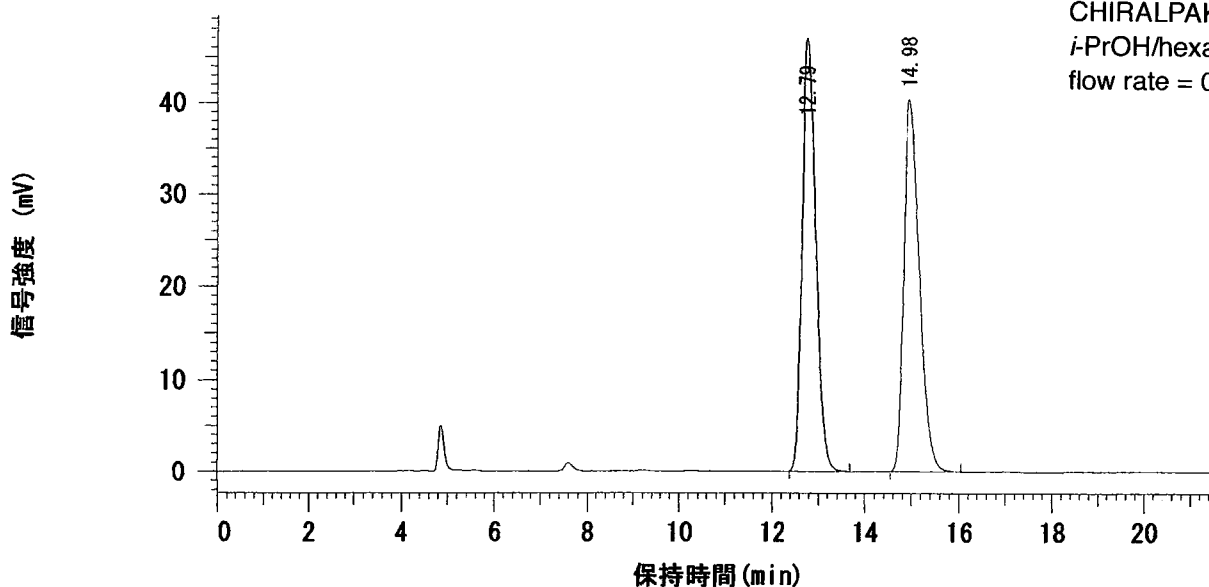
rac-1c-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 mL/min

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

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	12.79	940707	49.969		BB
2	14.98	941880	50.031	1.0000	BB
		1882587	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: 2012/01/20 21:05

作成日時: 2012/01/20 21:19

処理日時: 2012/01/20 21:19

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\K_Gotoh\DATA\NO.3-082\

データ処理用分析ファイル: Hexane/2-Propanol

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

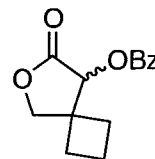
サンプルコメント:

シリーズ: NO.3-082

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



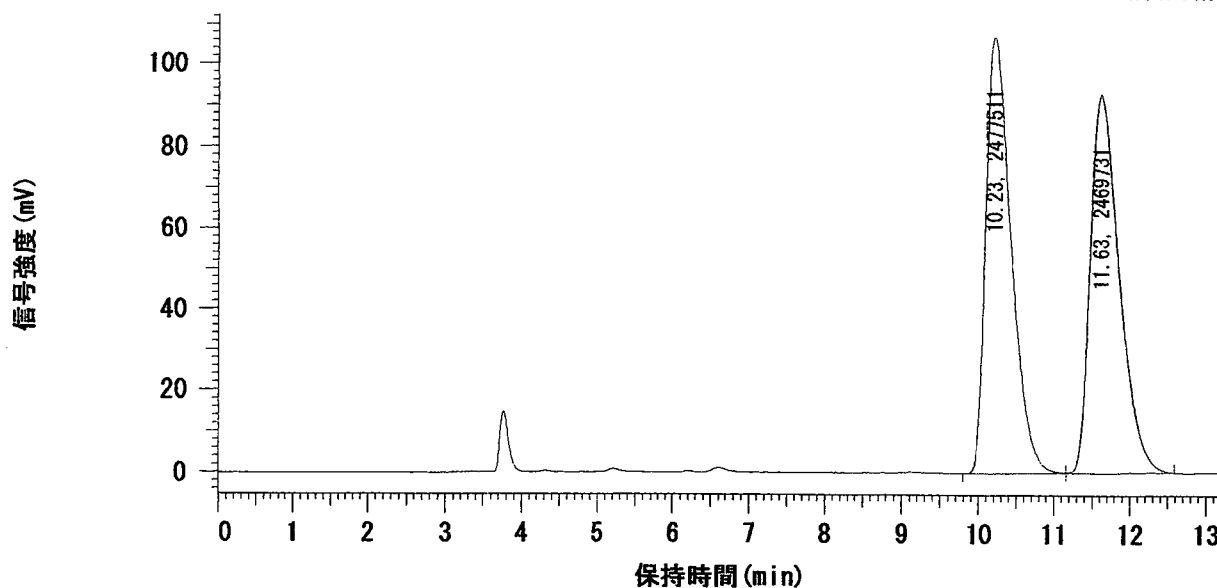
rac-1d-benzoate

CHIRALCEL OD-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: Hexane/2-Propanol

カラム名: OD-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:

分析ファイルコメント:

リポート作成者:

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	10.23	2477511	50.079	BB
2	11.63	2469731	49.921	BB
		4947242	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: 2011/09/22 16:21

作成日時: 2011/09/22 16:46

処理日時: 2011/09/22 16:46

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-036\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

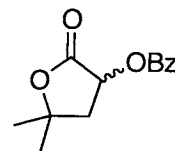
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-036

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



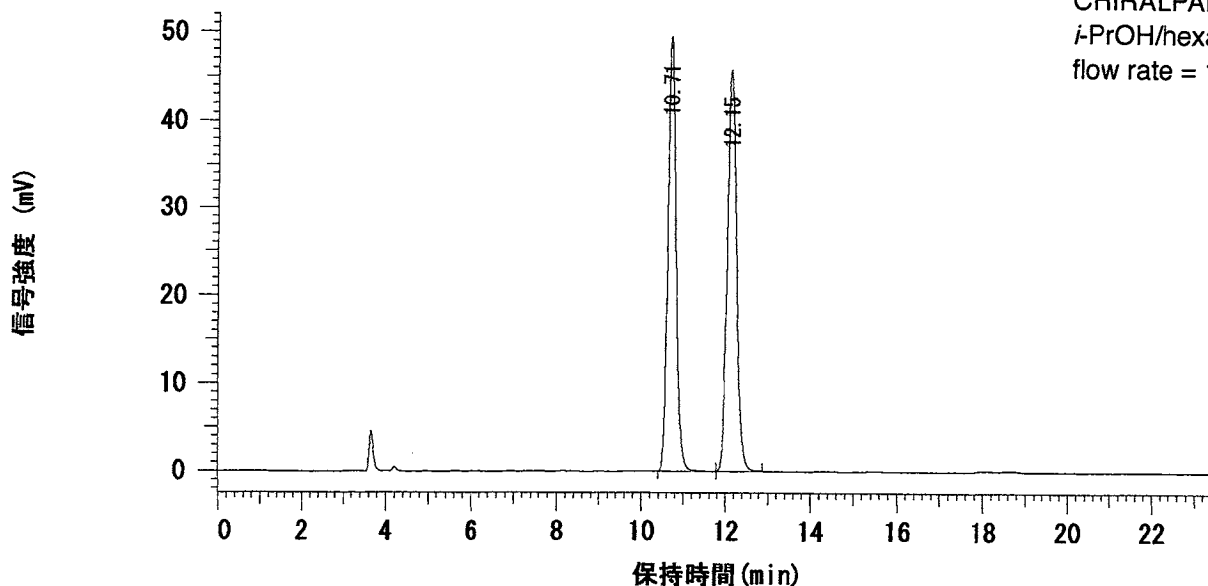
rac-1e-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 1.0 mL/min

加マトタイプ: 固定波長加マト, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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:

分析ファイルコメント:

メソッド作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

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	10.71	662046	49.175		BB
2	12.15	684256	50.825	0.9998	BB
		1346302	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: 2013/01/31 18:58

作成日時: 2013/01/31 19:39

処理日時: 2013/01/31 19:39

データベース名: C:\WIN32APP\¥D2000HSM¥kitajima¥DATA¥0121¥

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

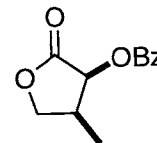
サンプルコメント:

シリーズ: 0121

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 µl

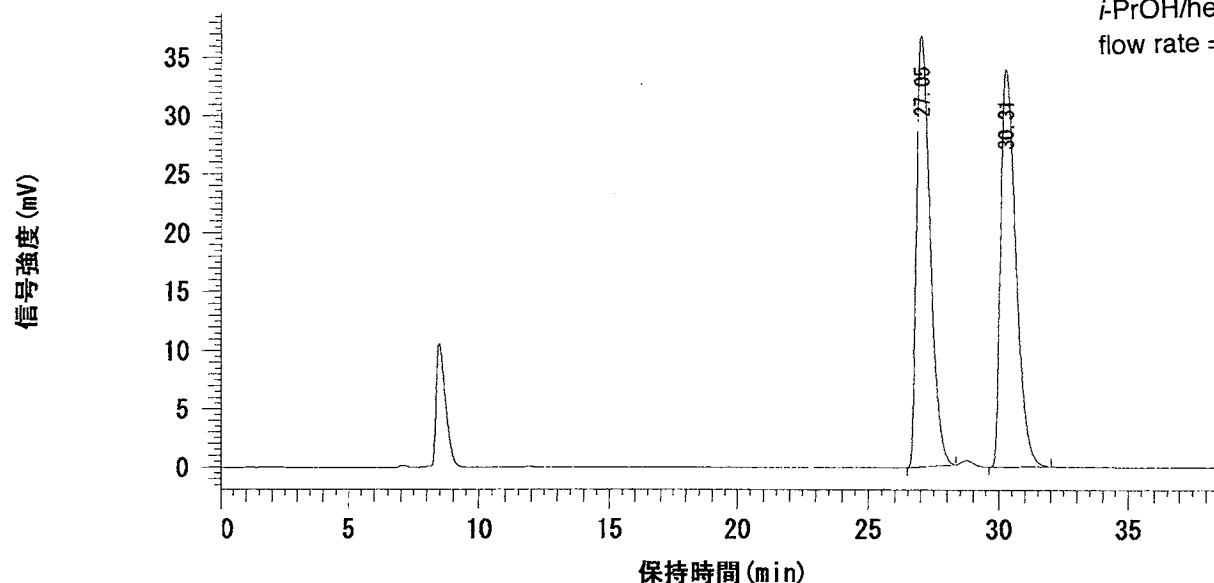
*rac-cis*-1f-benzoate

CHIRALCEL OD-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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	27.05	1350012	49.517	BB
2	30.31	1376376	50.483	BB
		2726388	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: 2011/10/22 19:12

作成日時: 2011/10/22 20:01

処理日時: 2011/10/22 20:01

データベース名: C:\WIN32APP\2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 2-177\

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: No. 2-177

アプリケーション(データ): K_Gotoh

ファイル: 1

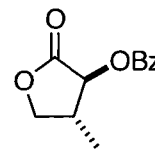
サンプル名: 未知試料001

ファイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

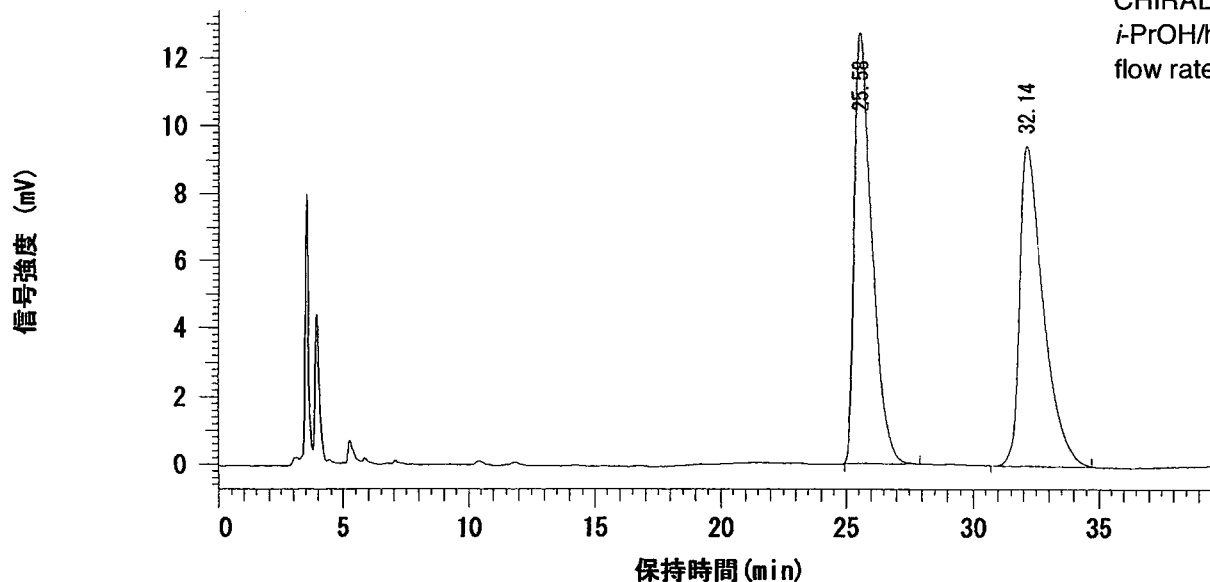
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-trans-1f-benzoate
CHIRALPAK AS-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 1.0 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: AS-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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	25.58	614364	49.972	1.0000	MC
2	32.14	615046	50.028	1.0000	MC
		1229410	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HSM: K_Ono

シリーズ: Gotoh-endo-rac レポート名: modified

システム: Sys 1

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/02/06 22:05

作成日時: 2013/02/07 11:26

処理日時: 2013/02/07 11:26

データパス名: C:\USERS\SHI\INLAB\DOCUMENTS\学生フォルダ\HPLC-DATA\K_Ono\DATA\Gotoh-endo-rac\

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

アプリケーション(データ): K_Ono

サンプル名: 未知試料001

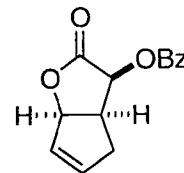
サンプルコメント:

シリーズ: Gotoh-endo-rac

注入量: 2.0 ul

注入回数: 1 of 1

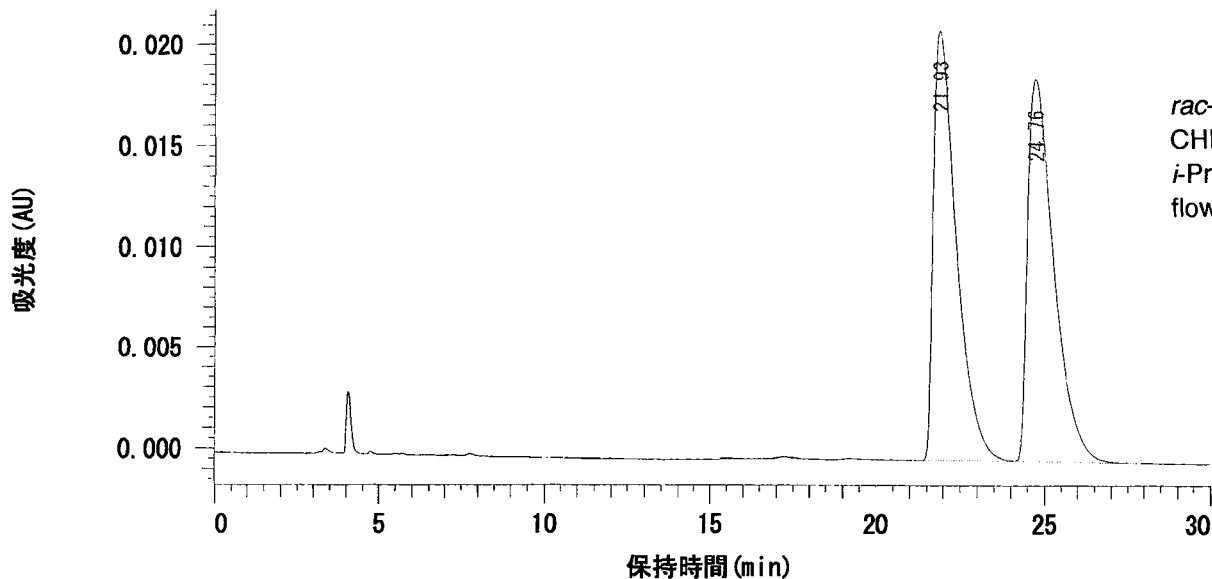
カラム名: OJ-H

**rac-endo-1g-benzoate**

CHIRALCEL OJ-H

i-PrOH/hexane = 1/4

flow rate = 1.0 mL/min



クロマトタイプ: 固定波長クロマト, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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

分析ファイルコメント:

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	21.93	505656	49.978		BB
2	24.76	506095	50.022		BB
		1011751	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: 2011/09/30 10:05

作成日時: 2011/09/30 10:58

処理日時: 2011/09/30 10:58

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\No. 2-182

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

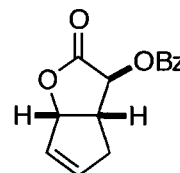
サンプルコメント:

シリーズ: No. 2-182

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



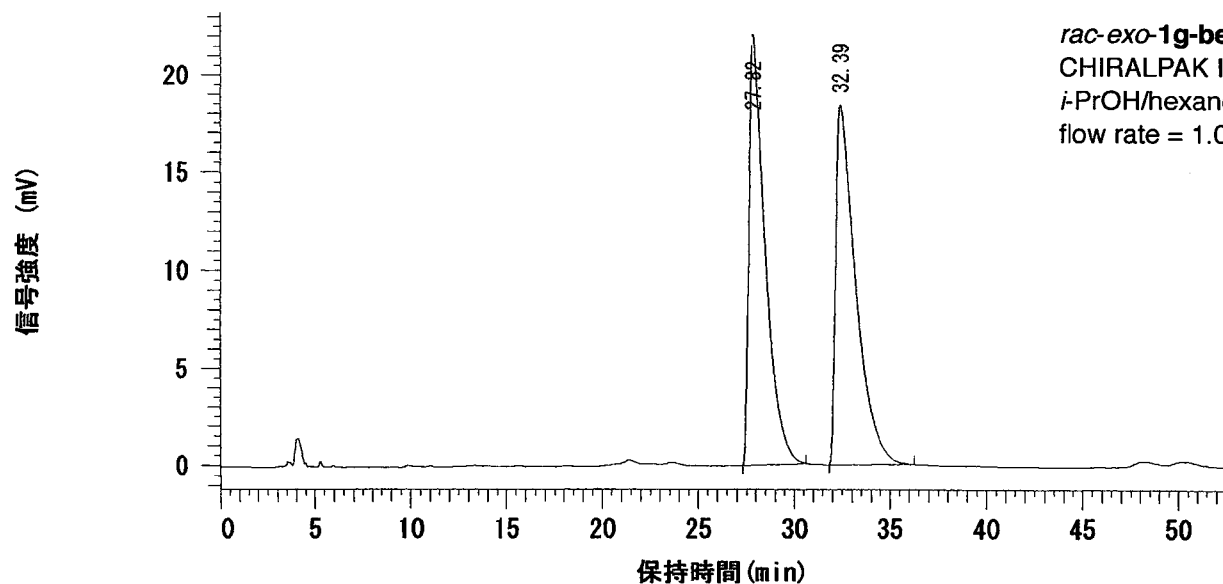
rac-exo-1g-benzoate

CHIRALPAK IA

i-PrOH/hexane = 1/49

flow rate = 1.0 mL/min

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: IC

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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	27.82	1301639	49.886	1.0000	BB
2	32.39	1307565	50.114	1.0000	BB
		2609204	100.000		

レポートの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/11/14 09:45

作成日時: 2011/11/14 10:27

処理日時: 2011/11/14 10:26

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\K_Gotoh\DATA\No. 3-097\

データ処理用分析ファイル: Hexane/2-Propanol

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

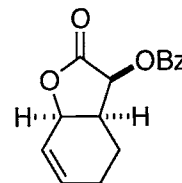
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-097

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



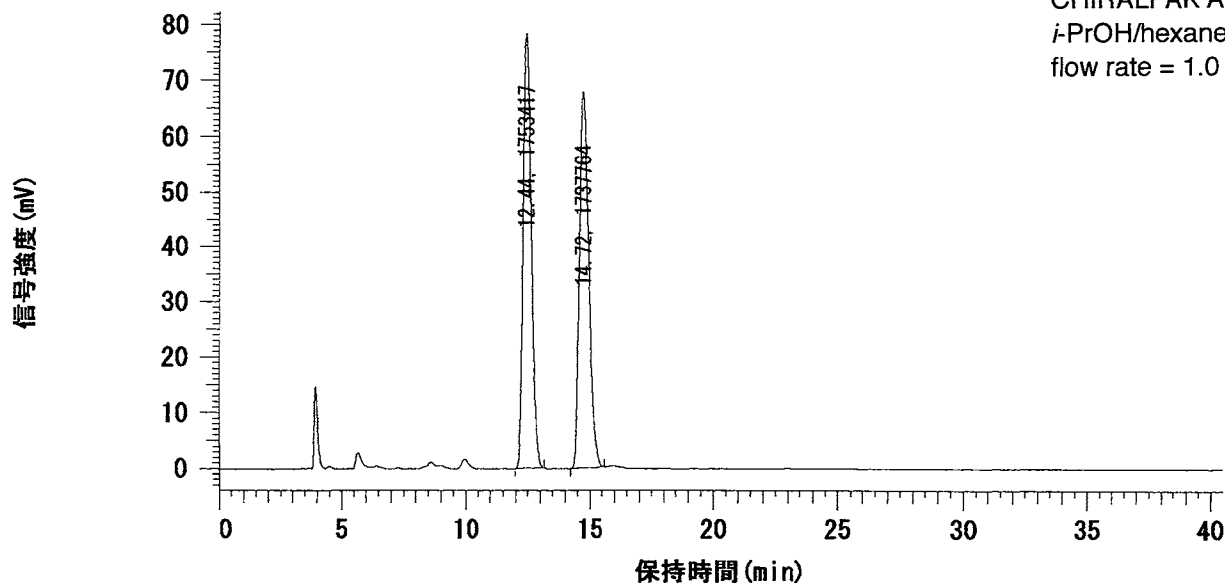
rac-endo-1h-benzoate

CHIRALPAK AD-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: Hexane/2-Propanol

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:

分析ファイルコメント:

メソッド作成者:

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	12.44	1753417	50.224	BB
2	14.72	1737764	49.776	BB
		3491181	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: 2011/11/14 10:30

作成日時: 2011/11/14 11:20

処理日時: 2011/11/14 11:20

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\K_Gotoh\DATA\No. 3-098\

データ処理用分析ファイル: Hexane/2-Propanol

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

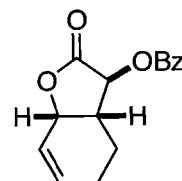
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-098

ファイル: 1

パイロット: UNK

注入量: 10.0 ul



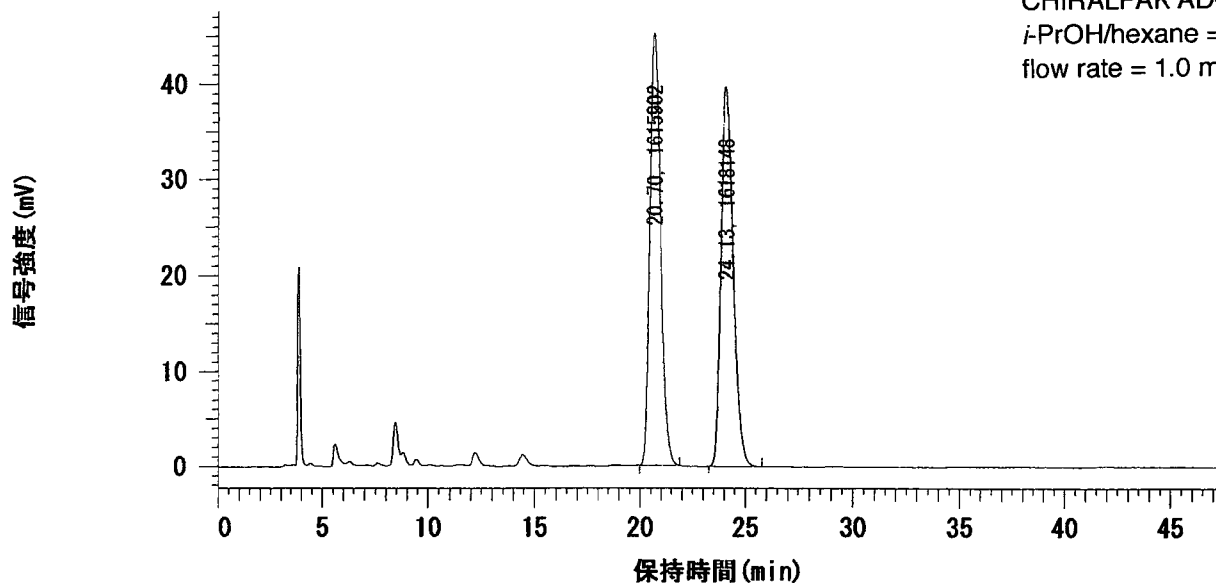
rac-exo-1h-benzoate

CHIRALPAK AD-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: Hexane/2-Propanol

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:

分析ファイルコメント:

メソッド作成者:

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	20.70	1615902	49.965	MC
2	24.13	1618148	50.035	MC
		3234050	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: 2013/02/01 19:02

作成日時: 2013/02/01 20:31

処理日時: 2013/02/01 20:30

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\0127

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

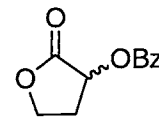
注入回数: 1 of 1

サンプルコメント:

シリーズ: 0127

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 μ l

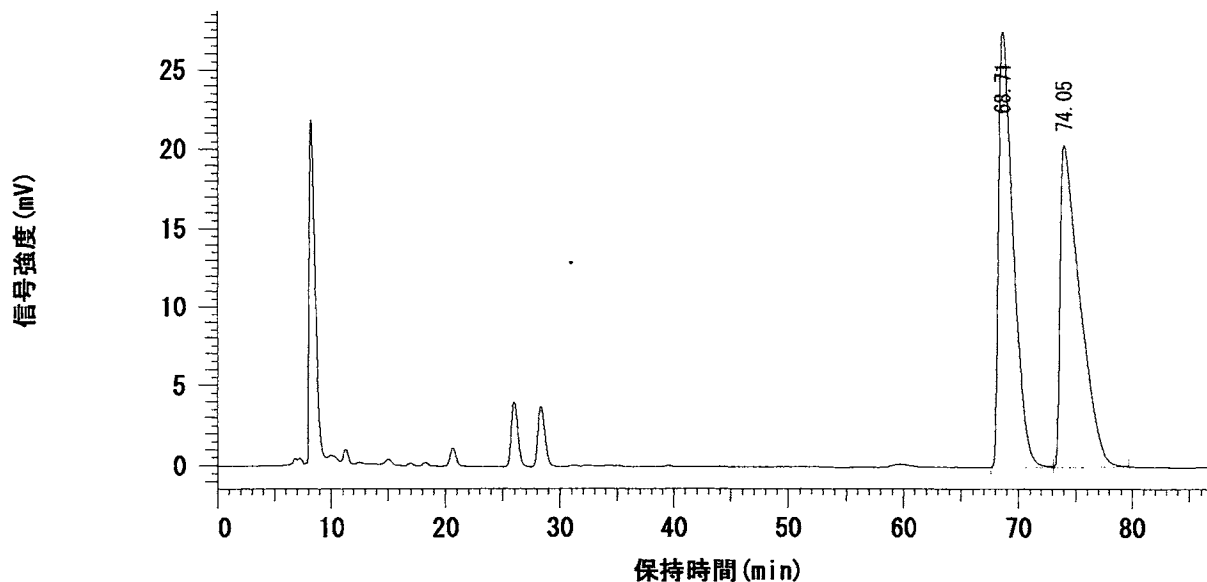
rac-1i-benzoate

CHIRALPAK ID

i-PrOH/hexane = 1/4

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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	68.71	2381792	49.898	BV
2	74.05	2391536	50.102	VB
		4773328	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

HPLC Analyses of Chiral Compounds 1a-benzoate–1i-benzoate

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/09/21 10:33

作成日時: 2011/09/21 11:33

処理日時: 2011/09/21 11:33

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\K_Gotoh\DATA\No. 3-029

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

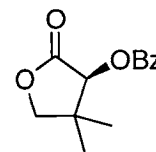
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-029

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



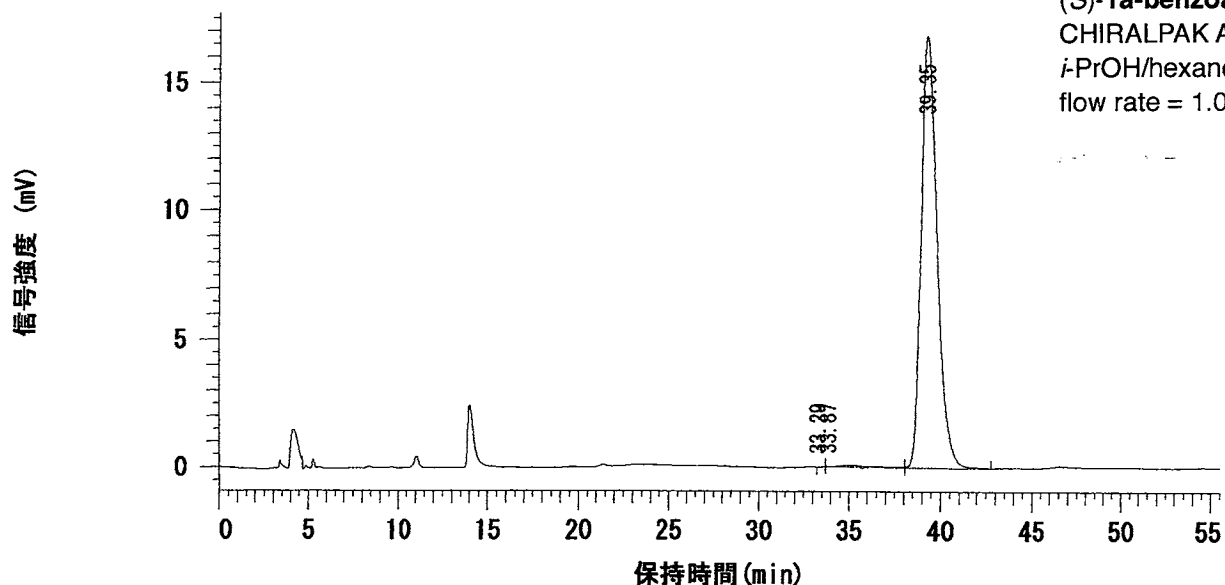
(S)-1a-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/49

flow rate = 1.0 mL/min

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm

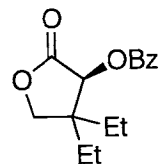
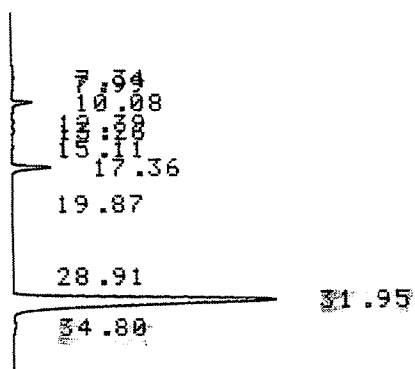
ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	33.29	181	0.018		BV
2	33.87	8680	0.867		VV
3	39.35	992662	99.115	0.9999	VB
		1001523	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

CH. 1 C.S 1.25 ATT 7 OFF5 0 00/00/00



(S)-1b-benzoate
CHIRALPAK AS-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

D-2500

METHOD: TAG: 6 CH: 1
FILE: 0 CALC-METHOD: AREA% TABLE: 0

NO.	RT	AREA	CONC	BC
3	10.08	45358	2.508	BB
7	17.36	104640	5.785	BB
10	31.95	1647822	91.106	BU ◊
11	34.80	10867	0.601	TBB ◊
TOTAL		1808687	100.000	
PEAK REJ :		10000		

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/11/10 09:51

作成日時: 2012/09/12 19:40

処理日時: 2012/09/12 19:40

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\NO.3-102re\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

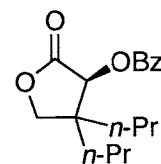
サンプルコメント:

シー・ス: NO.3-102re

注入量: 10.0 μ l

注入回数: 1 of 1

カラム名: AD-H

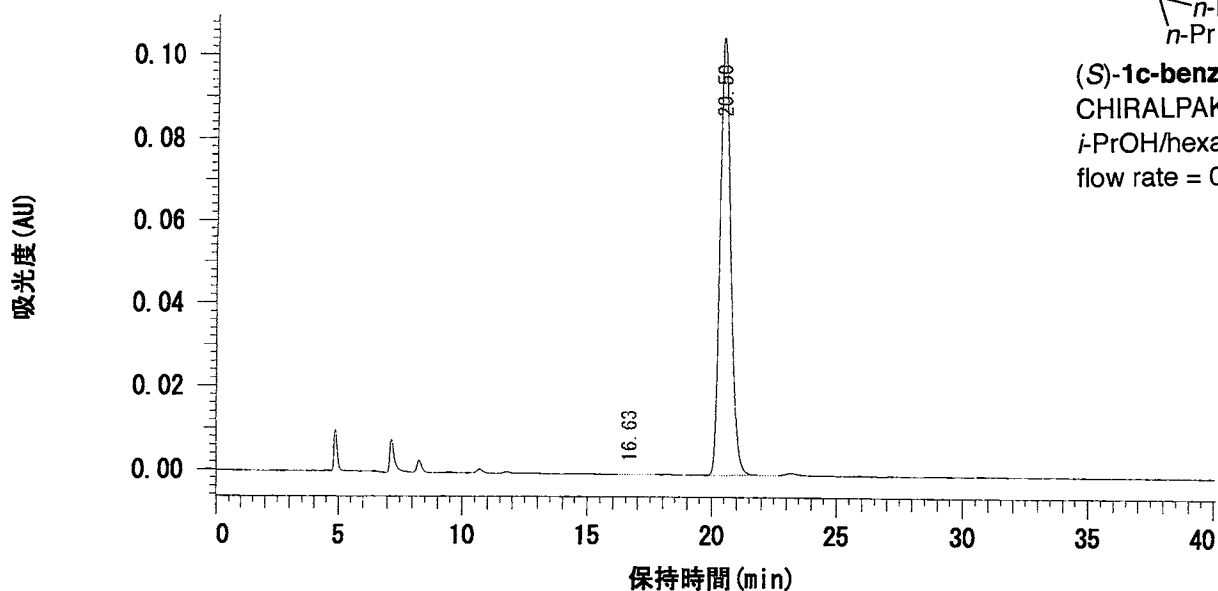


(S)-1c-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 mL/min



カラムタイプ: 固定波長カラム, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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

分析ファイルコメント:

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	16.63	489	0.032		BB
2	20.50	1545542	99.968		BB
		1546031	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: 2012/01/20 20:24

作成日時: 2012/01/20 21:02

処理日時: 2012/01/20 21:02

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\K_Gotoh\DATA\NO. 3-156\

データ処理用分析ファイル: Hexane/2-Propanol

システム(データ収集): Sys 2

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

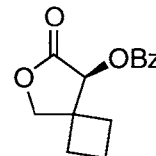
サンプルコメント:

シリーズ: NO. 3-156

ファイル: 1

ファイル名: UNK

注入量: 10.0 ul



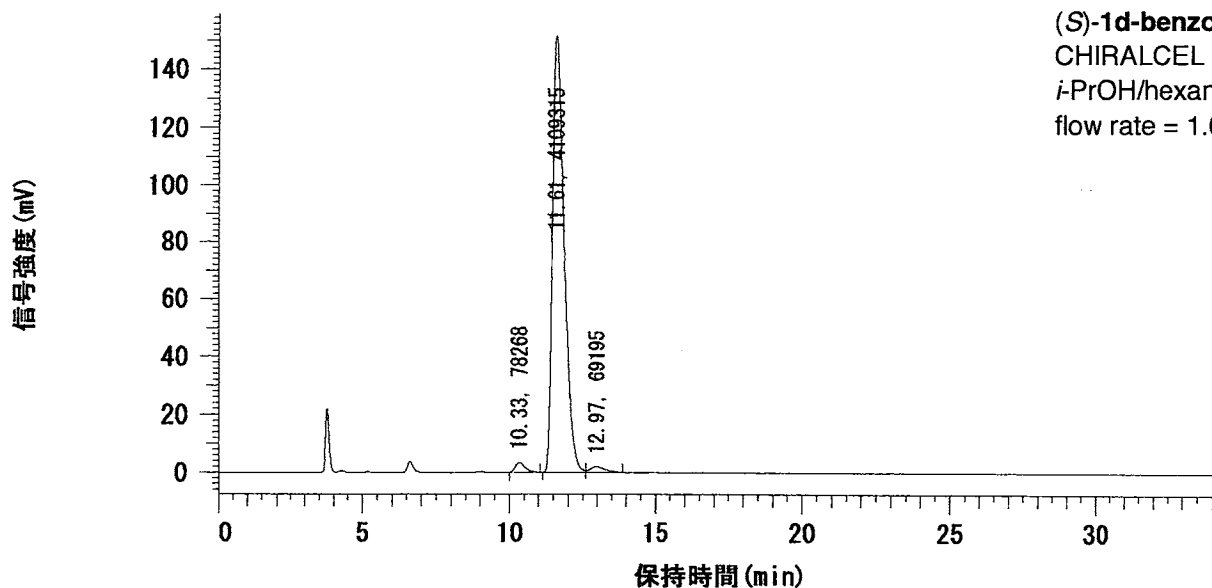
(S)-1d-benzoate

CHIRALCEL OD-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: Hexane/2-Propanol

カラム名: OD-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:

分析ファイルコメント:

リポート作成者:

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	10.33	78268	1.839	MC
2	11.61	4109315	96.536	MC
3	12.97	69195	1.626	MC
		4256778	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: 2011/10/22 15:49

作成日時: 2011/10/22 16:33

処理日時: 2011/10/22 16:33

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-090\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

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:

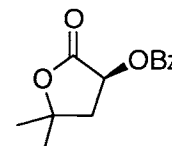
シリーズ: No. 3-090

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

加マトタイプ: 固定波長加マト, 254 nm

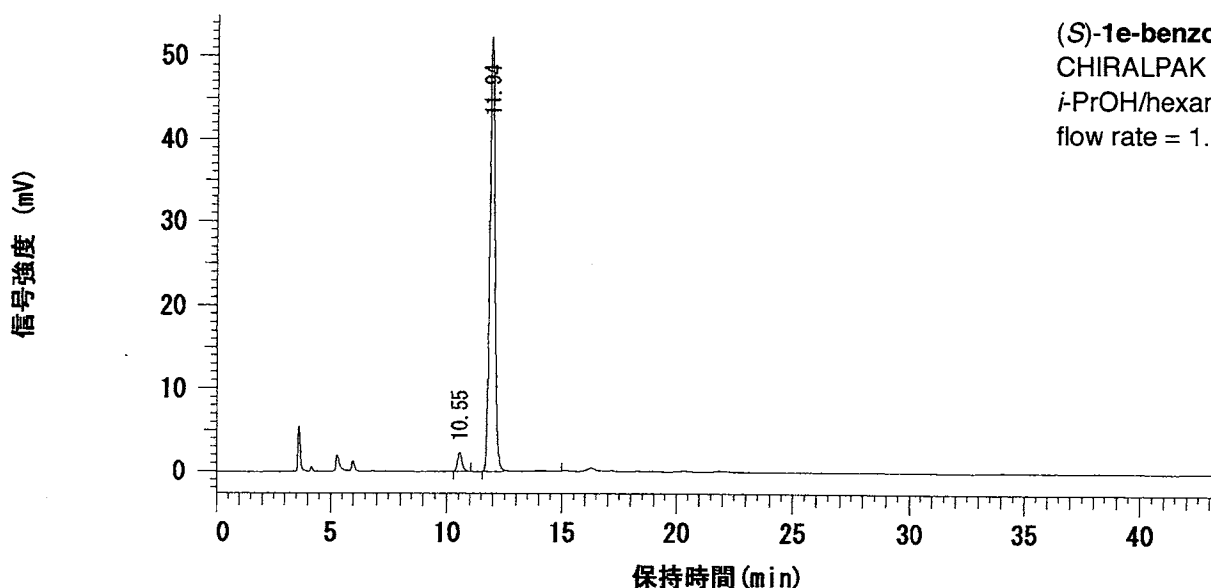


(S)-1e-benzoate

CHIRALPAK AD-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: 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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

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	10.55	28859	3.609	0.9998	BB
2	11.94	770693	96.391	1.0000	BB
		799552	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: 2013/01/31 19:37

作成日時: 2013/01/31 21:29

処理日時: 2013/01/31 21:29

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\0122\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 0122

アプリケーション(データ): kitajima

バイアル: 1

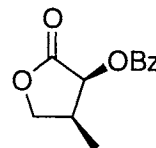
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

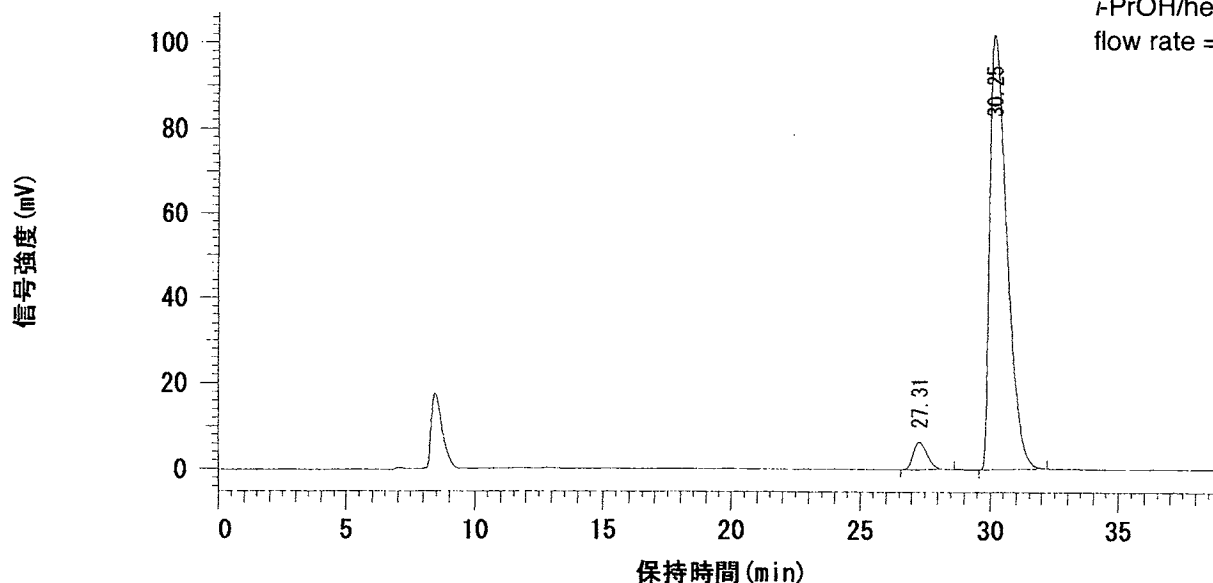
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(S)-cis-1f-benzoate
CHIRALCEL OD-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: test

カラム名: Column

メソッド作成者:

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	27.31	233992	4.850	BB
2	30.25	4590307	95.150	BB
		4824299	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: 2011/10/24 19:04

作成日時: 2011/10/24 19:55

処理日時: 2011/10/24 19:55

データパス名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\K_Gotoh\DATA\No. 3-088

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

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:

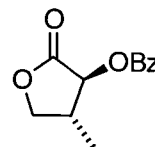
シリーズ: No. 3-088

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

検出器タイプ: 固定波長検出器, 254 nm

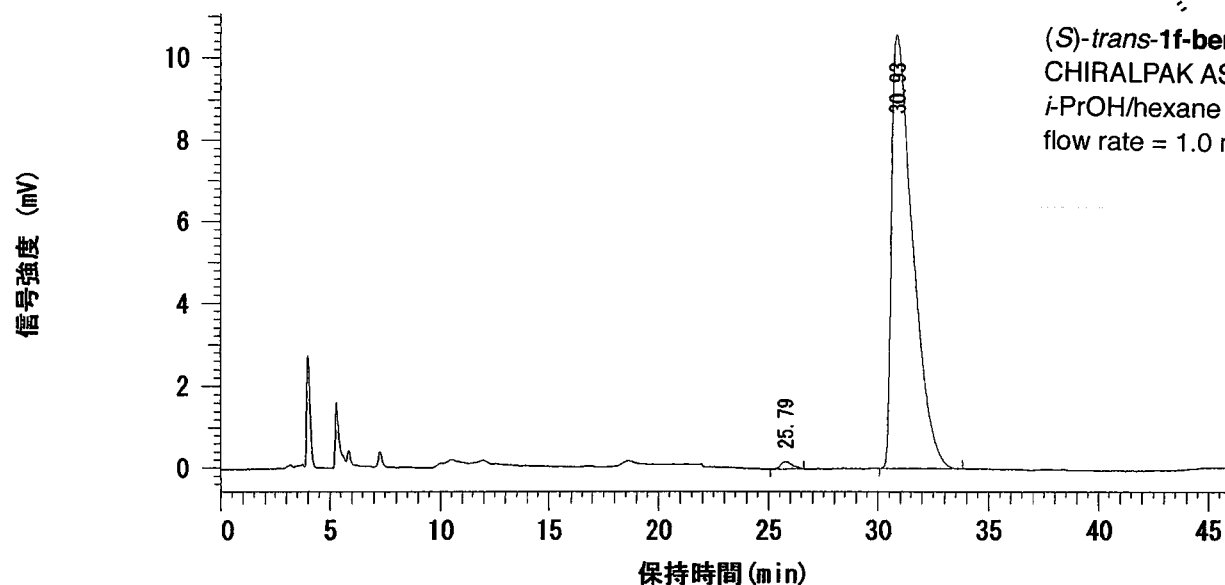


(S)-trans-1f-benzoate

CHIRALPAK AS-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: AS-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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

ポンプ A 溶離液D:

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	25.79	6729	0.955		MC
2	30.93	698115	99.045	1.0000	MC
		704844	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: 2013/02/06 23:26

作成日時: 2013/02/07 11:29

処理日時: 2013/02/07 11:28

データパス名: C:\USERS\SHI\LAB\DOCUMENTS\学生フォルダ\HPLC-DATA\K_Ono\DATA\Gotoh-endo-chiral\

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

アプリケーション(データ): K_Ono

サンプル名: 未知試料001

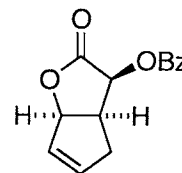
サンプルコメント:

シリーズ: Gotoh-endo-chiral

注入量: 2.0 ul

注入回数: 1 of 1

グラム名: OJ-H

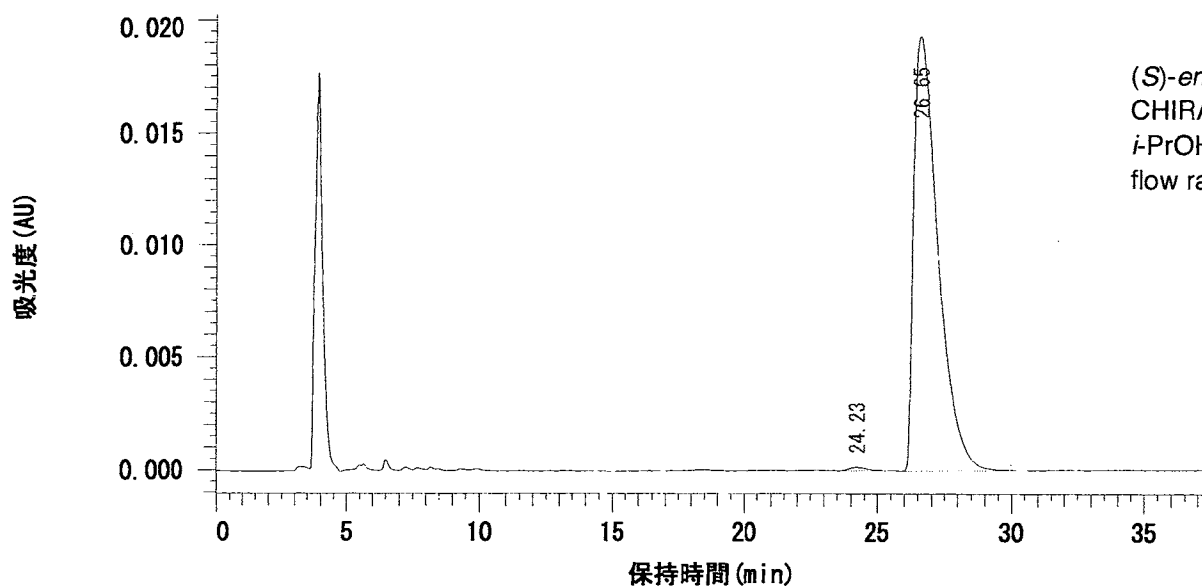


(S)-endo-1g-benzoate

CHIRALCEL OJ-H

i-PrOH/hexane = 1/4

flow rate = 1.0 mL/min



クロマトタイプ: 固定波長クロマト, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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

分析ファイルコメント:

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	24.23	3377	0.560	0.9783	BB
2	26.65	599737	99.440	1.0000	BB
		603114	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: 2013/01/22 14:10

作成日時: 2013/01/22 21:51

処理日時: 2013/01/22 21:50

データパス名: C:\USERS\SHI\INLAB\DOCUMENTS\学生フォルダ\HPLC-DATA\K_Ono\DATA\16-061Bz\

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: 16-061Bz

アプリケーション(データ): K_Ono

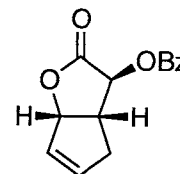
注入量: 2.0 ul

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:

カラム名: IA

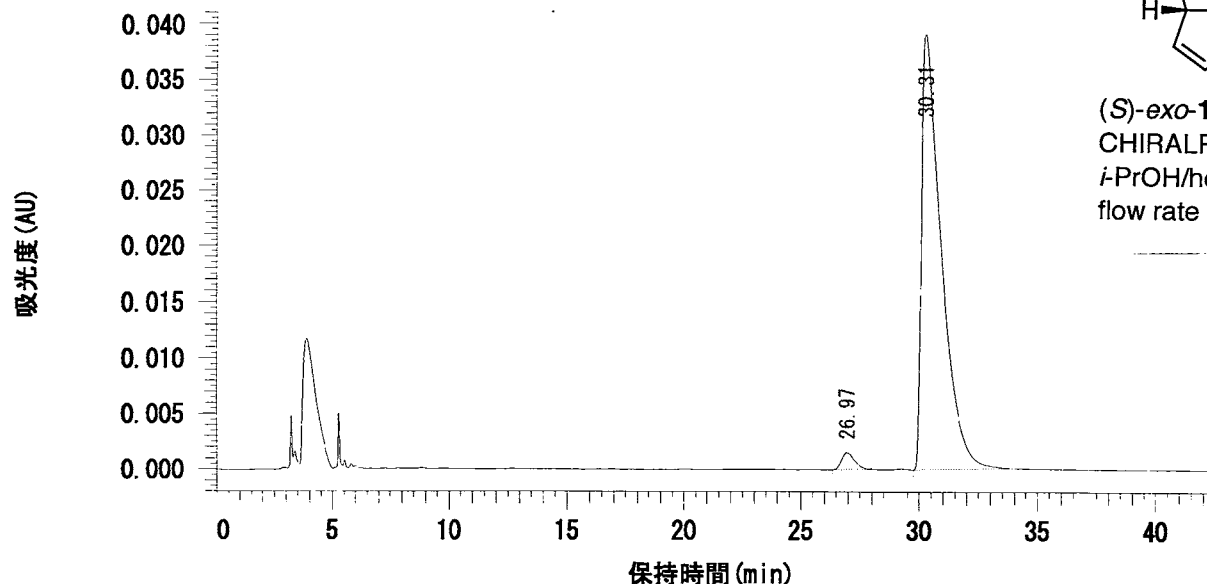


(S)-exo-1g-benzoate

CHIRALPAK IA

i-PrOH/hexane = 1/49

flow rate = 1.0 mL/min



クロマトタイプ: 固定波長クロマト, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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

分析ファイルコメント:

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	26.97	28454	2.505		BB
2	30.31	1107524	97.495		BB
		1135978	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: 2012/01/21 11:41

作成日時: 2012/01/21 14:23

処理日時: 2012/01/21 14:23

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\NO.3-147

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

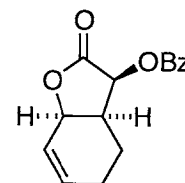
注入回数: 1 of 1

サンプルコメント:

シリーズ: NO.3-147

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 μ l

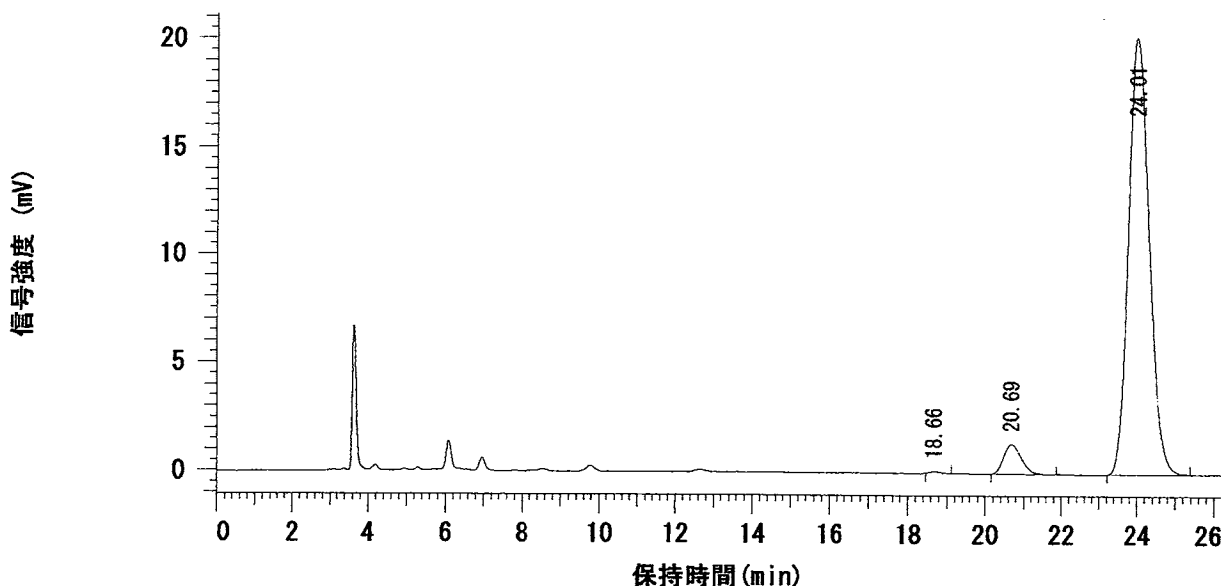
(S)-endo-1h-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 1.0 mL/min

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	18.66	0	0.000		
2	20.69	43934	5.531		BB 0
3	24.01	750456	94.469		MC 0
		794390	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: 2012/01/21 13:02

作成日時: 2012/01/21 14:20

処理日時: 2012/01/21 14:19

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\NO.3-148

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

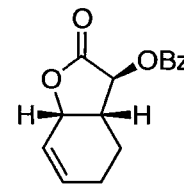
サンプルコメント:

シリーズ: NO.3-148

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



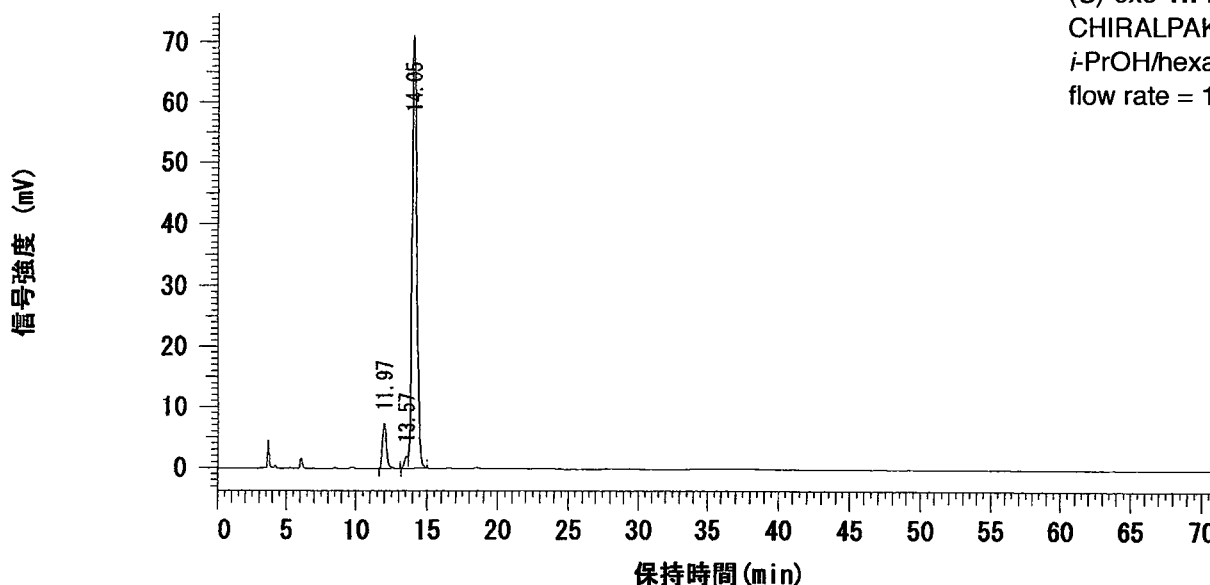
(S)-exo-1h-benzoate

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 1.0 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: 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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

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	11.97	137839	7.899	1.0000	BB
2	13.57	30770	1.763	0.9989	BV
3	14.05	1576464	90.338	0.9985	VB
		1745073	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: 2013/02/01 17:32

作成日時: 2013/02/01 20:03

処理日時: 2013/02/01 20:03

データパス名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\0126

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

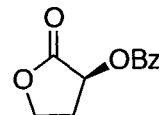
サンプルコメント:

シリーズ: 0126

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



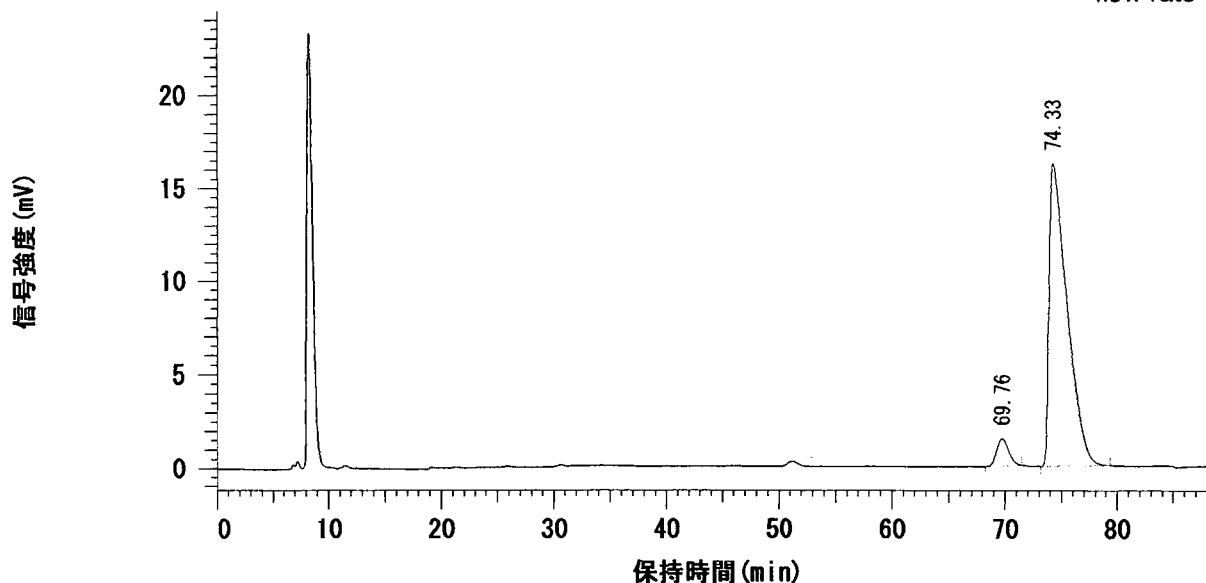
(S)-1i-benzoate

CHIRALPAK ID

i-PrOH/hexane = 1/4

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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	69.76	104344	5.572	BB
2	74.33	1768228	94.428	BB
		1872572	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

HPLC Analyses of Racemic Compounds 2a–2i

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/09/22 17:32

作成日時: 2011/09/22 18:33

処理日時: 2011/09/22 18:33

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\2000HSM\K_Gotoh\DATA\No.1-107

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: No.1-107

アプリケーション(データ): K_Gotoh

バイル: 1

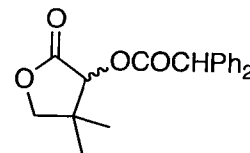
サンプル名: 未知試料001

バイルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

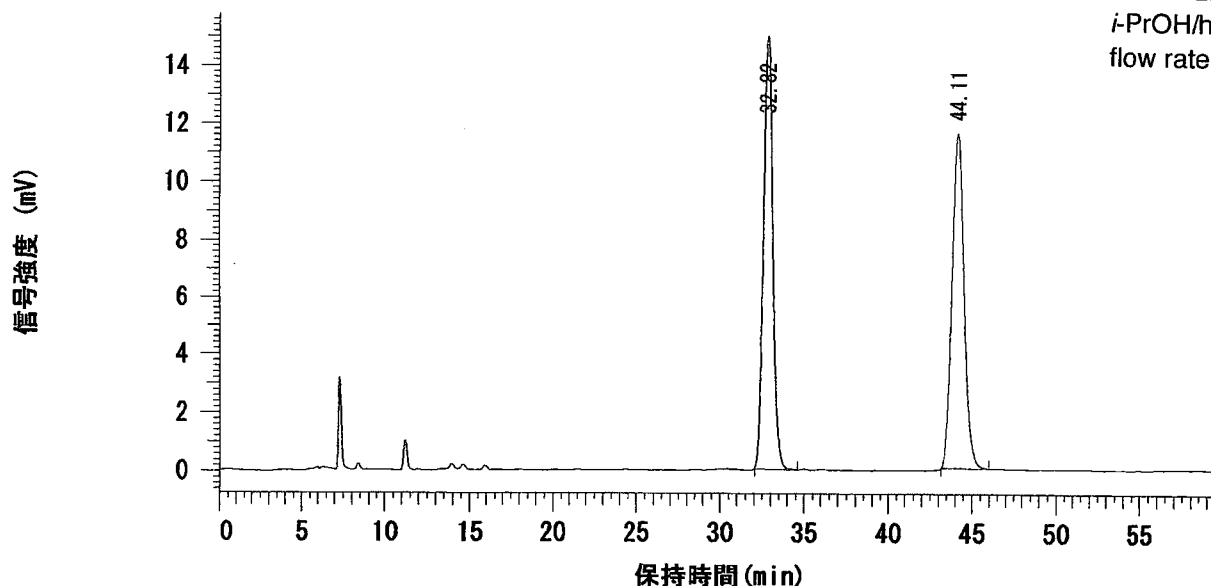
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



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

カラムタイプ: 固定波長カラム, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: AD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

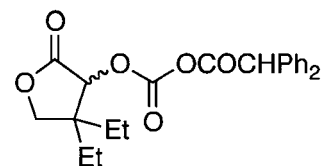
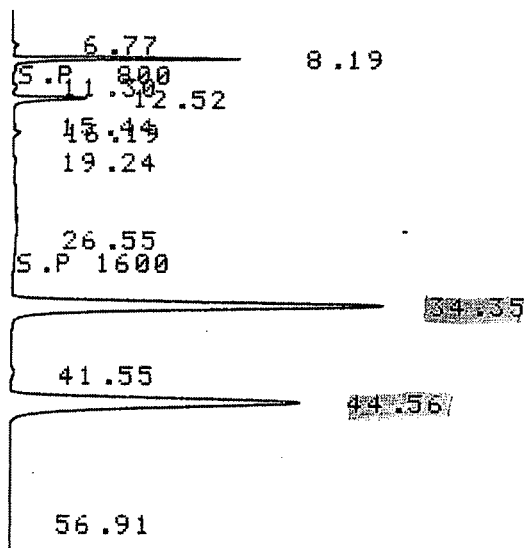
カラムタイプ: 固定波長カラム, 254 nm

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	32.82	555418	49.356	1.0000	BB
2	44.11	569904	50.644		BB
		1125322	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0



rac-2b

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

D-2500

METHOD: TAG: 3 CH: 1

FILE: 0 CALC-METHOD: AREA% TABLE: 0

NO.	RT	AREA	CONC	BC
9	34.35	1080397	50.128	VB
11	44.56	1074880	49.872	BB

TOTAL

2155277 100.000

PEAK REJ : 400000

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/10/14 10:15

作成日時: 2011/10/14 11:42

処理日時: 2011/10/14 11:41

データベース名: C:\WIN32APP\2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-057

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

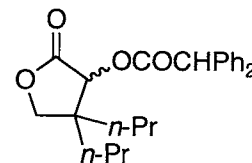
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-057

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



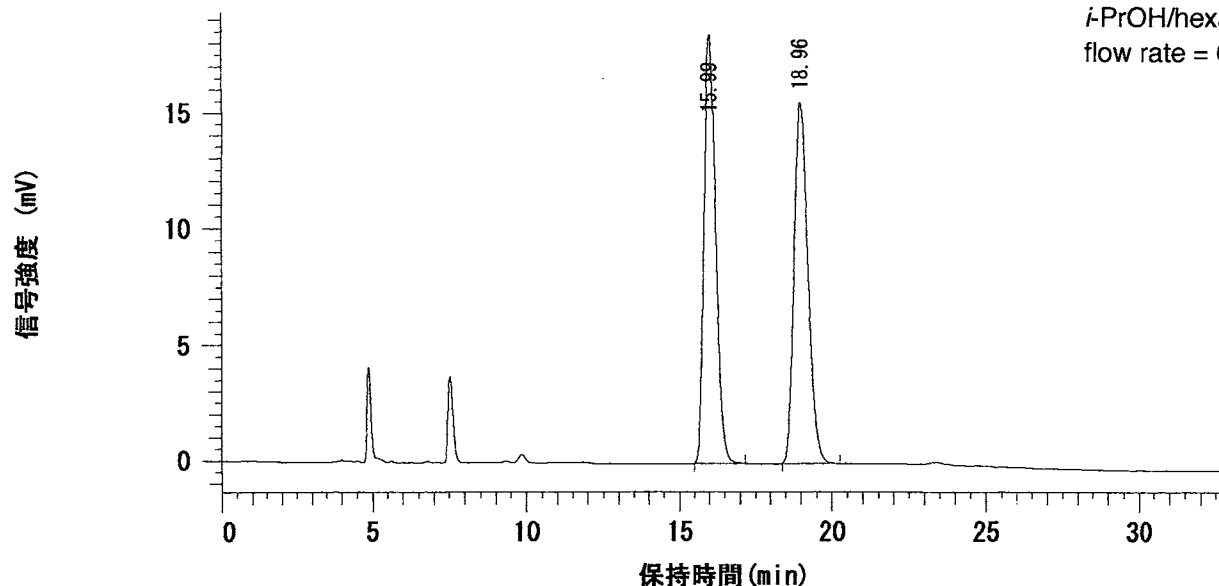
rac-2c

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 mL/min

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: AD-H

メソッド作成者: K_Gotoh

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:

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	15.99	478647	49.866		BB
2	18.96	481212	50.134		BB
		959859	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: 2012/01/17 20:52

作成日時: 2012/01/17 21:26

処理日時: 2012/01/17 21:26

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-078\

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: No. 3-078

アプリケーション(データ): K_Gotoh

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

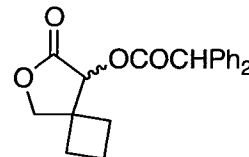
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

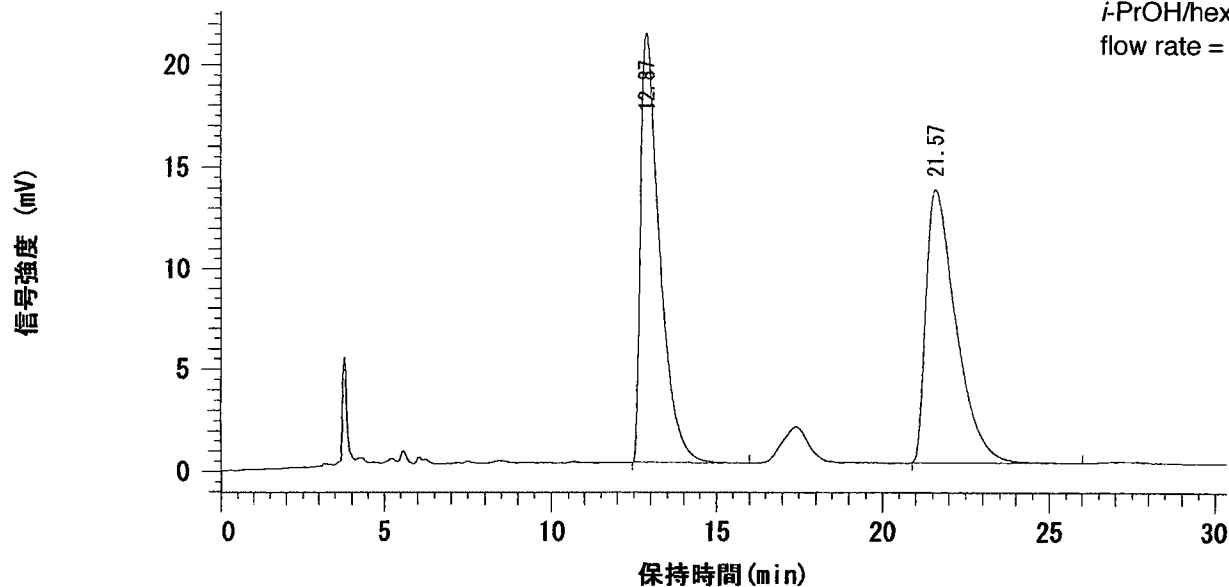
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検出器タイプ: 固定波長検出, 254 nm



rac-2d
CHIRALCEL OD-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: OD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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, 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	12.87	826043	49.762		BB
2	21.57	833940	50.238	0.9944	BB
		1659983	100.000		

レポートの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/09/22 14:49

作成日時: 2011/09/22 15:14

処理日時: 2011/09/22 15:14

データパス名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\K_Gotoh\DATA\No. 3-033-2

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

シーヌ: No. 3-033-2

アプリケーション(データ): K_Gotoh

ファイル: 1

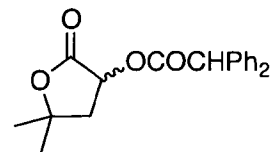
サンプル名: 未知試料001

パイロット: UNK

注入回数: 1 of 1

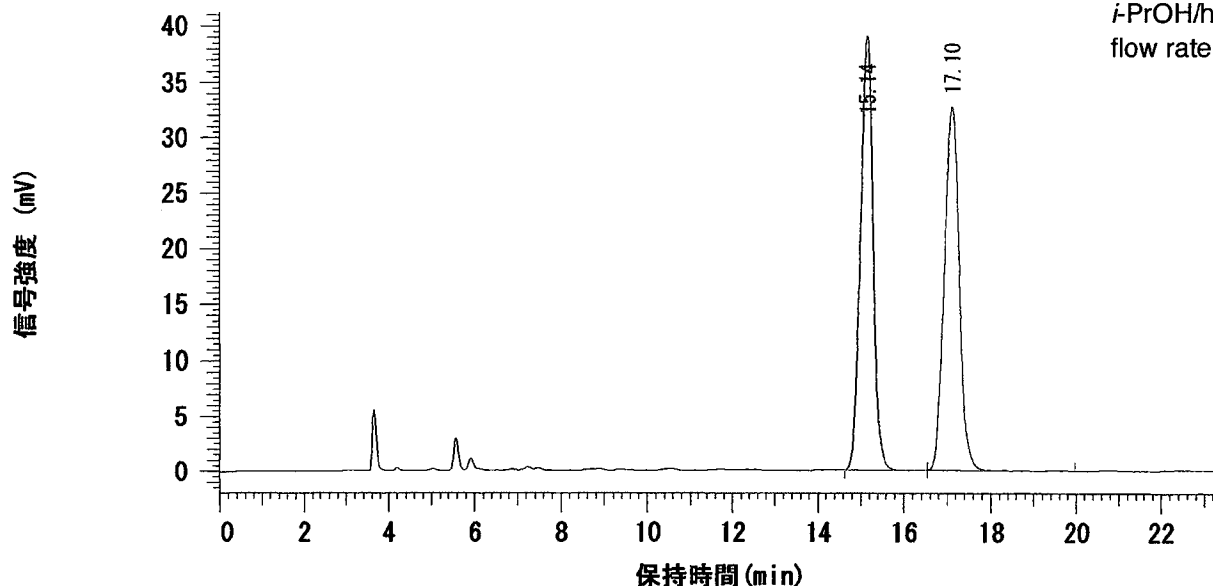
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-2e
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 1.0 mL/min

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

カラム名: AD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

ポンプA 溶離液D:

分析ファイルコメント:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	15.14	783778	49.864		BB
2	17.10	788040	50.136		BB
		1571818	100.000		

レポートの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2013/01/31 15:43

作成日時: 2013/01/31 16:42

処理日時: 2013/01/31 16:42

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\0120\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

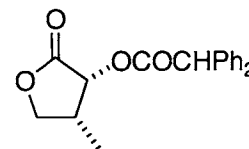
サンプルコメント:

シリーズ: 0120

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul

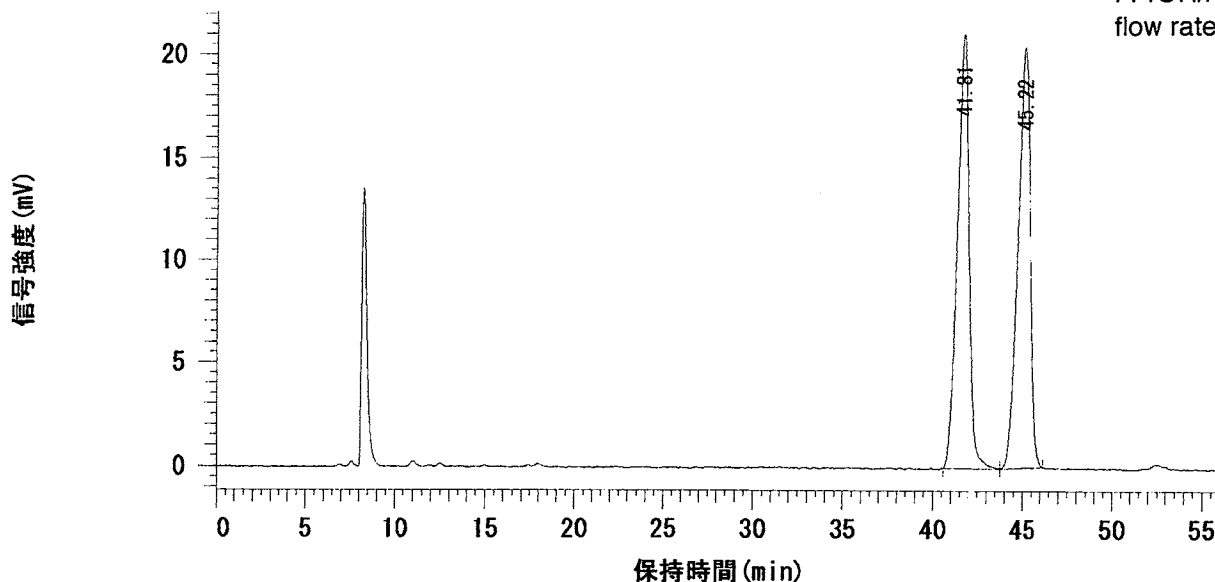
*rac-cis-2f*

CHIRALPAK AD-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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	41.81	979535	50.426	BB
2	45.22	963002	49.574	BB
		1942537	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: 2011/08/08 19:02

作成日時: 2011/08/25 10:38

処理日時: 2011/08/25 10:38

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM_2\K_Gotoh\DATA\No. 2-170\

データ処理用分析ファイル: method

システム(データ収集): Sys 2

シリーズ: No. 2-170

アプリケーション(データ): K_Gotoh

ファイル: 1

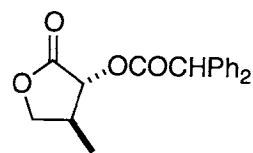
サンプル名: 未知試料001

ファイル名: UNK

注入回数: 1 of 1

注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



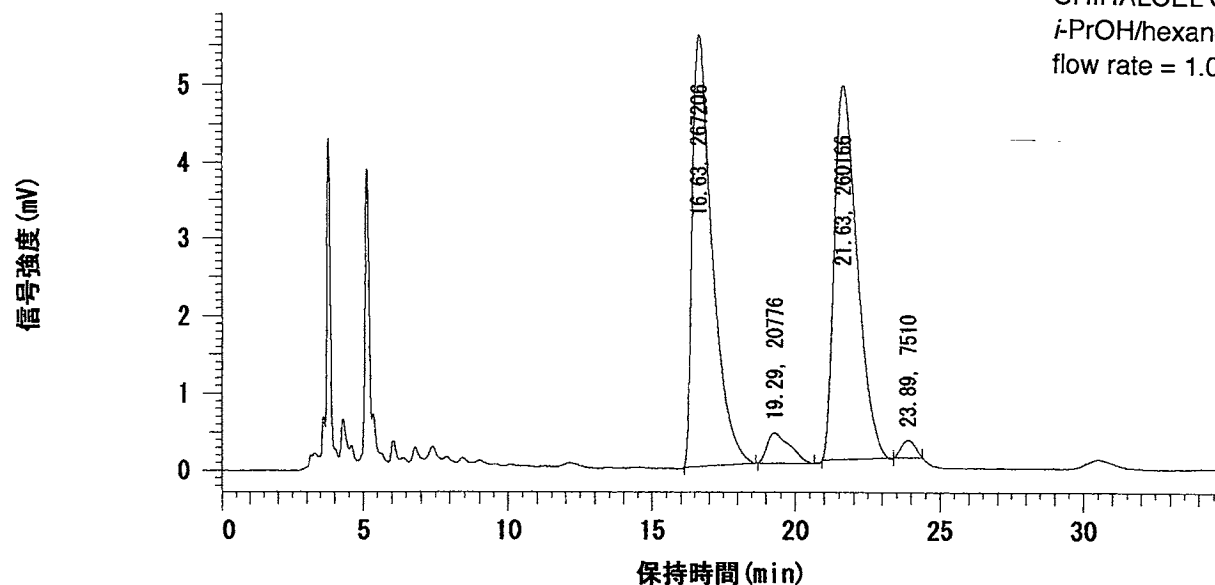
rac-trans-2f

CHIRALCEL OD-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: method

カラム名: OD-H

リポート作成者:

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:

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	16.63	267206	48.088	MC ✖
2	19.29	20776	3.739	MC
3	21.63	260166	46.821	MC ✖
4	23.89	7510	1.352	MC
555658			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 12:29

作成日時: 2013/01/25 13:22

処理日時: 2013/01/25 13:22

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\rac-endo-ester\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: rac-endo-ester

アプリケーション(データ): kitajima

バイアル: 1

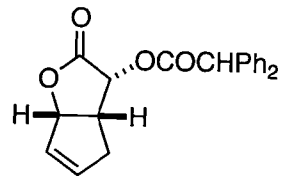
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

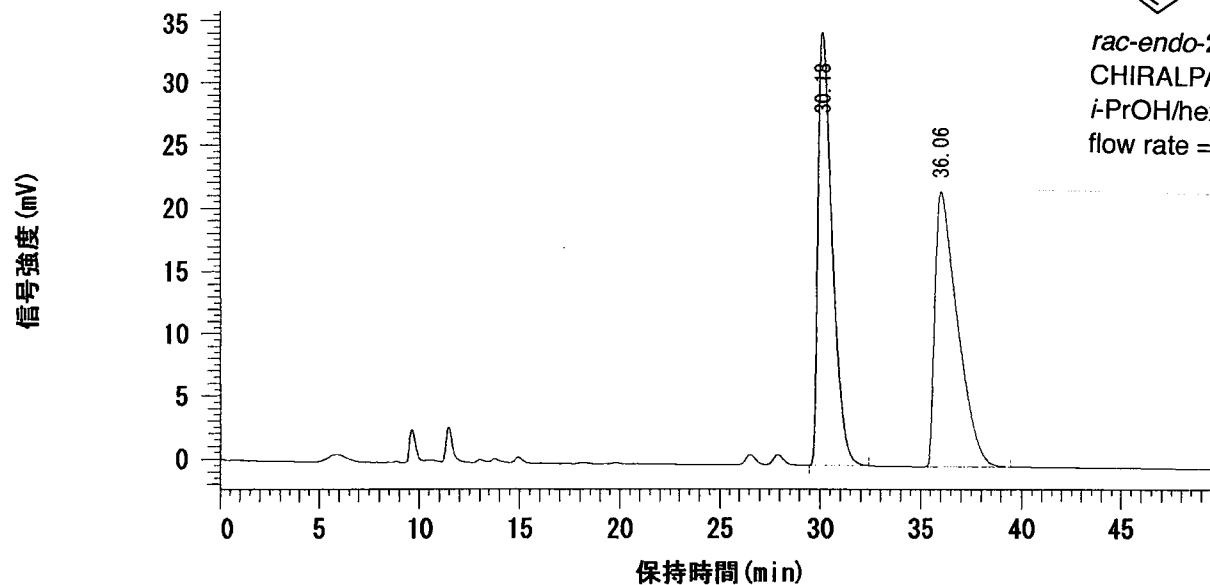
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



rac-endo-2g
CHIRALPAK ID
i-PrOH/hexane = 1/1
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: test

カラム名: Column

メソッド作成者:

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	30.18	1657081	49.888	BB
2	36.06	1664494	50.112	BB
		3321575	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: 2013/01/17 18:22

作成日時: 2013/01/17 19:47

処理日時: 2013/01/17 19:46

データパス名: C:\USERS\SHI\INLAB\DOCUMENTS\学生フォルダ\HPLC-DATA\K_Ono\DATA\16-062\

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: 16-062

アプリケーション(データ): K_Ono

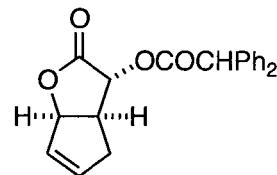
注入量: 2.0 ul

サンプル名: 未知試料001

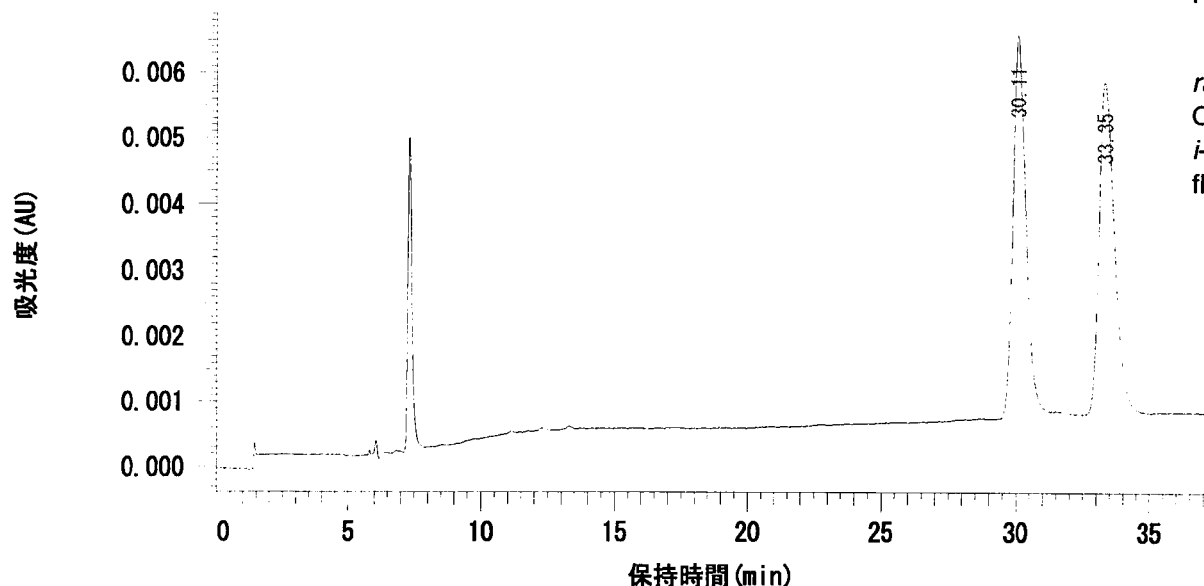
注入回数: 1 of 1

サンプルコメント:

カラム名: AD-H



rac-exo-2g
CHIRALPAK AD-H
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min



クロマトタイプ: 固定波長クロマト, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

ポンプ A (メイン): L-2130

ポンプ A 溶離液A: Hexane

分析ファイルコメント:

ポンプ A 溶離液B: 2-Propanol

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	30.11	99863	50.324		BB
2	33.35	98578	49.676		BB
		198441	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: 2012/01/20 16:46

作成日時: 2012/01/20 17:46

処理日時: 2012/01/20 17:46

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\NO.3-157\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

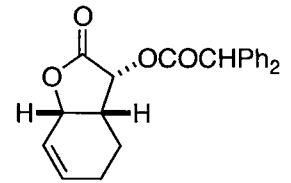
注入回数: 1 of 1

サンプルコメント:

シリーズ: NO.3-157

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

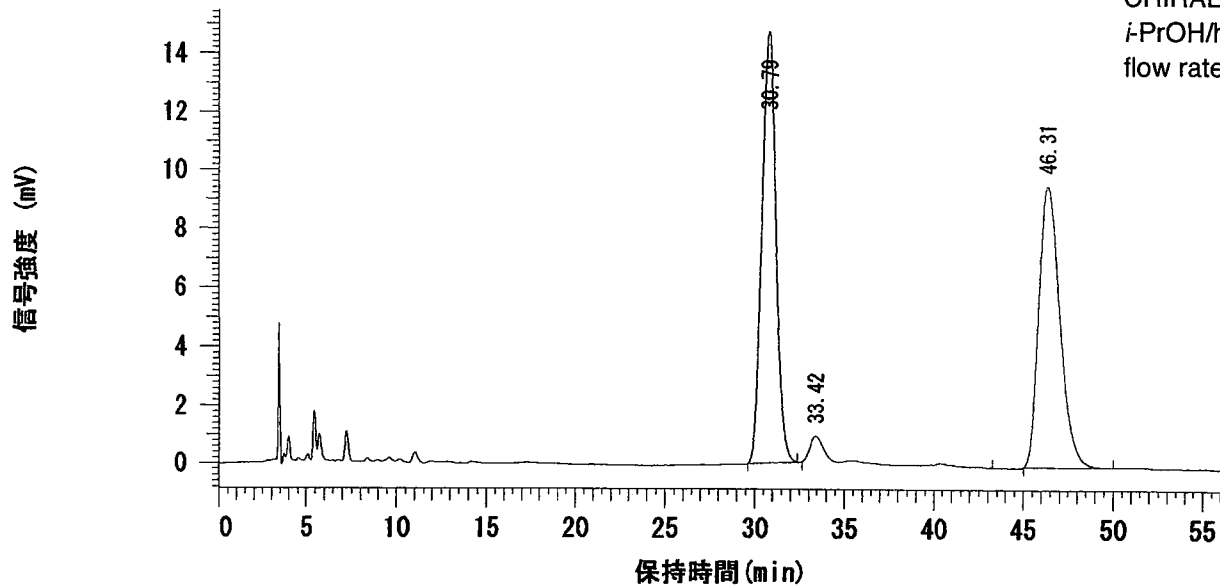
注入量: 10.0 μ l*rac-endo-2h*

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 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: AD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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	30.79	775822	49.865		MC
2	33.42	0	0.000		
3	46.31	780037	50.135		BB
		1555859	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: 2011/11/10 19:57

作成日時: 2011/11/10 20:32

処理日時: 2011/11/10 20:32

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-094\

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: No. 3-094

アプリケーション(データ): K_Gotoh

バイアル: 1

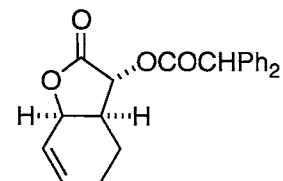
サンプル名: 未知試料001

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:

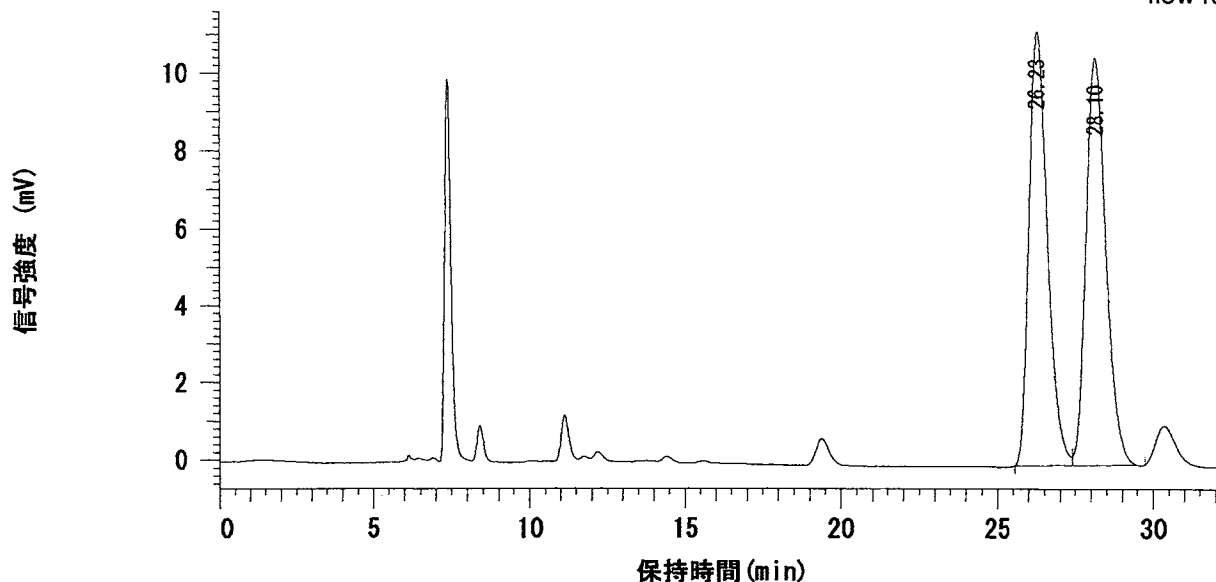
*rac-exo-2h*

CHIRALPAK AD-H

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: AD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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	26.23	456614	49.829	1.0000	BV
2	28.10	459752	50.171	1.0000	VB
		916366	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: 2013/01/29 10:51

作成日時: 2013/01/29 12:04

処理日時: 2013/01/29 12:03

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\0108\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

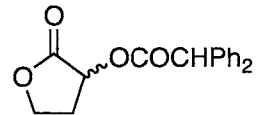
サンプルコメント:

シリーズ: 0108

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



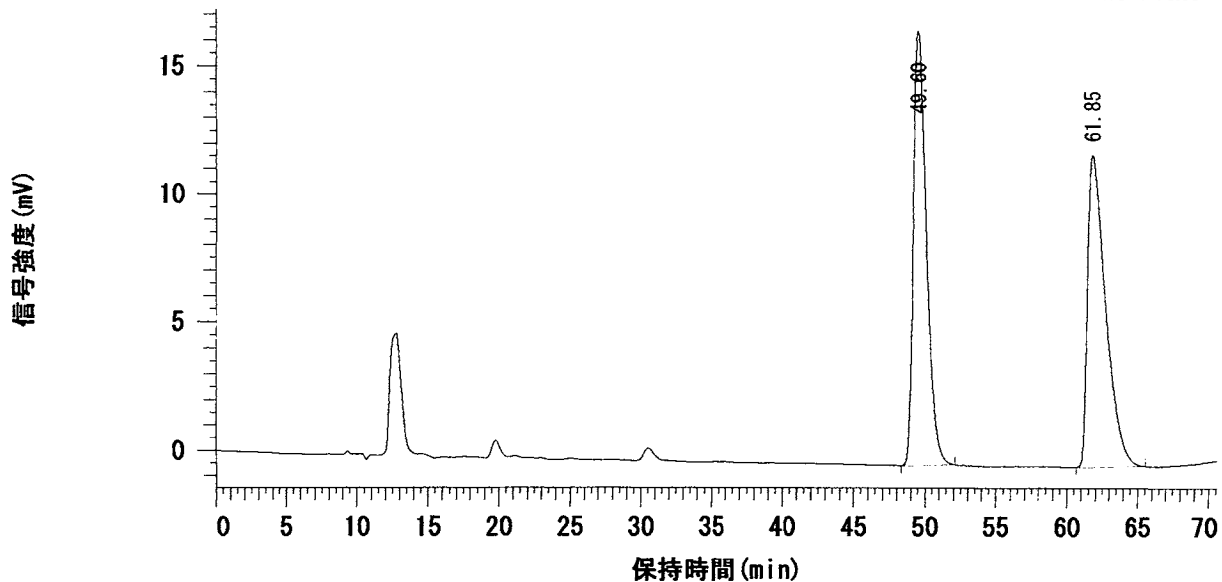
rac-2i

CHIRALPAK IC-3

i-PrOH/hexane = 1/1

flow rate = 0.35 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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	49.60	1077392	49.937	BB
2	61.85	1080102	50.063	BB
		2157494	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

HPLC Analyses of Chiral Compounds 2a–2i

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/09/27 10:56

作成日時: 2011/09/27 12:00

処理日時: 2011/09/27 12:00

データパス名: C:\WIN32APP\2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-027-2. TM

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

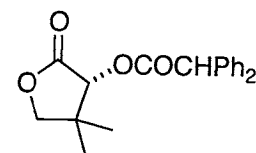
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-027-2. TM

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



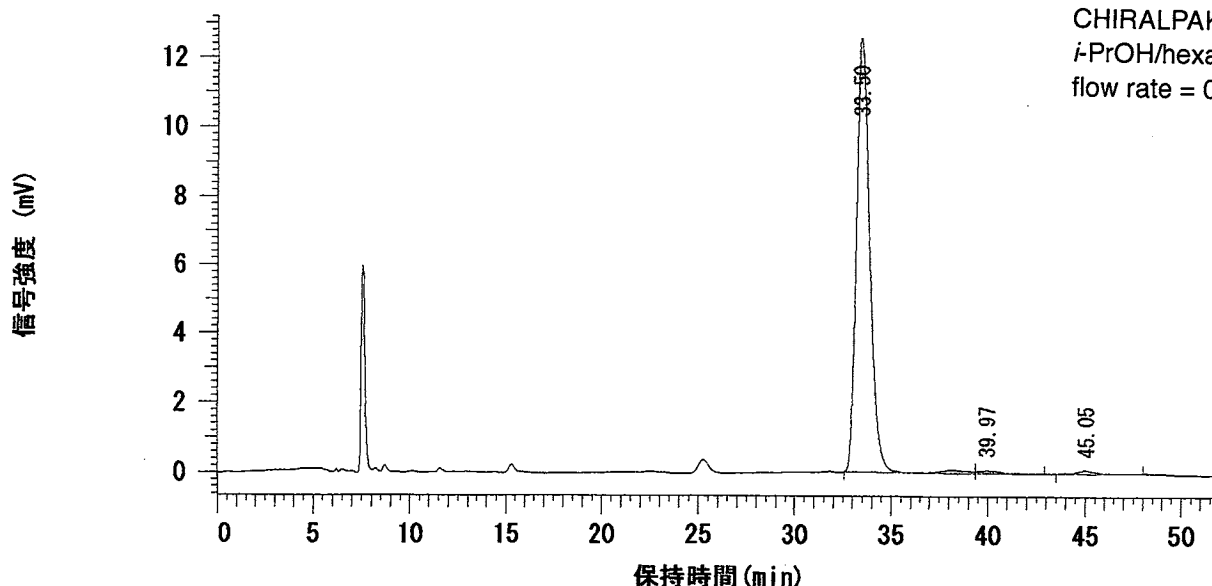
(R)-2a

CHIRALPAK AD-H

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: 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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

検出タイプ: 固定波長検出, 254 nm

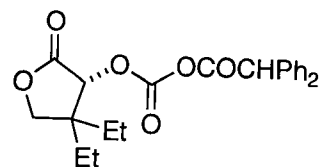
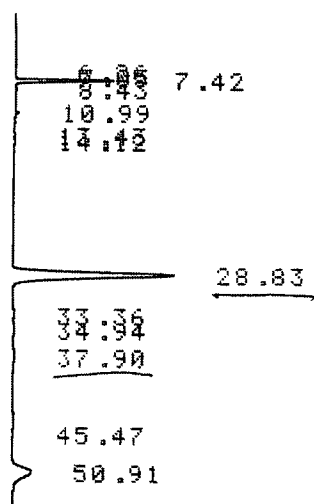
ピーク定量: 面積

定量計算方法: 面積%

NO	RT	面積	濃度1	純度	BC
1	33.50	600964	98.360		BV
2	39.97	2567	0.420		TBB
3	45.05	7451	1.220		BB
		610982	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

C.S 1.25 ATT 6 OFFS 0 00/00/0



(R)-2b

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min

: TAG: 2 CH: 1

0 CALC-METHOD: AREA% TABLE: 0

RT	AREA	CONC	BC
7.42	82812	13.810	VB
10.99	4724	0.788	BB
28.83	404432	67.447	BB
33.36	3547	0.592	BU
34.94	6011	1.002	VB
37.90	3696	0.616	BB
50.91	94409	15.745	BB

EJ : 599631 100.000
3000

D-2000 HPLC システム マネージャ レポート

分析日時: 2011/11/08 18:27

作成日時: 2012/09/12 19:34

処理日時: 2012/09/12 19:34

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\NO.3-100.TMre\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

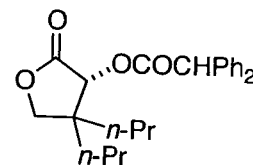
サンプルコメント:

シーナス: NO.3-100.TMre

注入量: 10.0 ul

注入回数: 1 of 1

カラム名: AD-H

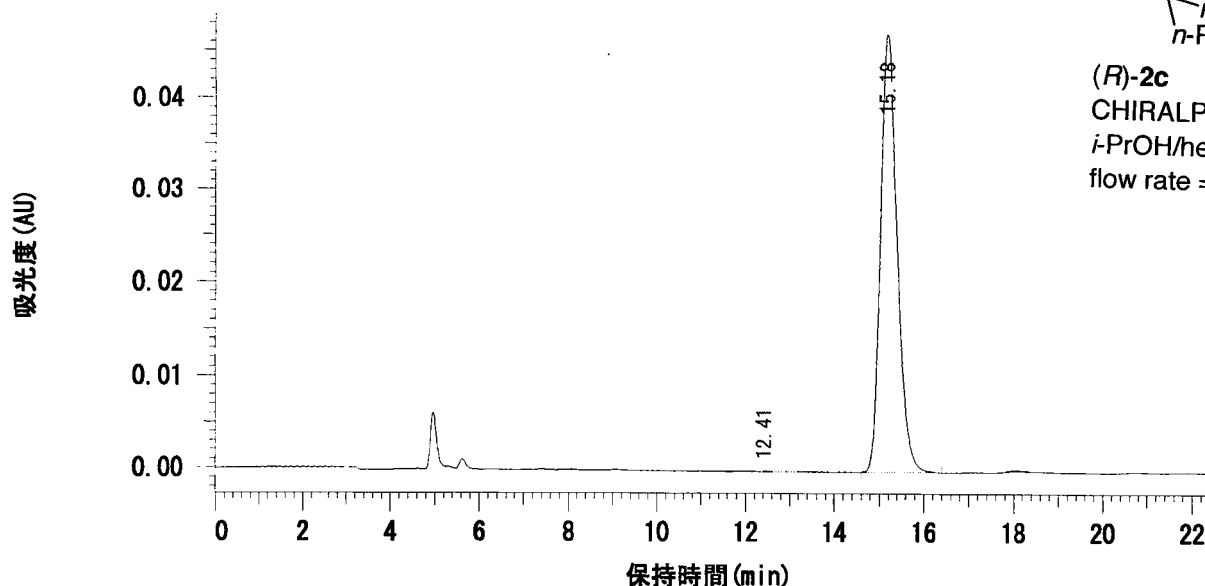


(R)-2c

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 mL/min



カラムタイプ: 固定波長カラム, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

ポンプA(メイン): L-2130

ポンプA 溶離液A: Hexane

分析ファイルコメント:

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

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	12.41	124	0.020		BB
2	15.18	614173	99.980		BB
		614297	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: 2012/01/18 15:33

作成日時: 2012/01/18 16:24

処理日時: 2012/01/18 16:24

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-151. TM

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

シーヌ: No. 3-151. TM

アプリケーション(データ): K_Gotoh

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

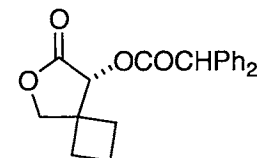
バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

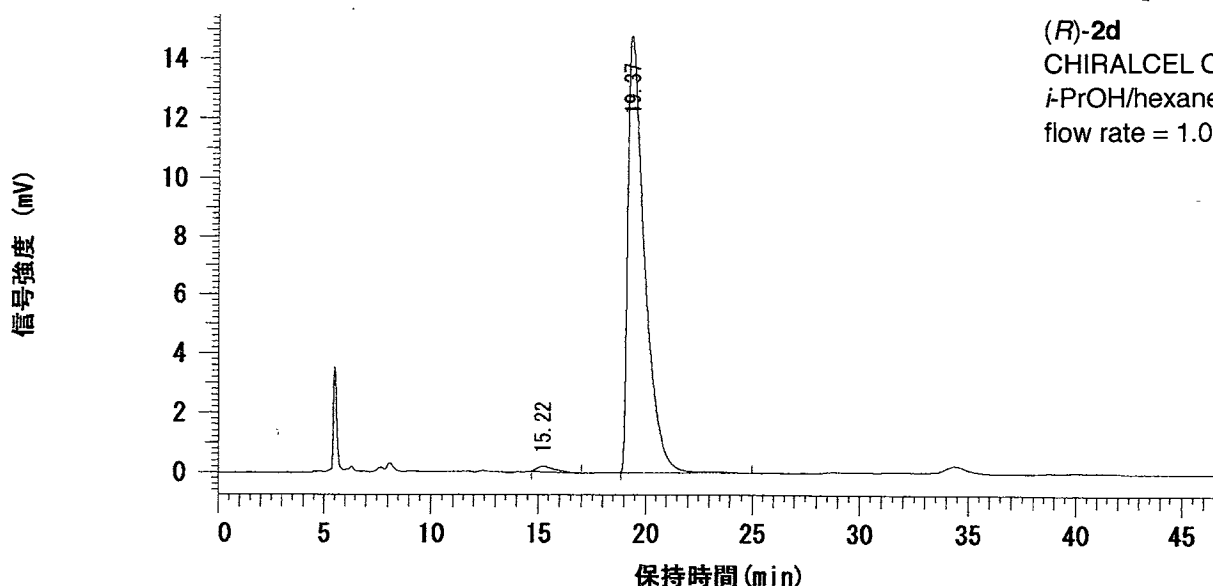
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:

検体タイプ: 固定波長検体, 254 nm



(R)-2d
CHIRALCEL OD-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: OD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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	15.22	10129	1.270		BB
2	19.37	787780	98.730	1.0000	BB
		797909	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: 2011/10/22 13:58

作成日時: 2011/10/22 14:27

処理日時: 2011/10/22 14:27

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\No. 3-086.TM\

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: No. 3-086.TM

アプリケーション(データ): K_Gotoh

バイアル: 1

サンプル名: 未知試料001

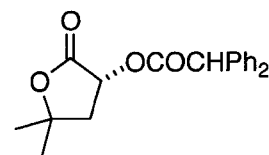
バイアルタイプ: UNK

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, 254 nm

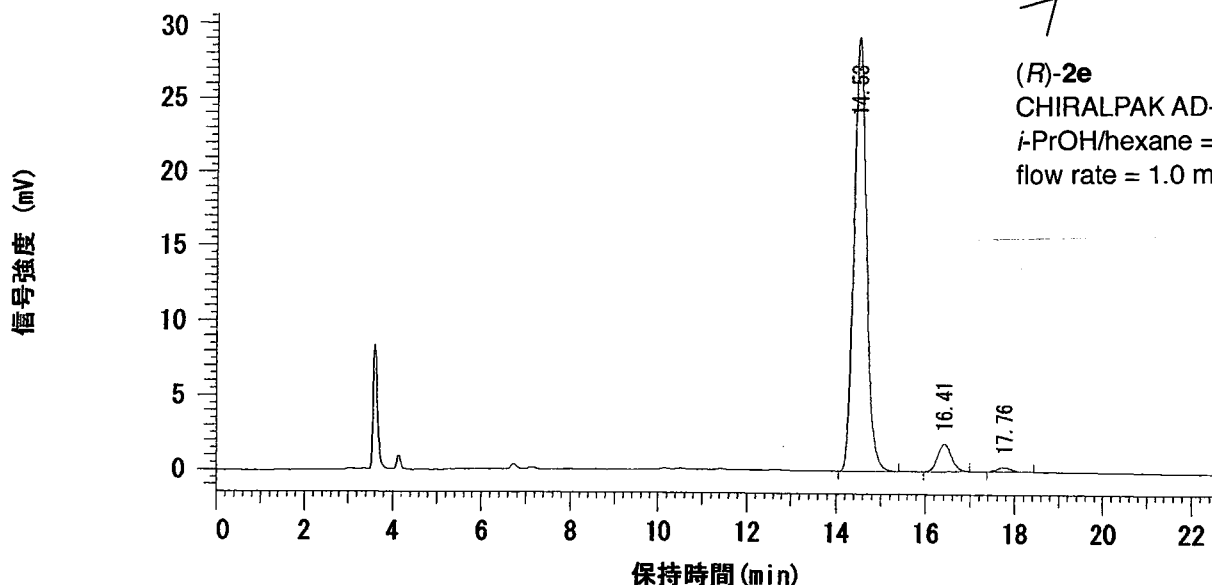


(R)-2e

CHIRALPAK AD-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: AD-H

レポート作成者: K_Gotoh

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:

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, 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	14.53	565886	92.603		MC ☆
2	16.41	38798	6.349	1.0000	MC ☆
3	17.76	6406	1.048	0.9934	MC
		611090	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: 2013/01/31 16:40

作成日時: 2013/01/31 18:05

処理日時: 2013/01/31 18:05

データベース名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\0125

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

シリーズ: 0125

アプリケーション(データ): kitajima

バイアル: 1

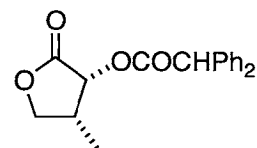
サンプル名: 未知試料001

バイアルタイプ: UNK

注入回数: 1 of 1

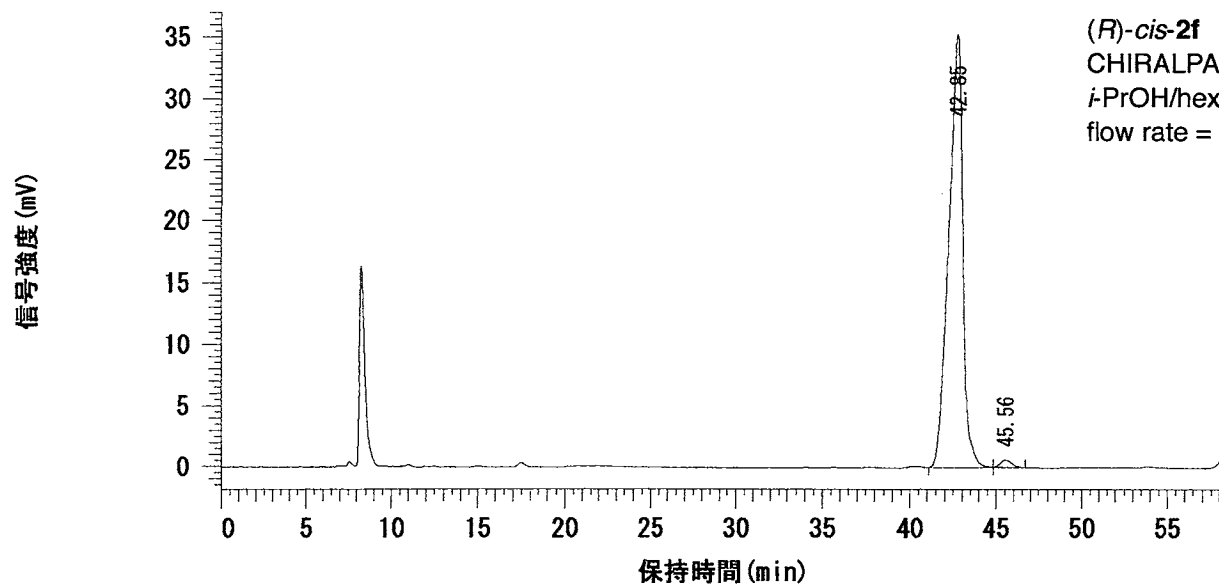
注入量: 10.0 ul

サンプルコメント:



(R)-cis-2f
CHIRALPAK AD-3
i-PrOH/hexane = 1/9
flow rate = 0.5 mL/min

クロマトタイプ: HPLC チャンセル: 1



データ処理用分析ファイル: test

カラム名: Column

レポート作成者:

分析ファイルコメント:

クロマトタイプ: HPLC チャンセル: 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	42.85	1944916	98.646	BV
2	45.56	26690	1.354	TBB
		1971606	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: 2011/10/20 19:57

作成日時: 2011/10/22 14:34

処理日時: 2011/10/22 14:34

データパス名: C:\WIN32APP\HPLC\DATA\K_Gotoh\DATA\No. 3-084. TM

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

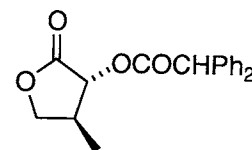
サンプルコメント:

シリーズ: No. 3-084. TM

ファイル: 1

ファイルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



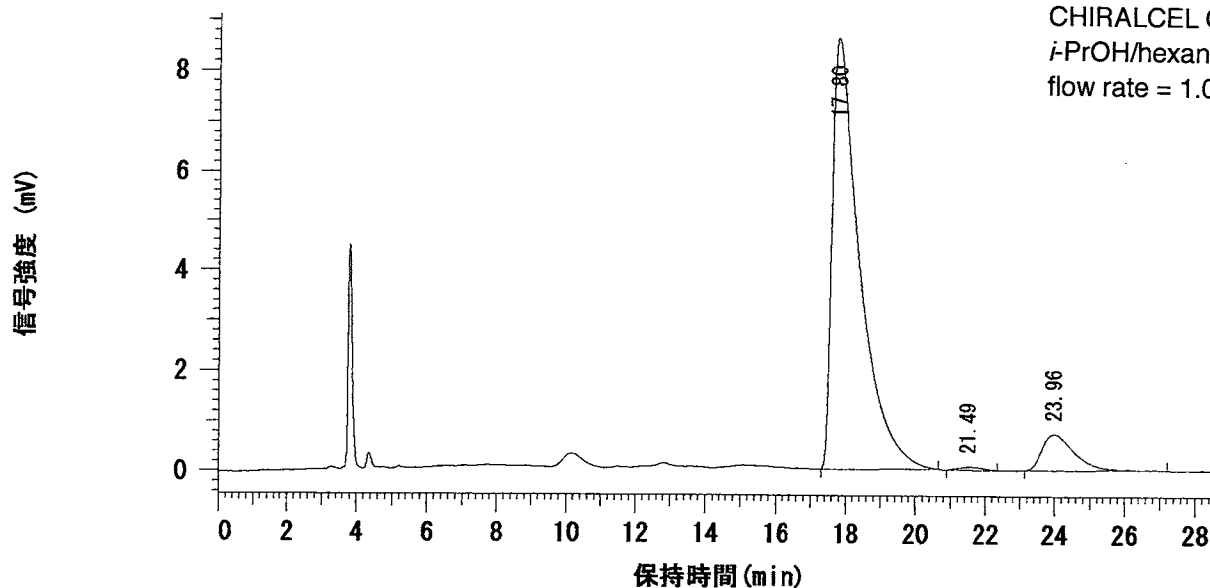
(R)-trans-2f

CHIRALCEL OD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 1.0 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: OD-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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

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	17.80	472330	90.658	1.0000	MC
2	21.49	2531	0.486		MC
3	23.96	46141	8.856	0.9998	MC
		521002	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 13:20

作成日時: 2013/01/25 14:04

処理日時: 2013/01/25 14:04

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\0090\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

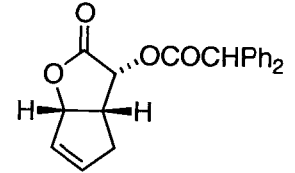
サンプルコメント:

シリーズ: 0090

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



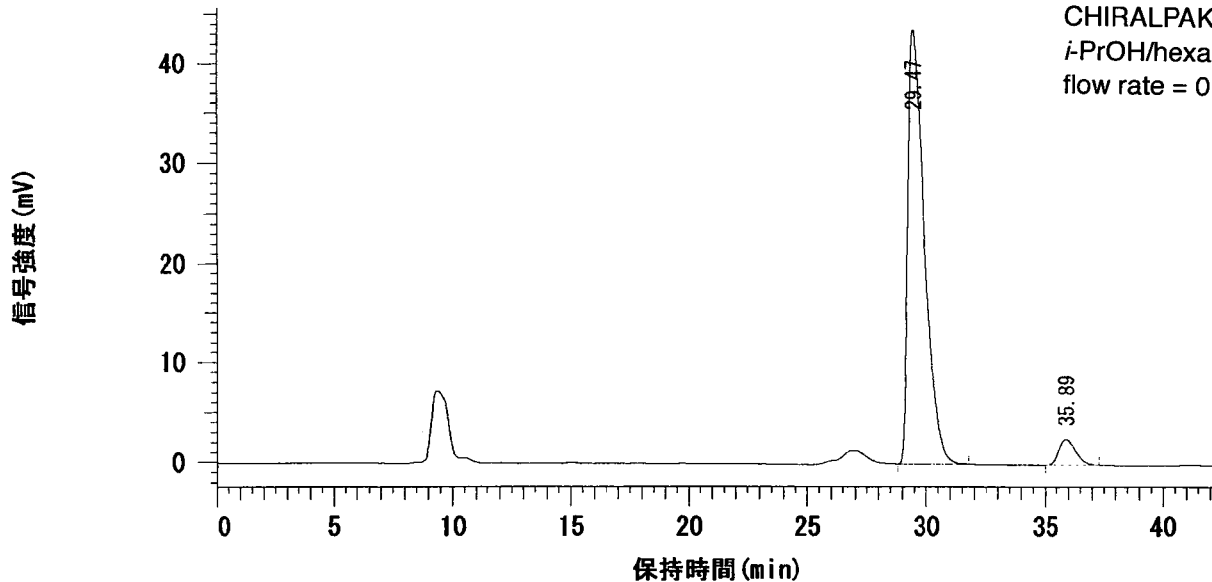
(R)-endo-2g

CHIRALPAK ID

i-PrOH/hexane = 1/1

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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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	29.47	2084208	94.356	BB
2	35.89	124663	5.644	BB
		2208871	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: 2013/01/17 19:03

作成日時: 2013/01/17 19:48

処理日時: 2013/01/17 19:47

データパス名: C:\¥USERS¥SHI\INLAB¥DOCUMENTS¥学生フォルダ¥HPLC-DATA¥K_Ono¥DATA¥16-061Es¥

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: 16-061Es

アプリケーション(データ): K_Ono

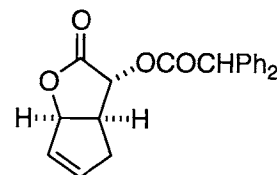
注入量: 2.0 ul

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:

カラム名: AD-H

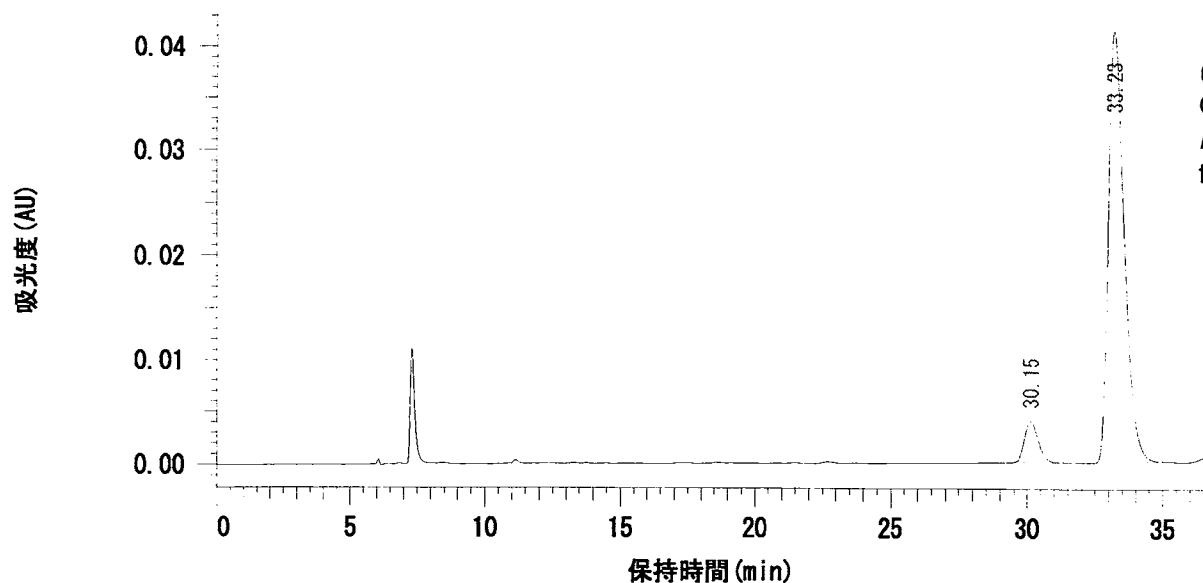


(R)-exo-2g

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.5 mL/min



クロマトタイプ: 固定波長クロマト, 254 nm

データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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

分析ファイルコメント:

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	30.15	67228	7.618	0.9998	BB
2	33.23	815220	92.382	1.0000	BB
		882448	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: 2012/01/20 18:36

作成日時: 2012/01/21 18:29

処理日時: 2012/01/21 18:29

データパス名: C:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\NO.3-145\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

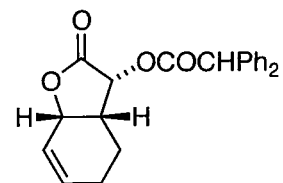
サンプルコメント:

シリーズ: NO.3-145

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



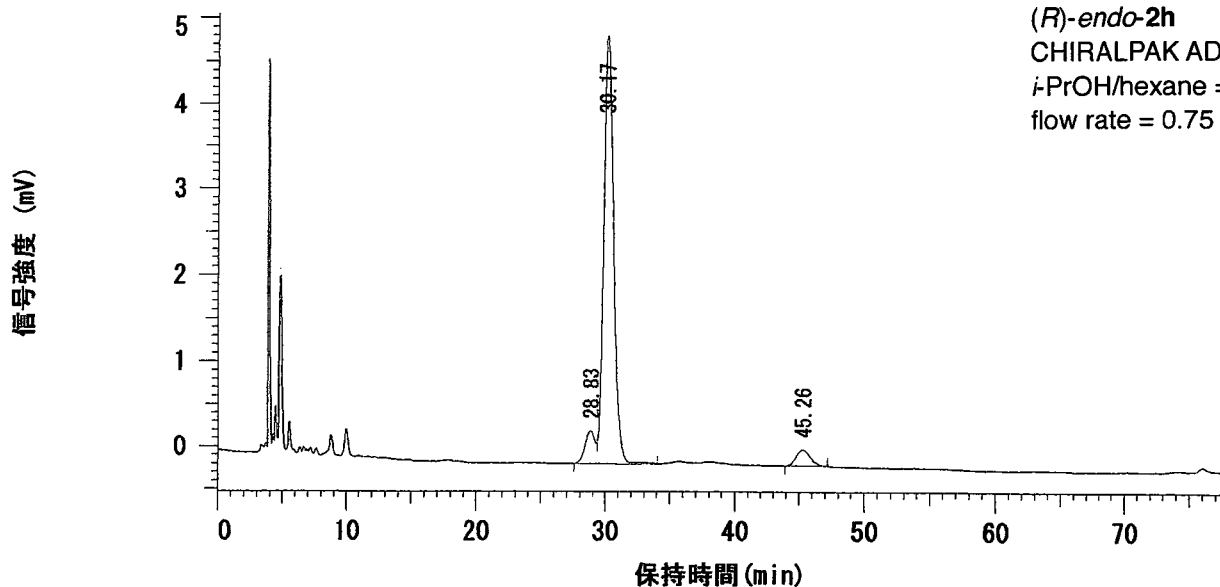
(R)-endo-2h

CHIRALPAK AD-H

i-PrOH/hexane = 1/9

flow rate = 0.75 mL/min

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm



データ処理用分析ファイル: Hex/2-PrOH

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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	28.83	21293	7.233	-0.5546	MC
2	30.17	258935	87.953	1.0000	MC
3	45.26	14173	4.814		MC
		294401	100.000		

レポートピークの判定レベル: 0

D-2000 HPLC システム マネージメント

分析日時: 2012/01/21 16:02

作成日時: 2012/01/21 16:44

処理日時: 2012/01/21 16:44

データパス名: G:\WIN32APP\D2000HSM\K_Gotoh\DATA\NO.3-146\

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

アプリケーション(データ): K_Gotoh

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:

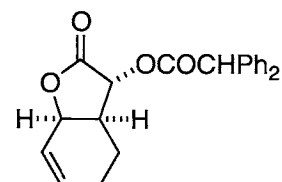
シリーズ: NO.3-146

バイアル: 1

バイアルサイズ: UNK

注入量: 10.0 µl

加圧タイプ: 固定波長加圧, 254 nm

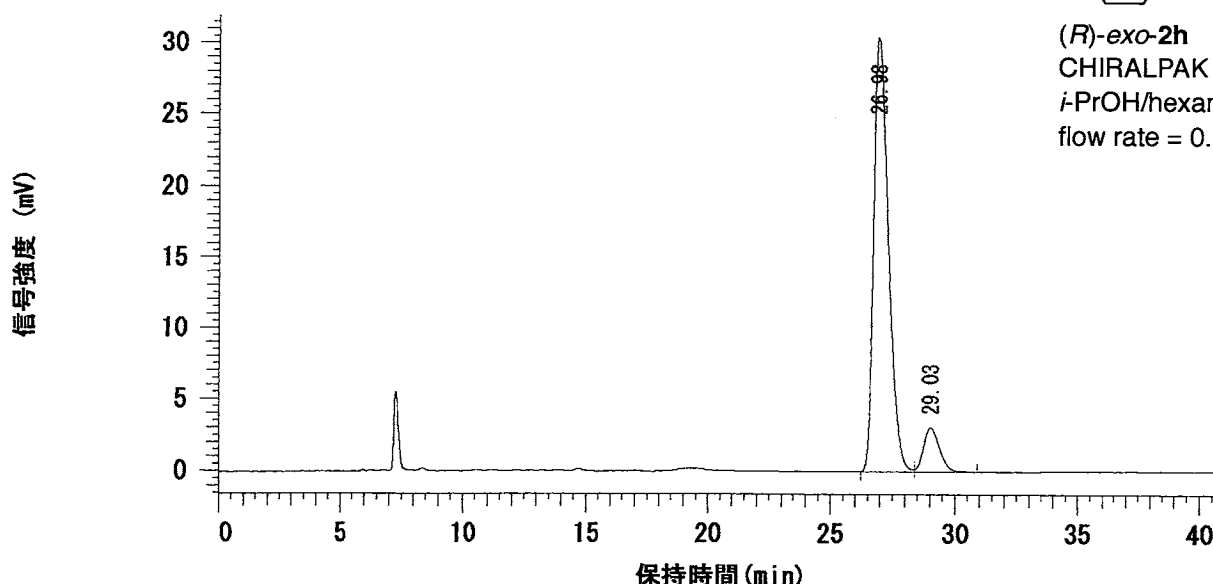


(R)-exo-2h

CHIRALPAK AD-H

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: 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:

分析ファイルコメント:

レポート作成者: K_Gotoh

ポンプA 溶離液B: 2-Propanol

ポンプA 溶離液D:

加圧タイプ: 固定波長加圧, 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	26.98	1227826	90.299	0.9721	BV
2	29.03	131906	9.701		VB
		1359732	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: 2013/02/01 15:45

作成日時: 2013/02/01 17:06

処理日時: 2013/02/01 17:06

データベース名: C:\WIN32APP\D2000HSM\kitajima\DATA\0126\

データ処理用分析ファイル: test

システム(データ収集): Sys 1

アプリケーション(データ): kitajima

サンプル名: 未知試料001

注入回数: 1 of 1

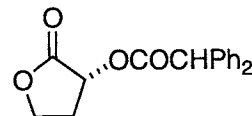
サンプルコメント:

シリーズ: 0126

バイアル: 1

バイアルタイプ: UNK

注入量: 10.0 ul



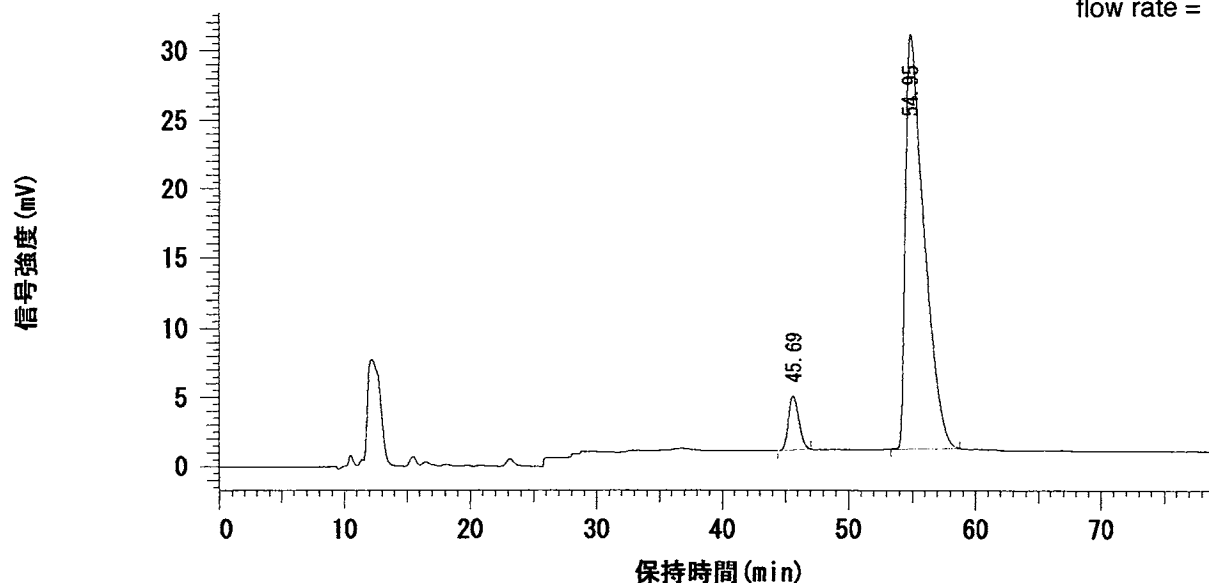
(R)-2i

CHIRALPAK IC-3

i-PrOH/hexane = 1/1

flow rate = 0.35 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: test

カラム名: Column

分析ファイルコメント:

レポート作成者:

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%

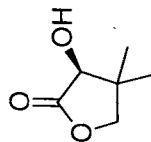
NO	RT	面積	濃度1	BC
1	45.69	223726	6.876	BB
2	54.95	3029793	93.124	BB
		3253519	100.000	

レポートピークの判定レベル: 0

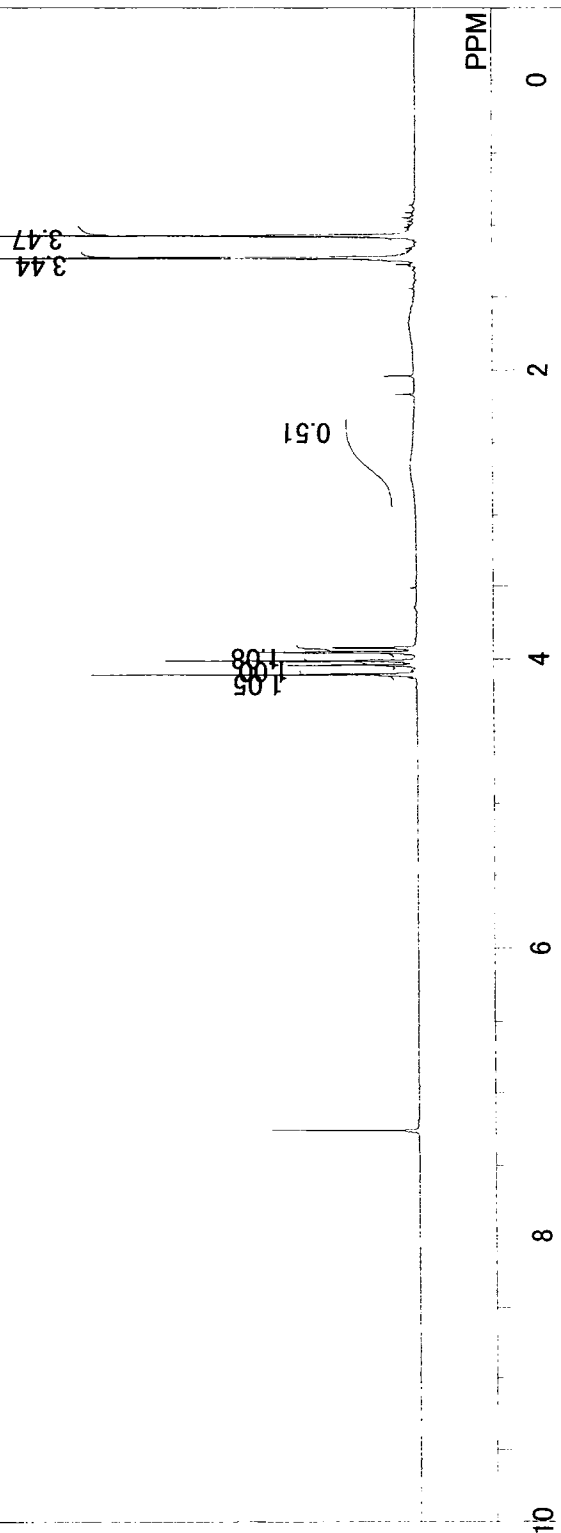
E:\New NMR DATA\No.3-020-3.r
JCAMP-DX DATA FILE
2011/Sep/13 10:28:18

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
ZG30
300.01 MHz
0.00 KHz
1842.92 Hz
32768
6172.84 Hz
8
0.0000 sec
0.0000 sec
12.70 usec
OFF
24.9 c
CDCL3
7.26 ppm
0.25 Hz
813



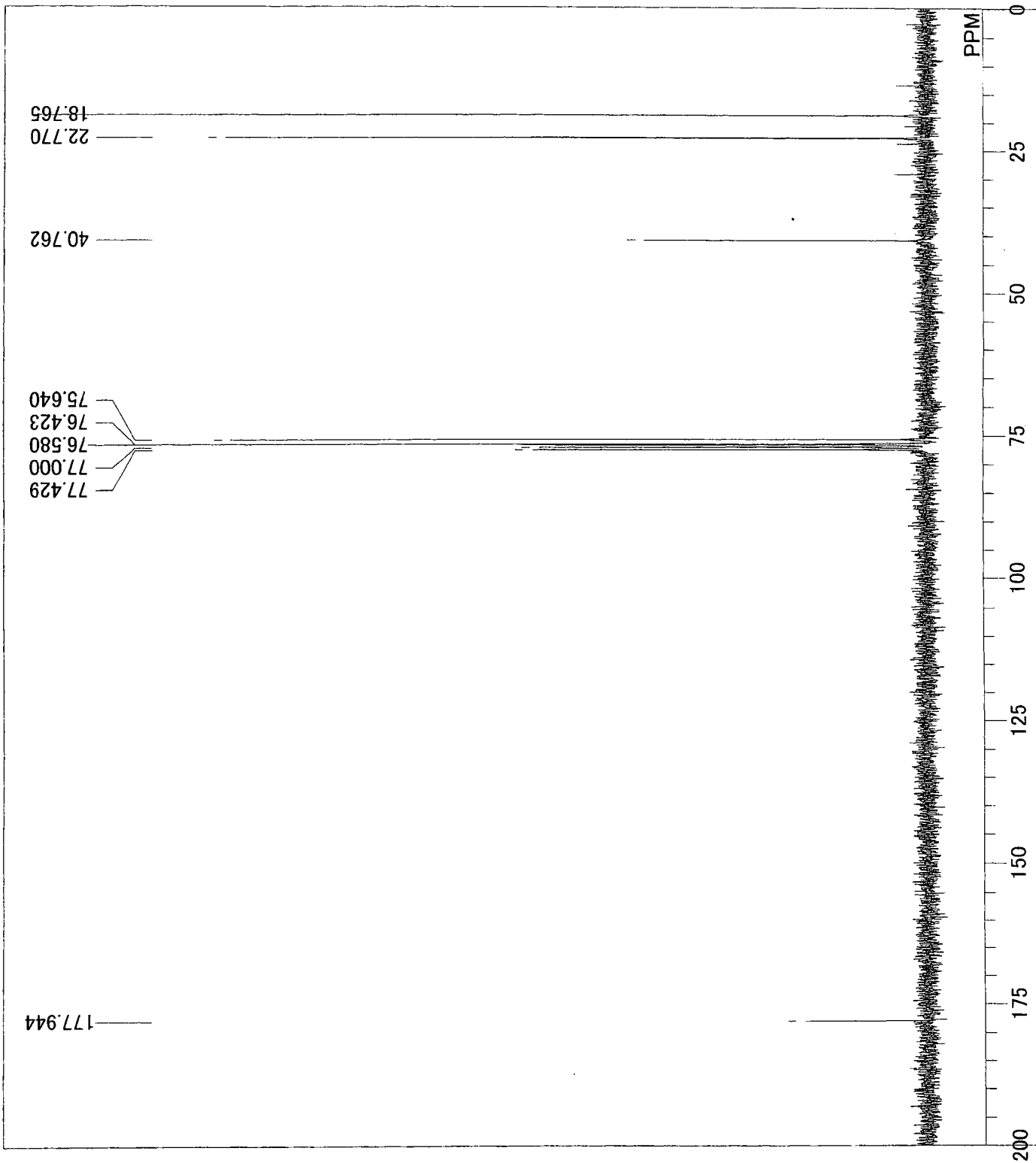
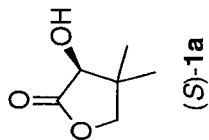
(S)-1a



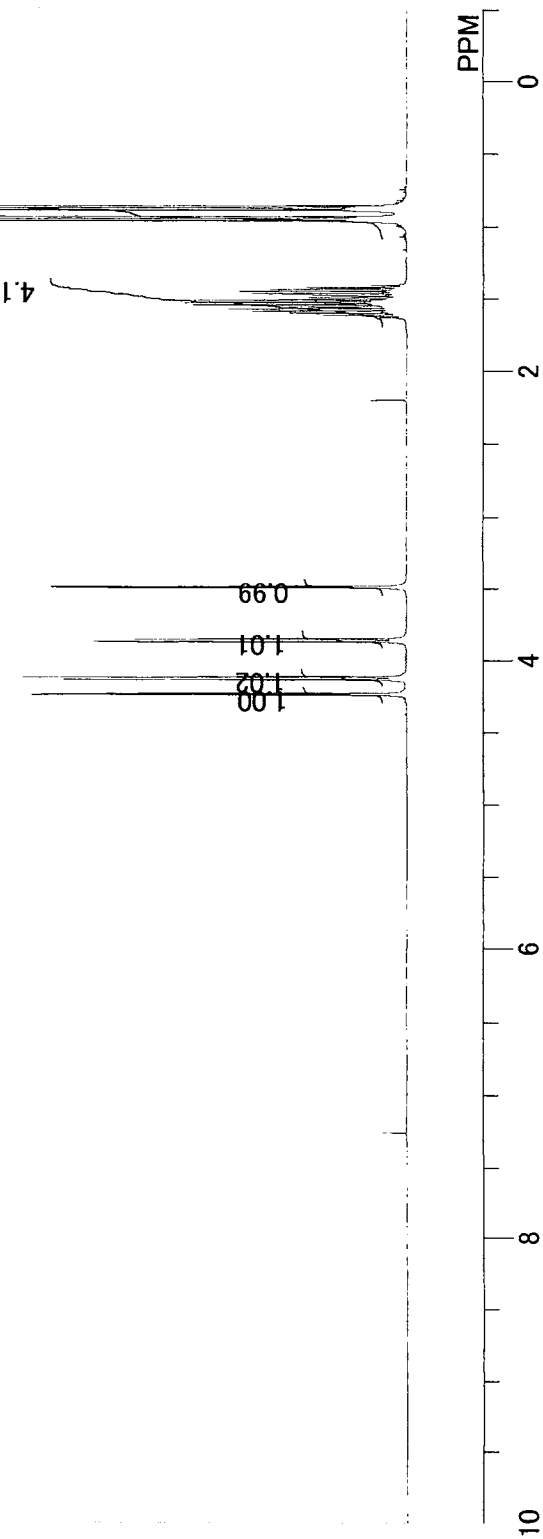
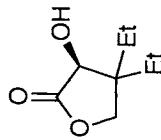
Sat Dec 24 16:00:52 2011

13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
128
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
21.8 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
22

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

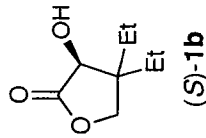
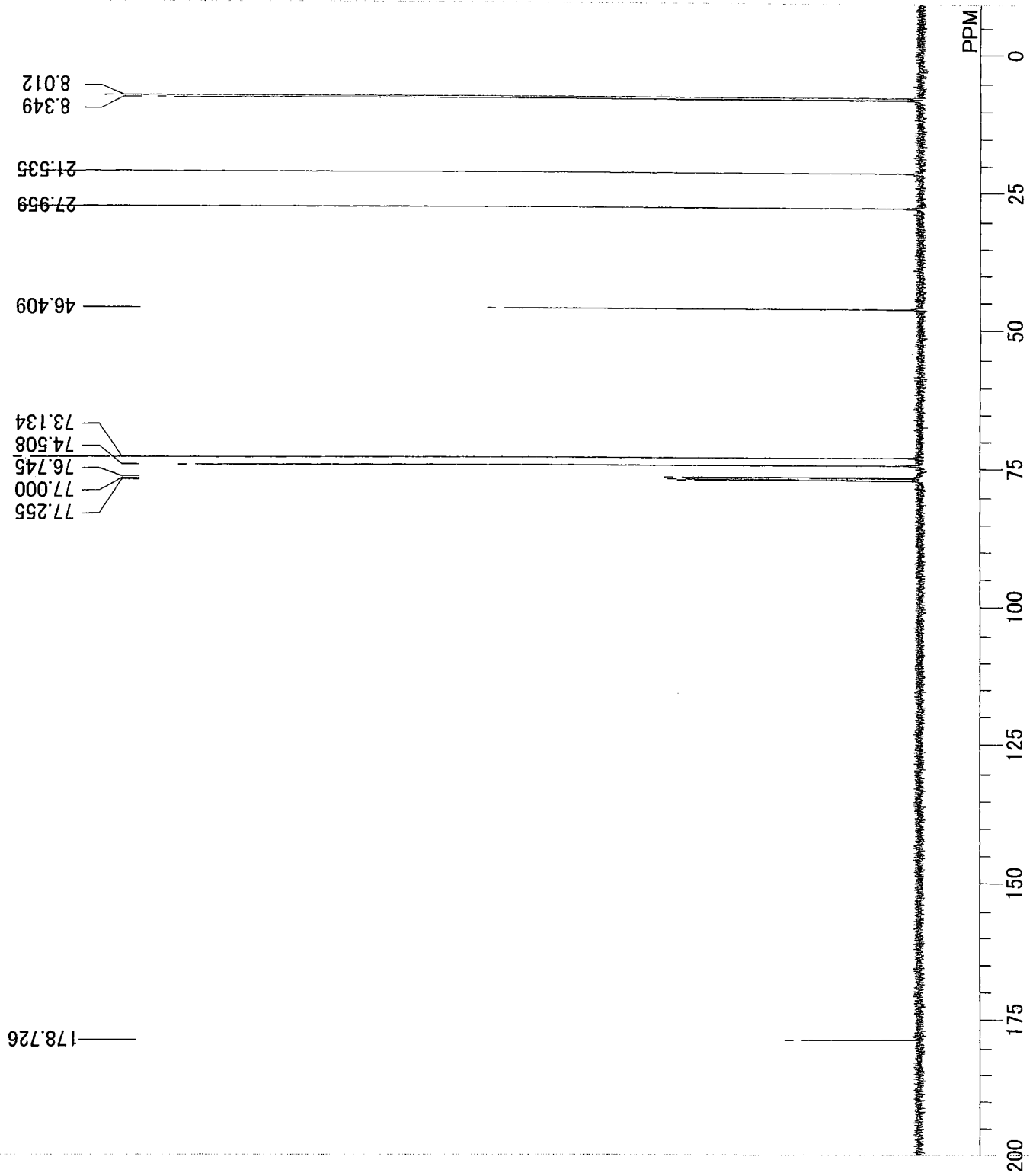


DFILE E:\実験DATA\NMR DATA No.2\N
COMNT No.2-139-2.recryst.
DATIM Mon Dec 13 13:40:33 2010
OBNUC 1H
EXMOD non
OBFRQ 500.00 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 162160.00 Hz
POINT 32768
FREQU 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 3.2768 sec
PD 3.7232 sec
PW1 6.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 22.9 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 10



DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

E:\实验DATA\NMR DATA No.2\N
No.2-139-2.recryst.
Mon Dec 13 13:56:51 2010
13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
320
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
24.9 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
30

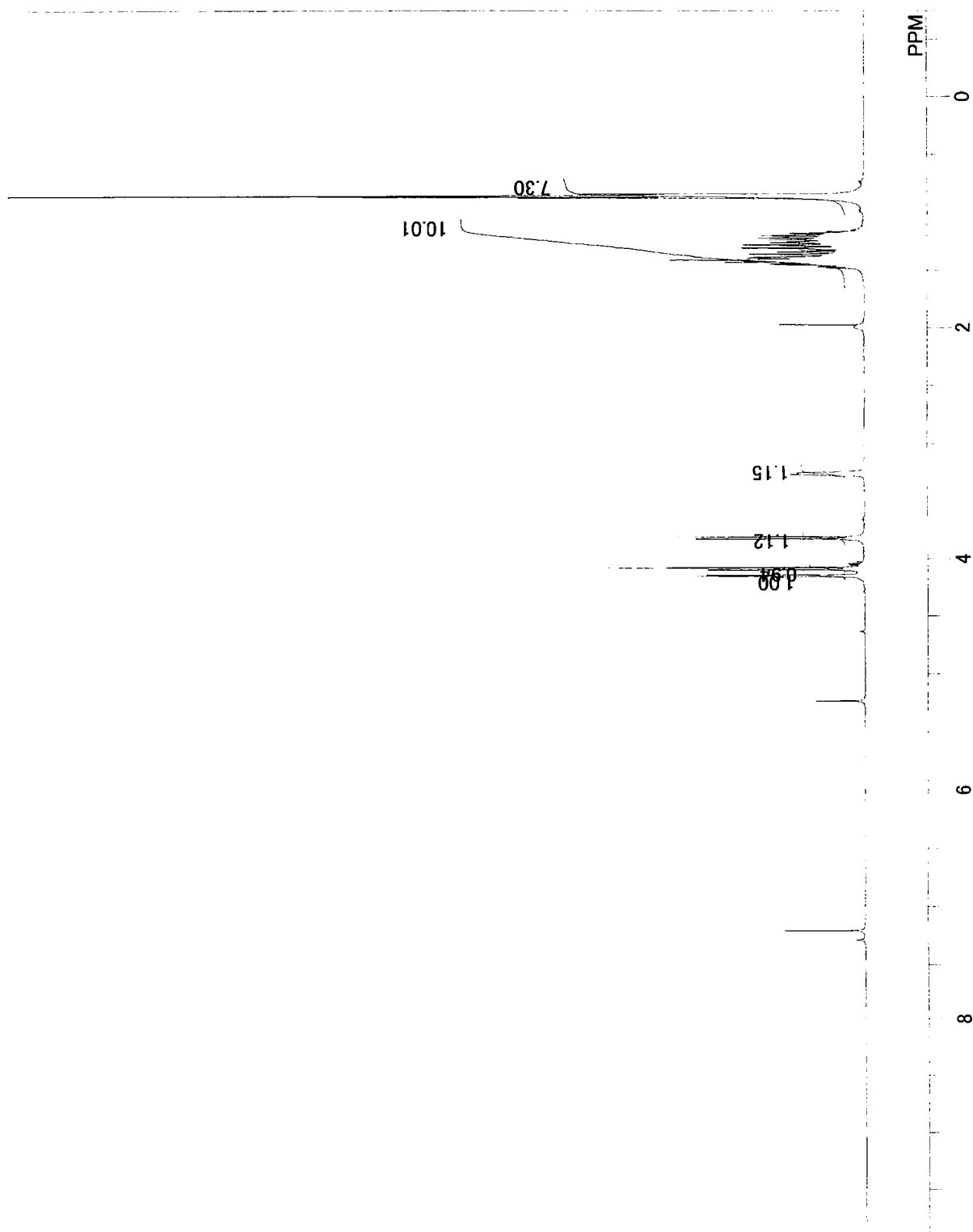
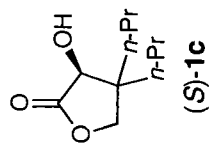


F:\NMR DATA of K.R\D.2-Hydroxy-3.3

Mon Oct 17 10:25:29 2011

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
25.3 c
CDCL3
0.00 ppm
0.12 Hz
11

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

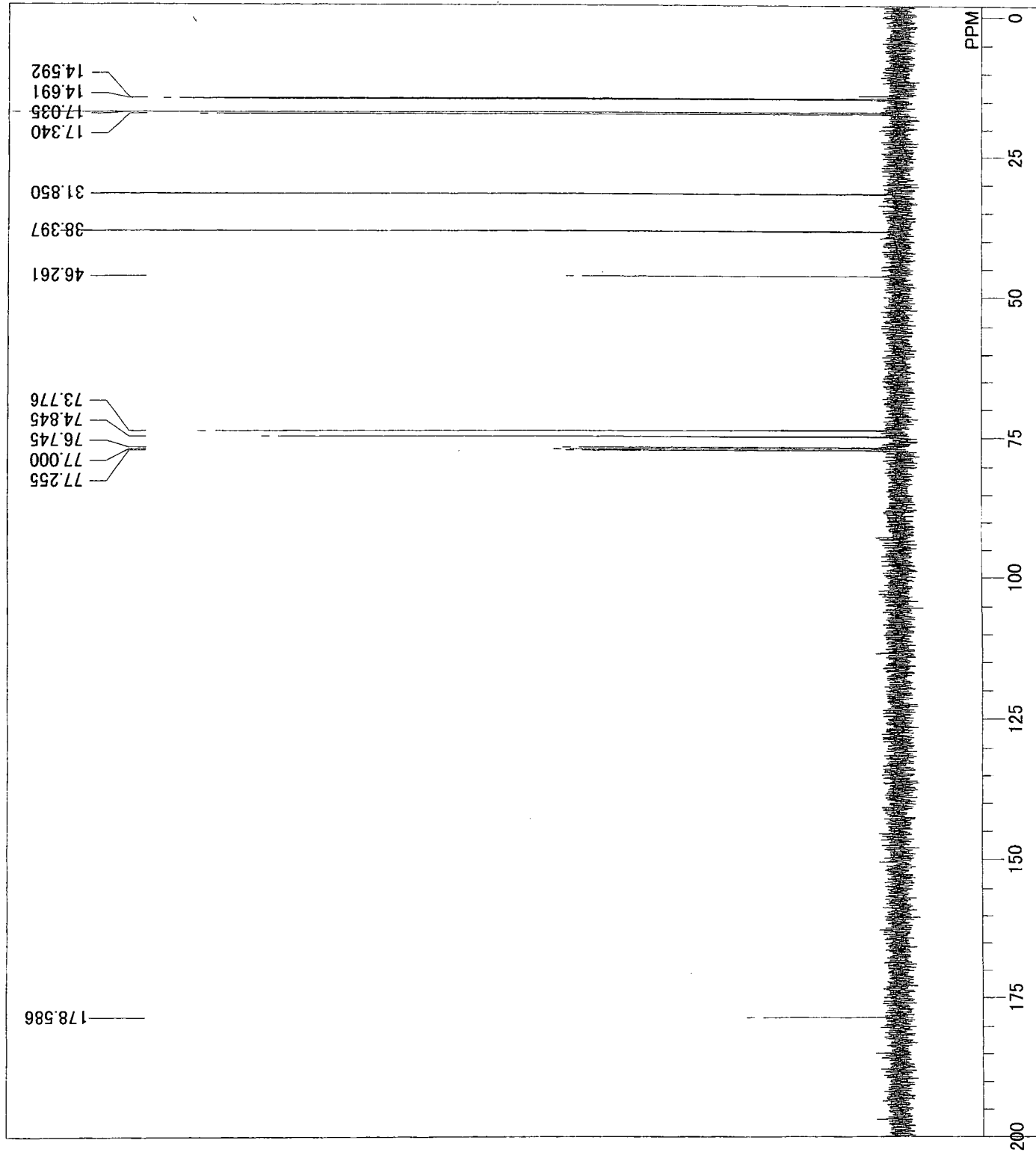
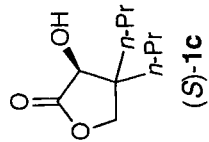


F:\NMR DATA of K.R\D 2-Hydroxy-3,3

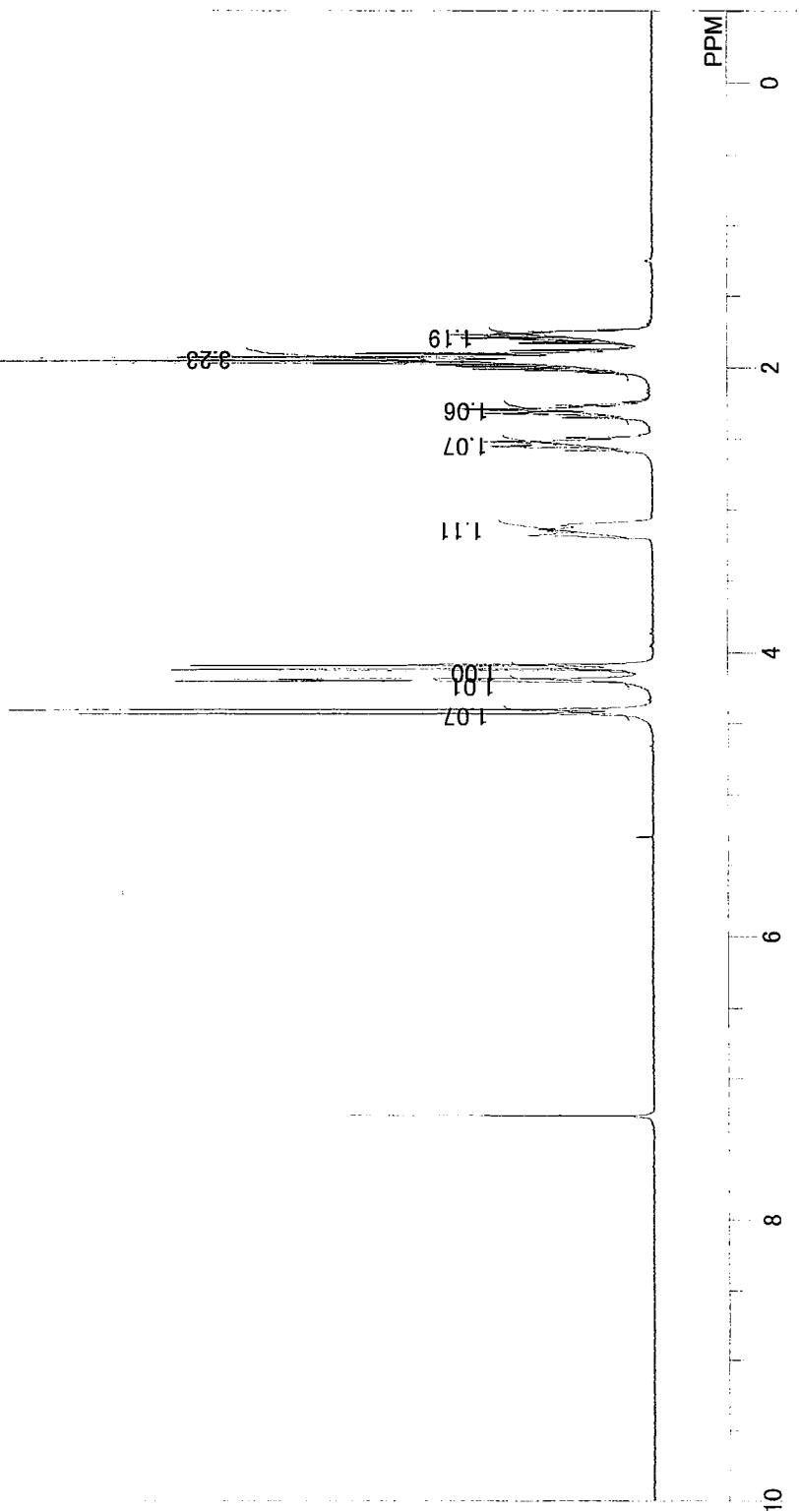
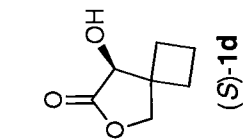
Mon Oct 17 10:29:02 2011

13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
64
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
26.5 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
30

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

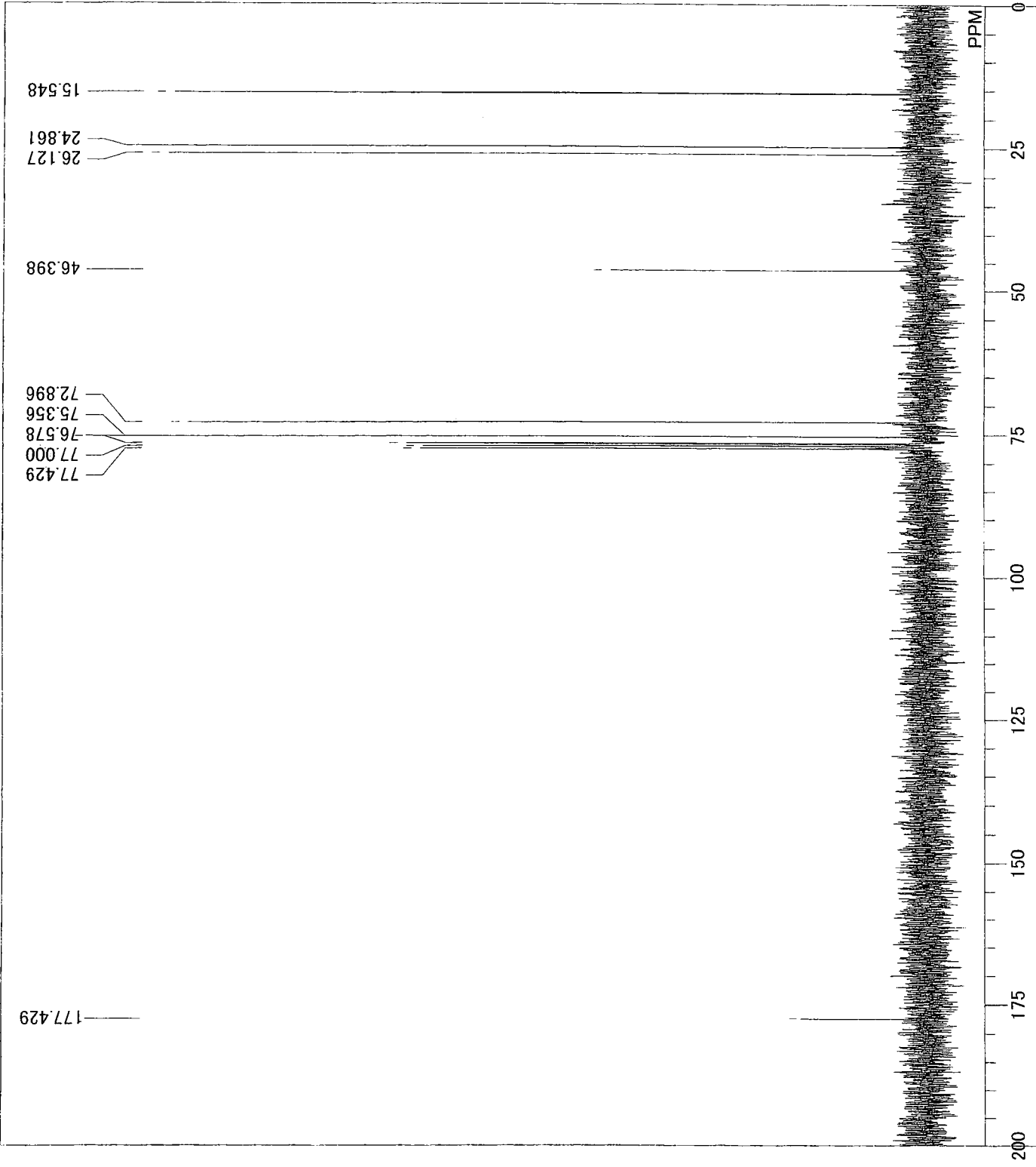
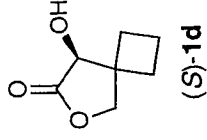


DFILE F:\NMR DATA of K.R\No.3-072.als
COMNT 2
DATIM Thu Nov 10 10:04:50 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON
OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 21.6 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 16



DFILE F:\New NMR DATA\No.3-072.BCM.als
COMINT JCAMP-DX DATA FILE
DATIM 2012/Jan/17 12:02:45
OBNUG 13C

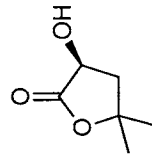
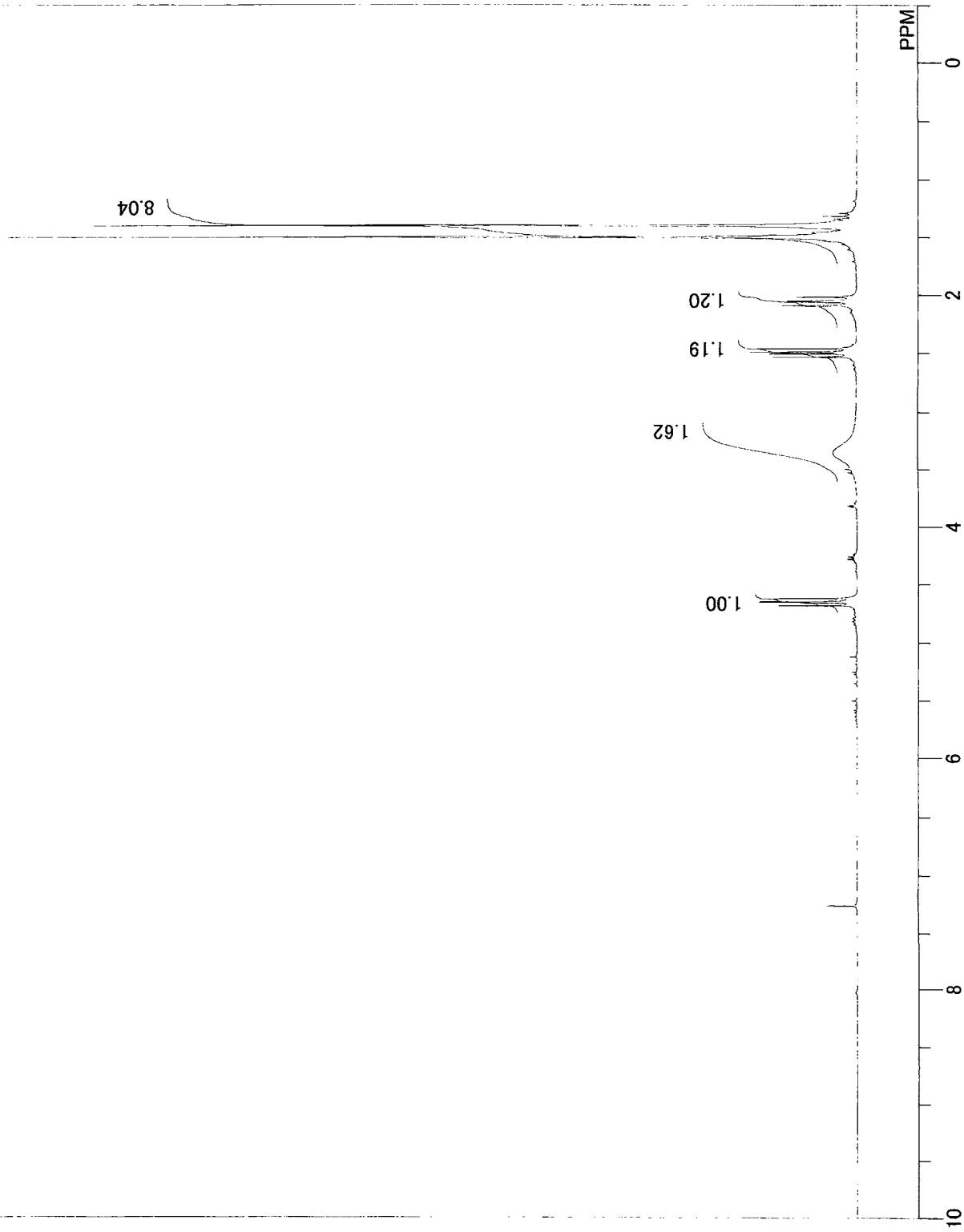
EXMOD ZGPG30
OBFRQ 75.44 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 7541.97 Hz
POINT 32768
FREQU 17985.61 Hz
SCANS 32
ACQTM 0.0000 sec
PD 0.0000 sec
PW1 9.50 usec
IRNUC OFF
CTEMP 22.9 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 0.25 Hz
RGAIN 1825



D:\实验数据\NMR DATA of K.R\4.4-
No.3-003-7.r2
Mon Sep 12 16:32:15 2011
1H
NON

300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.60 usec
1H
23.3 °
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
13
RGAIN

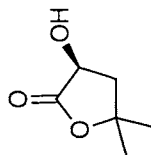
D\FILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



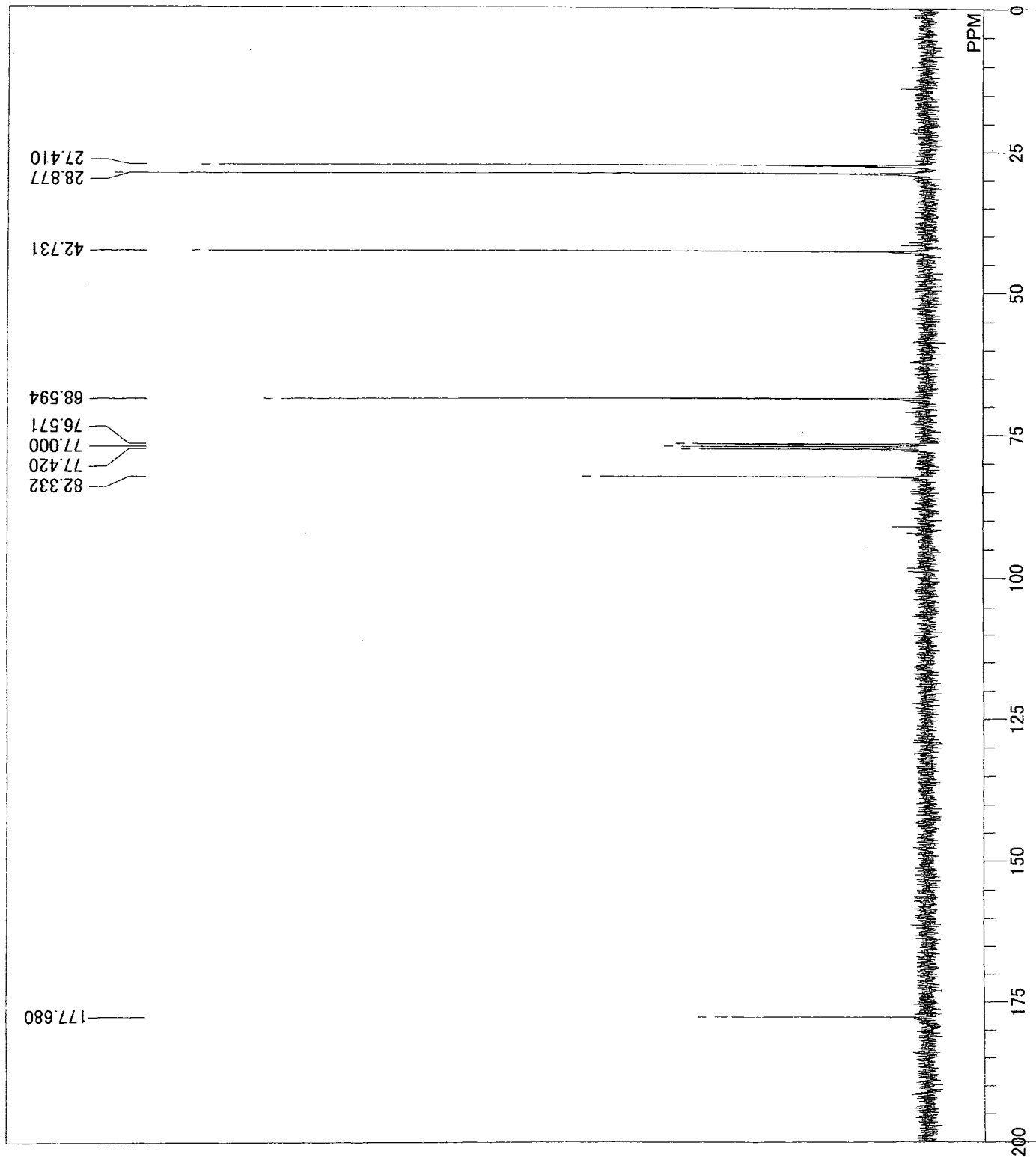
(S)-1e

Mon Sep 12 19:05:13 2011

COMNT
DATIM
OBNUC 13C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 64
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.4 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 23

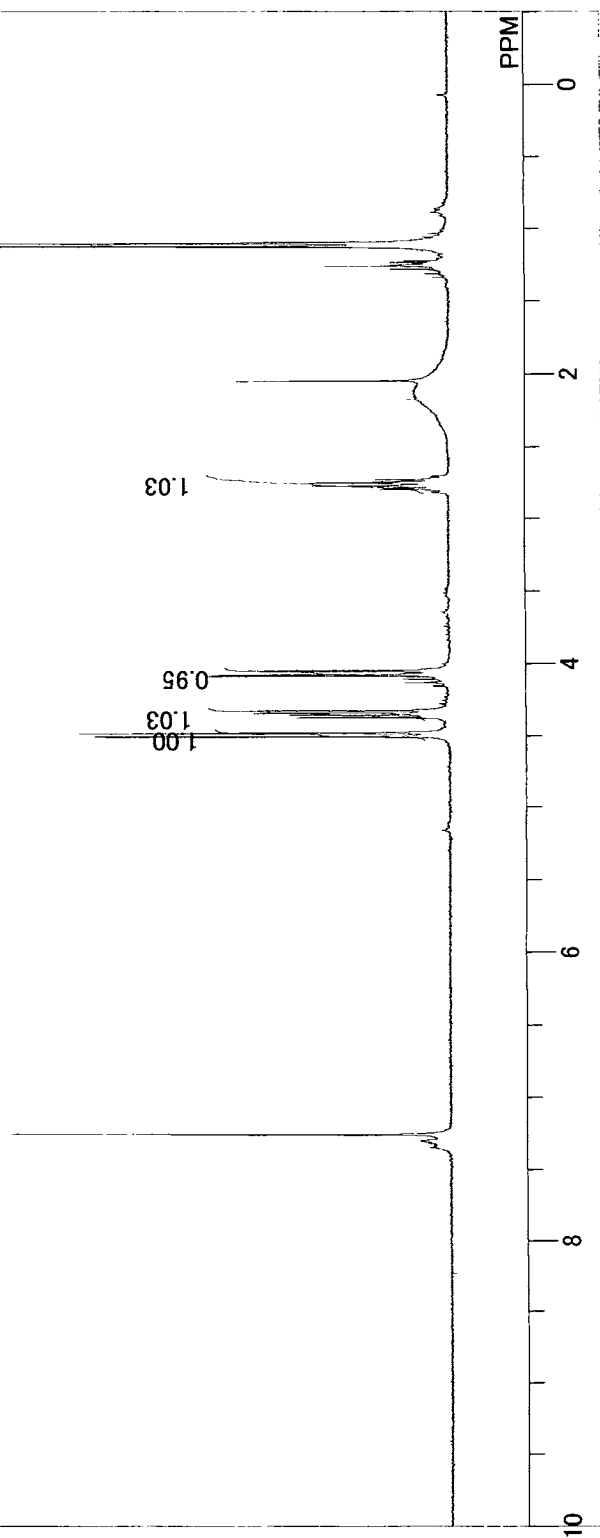
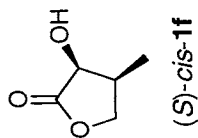


(S)-1e



FILE F:\NMR DATA of K.R\monomethyl (cis)
No.2-198-2.rSM
Thu Aug 04 20:36:05 2011
1H
NON

OBNUC 300.40 MHz
OBFRQ 130.00 KHz
OBSET 1150.00 Hz
OBFIN 32768
POINT 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.7 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 20



E:\实验DATA\NMR DATA of K.R\mon

DFILE COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQ
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

Wed Jul 20 18:53:07 2011

13C

BCM

75.45 MHz

124.00 KHz

1840.00 Hz

32768

20408.10 Hz

400

1.6056 sec

1.3940 sec

4.20 usec

1H

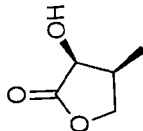
24.1 °C

CDCL3

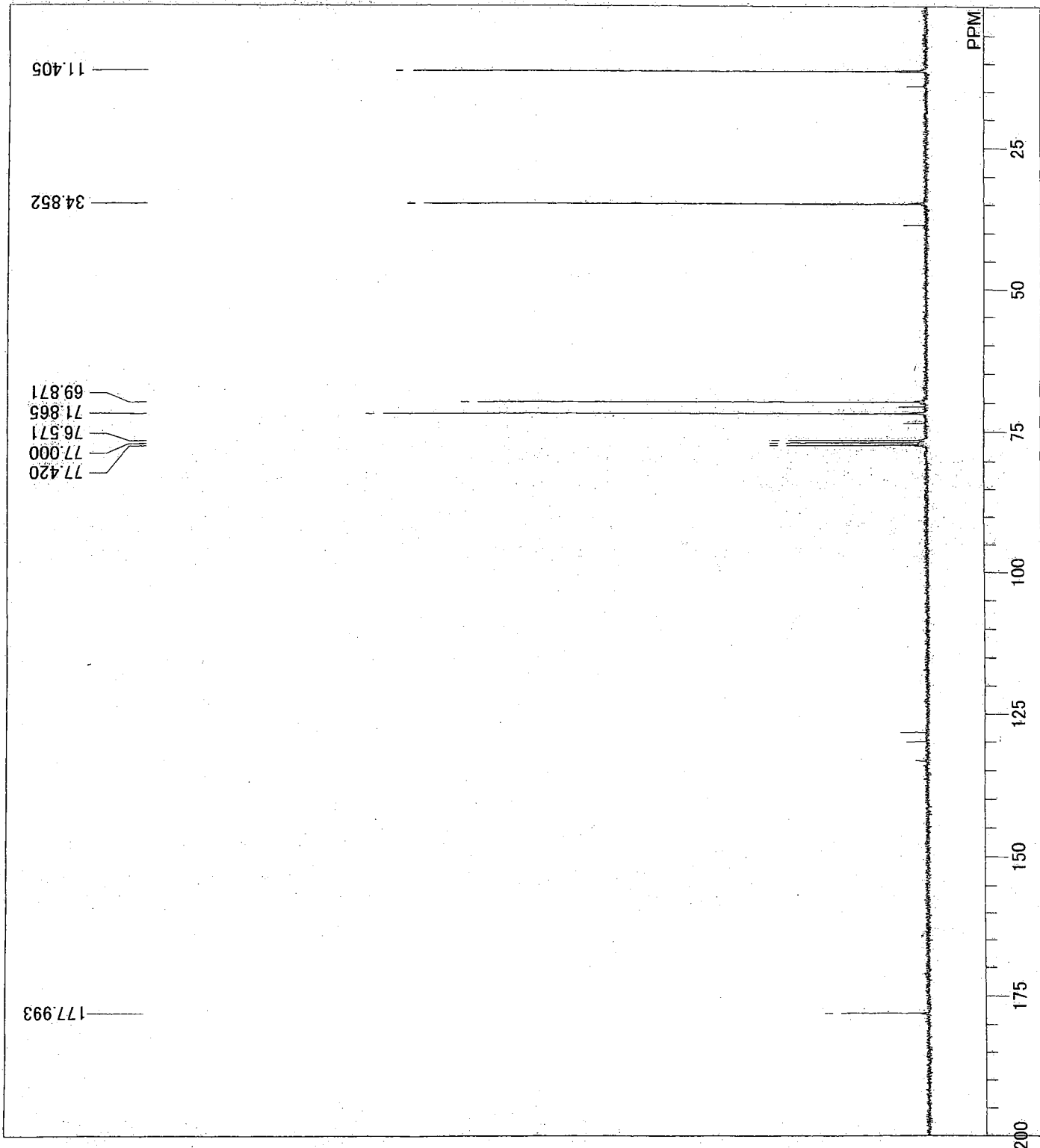
77.00 ppm

1.20 Hz

23

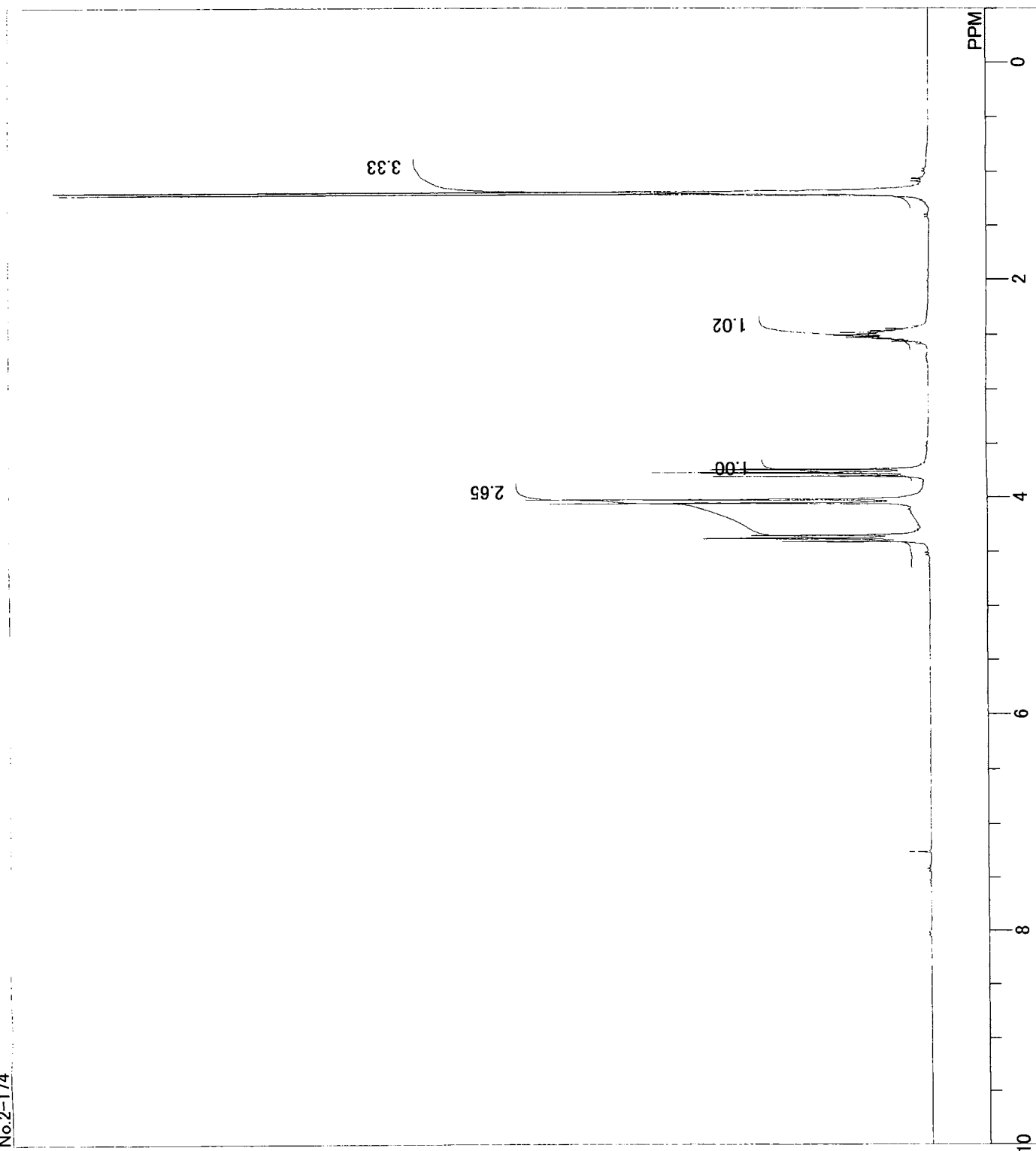
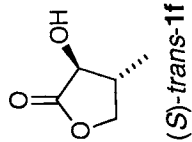


(S)-cis-1f

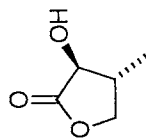


DFILE F:\NMR DATA of K.R\monomethyl (tra
COMNT No.2-174
DATIM Wed Jul 20 18:12:43 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON

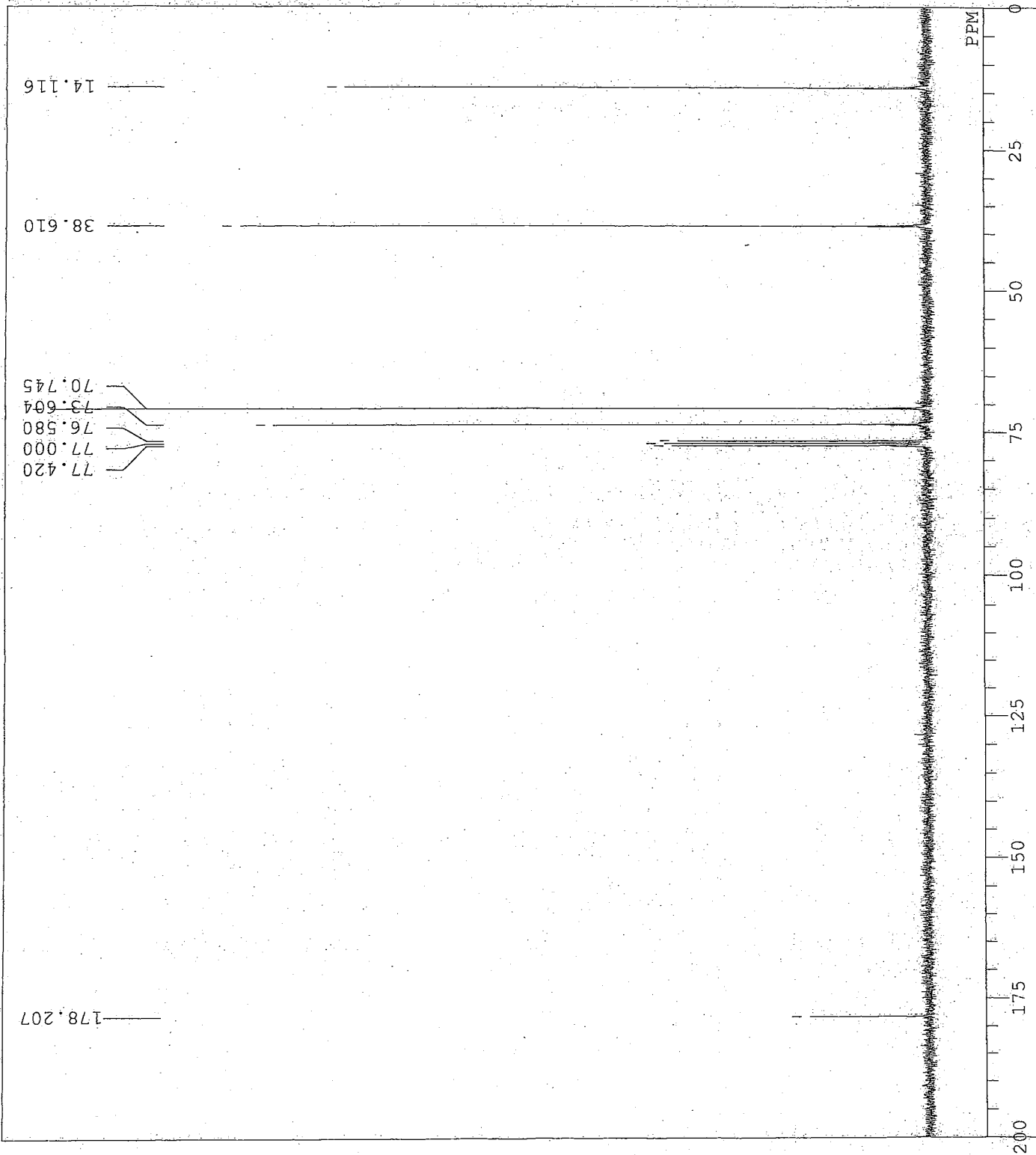
OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.7 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 12



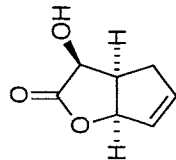
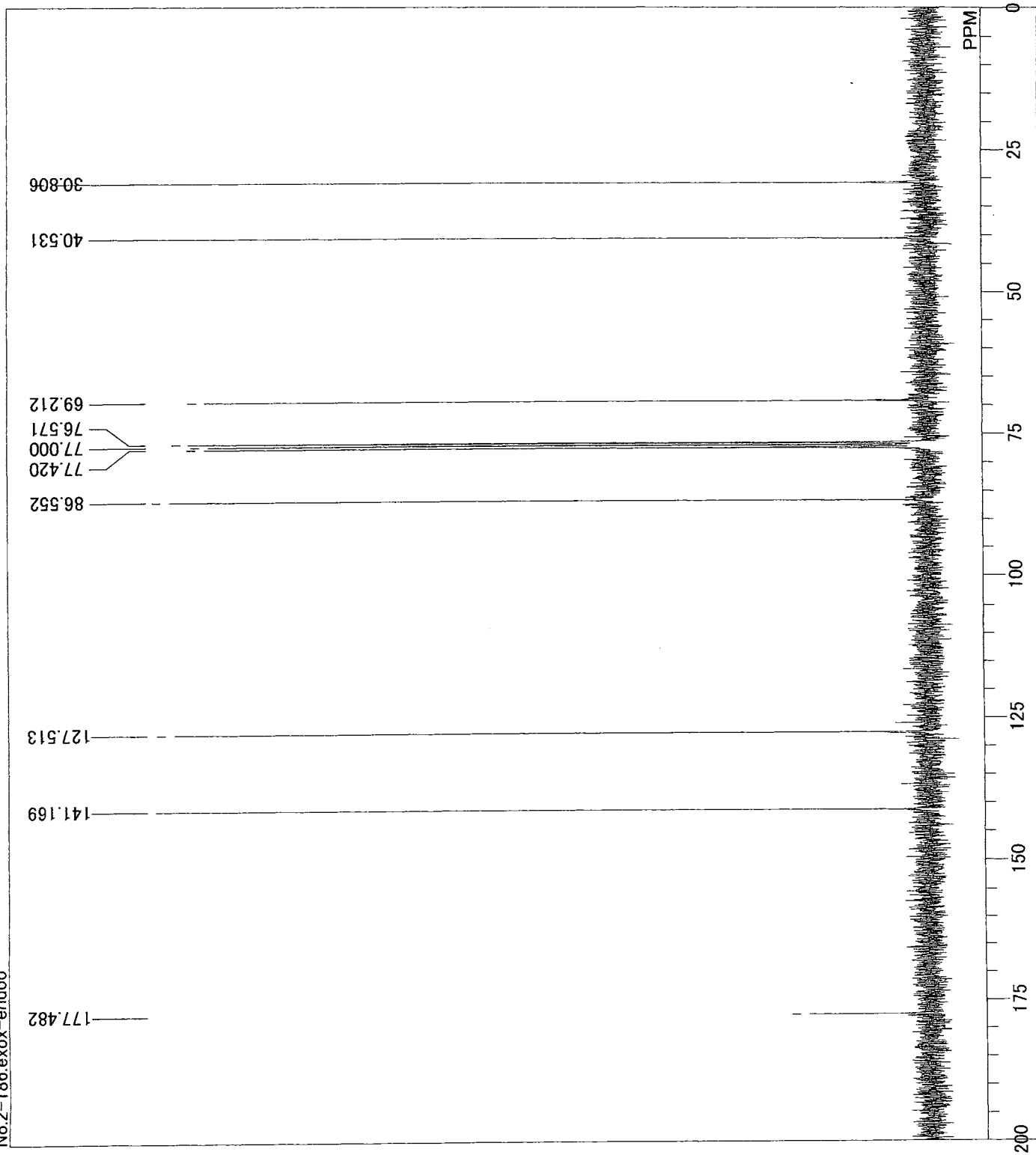
FILE F:\ZACID\DATA\NMR DATA No. 2\No.
COMNT No. 2-174
DATIM Wed Jul 20 18:25:53 2011
OBNUC 13C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 256
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.9 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 23



(S)-trans-1f

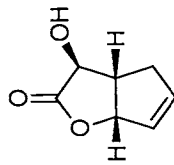


DFILE F:\New NMR DATA\No.2-186.BCM.exo
COMNT No.2-186.exox-endoo
DATIM Sat Dec 10 20:52:01 2011
OBNUC 13C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 256
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 21.0 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 22

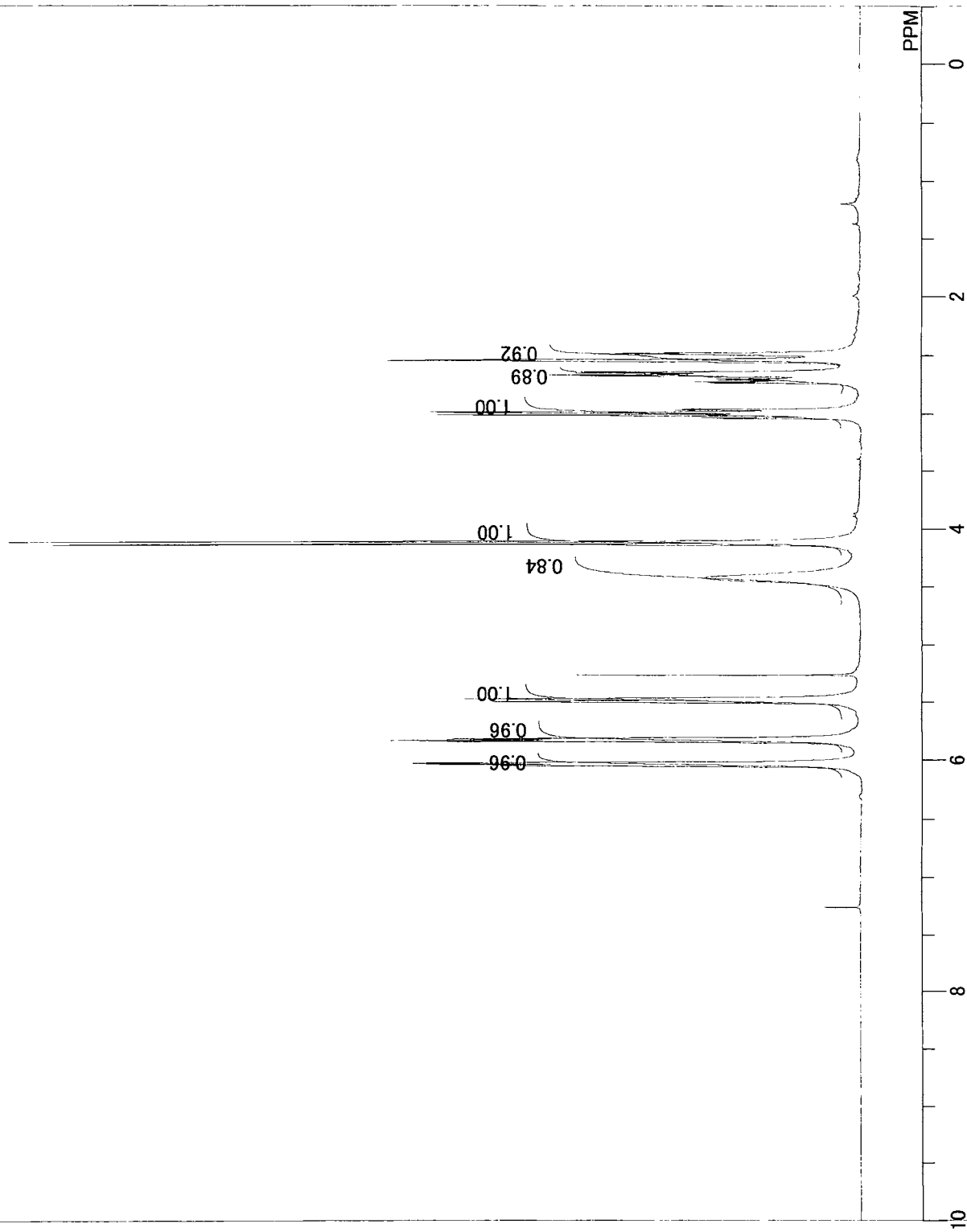


(S)-endo-1g

D:FILE F:\New NMR DATA\No.2-186.endox-e)
COMNT No.2-186.exox-endoo
DATIM Sat Dec 10 20:06:53 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON
OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 20.9 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 9

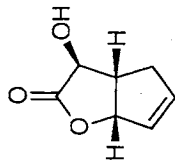
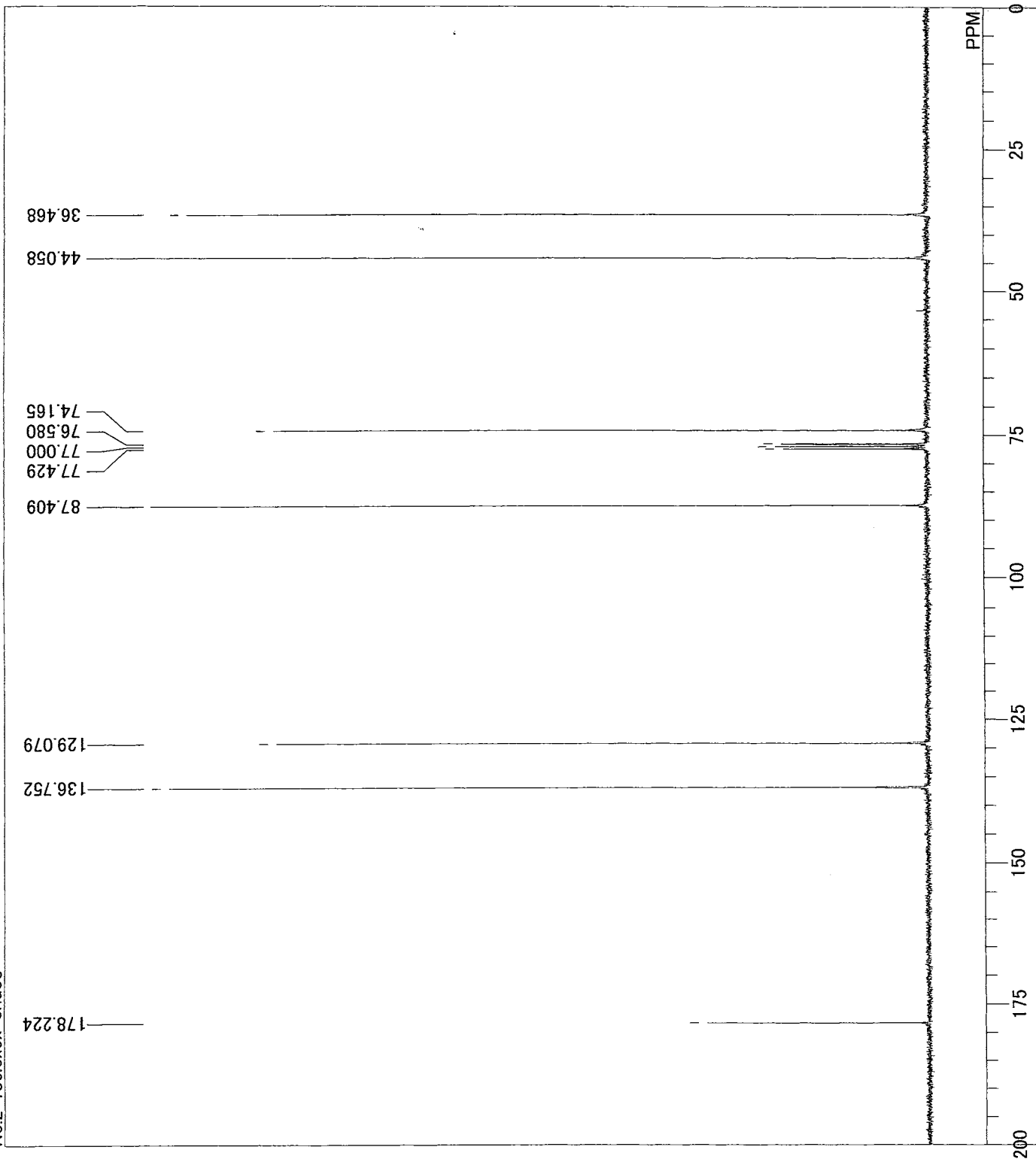


(S)-exo-19



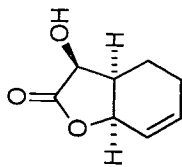
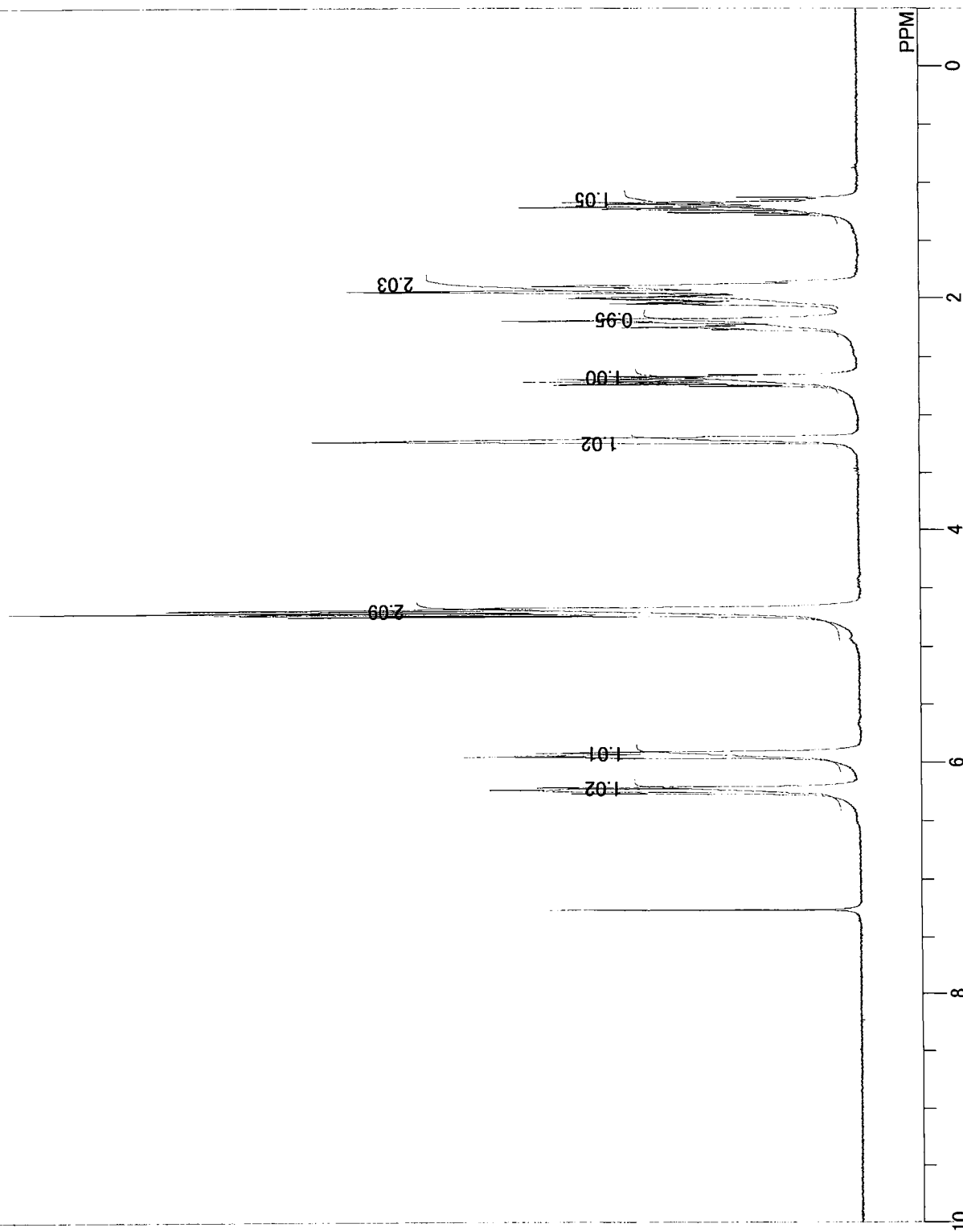
DFILE
COMINT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F:\New NMR DATA\No.2-186.BCM.enc
No.2-186.exox-endoo
Sat Dec 10 20:20:04 2011
13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
256
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
21.4 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
22



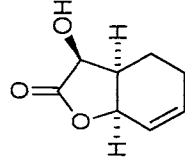
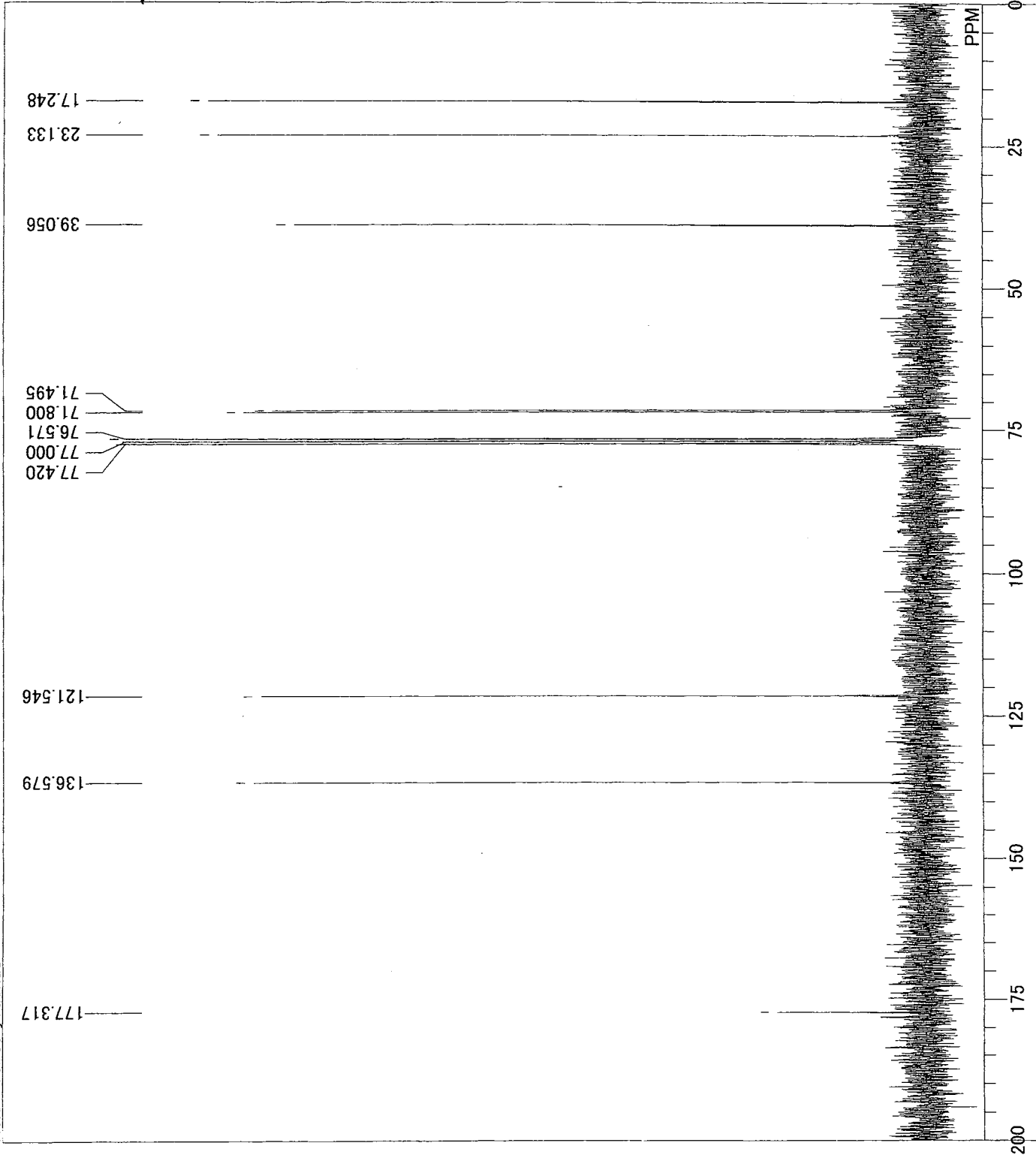
(S)-exo-1g

DFILE F:\New NMR DATA\No.3-076.recryst.e
COMNT No.3-076.recryst.endo
DATIM Sat Dec 10 21:00:04 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON
OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 20.8 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 14



(S)-endo-1h

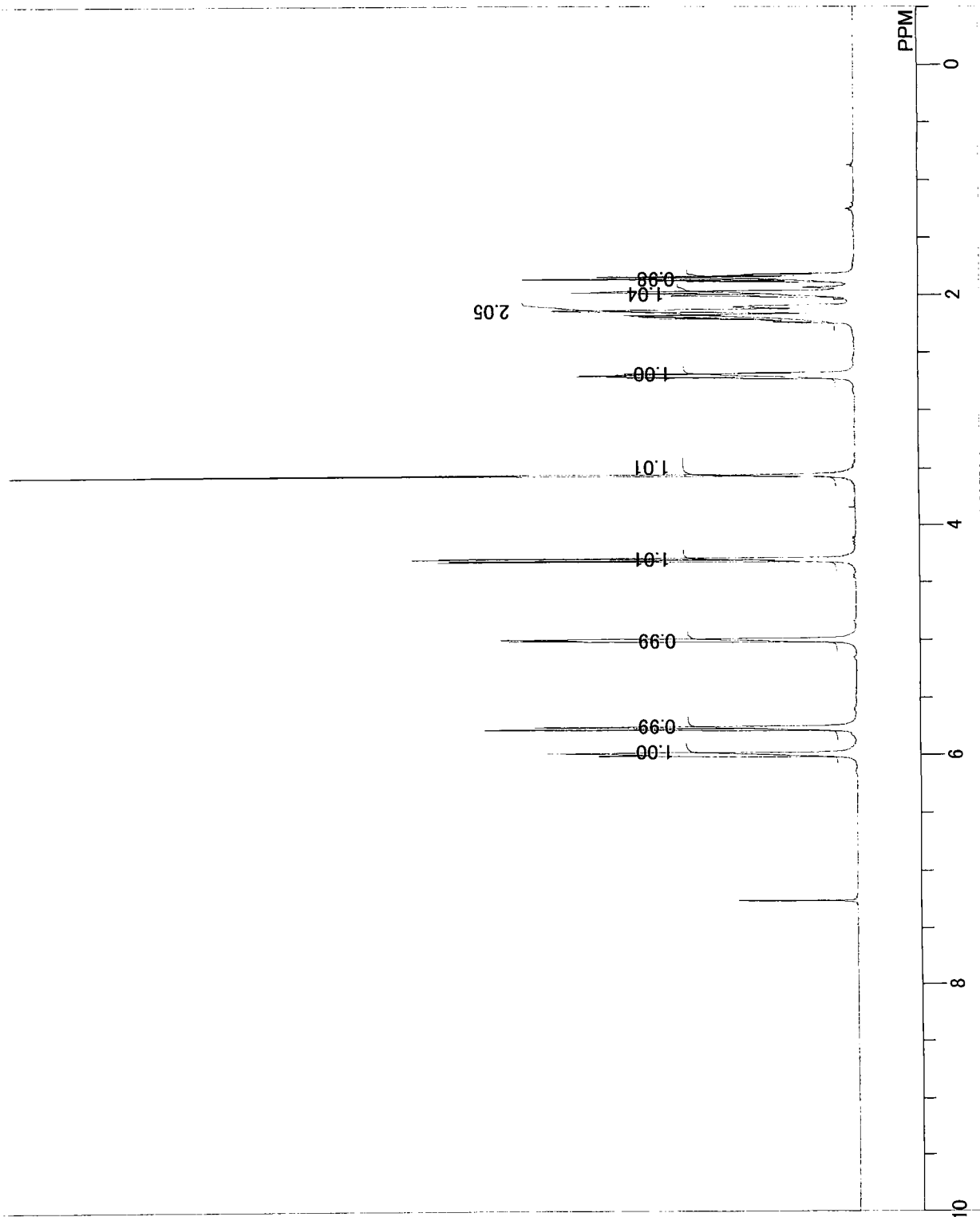
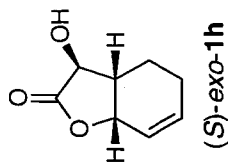
DFILE F:\New NMR DATA\No.3-076.recryst.e
COMNT No.3-076.recryst.endo
DATIM Sat Dec 10 21:06:50 2011
OBNUC ¹³C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 128
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 21.0 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 22



(S)-endo-1h

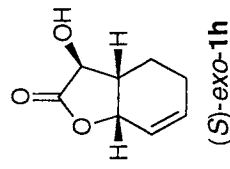
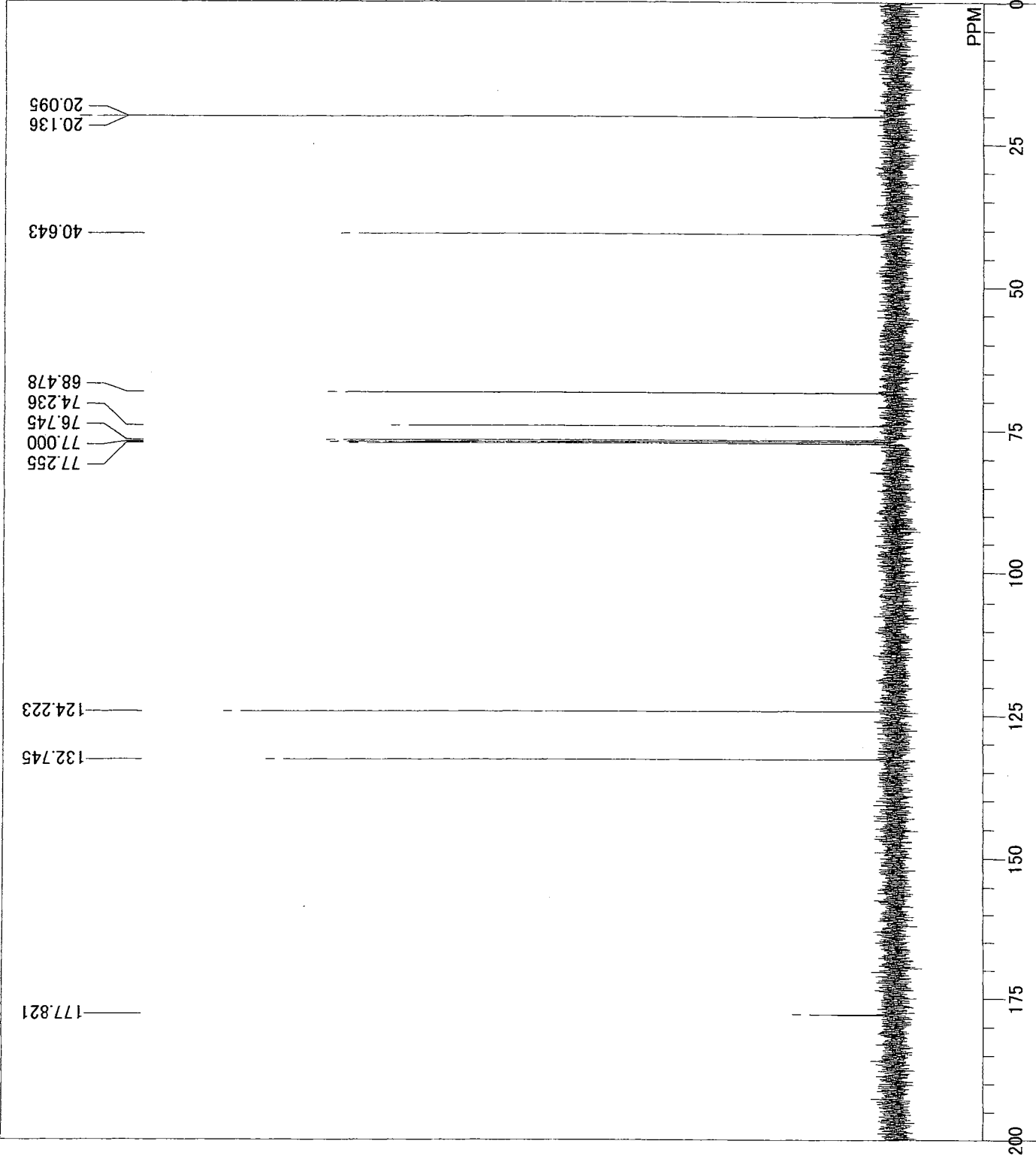
D:\New NMR DATA\No.3-076.recryst.e
No.3-076.recryst.exo
Sat Dec 10 21:14:38 2011
1H
non

EXMOD 500.00 MHz
OBFRQ 0.00 KHz
OBSET 162160.00 Hz
OBFIN 8192
POINT 10000.00 Hz
FREQ 8
SCANS 0.8192 sec
ACQTM 6.1808 sec
PD 6.20 usec
PW1 1H
IRNUC 24.2 c
CTEMP CDCL3
SLVNT 7.26 ppm
EXREF 0.12 Hz
BF 17
RGAIN



DFILE
 COMNT
 DATIM
 OBNUC
 EXMOD
 OBFRQ
 OBSET
 OBFIN
 POINT
 FREQU
 SCANS
 ACQTM
 PD
 PW1
 IRNUC
 CTEMP
 SLVNT
 EXREF
 BF
 RGAIN

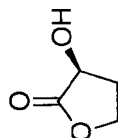
F:\New NMR DATA\No.3-076.recryst.e
 No.3-076.recryst.exo
 Sat Dec 10 21:21:24 2011
 13C
 bcm
 125.65 MHz
 0.00 KHz
 127958.00 Hz
 32768
 33898.30 Hz
 128
 0.9667 sec
 2.0333 sec
 4.90 usec
 1H
 25.4 c
 CDCL3
 77.00 ppm
 1.20 Hz
 31



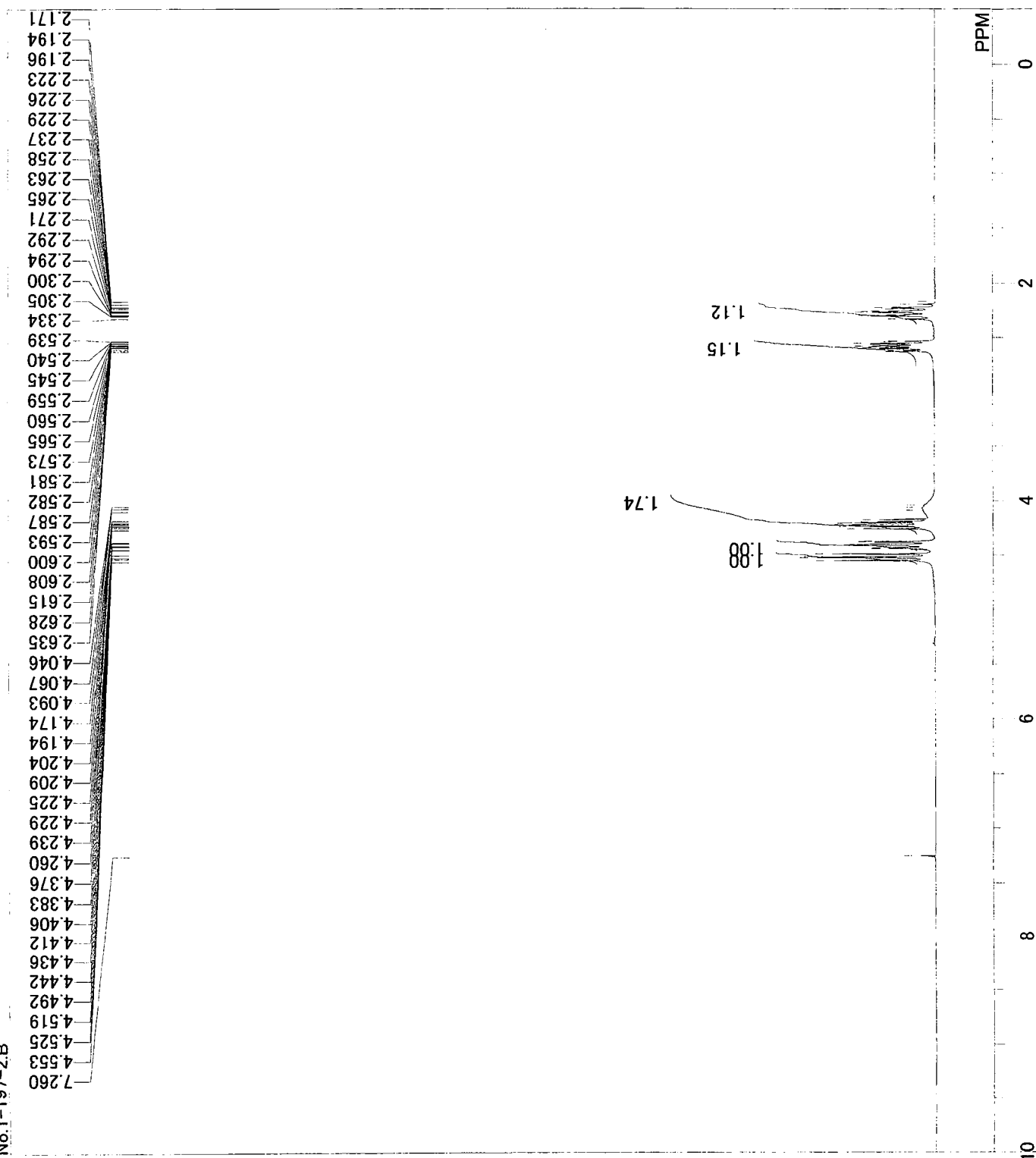
F:\NMR DATA of K.R\A.2-Hydroxybutr
No.1-197-2.B
Mon Apr 19 10:56:33 2010

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
NON
300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.40 usec
1H
20.4 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
11



(S)-1i

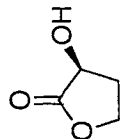


E:NMNMR DATA of K.R#A.2-Hydrox

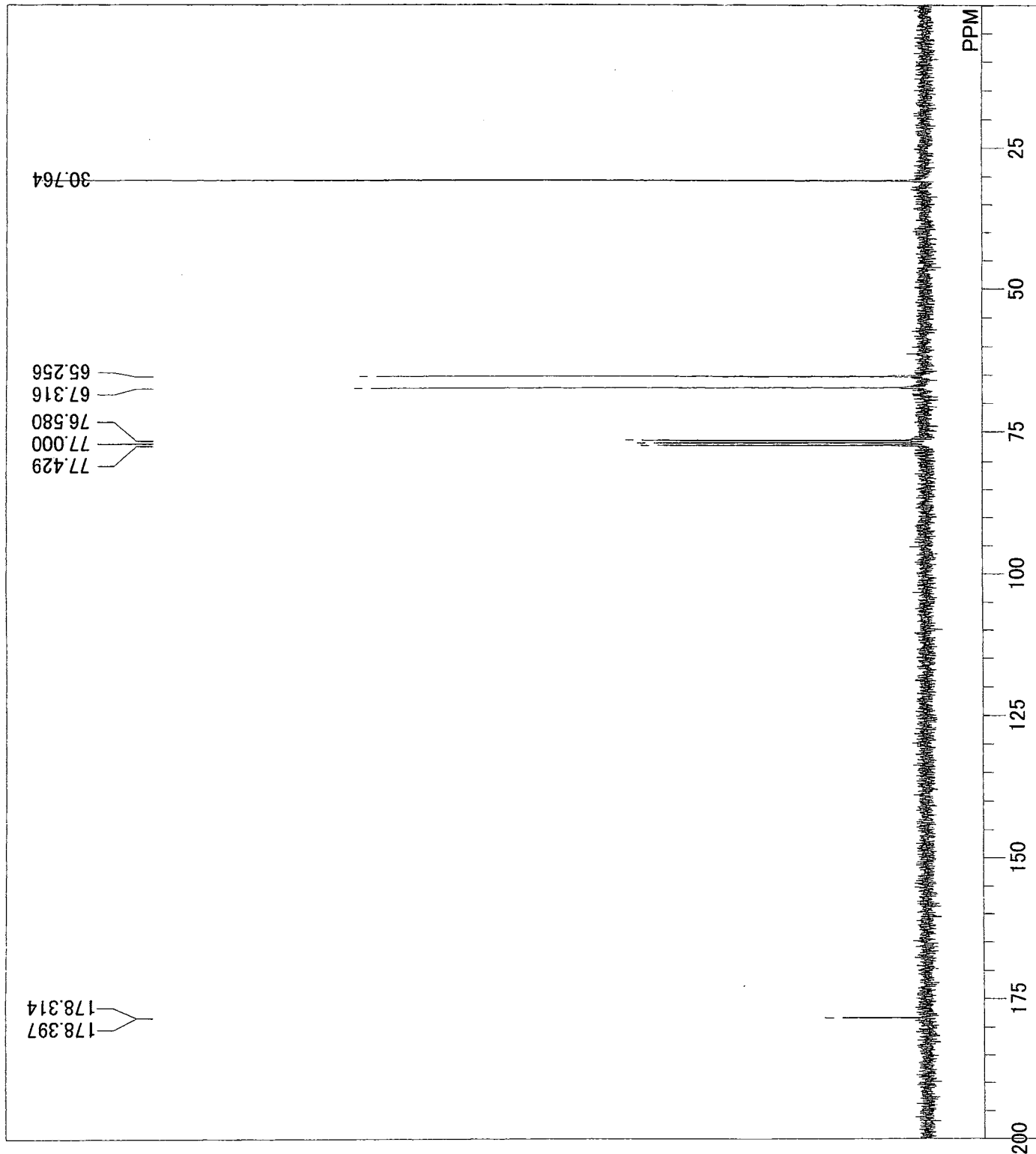
Mon Dec 26 13:13:52 2011

13C
BCM 75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
128
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
21.1 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
22

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



(S)-1i

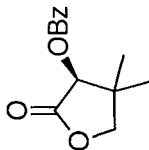


F:\NMR DATA of K.R\B.Pantolactone\

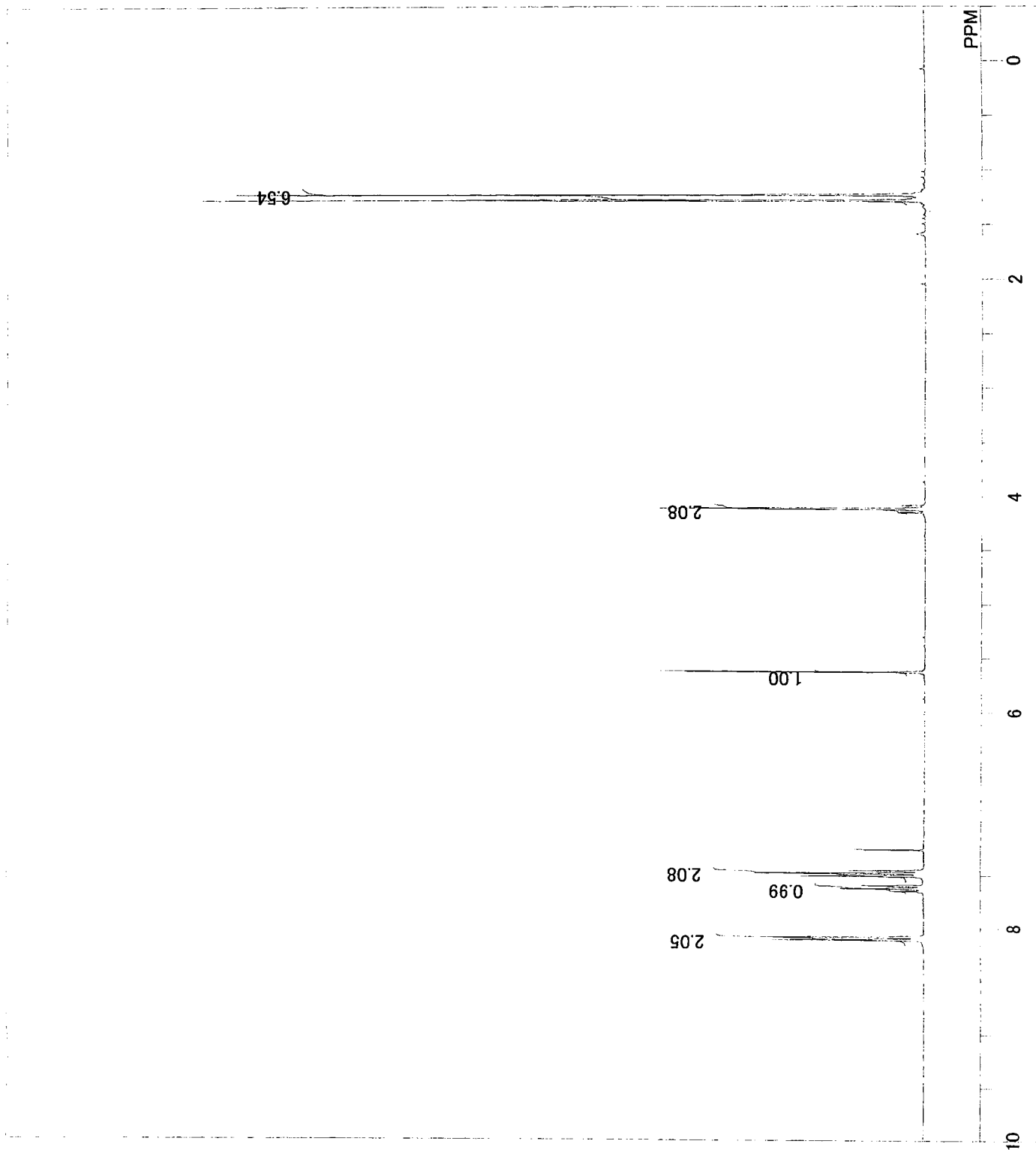
Mon Jan 25 12:35:00 2010

1H
NON
300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.40 usec
1H
20.5 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
16
RGAIN

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



(S)-1a-benzoate



F:\NMR DATA of K.R\B.Pantolactone\

Fri Dec 30 13:57:37 2011

13C

bcm

125.65 MHz

0.00 KHz

127958.00 Hz

32768

33898.30 Hz

256

0.9667 sec

2.0333 sec

4.90 usec

1H

25.3 c

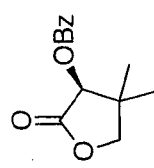
CDCL₃

77.00 ppm

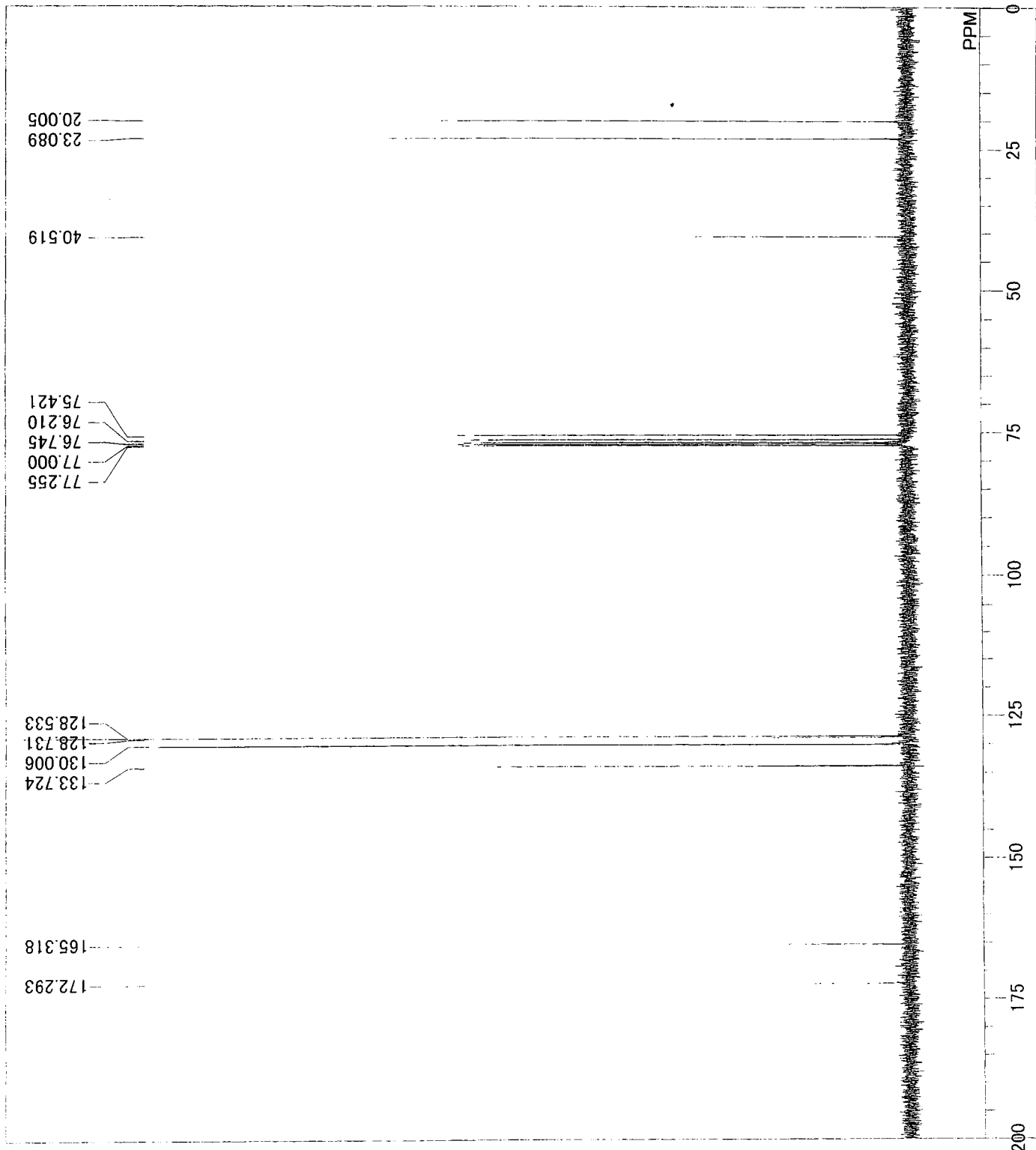
1.20 Hz

31

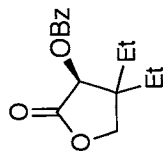
DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSE
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



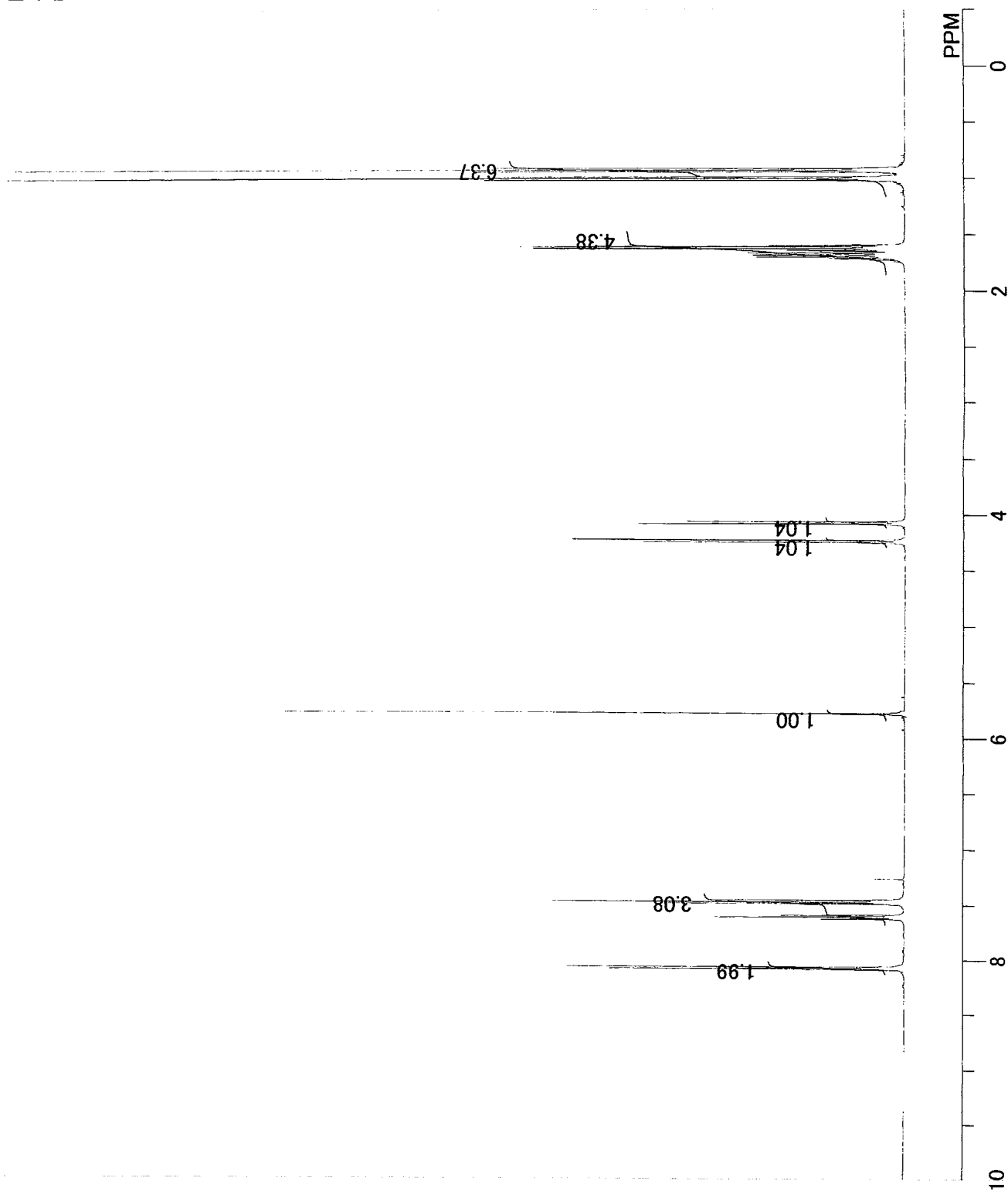
(S)-1a-benzoate



DFILE E:\NMR DATA of K.R\diethyl\No.2-147
COMNT No.2-147
DATIM Mon Dec 13 14:17:20 2010
OBNUC 1H
EXMOD non
OBFRQ 500.00 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 162160.00 Hz
POINT 32768
FREQU 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 3.2768 sec
PD 3.7232 sec
PW1 6.20 usec
IRNUG 1H
CTEMP 23.1 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 12



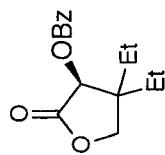
(S)-1b-benzoate



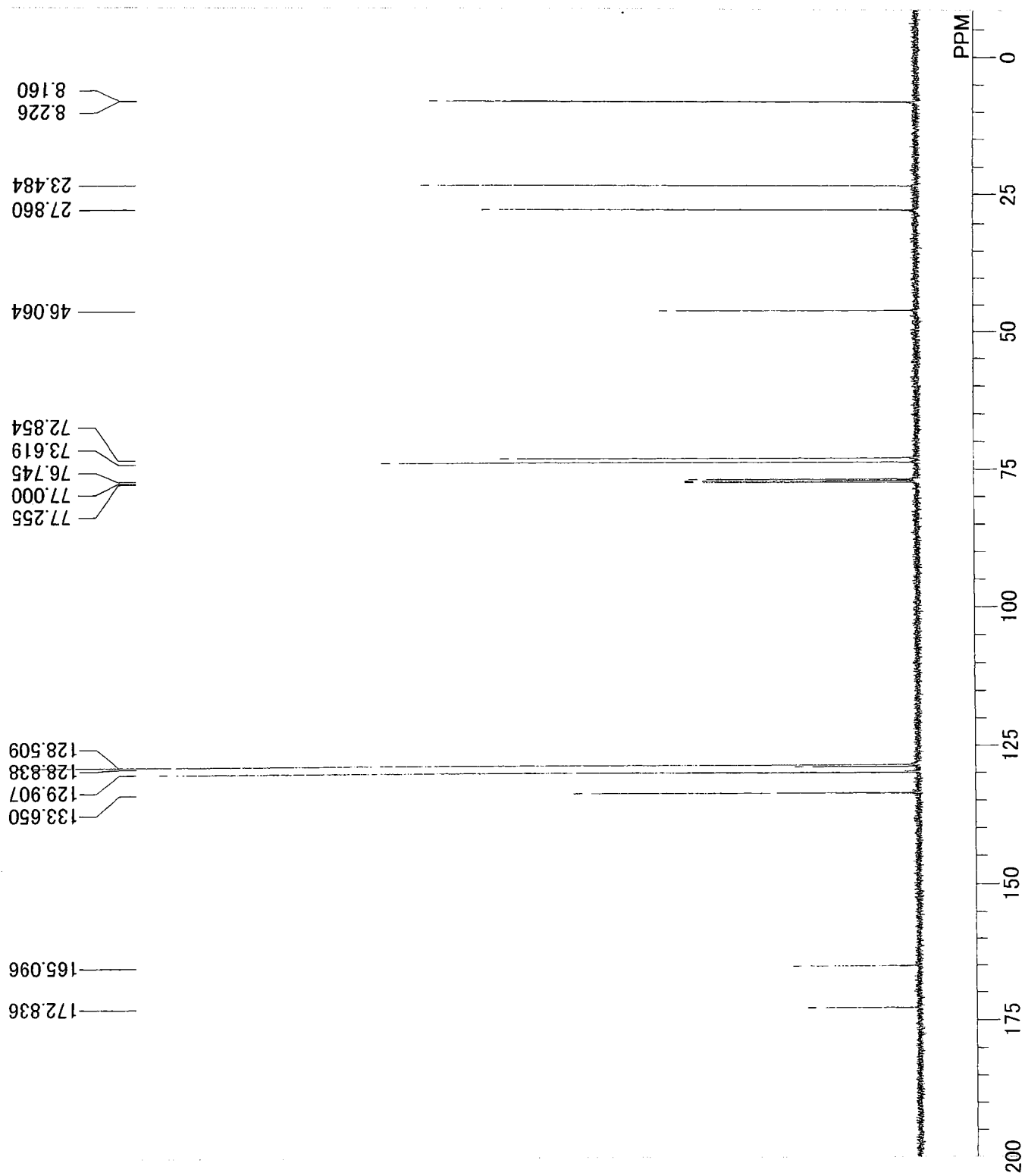
EXNMR DATA of K.R. diethyl No.2-147
No.2-147
Mon Dec 13 14:33:38 2010
13C
bcm

125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
320
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
25.3 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
30

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



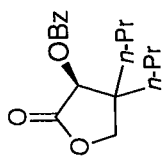
(S)-1b-benzoate



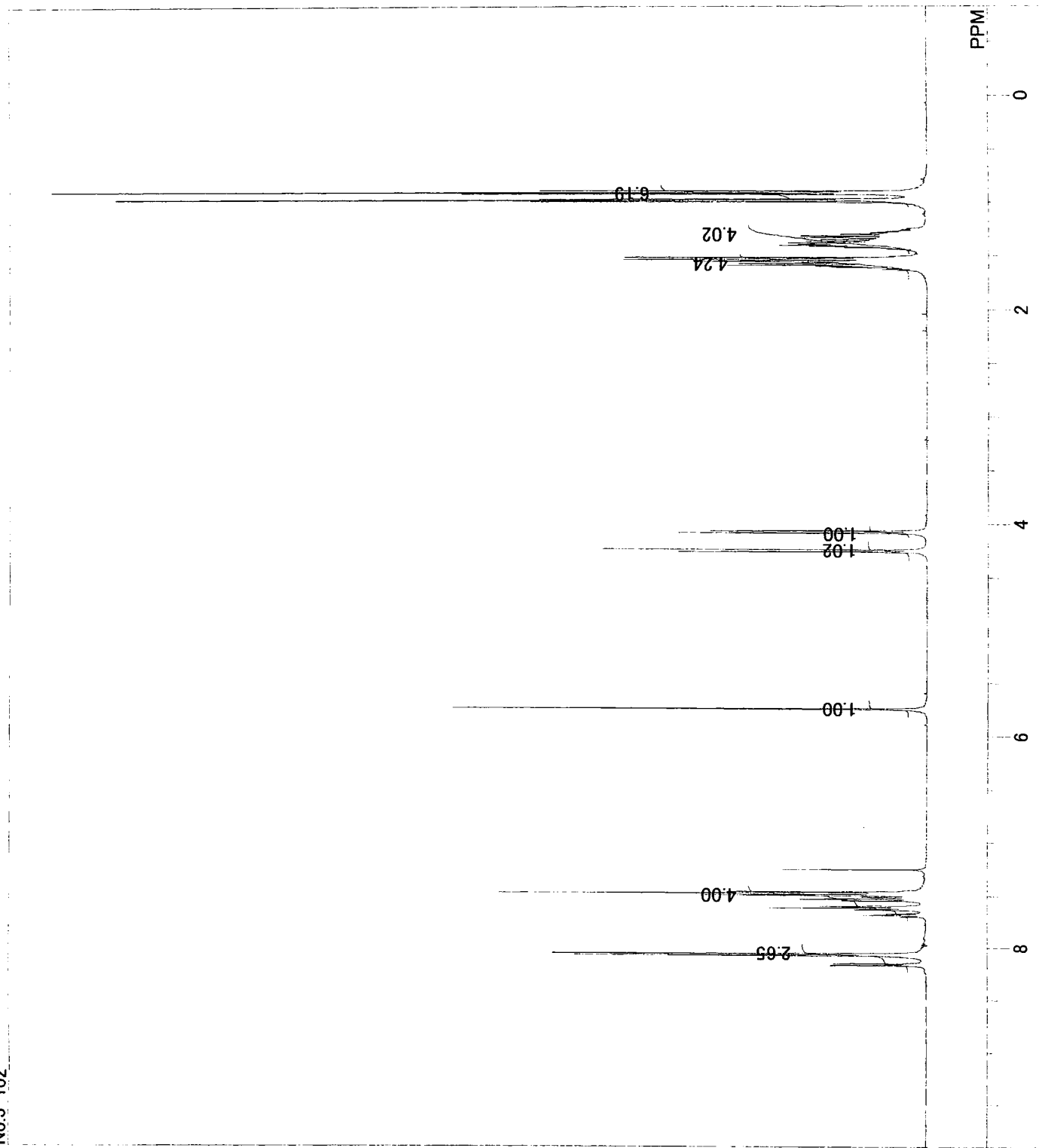
F: NMR DATA of K.R#D.3.3-di-n-Pr#N.
No.3-102
Wed Nov 09 16:50:16 2011

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
24.6 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
18

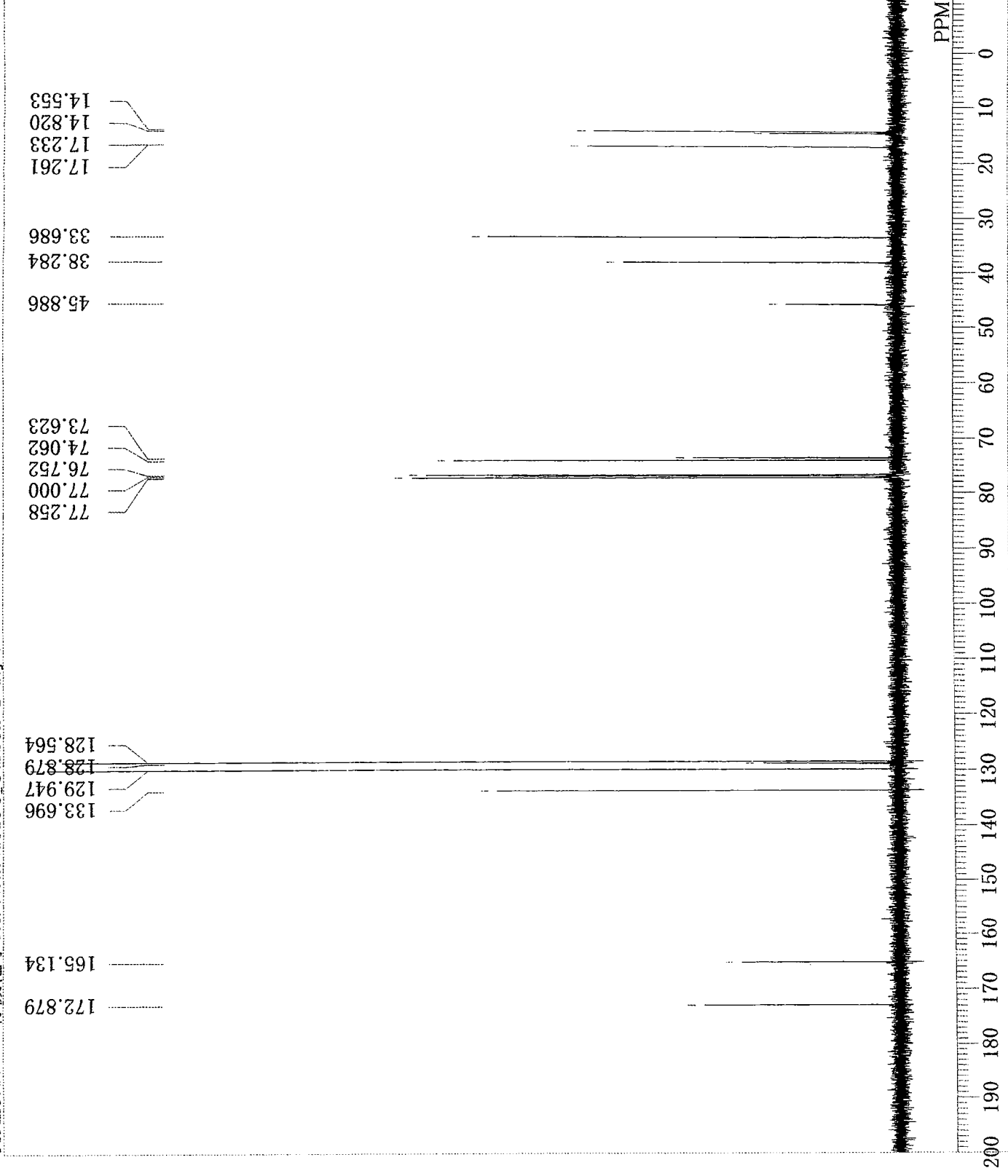


(S)-1c-benzoate

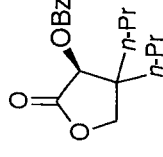


single pulse decoupled gated NOE

\\Alice\data\有機化学\K. Nakata\13C_Carbon-1-1.jdf



DFILE 13C_Carbon-1-1.jdf
 COMNT single pulse decoupled gate
 DATIM 2012-10-09 11:08:26
 OBNUC 13C
 EXMOD carbon.jxp
 OBFRQ 125.77 MHz
 OBSET 7.87 KHz
 OBFIN 4.21 Hz
 POINT 32767
 FREQU 39308.18 Hz
 SCANS 128
 ACQTM 0.8336 sec
 PD 1.0000 sec
 PW1 3.00 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 22.8 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 77.00 ppm
 BF 0.12 Hz
 RGAIN 60



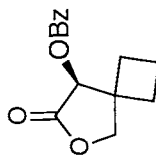
(S)-1c-benzoate

F:\NMR DATA of K.R\No.3-080.als

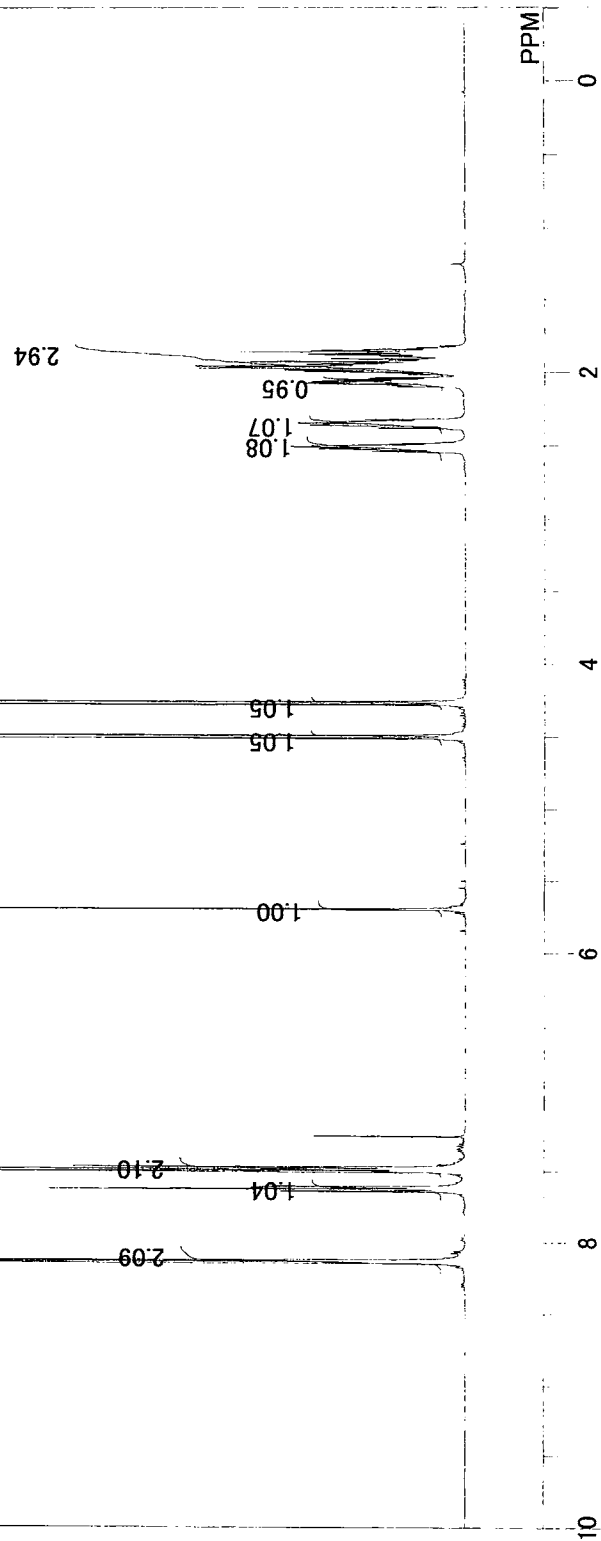
DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

Fri Jan 13 18:40:21 2012

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
24.0 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
15



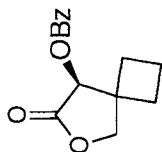
(S)-1d-benzoate



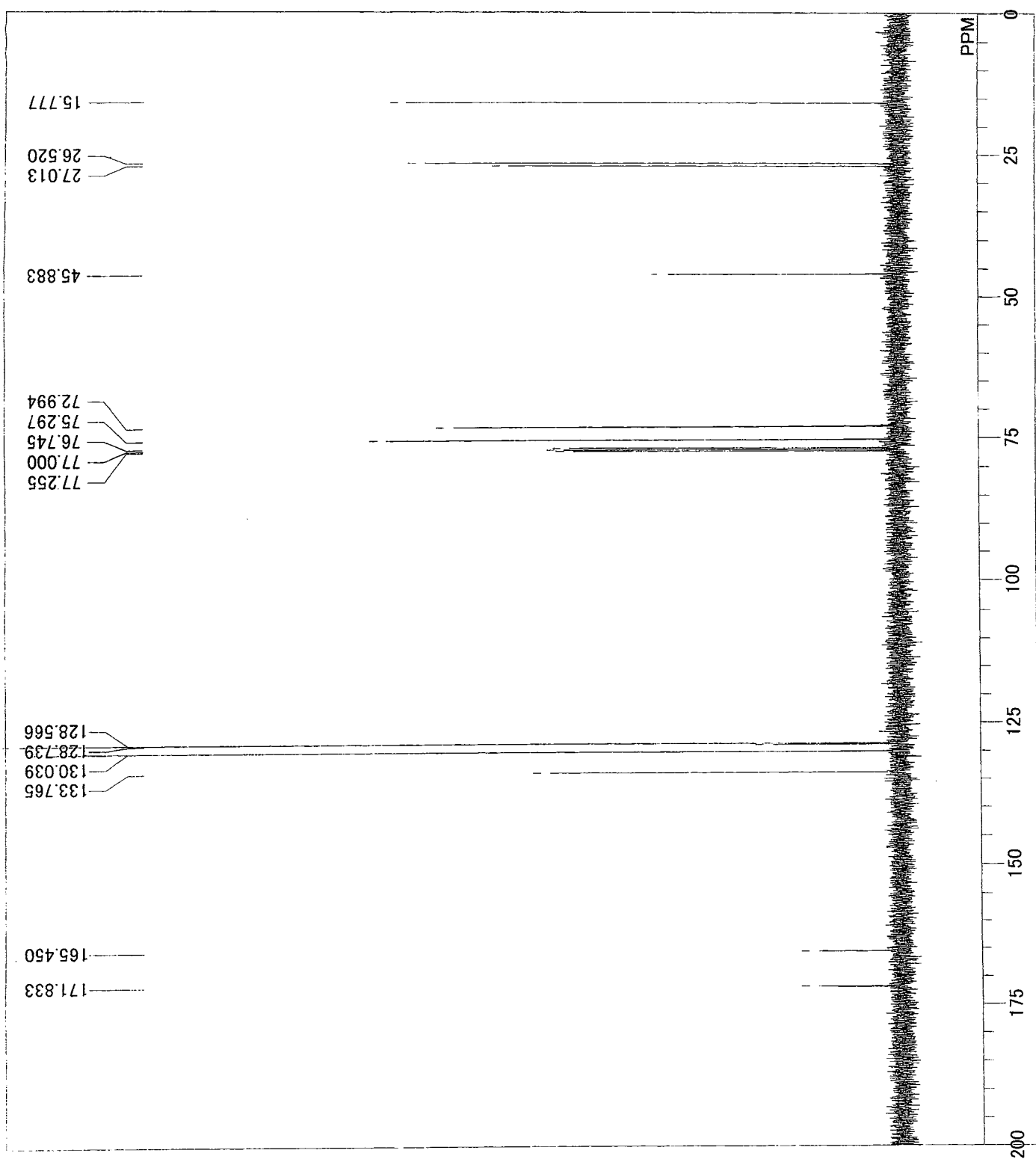
Fri Jan 13 18:43:51 2012

COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
64
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
25.0 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
31



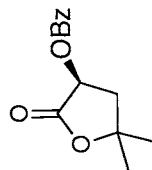
(S)-1d-benzoate



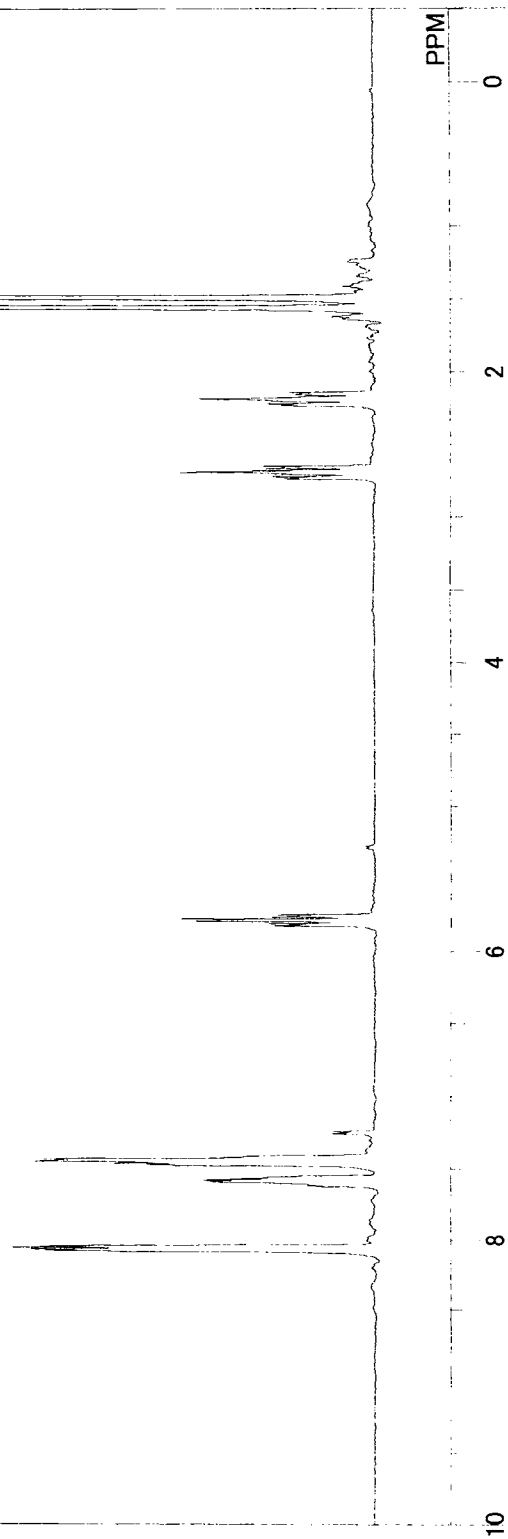
F:\New NMR DATA\No.3-036.als
JCAMP-DX DATA FILE
2011/Dec/15 08:44:13

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
ZG30
300.01 MHz
0.00 KHz
1842.92 Hz
32768
6172.84 Hz
8
0.0000 sec
0.0000 sec
12.70 usec
OFF
23.9 c
CDCL3
7.26 ppm
0.25 Hz
203



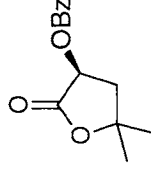
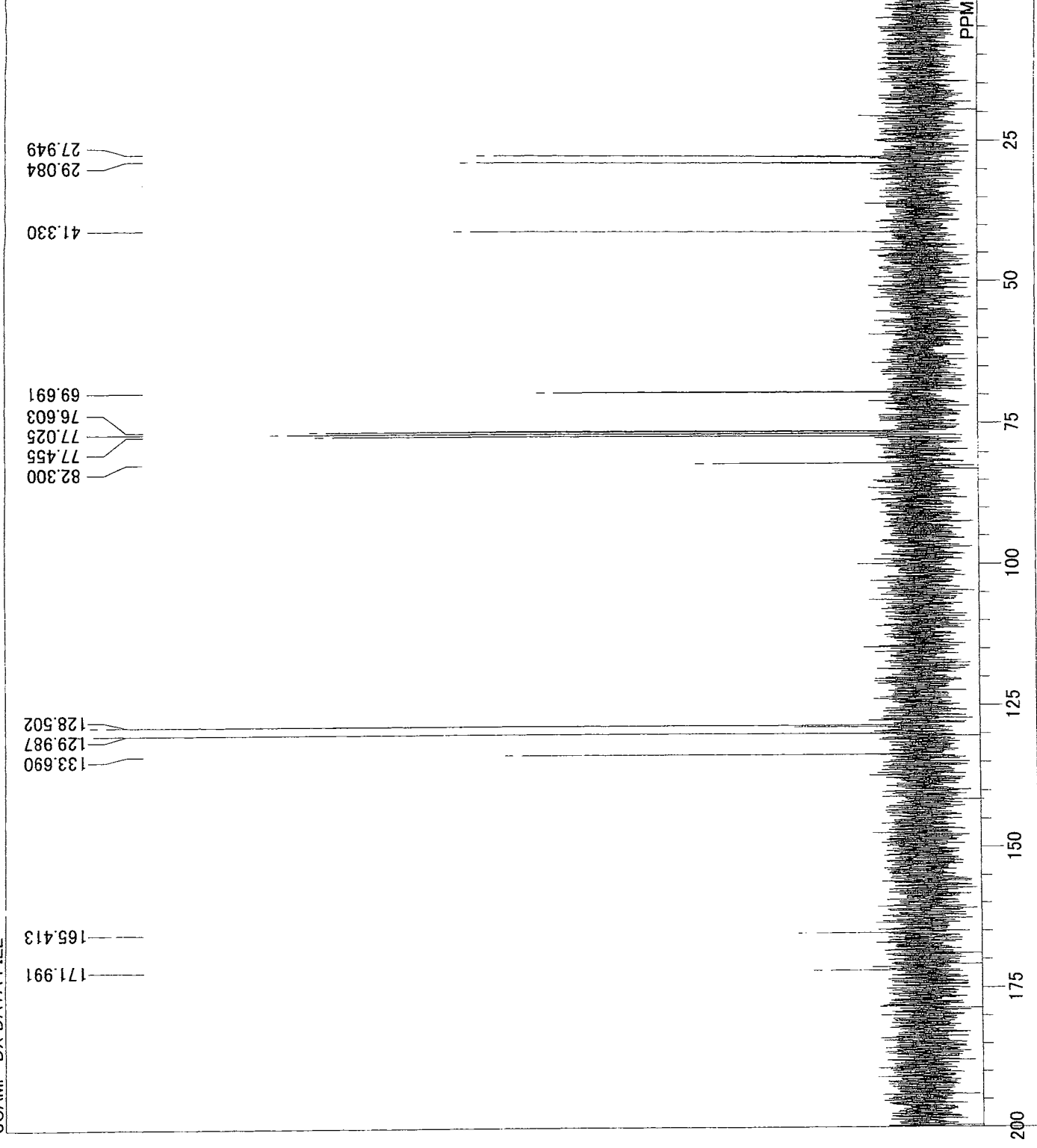
(S)-1e-benzoate



DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F:\New NMR DATA\No.3-036.BCM.als
JCAMP-DX DATA FILE
2011/Dec/15 08:50:32
13C
ZGPG30
75.44 MHz
0.00 KHz
7541.97 Hz
32768
17985.61 Hz
32
0.0000 sec
0.0000 sec
9.50 usec
OFF
23.9 c
CDCL3
-19.21 ppm
0.25 Hz
1448

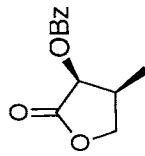
171.991
165.413
133.690
129.987
128.502
82.300
77.455
77.025
76.603
69.691
41.330
29.084
27.949



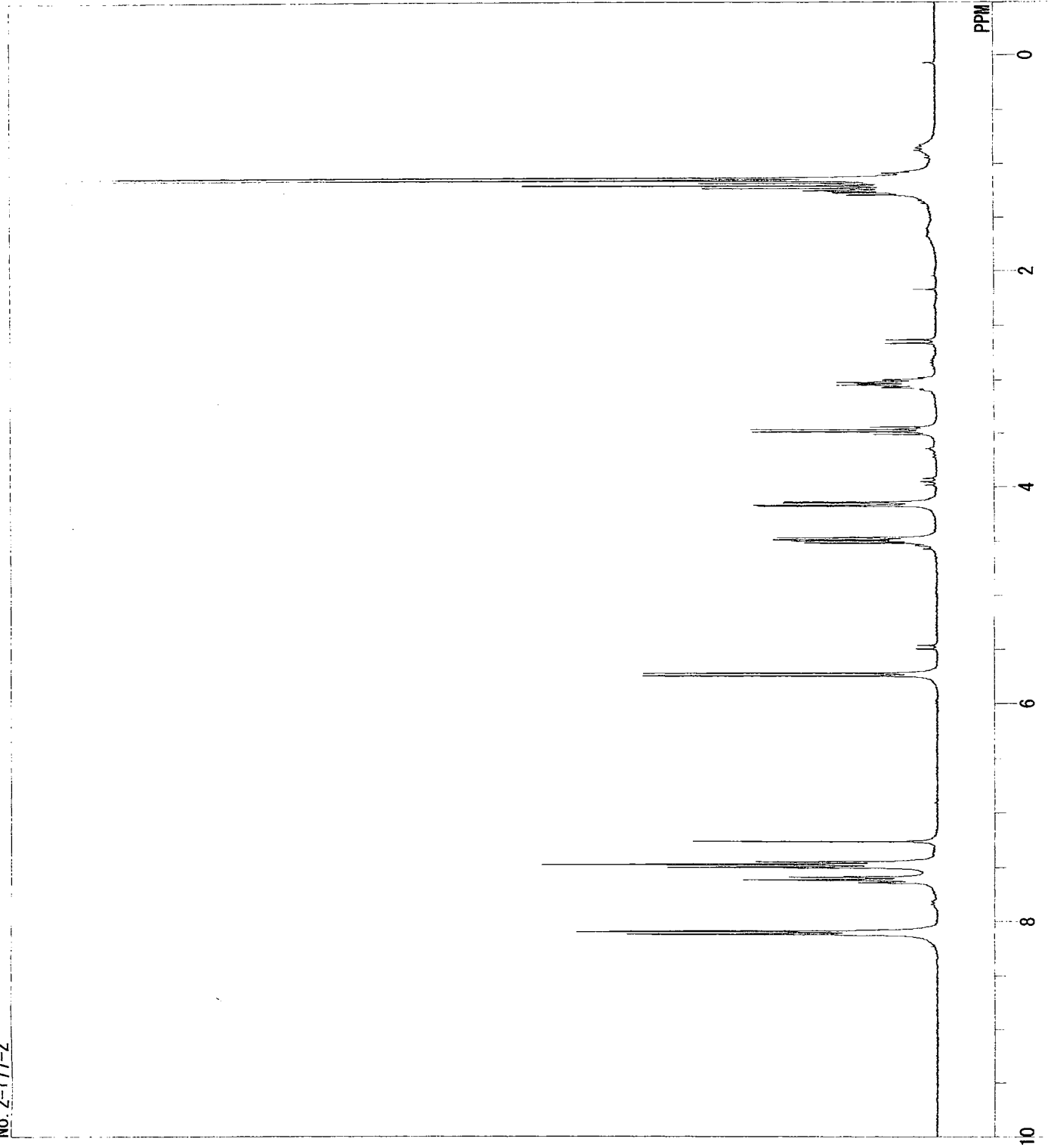
(S)-1e-benzoate

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQ
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

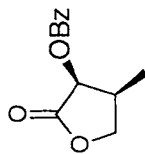
No. 2-177-2
Sat Dec 10 15:58:16 2011
1H
NON
300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.60 usec
1H
21.0 c
CDCl3
7.26 ppm
0.12 Hz
18



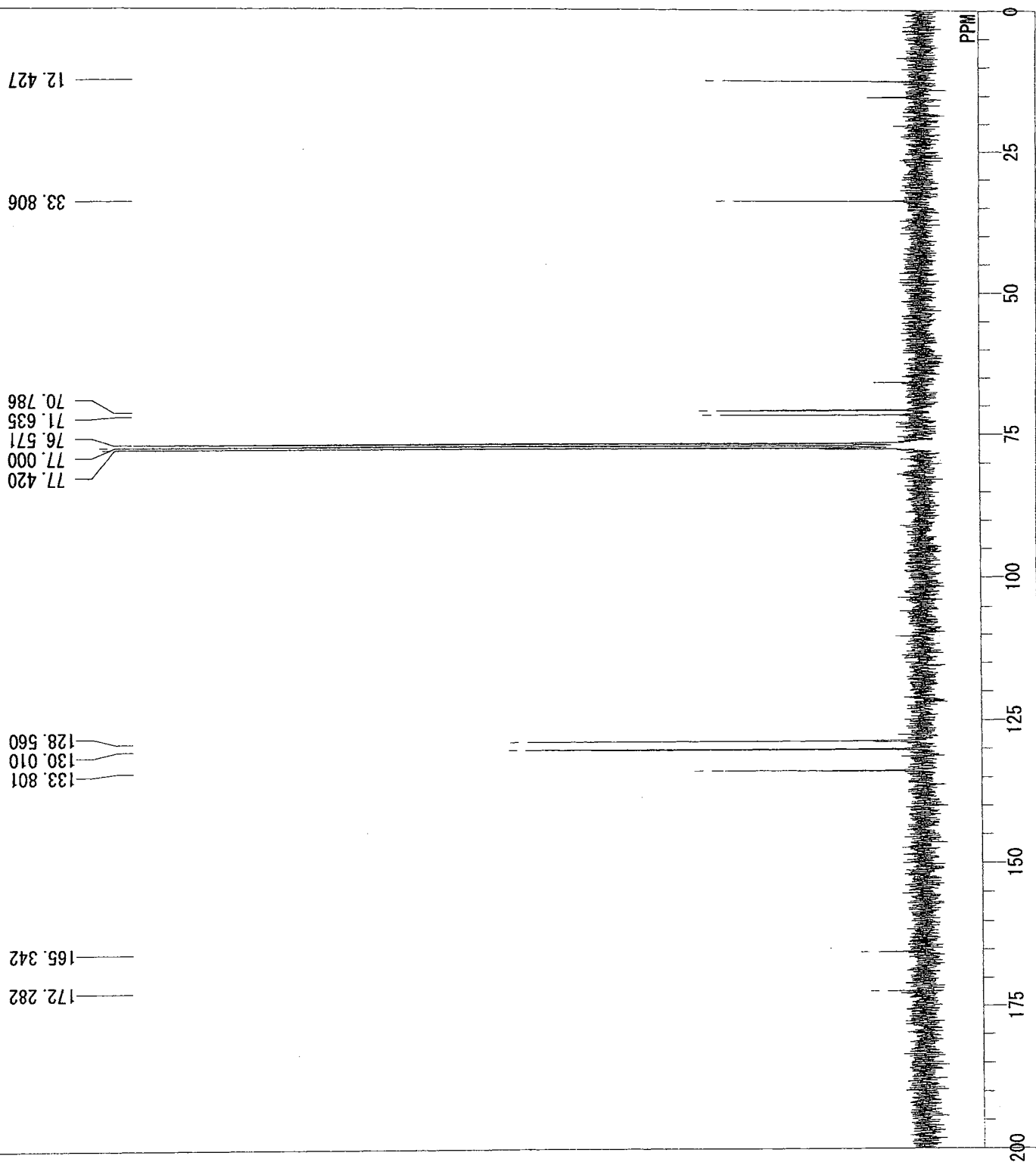
(S)-cis-1f-benzoate



DFILE E:\实验数据\NMR DATA No. 2\No. 2-177-2.
COMNT No. 2-177-2
DATIM Sat Dec 10 16:24:15 2011
OBNUC 13C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 512
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 21.6 C
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 23

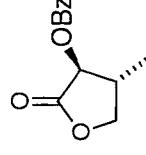


(S)-cis-1f-benzoate

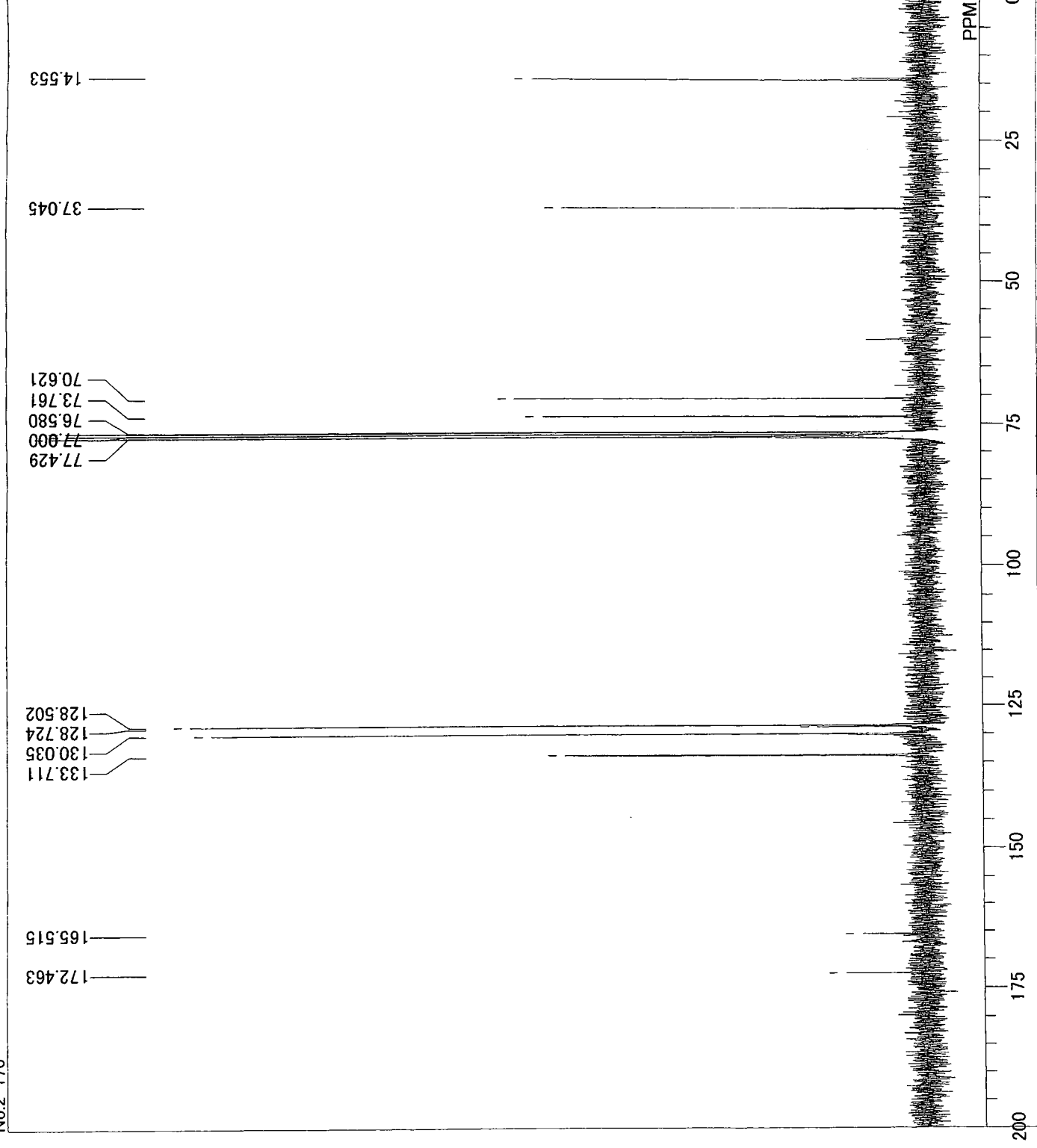


DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PWI
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F: NMR DATA of K.R. monomethyl (tr
No.2-170
Sat Jul 16 11:52:35 2011
13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
512
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
24.0 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
23



(S)-trans-1f-benzoate

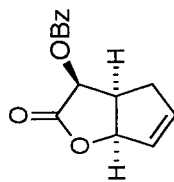


F:\NMR DATA of K.R\H.5,5-endo\No.2

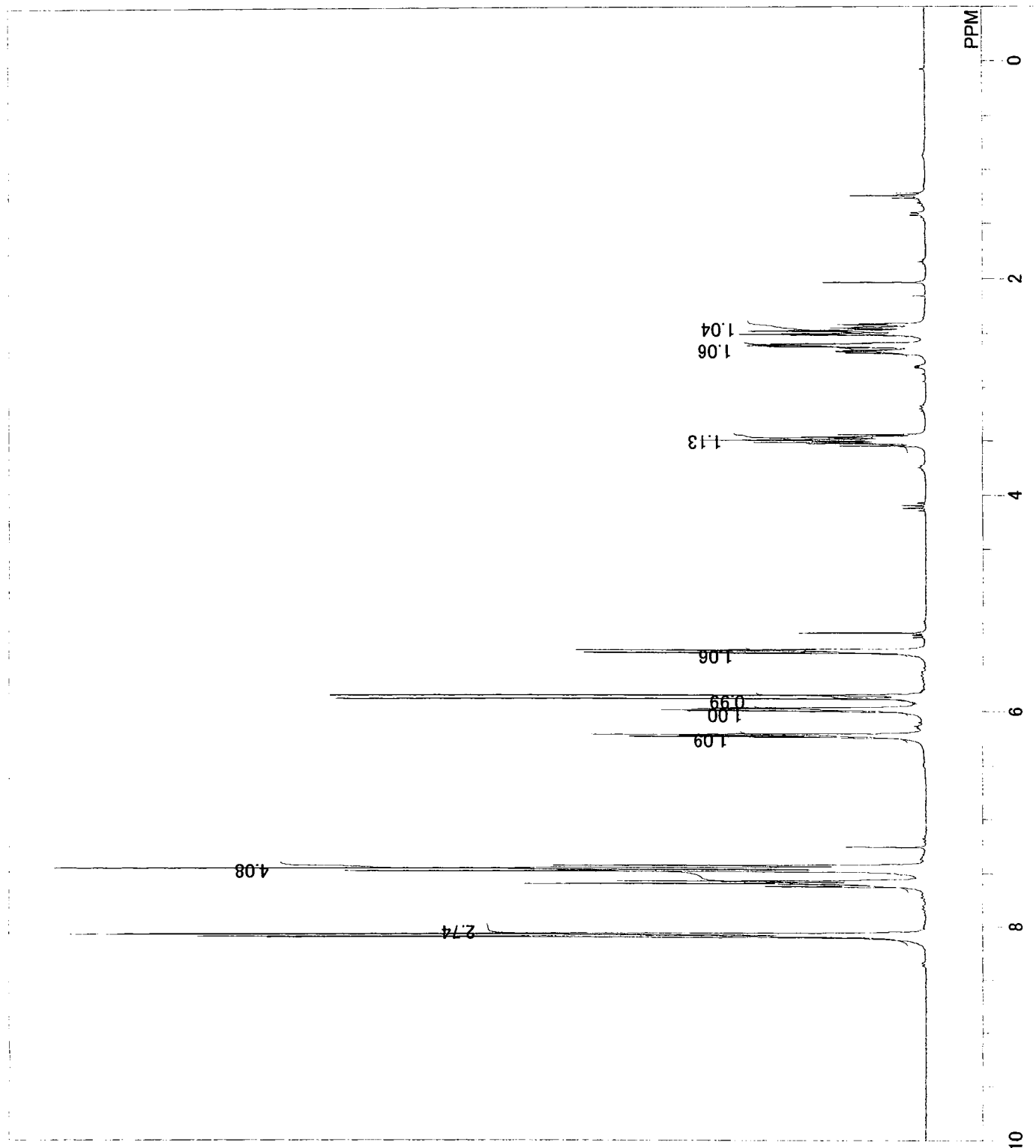
Thu Jul 28 11:55:31 2011

1H
NON
300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.60 usec
1H
23.3 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
15
RGAIN

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



(S)-endo-1g-benzoate

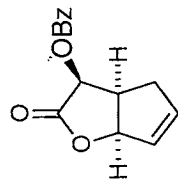


F: #NMR DATA of K.R#H.5.5--endo#No.2

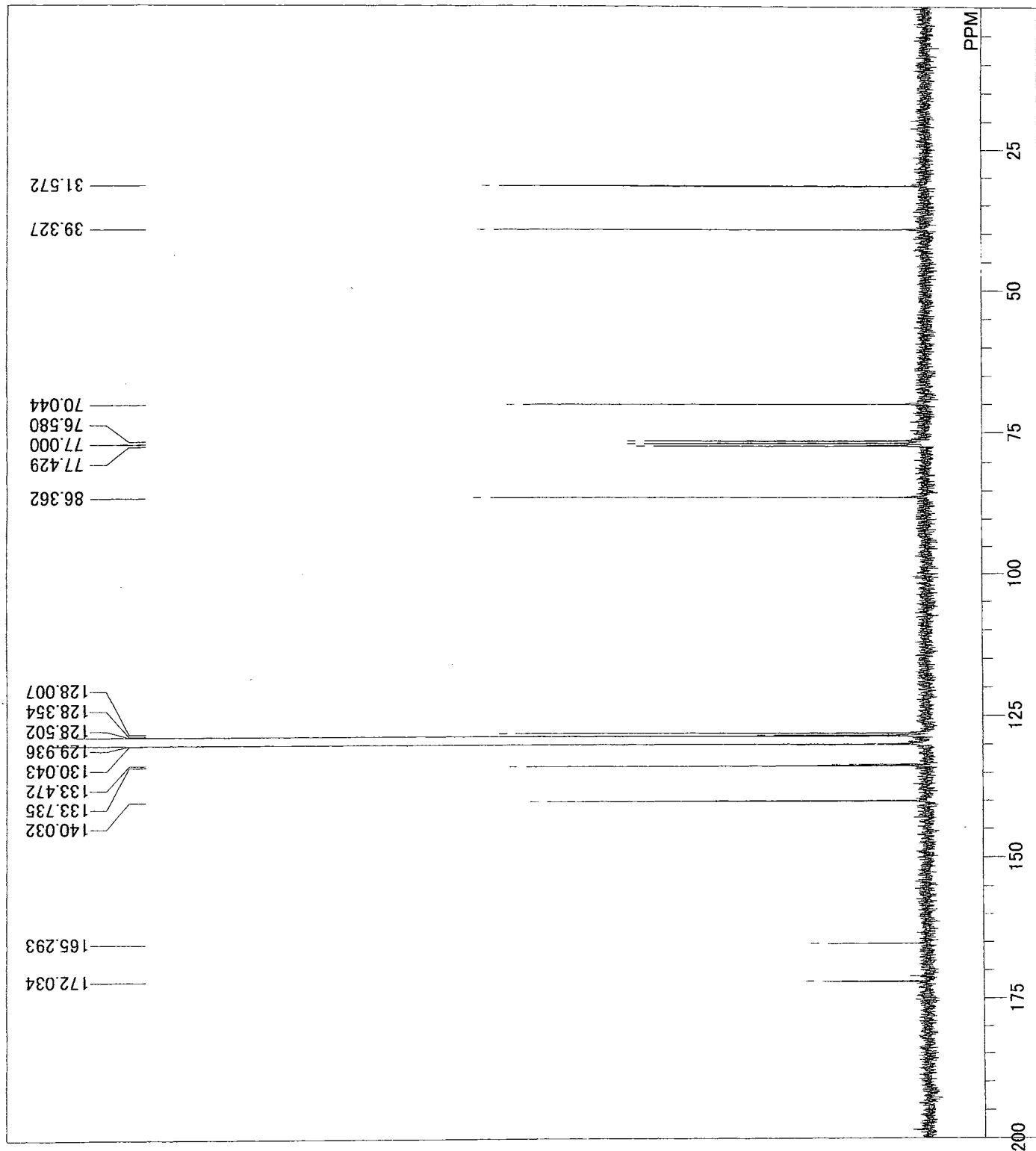
Thu Jul 28 12:02:17 2011

13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
128
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
23.5 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
23

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

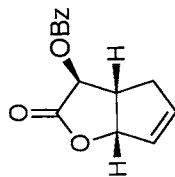


(S)-endo-1g-benzoate

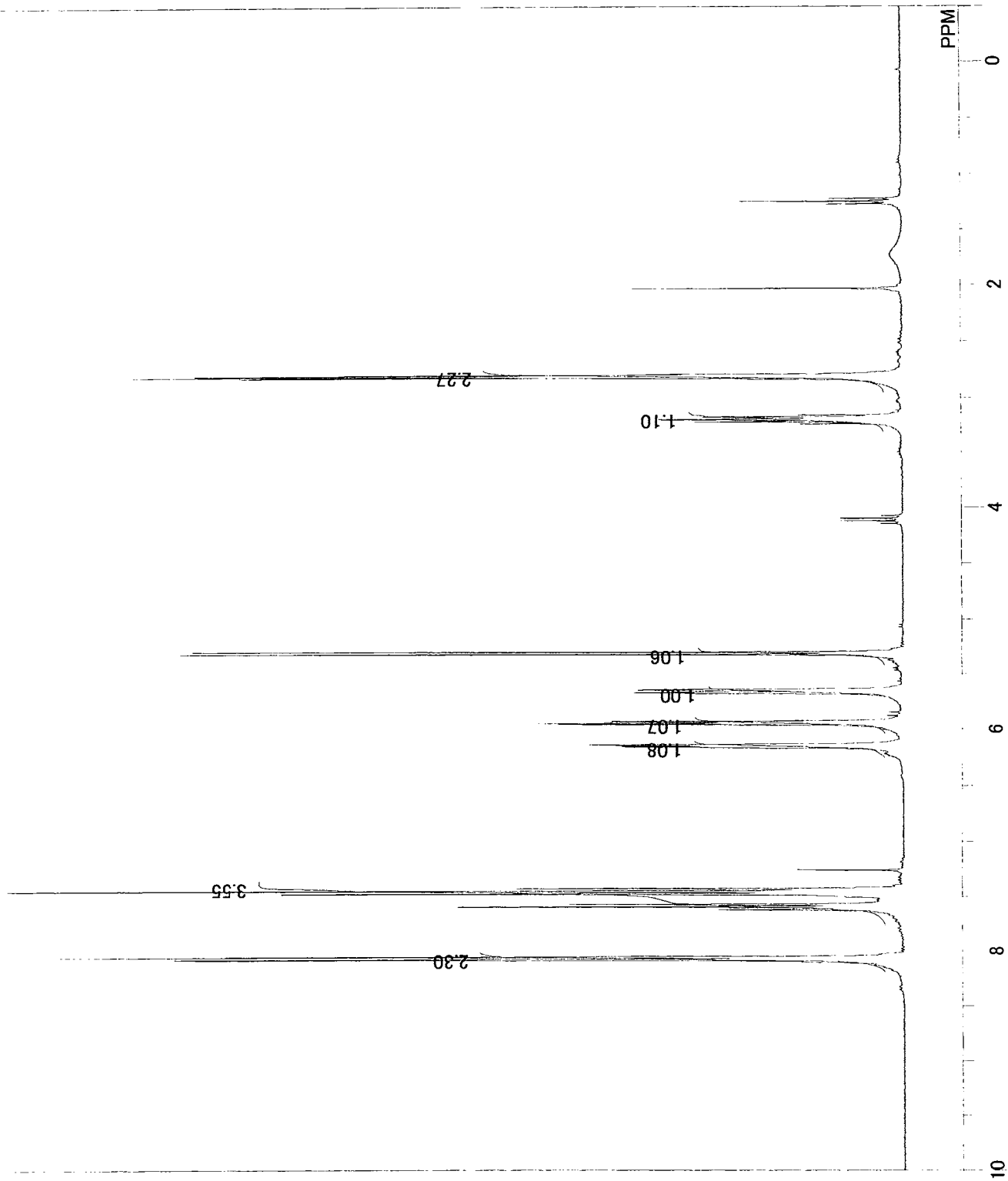


DFILE F:\NMR DATA of K.R\1.5-exo-Bz\No.
COMNT No.2-182
DATIM Thu Jul 28 11:26:26 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON

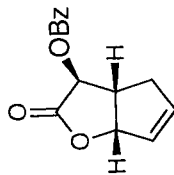
OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz
SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.60 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.3 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 15



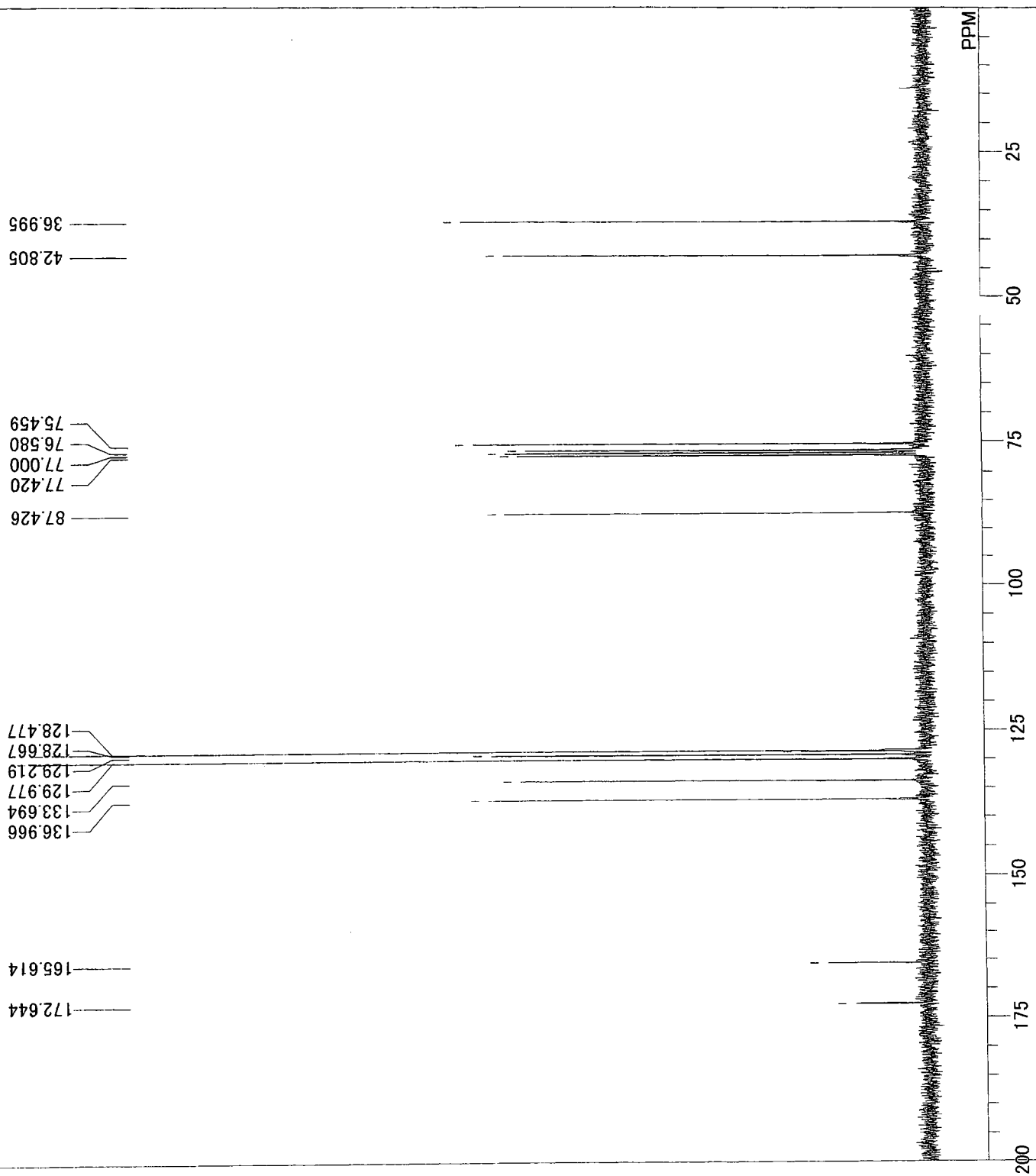
(S)-exo-1g-benzoate



DFILE F:\NMR DATA of K.R\1.5.5-exo#Bz#No.
COMNT No.2-182
DATIM Thu Jul 28 11:39:37 2011
OBNUC 13C
EXMOD BCM
OBFRQ 75.45 MHz
OBSET 124.00 KHz
OBFIN 1840.00 Hz
POINT 32768
FREQU 20408.10 Hz
SCANS 256
ACQTM 1.6056 sec
PD 1.3940 sec
PW1 4.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.2 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 1.20 Hz
RGAIN 23

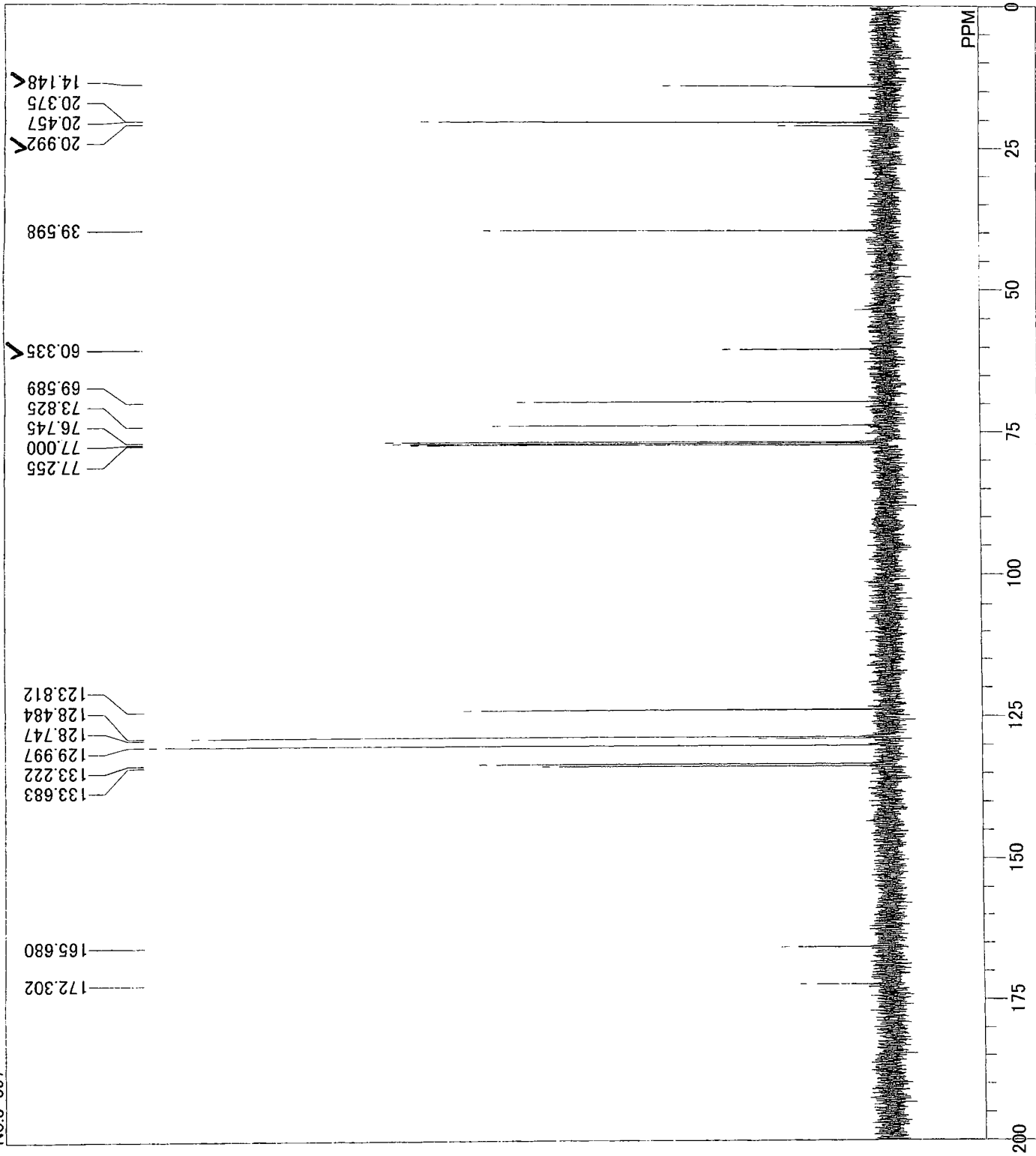


(S)-exo-1g-benzoate



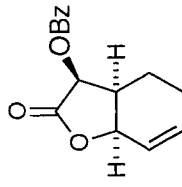
No.3-097

AcOEC



DFILE
 COMNT
 DATIM
 OBNUC
 EXMOD
 OBFRQ
 OBSET
 OBFIN
 POINT
 FREQU
 SCANS
 ACQTM
 PD
 PW1
 IRNUC
 CTEMP
 SLVNT
 EXREF
 BF
 RGAIN

No.3-097
 Tue Nov 08 14:48:48 2011
 13C
 bcm
 125.65 MHz
 0.00 KHz
 127958.00 Hz
 32768
 33898.30 Hz
 128
 0.9667 sec
 2.0333 sec
 4.90 usec
 1H
 26.6 c
 CDCL3
 77.00 ppm
 1.20 Hz
 30



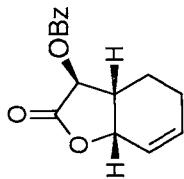
(S)-endo-1h-benzoate

F:\NMR DATA of K.R\K.6,6-exo\Bz\Nc

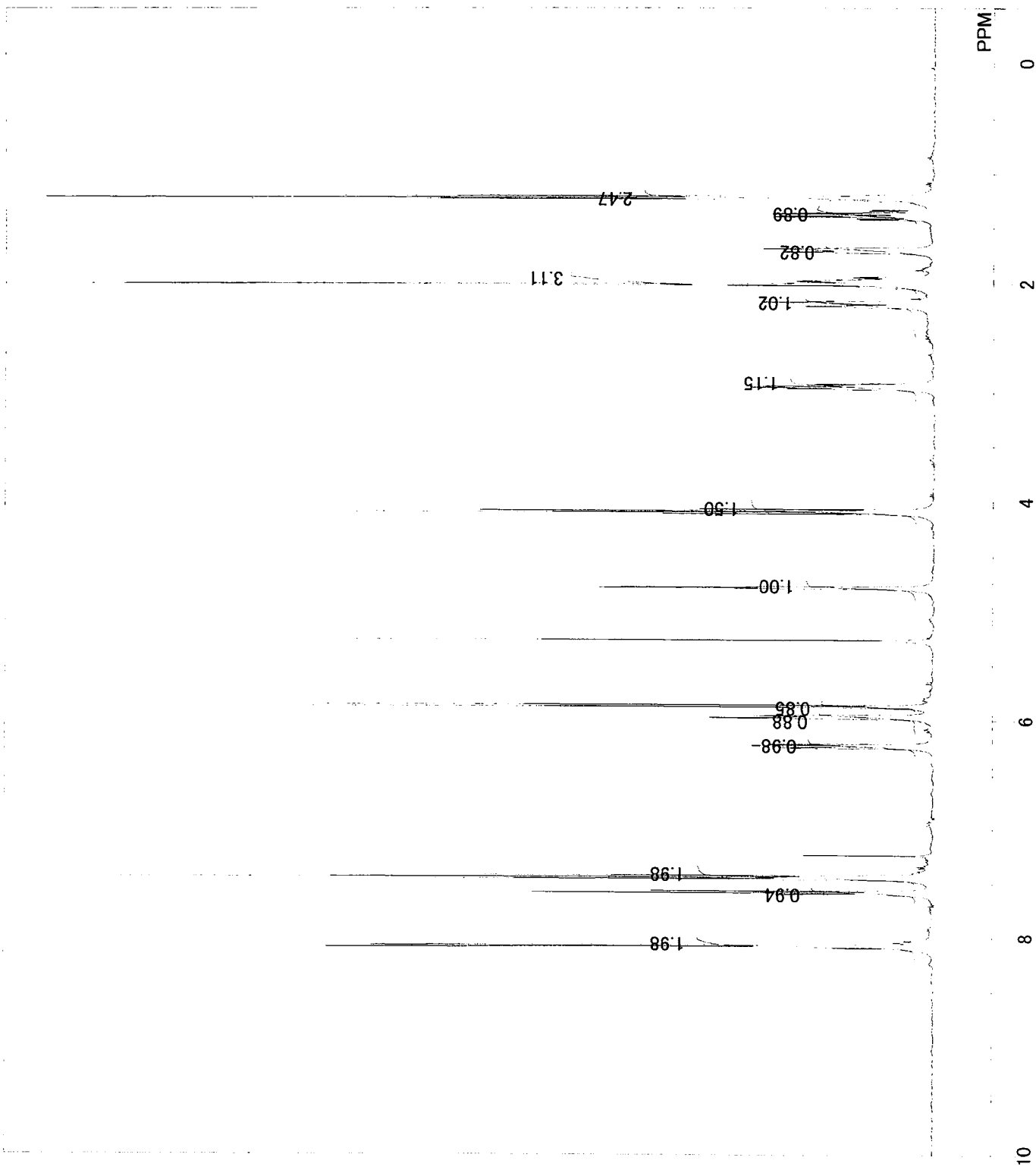
Tue Nov 08 14:53:39 2011

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
26.2 c
CDCL3
7.24 ppm
0.12 Hz
18

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



(S)-exo-1h-benzoate



ADFe

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

✓ 22.950
20.984 ✓
17.792
14.148 ✓

37.863

✓ 60.327

77.255
77.000
76.745
72.188
71.390

136.084
133.740
129.997
128.607
128.525
121.649

171.660
165.392

F: NMR DATA of K.R#K.6.6-exo-Bz#Nc

Tue Nov 08 15:00:21 2011

13C

bcm

125.65 MHz

0.00 KHz

127958.00 Hz

32768

33898.30 Hz

128

0.9667 sec

2.0333 sec

4.90 usec

1H

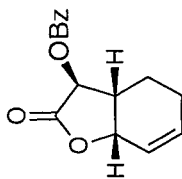
26.7 c

CDCL3

77.00 ppm

1.20 Hz

30



(S)-exo-1h-benzoate

PPM

0

25

50

75

100

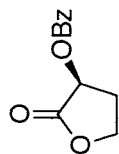
125

150

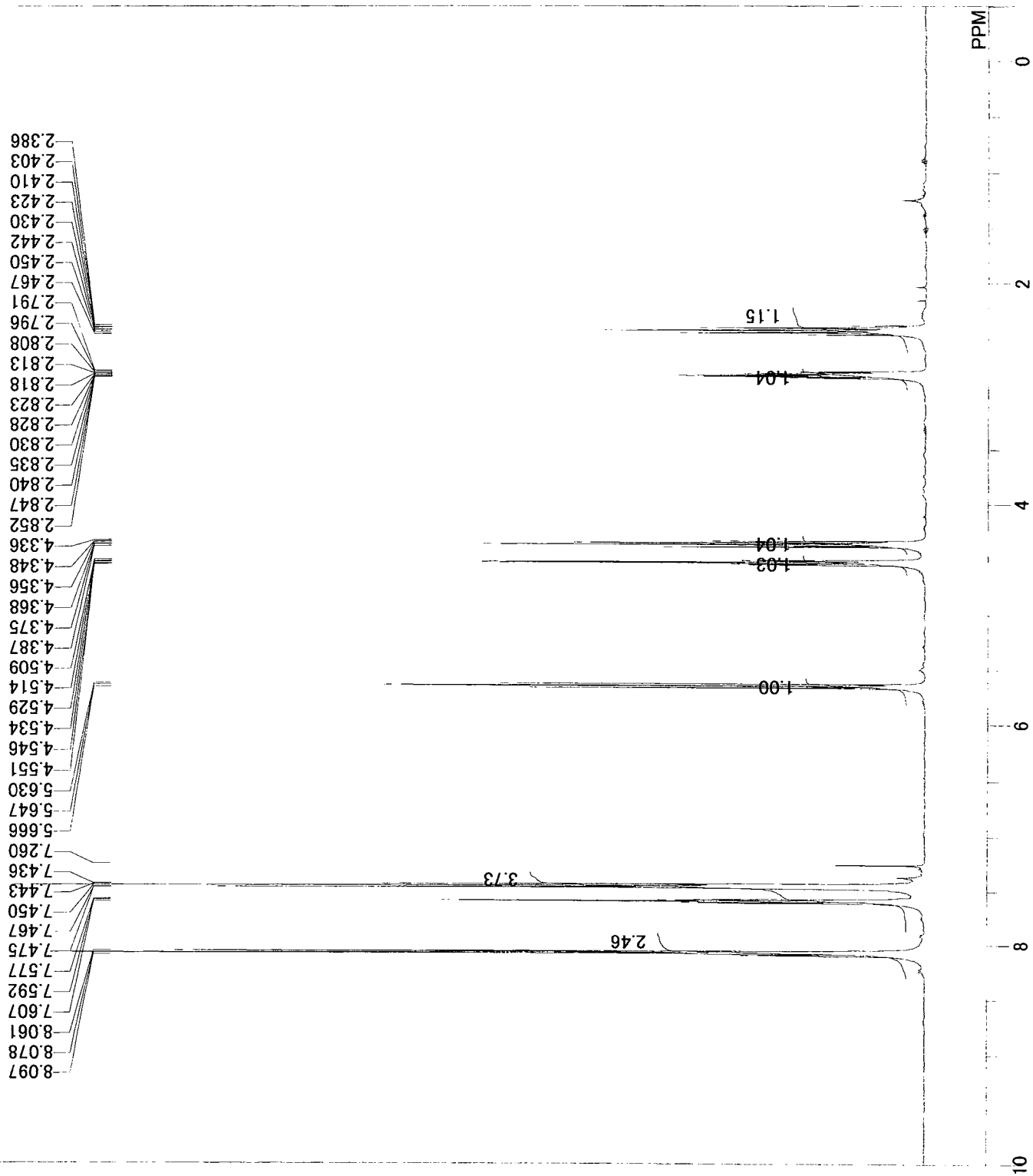
175

200

DFILE F:\New NMR DATA\No.3-092...als
COMNT No.3-092
DATIM Tue Nov 08 14:08:09 2011
OBNUC 1H
EXMOD non
OBFRQ 500.00 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 162160.00 Hz
POINT 8192
FREQU 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.8192 sec
PD 6.1808 sec
PW1 6.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 25.5 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 17

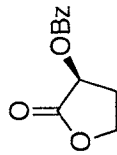


(S)-11-benzoate

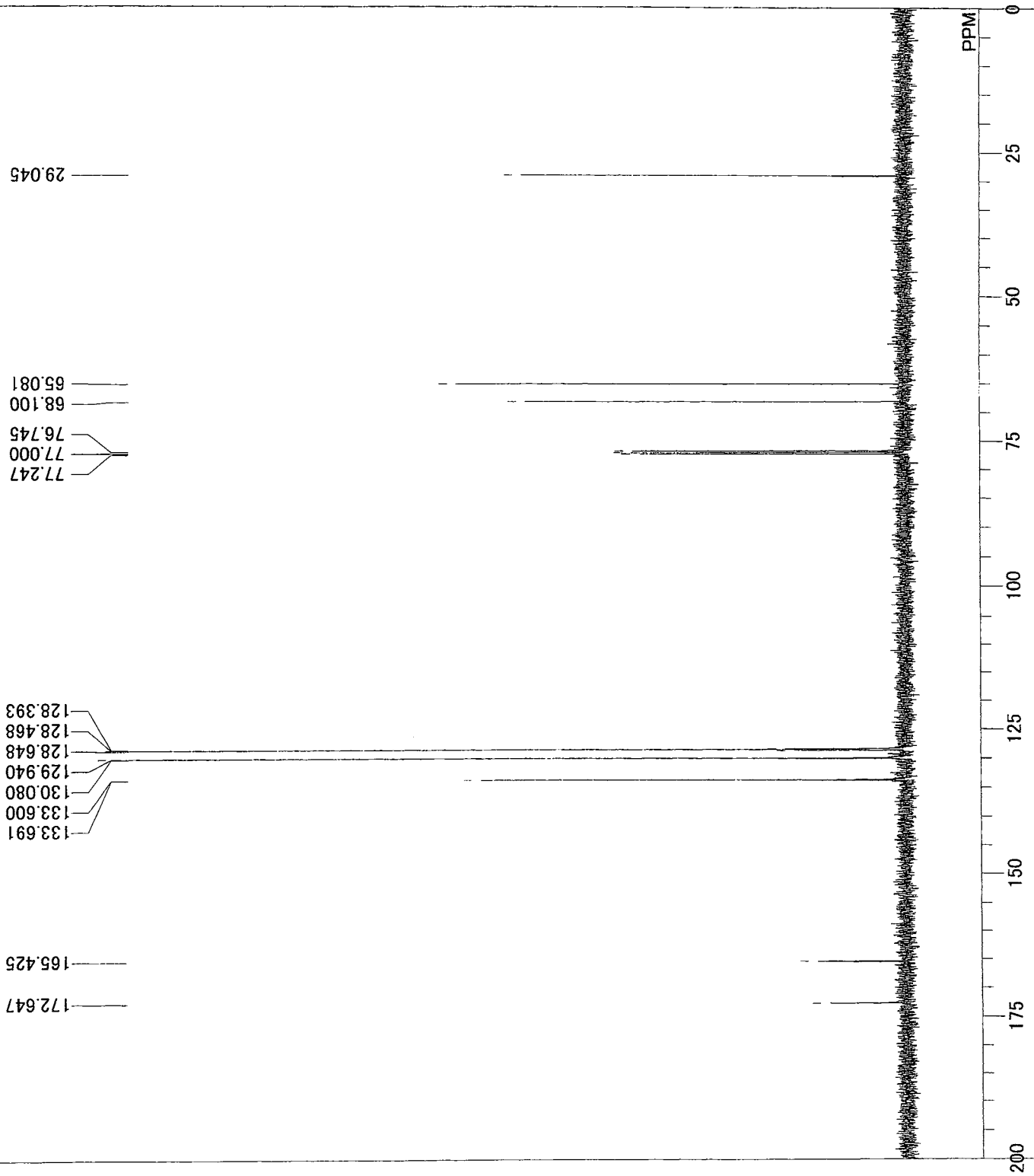


D:\New NMR DATA\No.3-092.BCM.als
No.3-092
Tue Nov 08 14:14:55 2011
13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
128
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
26.5 c
CDGL3
77.00 ppm
1.20 Hz
31

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



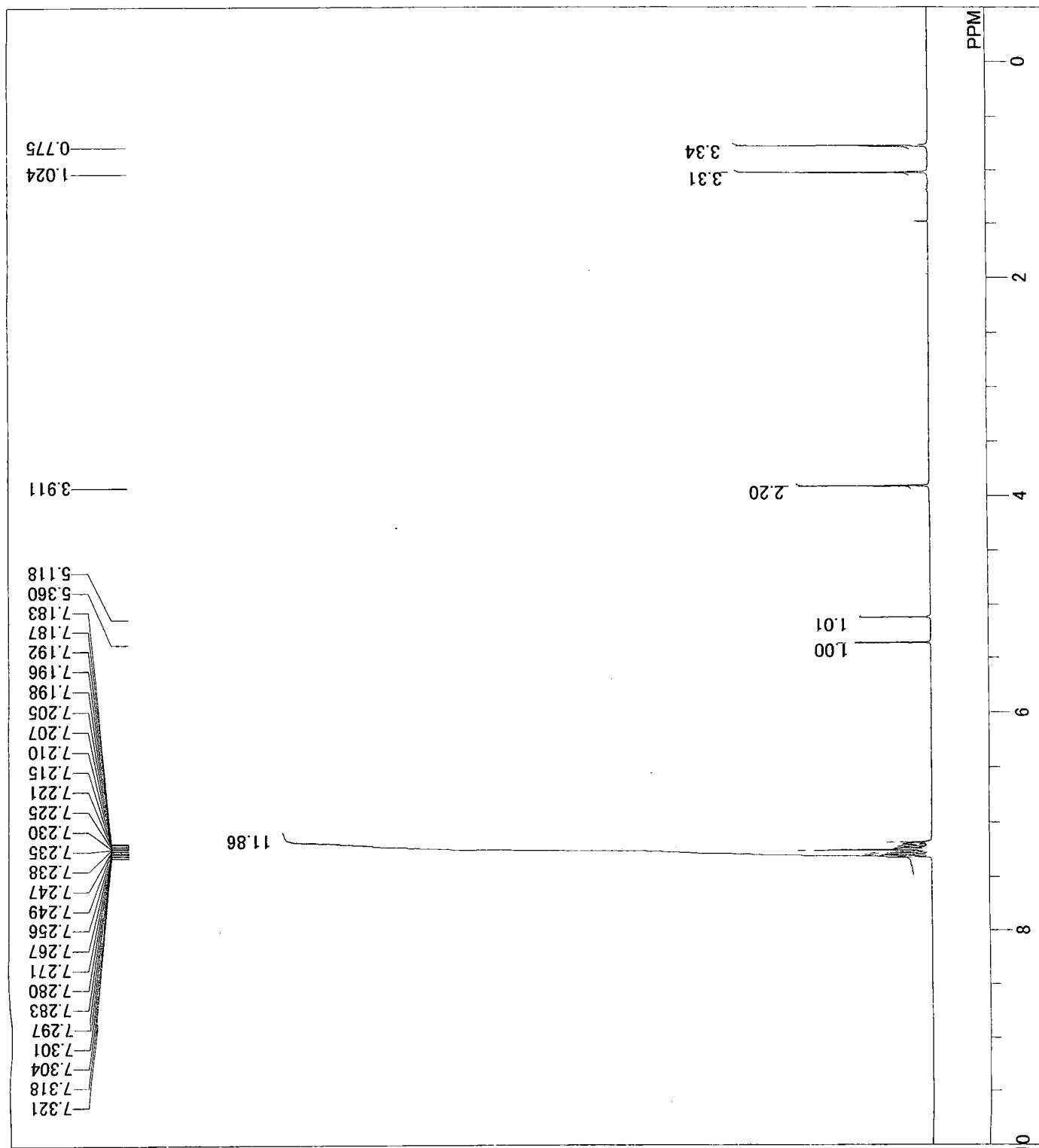
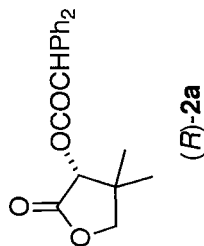
(S)-1i-benzoate



Mon Nov 16 21:16:56 2009

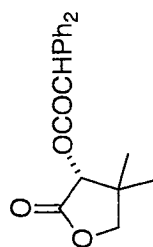
1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
32768
10000.00 Hz
8
3.2768 sec
3.7232 sec
6.50 usec
1H
24.0 c
CDCL3
0.00 ppm
0.12 Hz
18
RGAIN

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

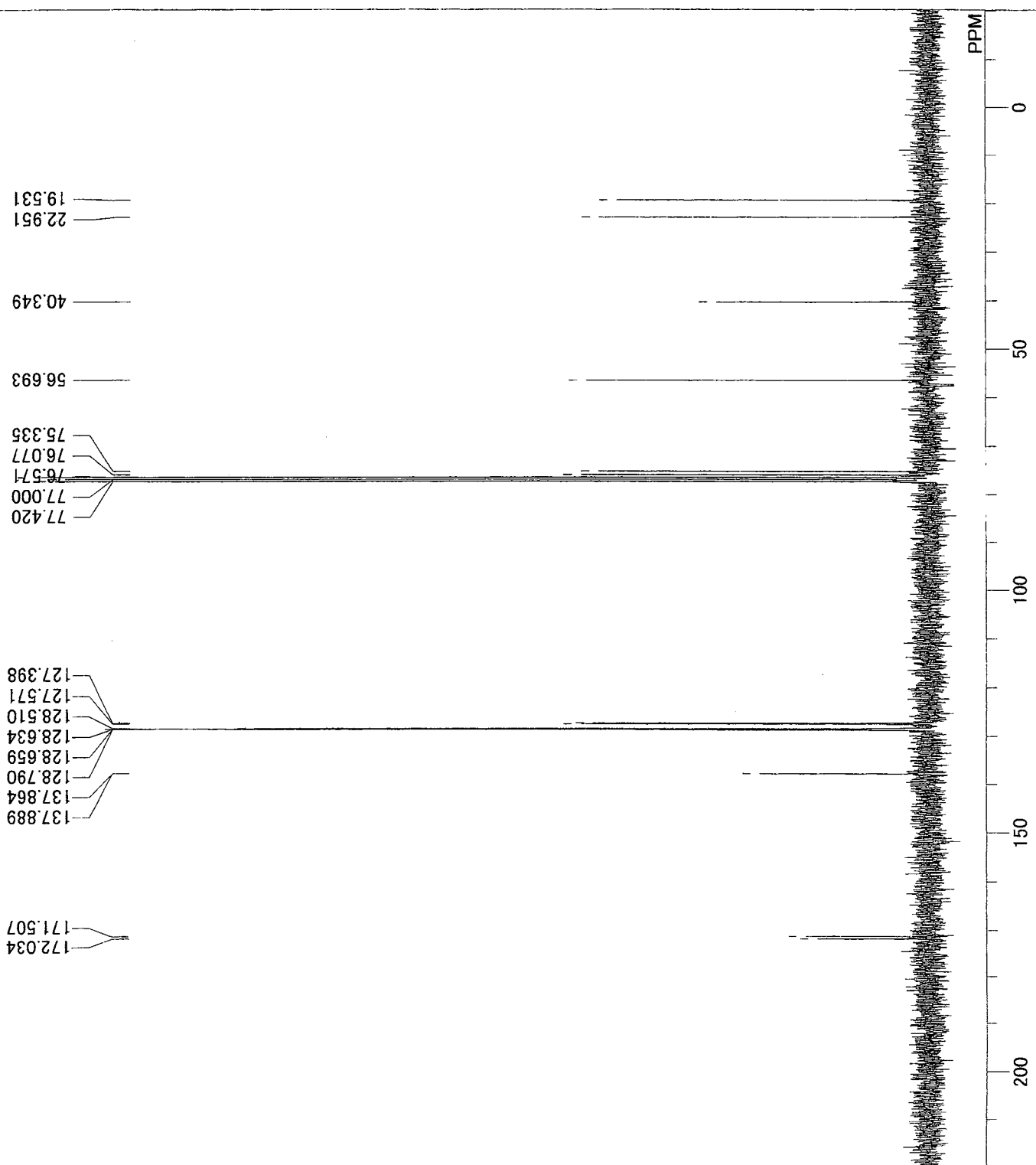


DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

G:\NMR DATA of K.R.#B.Pantolactone#
No.1-170-3.TM
Wed Mar 10 14:53:01 2010
13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
256
1.6056 sec
1.3940 sec
4.10 usec
1H
19.8 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
22



(R)-2a

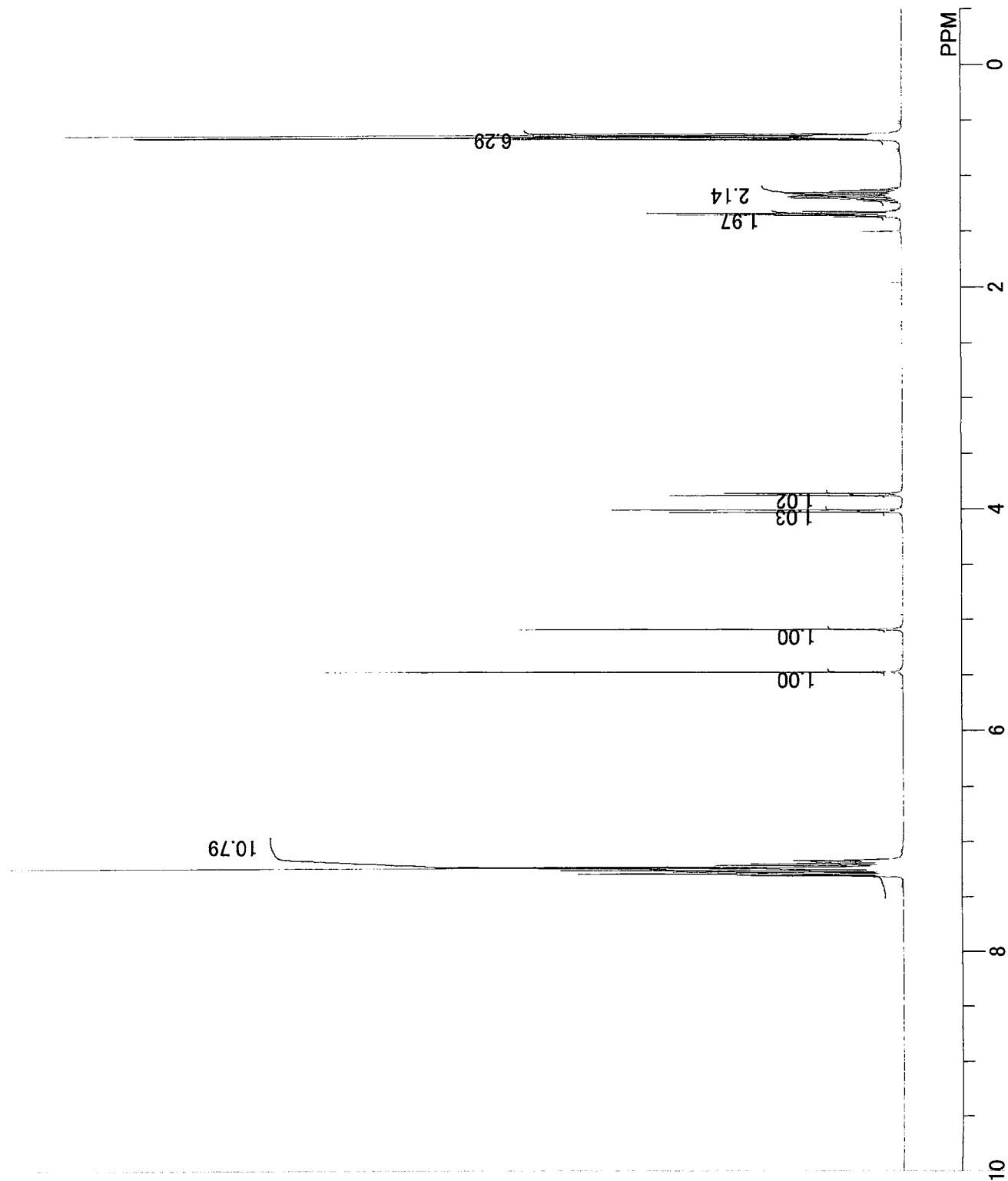
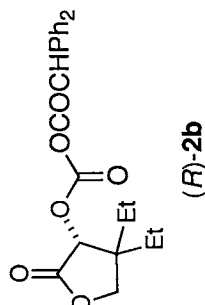


E:\NMR DATA of K.R\diethyl\No.:

Thu Dec 09 13:08:17 2010

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
32768
10000.00 Hz
8
3.2768 sec
3.7232 sec
6.20 usec
1H
24.5 c
CDCL3
0.00 ppm
0.12 Hz
15

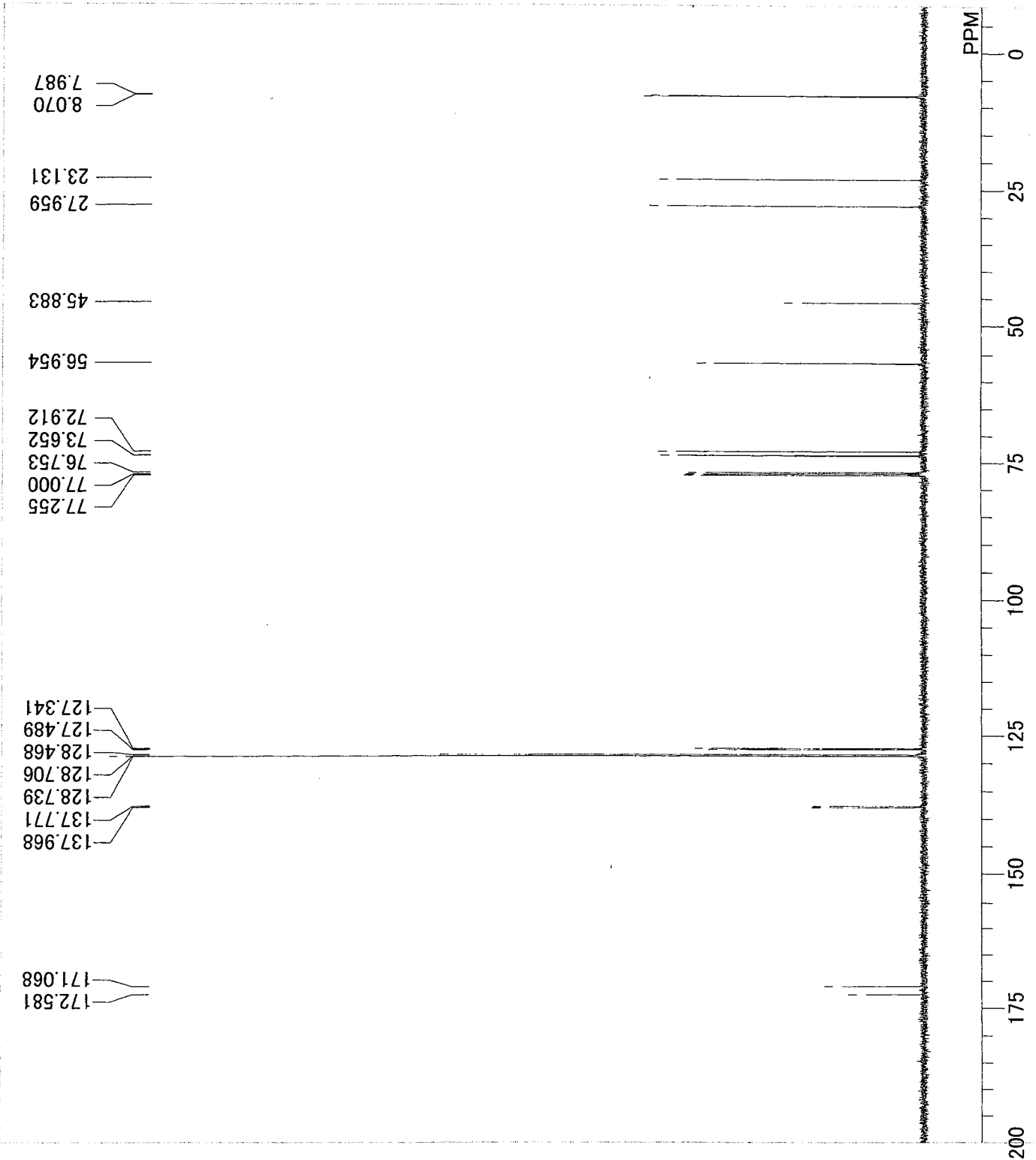
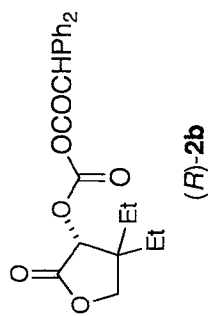


E:\NMR DATA of K.R\diethyl\#No.:

Thu Dec 09 13:24:36 2010

13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
320
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
24.9 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
30

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



DFILE F:\NMR DATA of K.R\#D.3.3-di-n-Pr\PI
COMNT No.3-100-1.TM
DATIM Tue Nov 08 14:16:55 2011
OBNUC 1H
EXMOD NON

OBFRQ 300.40 MHz

OBSET 130.00 KHz

OBFIN 1150.00 Hz

POINT 32768

FREQU 6020.40 Hz

SCANS 8

ACQTM 5.4428 sec

PD 1.5510 sec

PW1 5.60 usec

IRNUC 1H

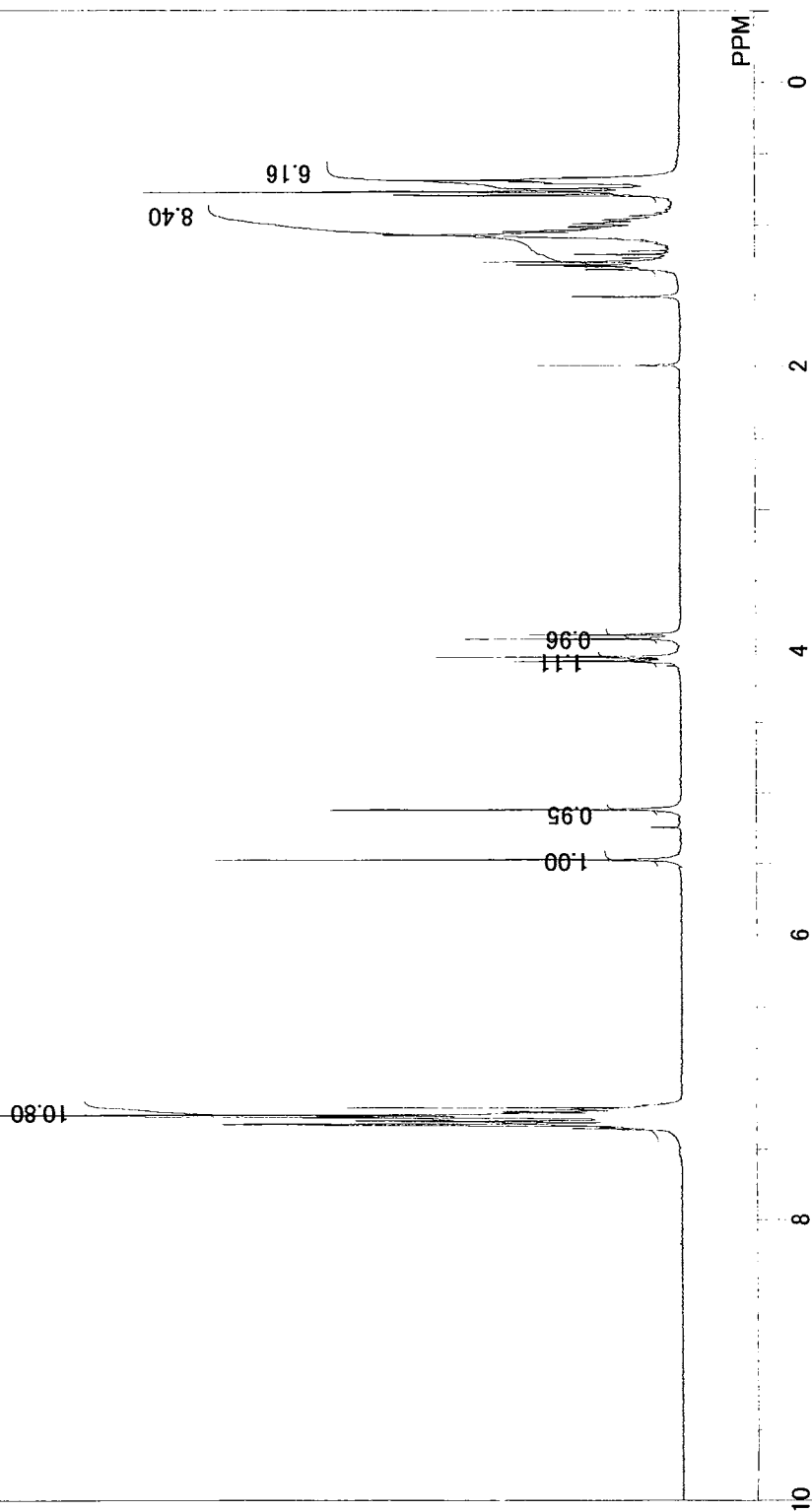
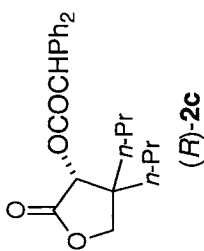
CTEMP 22.5 c

SLVNT CDCL3

EXREF 7.26 ppm

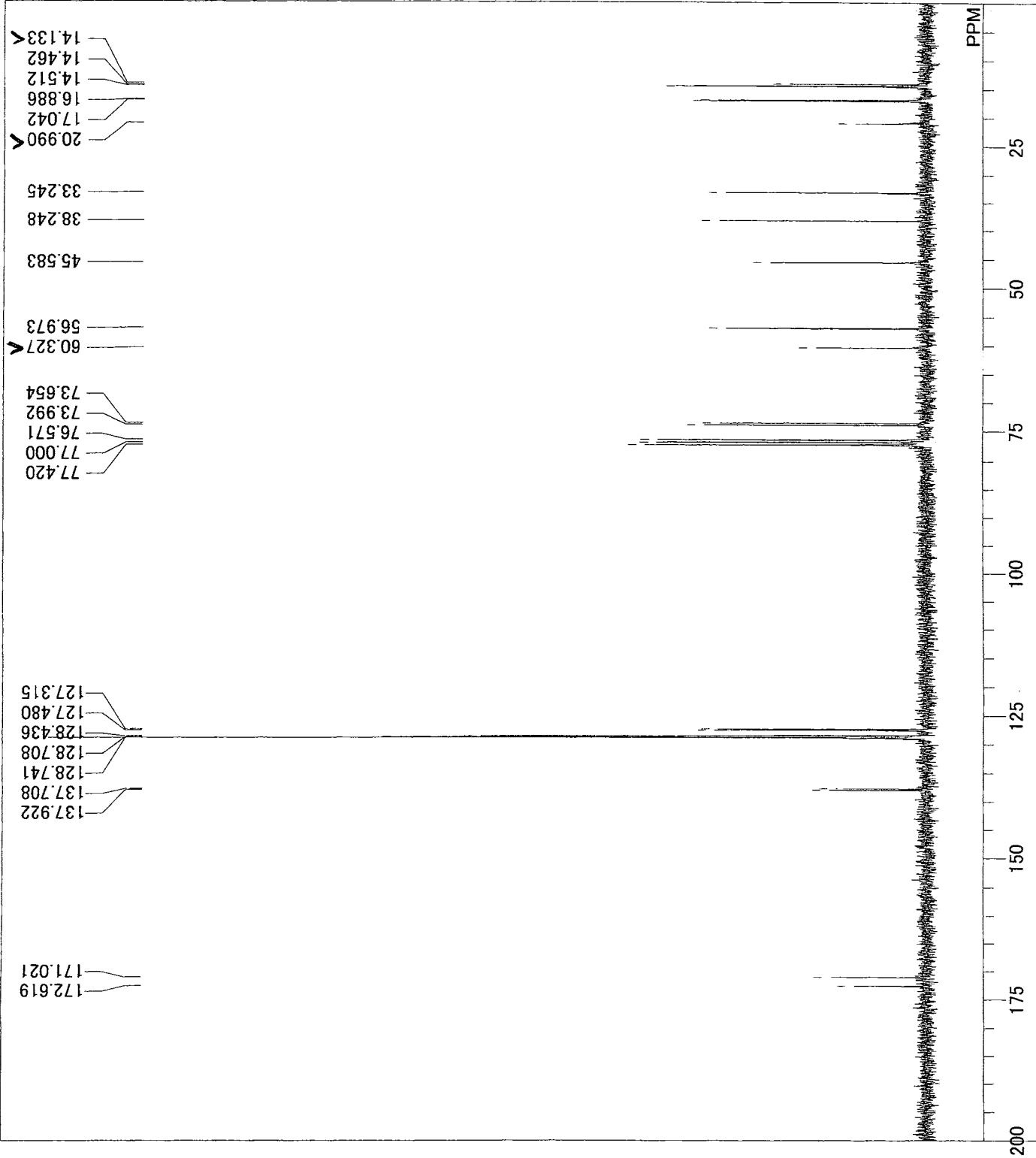
BF 0.12 Hz

RGAIN 16



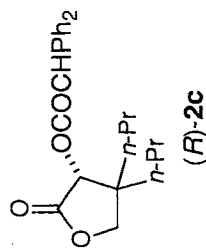
AcOAc

No.3-058.Piv



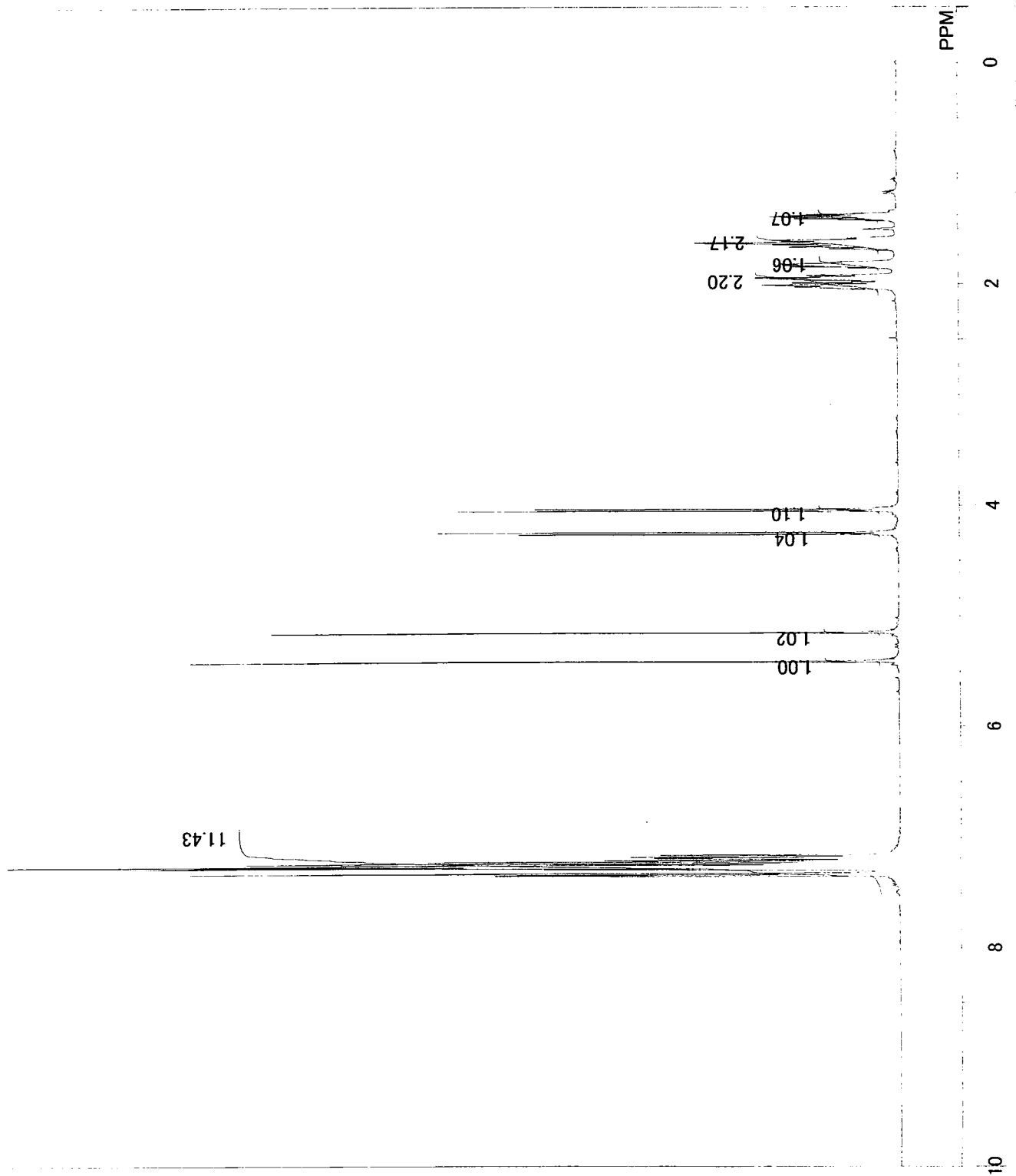
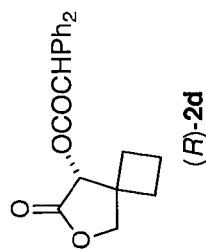
DFILE
COMINT
DATIM
OBNUG
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PWI
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

No.3-058.Piv
Tue Oct 11 10:37:17 2011
13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
160
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
23.4 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
24



DFILE F:\NMR DATA of K.R\No.3-078.als
COMNT No.3-078
DATIM Fri Jan 13 17:22:07 2012
1H
non

EXMOD 500.00 MHz
OBFRQ 0.00 KHz
OBSET 162160.00 Hz
OBFIN 8192
POINT 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.8192 sec
PD 6.1808 sec
PW1 6.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 25.3 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 15



F: #NMR DATA of K.R#No.3-078.BCM.al
No.3-078
Fri Jan 13 17:25:39 2012
13C
bcm

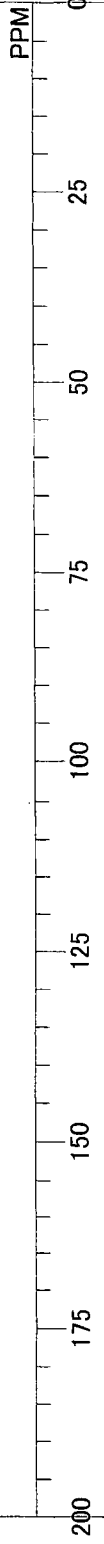
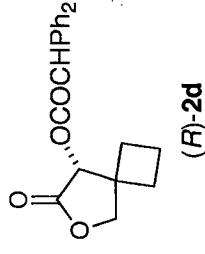
EXMOD 125.65 MHz
OBFRQ 0.00 KHz
OBSET 127958.00 Hz
OBFIN 32768
POINT 33898.30 Hz
FREQU 64
SCANS 0.9667 sec
ACQTM 2.0333 sec
PD 4.90 usec
PW1 1H
IRNUC 26.0 c
CTEMP CDCL3
SLVNT 77.00 ppm
EXREF 1.20 Hz
BF 31
RGAIN

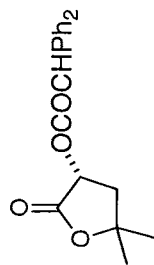
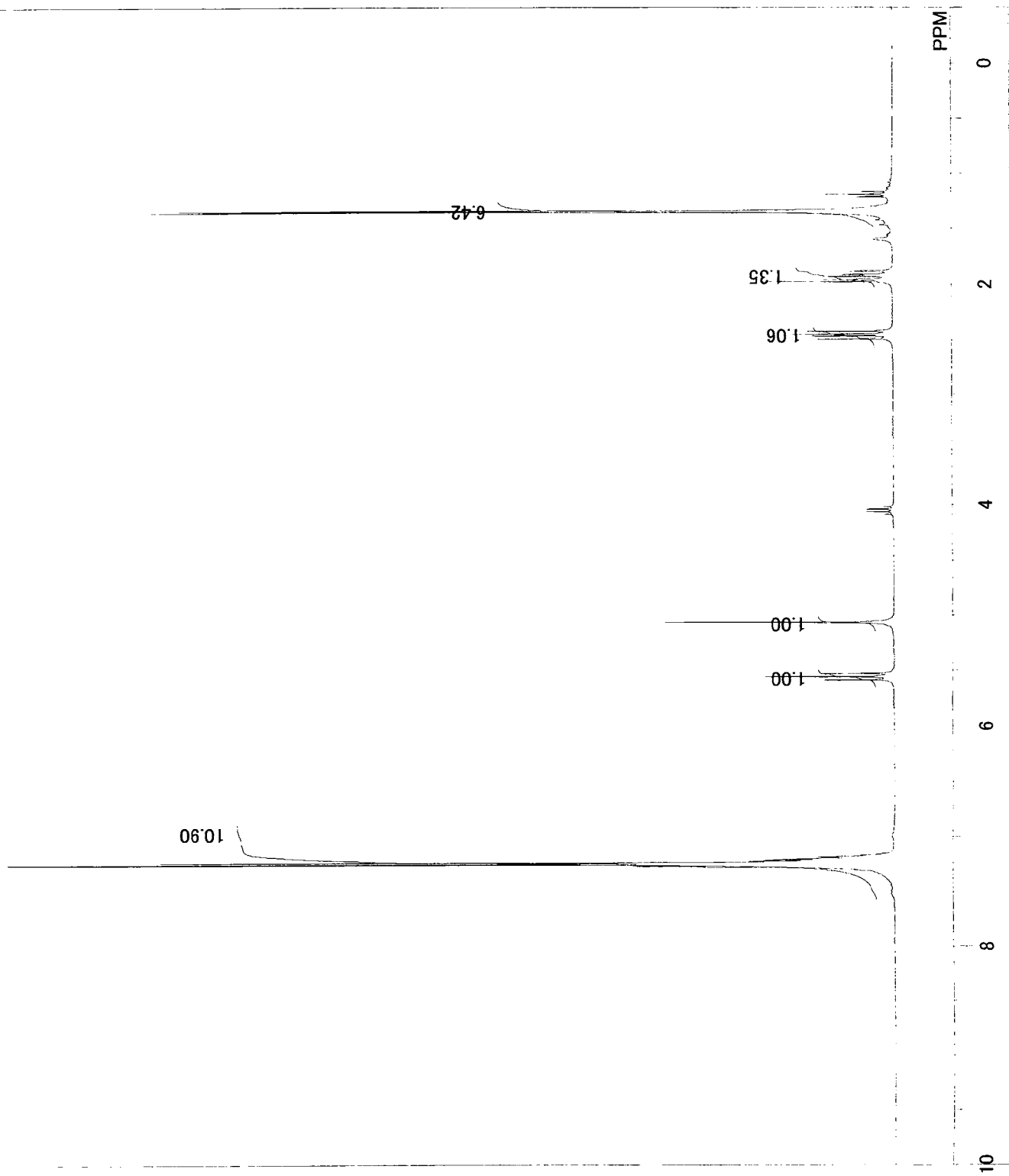
DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

15.308
25.993
26.717
45.512
56.806
72.904
75.223
76.745
77.000
77.255

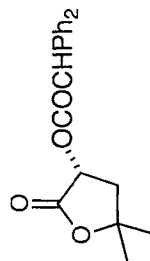
127.390
127.563
128.509
128.640
128.673
128.788
137.902
137.919

171.512
171.545

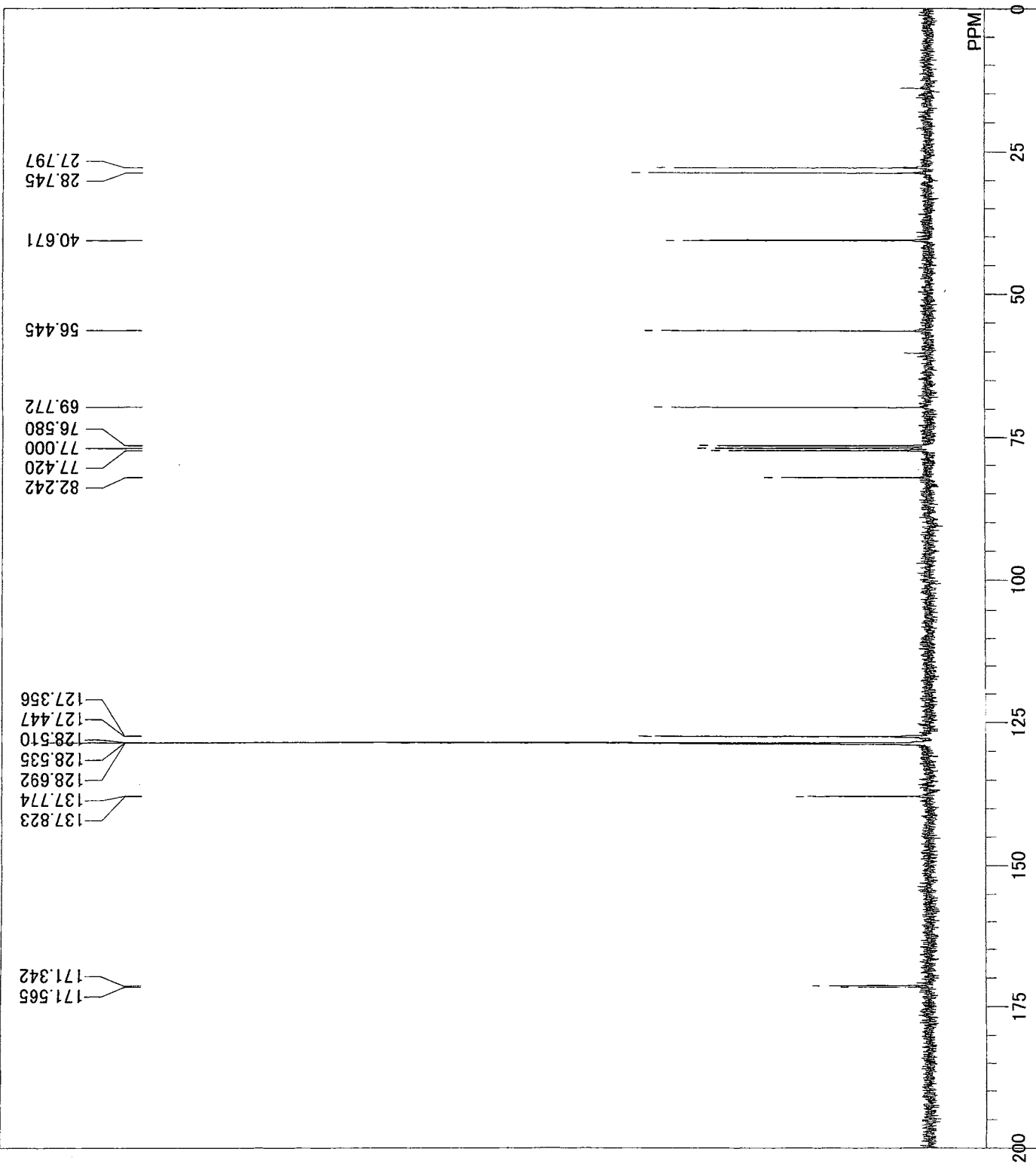




(R)-2e

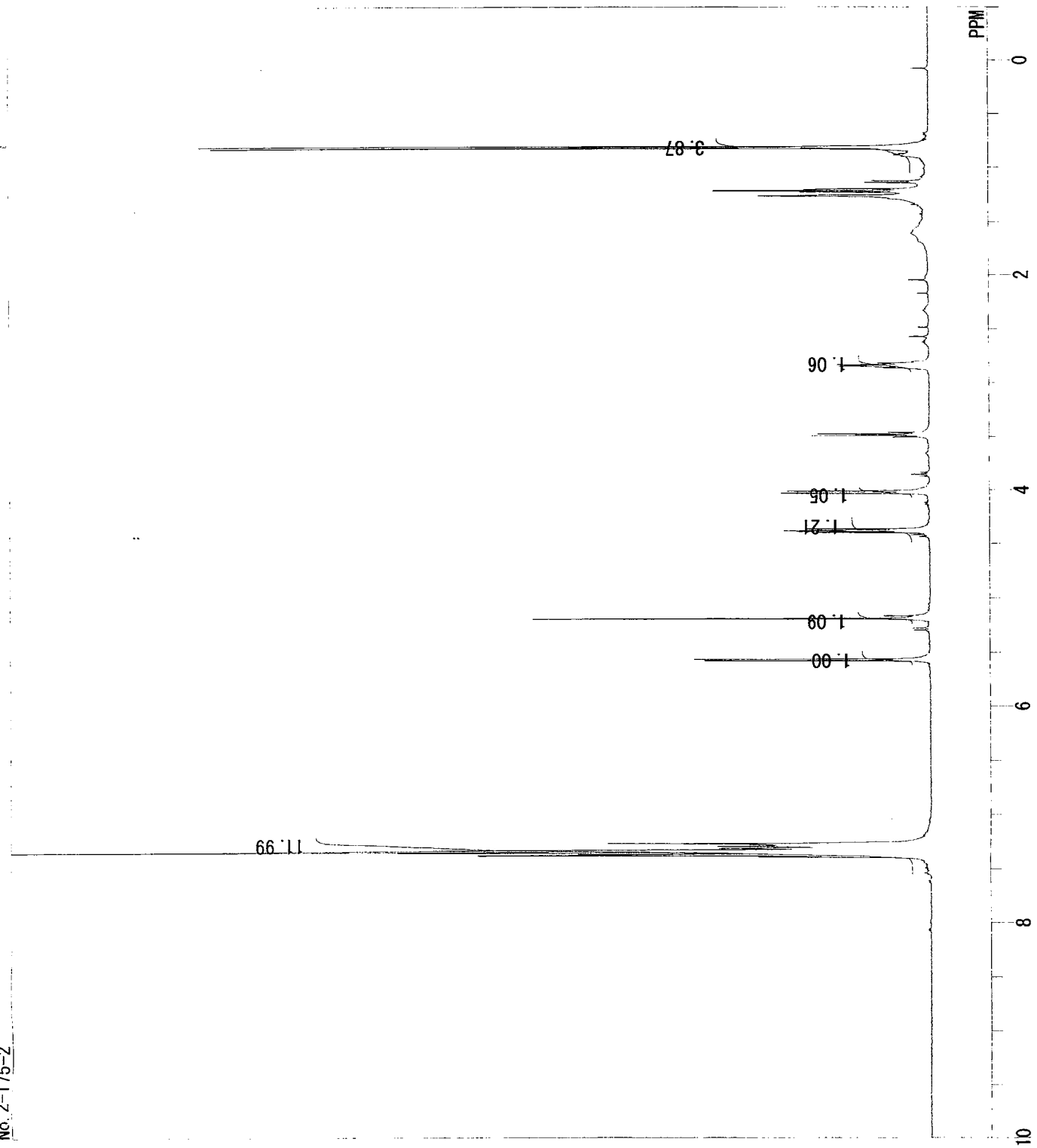
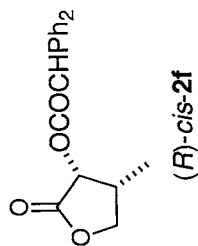


(R)-2e



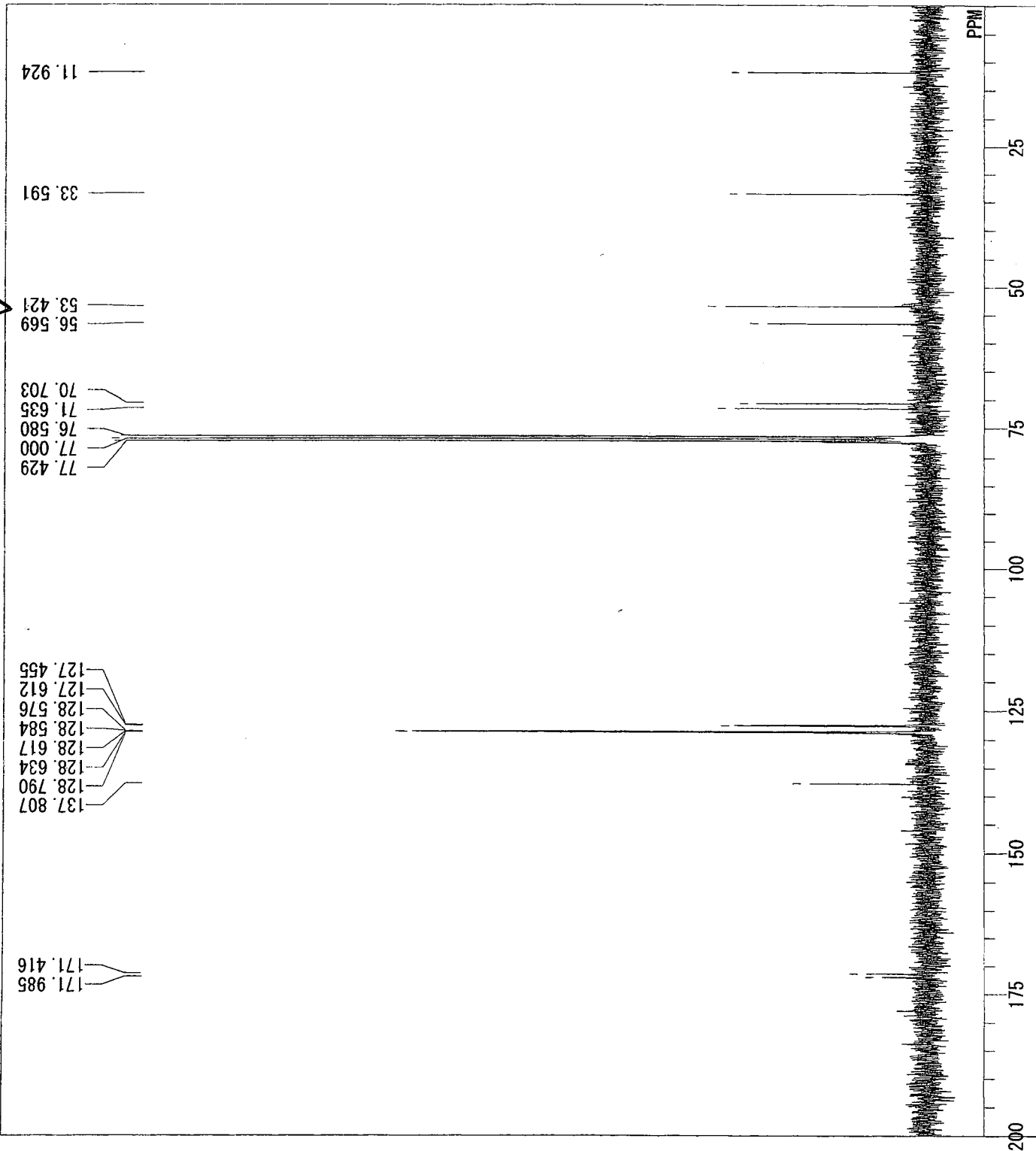
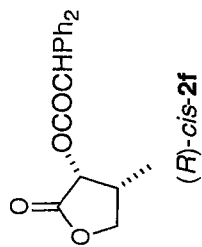
DFILE E:\実験DATA\NMR DATA No. 2\No. 2-175-2.
COMNT No. 2-175-2
DATIM Sat Dec 10 15:22:30 2011

OBNUC 1H
EXMOD non
OBFRQ 500.00 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 162160.00 Hz
POINT 8192
FREQU 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.8192 sec
PD 6.1808 sec
PW1 6.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 23.8 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 20

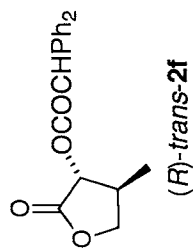
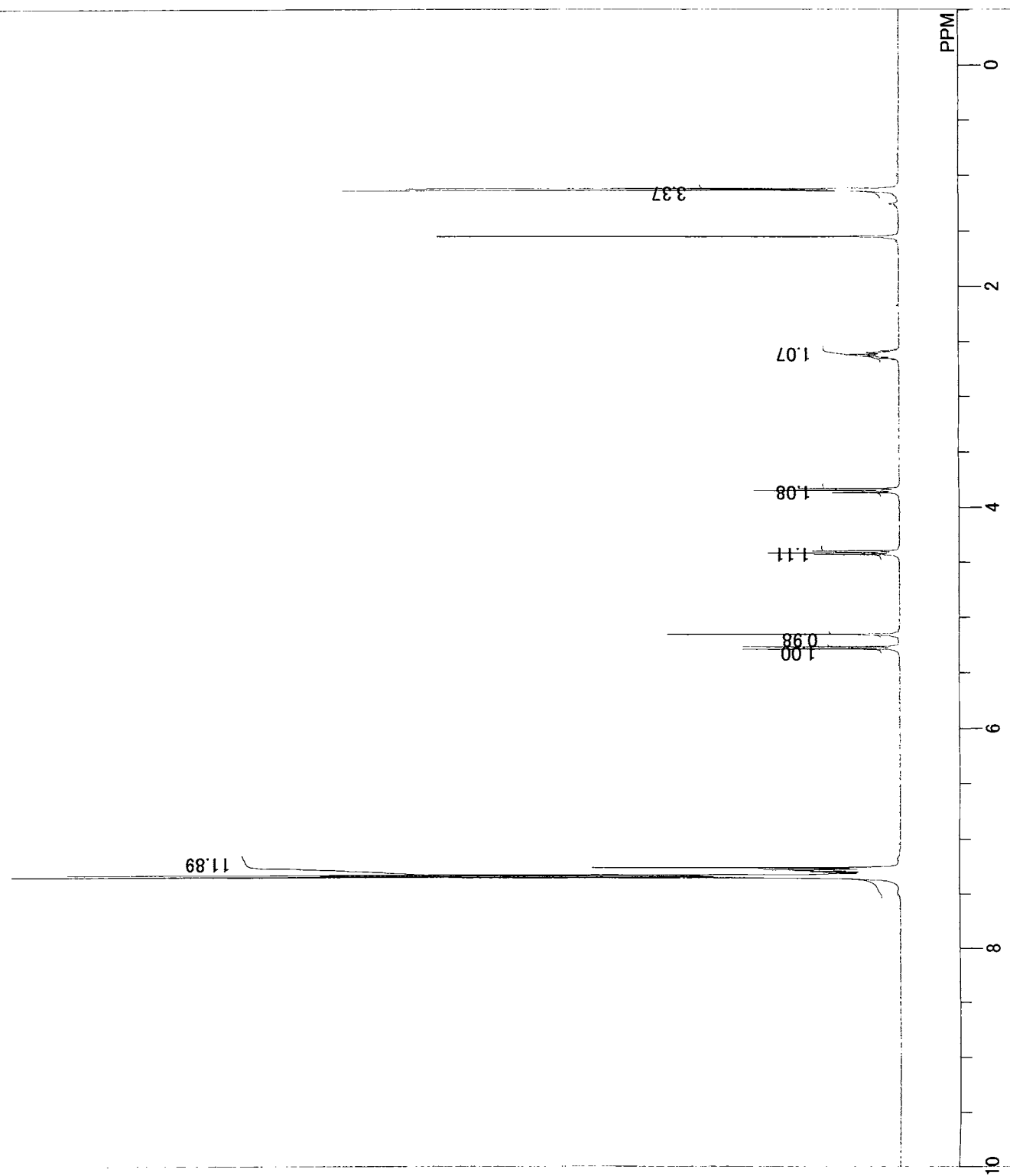


$$\frac{CH_2Cl_2}{A}$$

DFILE	E:\NMR DATA of K. R\monomethyl I (cis)¥e
COMMT	No. 2-175
DATIM	Sat Jul 16 16:11:13 2011
OBNUC	13C
EXMOD	BCM
OBFRQ	75.45 MHz
OBSET	124.00 KHz
OBFIN	1840.00 Hz
POINT	32768
FREQU	20408.10 Hz
SCANS	512
ACQTM	1.6056 sec
PD	1.3940 sec
PW1	4.20 usec
IRNUC	1H
CTEMP	22.5 c
SLVNT	CDCL3
EXREF	77.00 ppm
BF	1.20 Hz
RGAIN	23



DFILE F:\実験DATA\NMR DATA No.2\No.2-1
COMNT No.2-197-4.TM
DATIM Tue Nov 01 14:26:07 2011
OBNUC 1H
EXMOD non
OBFRQ 500.00 MHz
OBSET 0.00 KHz
OBFIN 162160.00 Hz
POINT 8192
FREQU 10000.00 Hz
SCANS 8
ACQTM 0.8192 sec
PD 6.1808 sec
PW1 6.20 usec
IRNUC 1H
CTEMP 24.5 c
SLVNT CDCL3
EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 21

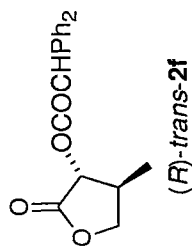
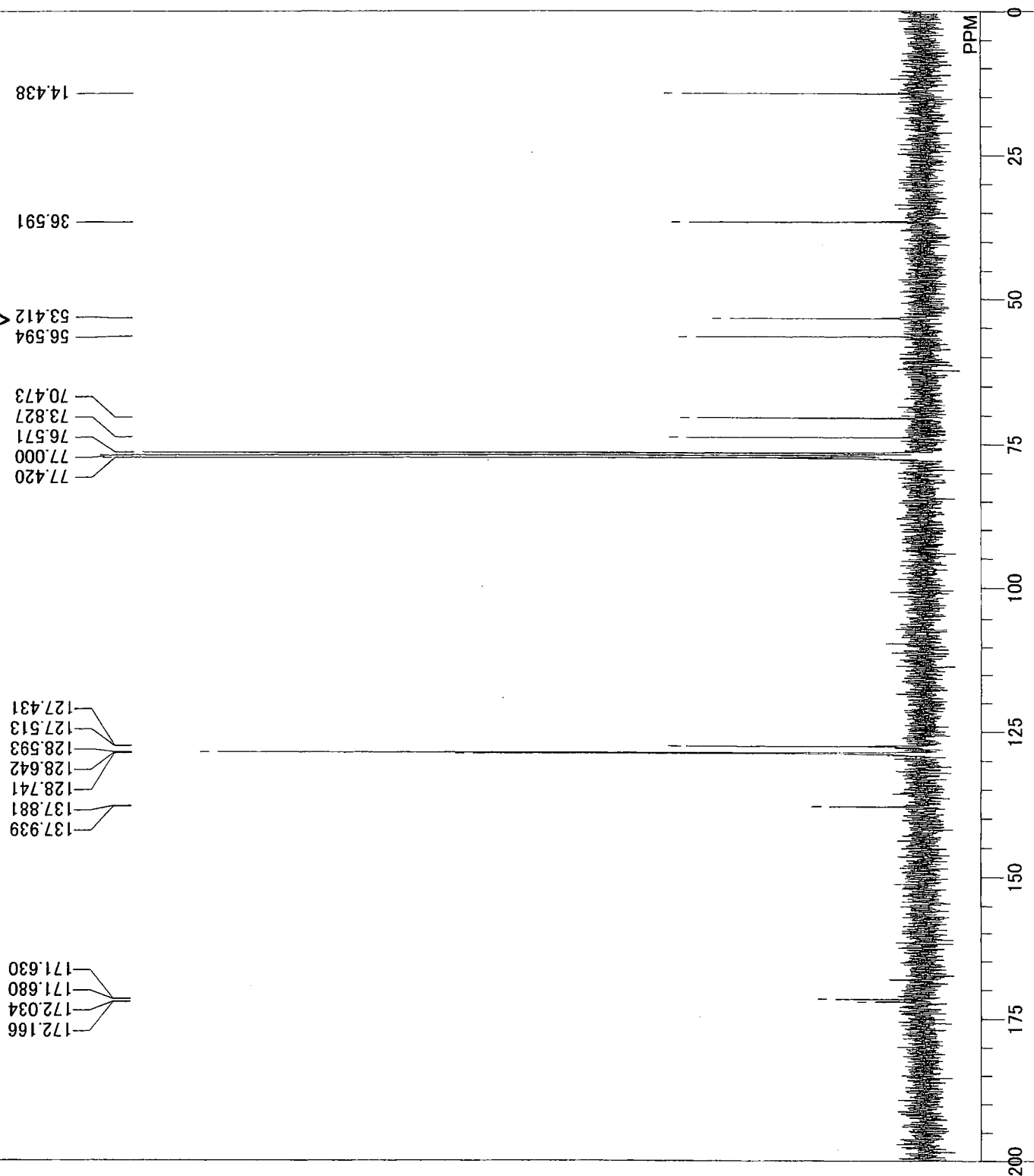


No.2-170

 CHCl_3

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F: NMR DATA of K.R#monomethyl (tra
No.2-170
Sat Jul 16 11:21:47 2011
13C
BCM
75.45 MHz
124.00 KHz
1840.00 Hz
32768
20408.10 Hz
360
1.6056 sec
1.3940 sec
4.20 usec
1H
23.9 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
23

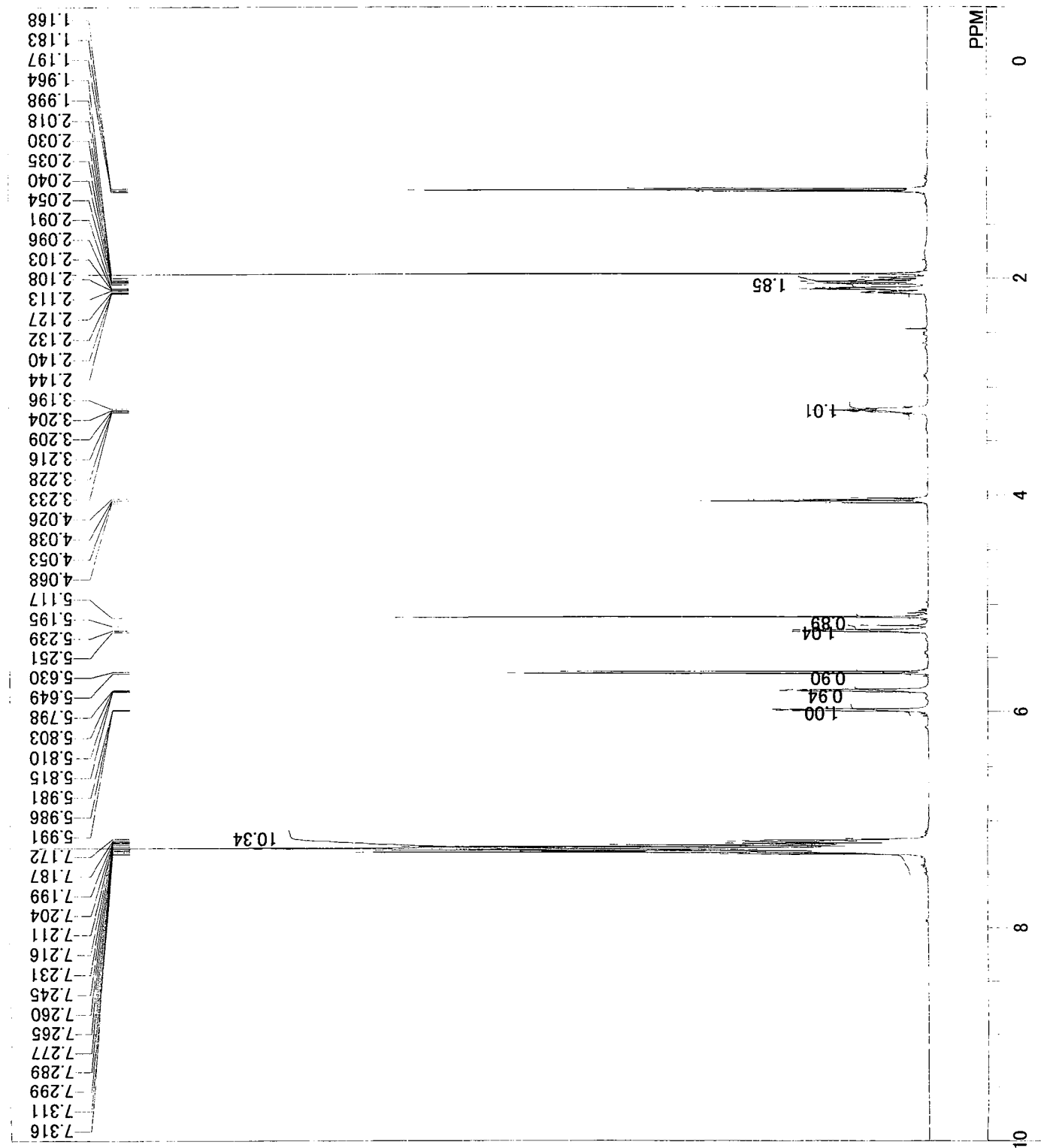
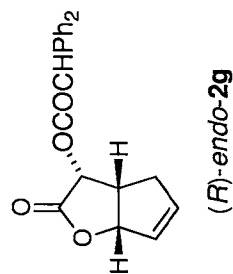


F: NMR DATA of K.R.H. 5,5-endo-Ph₂

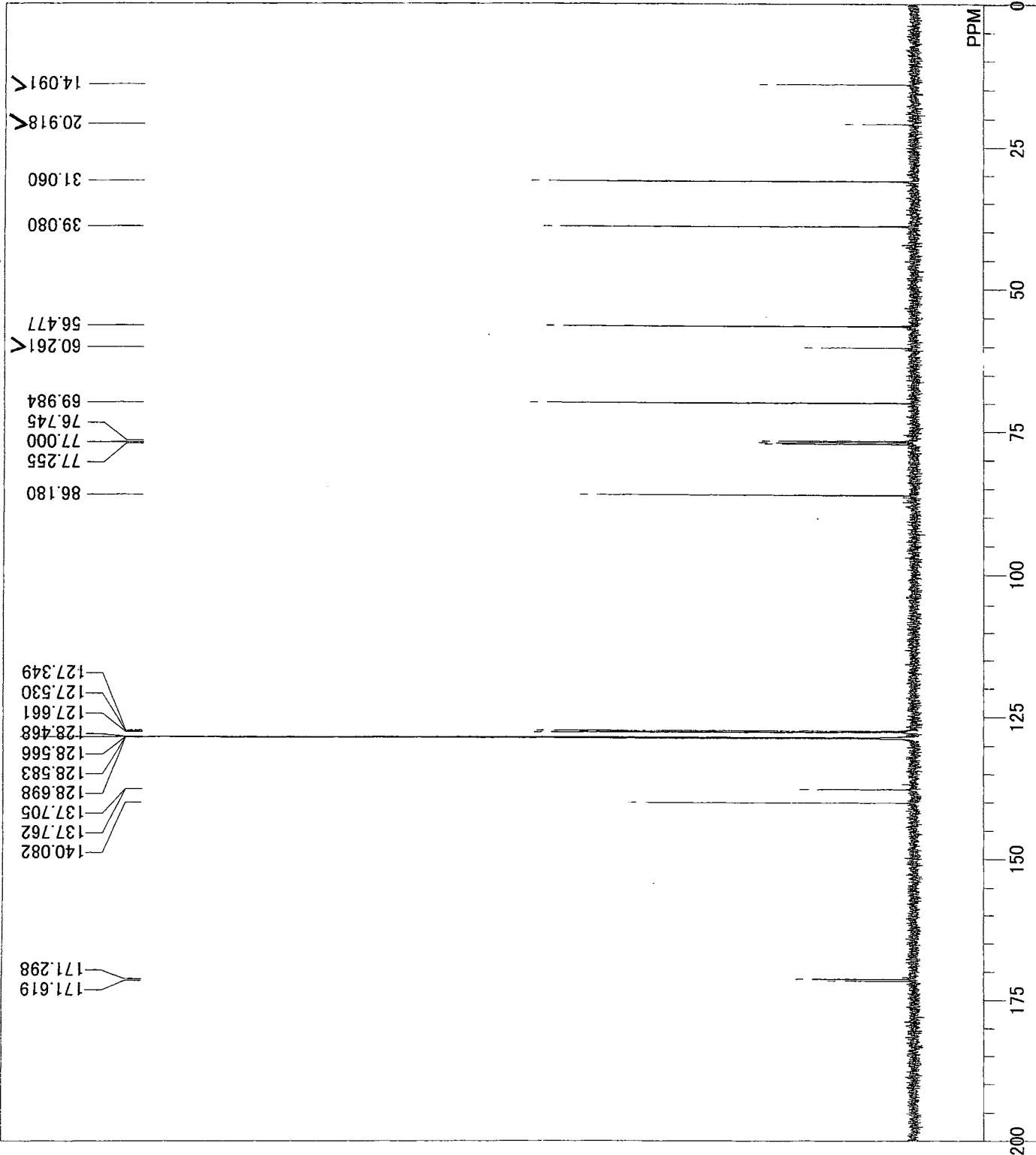
Thu Jul 28 11:32:05 2011

1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
26.7 c
CDCl₃
7.26 ppm
0.12 Hz
13

D: FILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

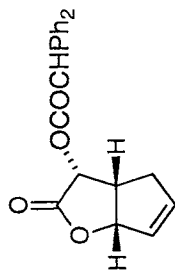


Acct



DFILE
 COMNT
 DATIM
 OBNUC
 EXMOD
 OBFRQ
 OBSET
 OBFIN
 POINT
 FREQU
 SCANS
 ACQTM
 PD
 PW1
 IRNUC
 CTEMP
 SLVNT
 EXREF
 BF
 RGAIN

Thu Jul 28 11:38:52 2011
 13C
 bcm
 125.65 MHz
 0.00 KHz
 127958.00 Hz
 32768
 33898.30 Hz
 128
 0.9667 sec
 2.0333 sec
 4.90 usec
 1H
 28.1 c
 CDCL3
 77.00 ppm
 1.20 Hz
 31



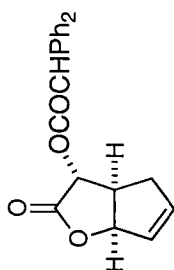
(R)-endo-2g

F:\NMR DATA of K.R\1.5-exo\No.2-1

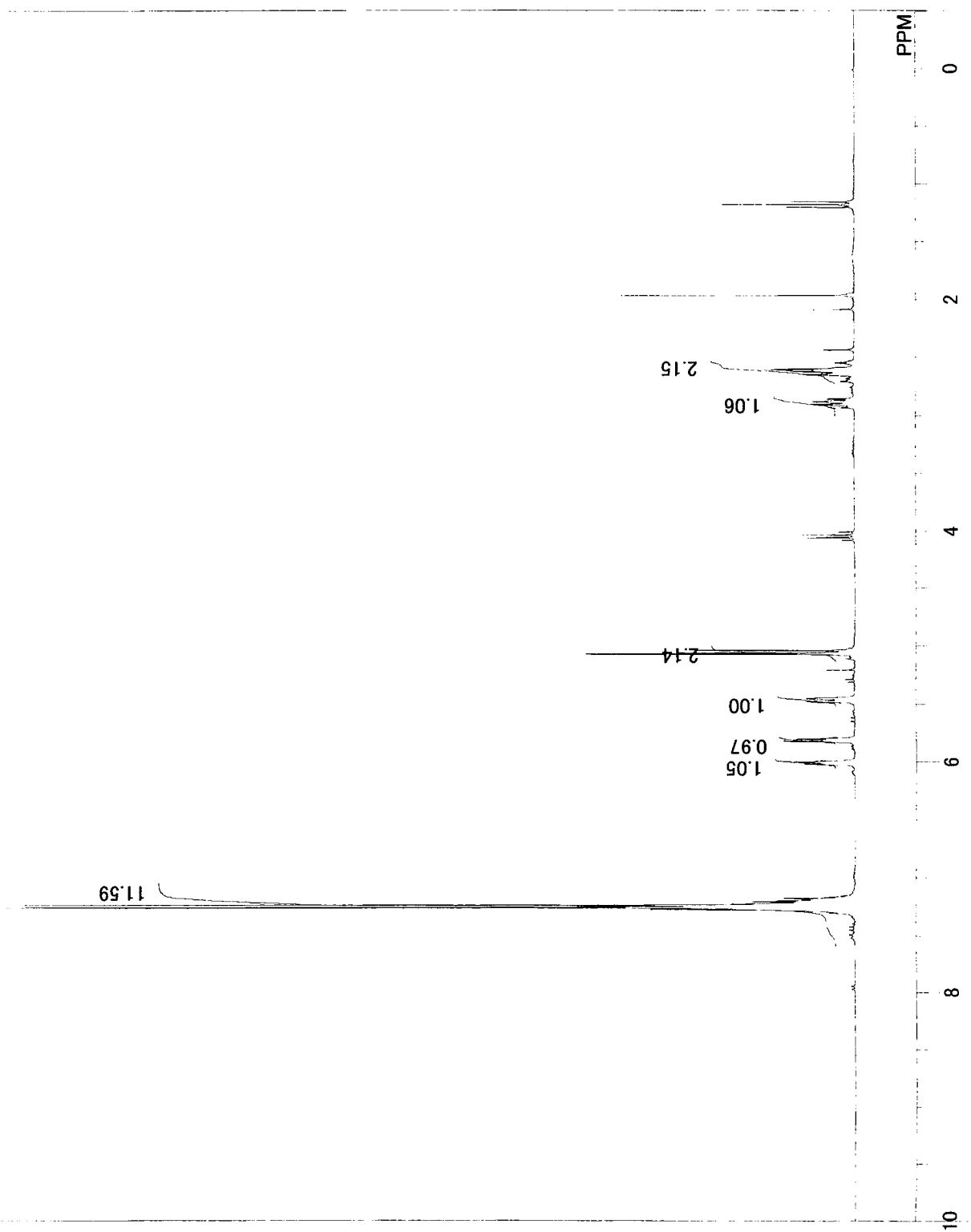
Wed Jul 27 21:47:25 2011

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

1H
NON
300.40 MHz
130.00 KHz
1150.00 Hz
32768
6020.40 Hz
8
5.4428 sec
1.5510 sec
5.60 usec
1H
25.1 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
15



(R)-exo-2g



DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

Wed Jul 27 22:00:36 2011

13C

BCM

75.45 MHz

124.00 KHz

1840.00 Hz

32768

20408.10 Hz

256

1.6056 sec

1.3940 sec

4.20 usec

1H

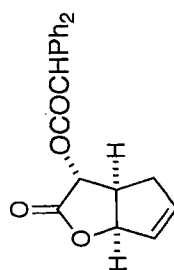
23.7 c

CDCL3

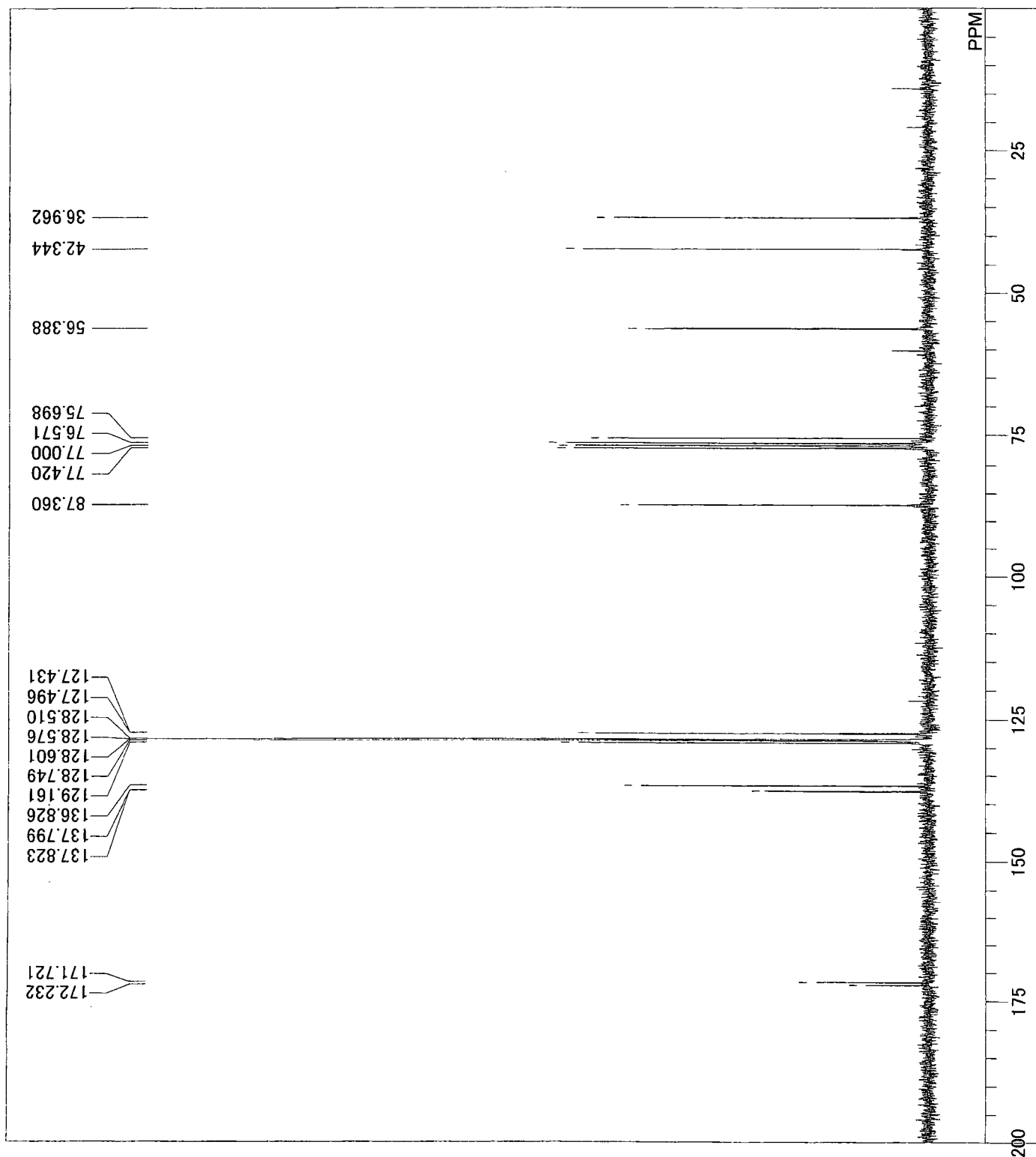
77.00 ppm

1.20 Hz

23

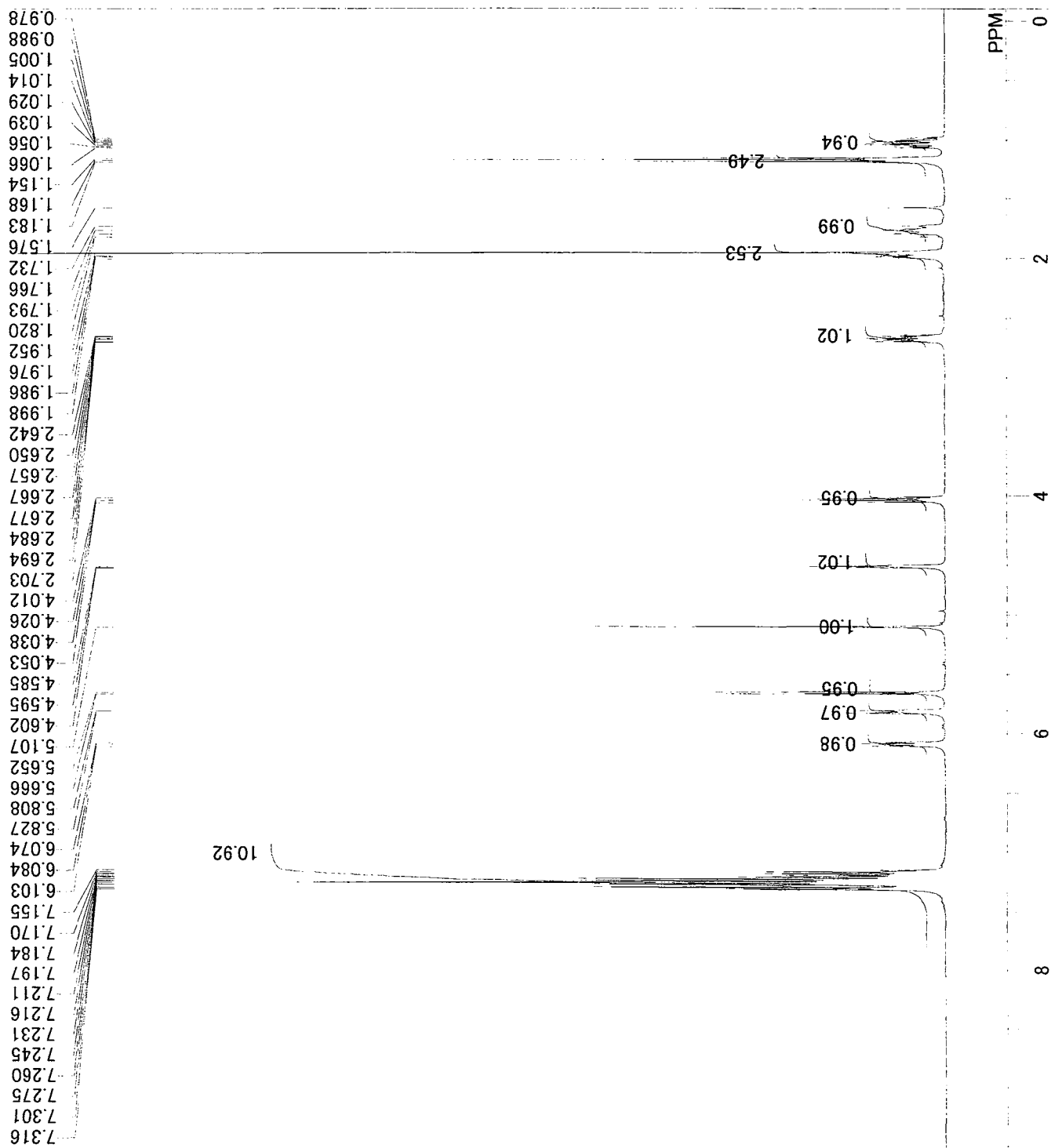
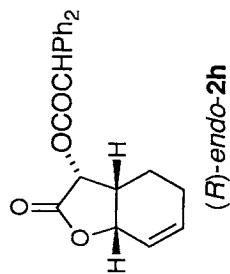


(R)-exo-2g



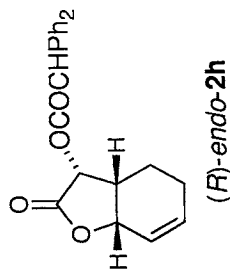
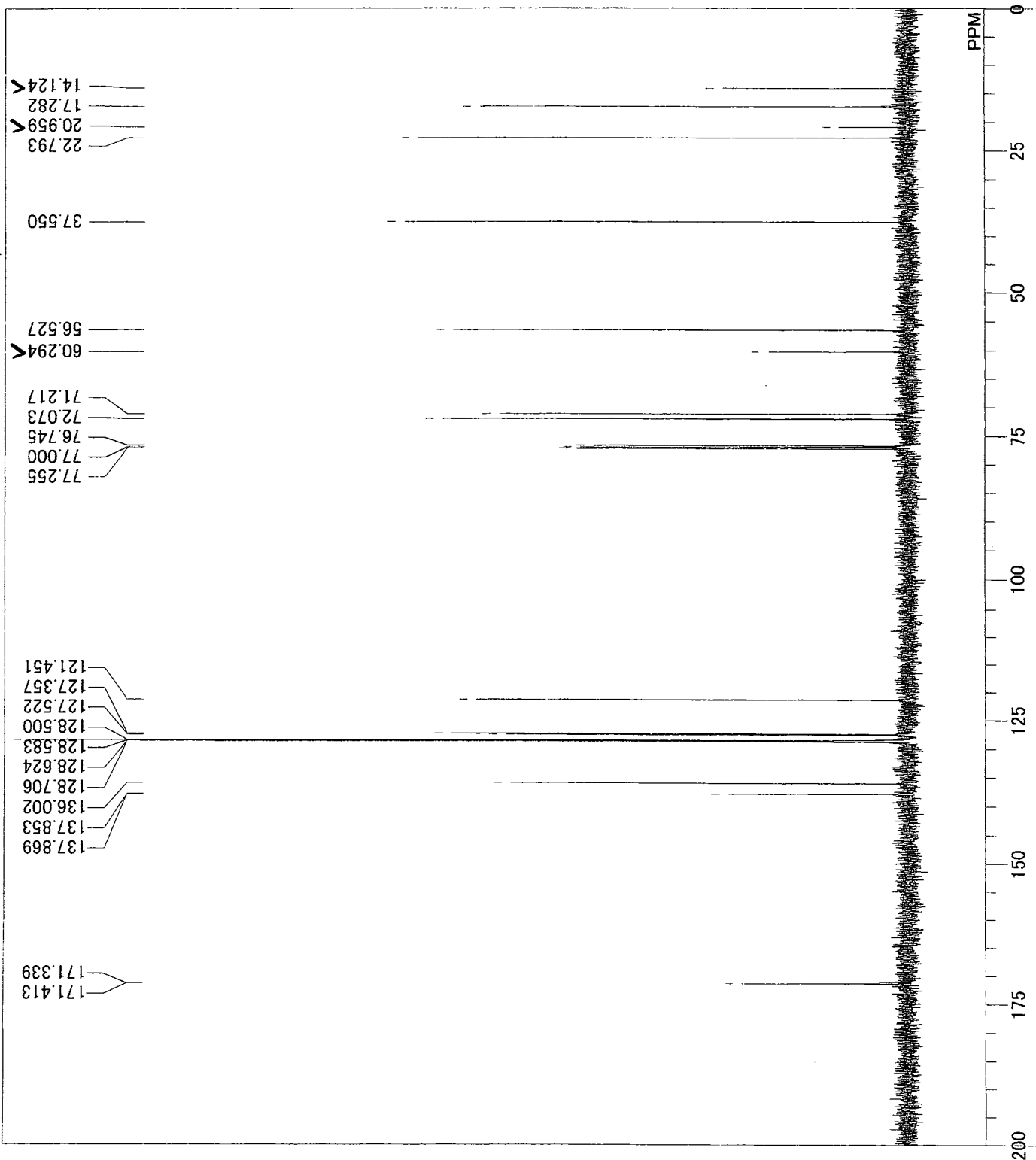
DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F: NMR DATA of K.R. J. 6,6-endo*No.3-
No.3-093
Tue Nov 08 14:19:46 2011
1H
non
500.00 MHz
0.00 KHz
162160.00 Hz
8192
10000.00 Hz
8
0.8192 sec
6.1808 sec
6.20 usec
1H
25.7 c
CDCL3
7.26 ppm
0.12 Hz
15



DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFRQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

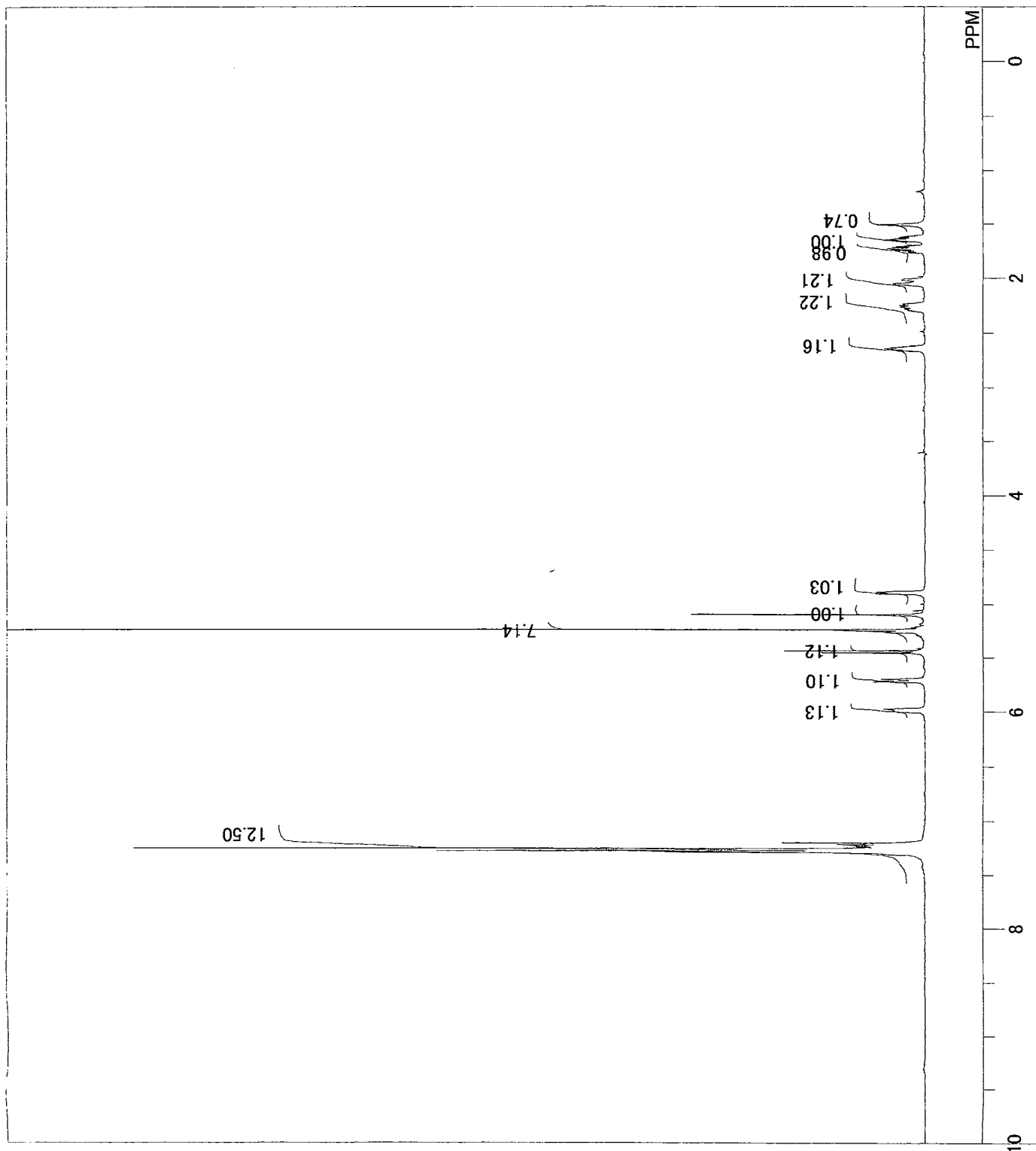
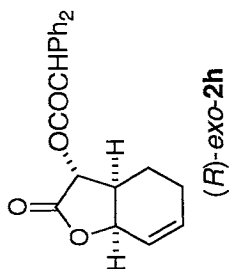
F: #NMR DATA of K.R#J.6,6-endo#No.3-
No.3-093
Tue Nov 08 14:26:27 2011
13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
128
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
26.3 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
30



F:\NMR DATA of K.R\K.6,6-exo\No.3-
 Tue Nov 08 14:31:01 2011

DFILE COMNT
 DATIM
 OBNUC
 EXMOD
 OBFRQ
 OBSET
 OBFIN
 POINT
 FREQU
 SCANS
 ACQTM
 PD
 PW1
 IRNUC
 CTEMP
 SLVNT
 EXREF
 BF
 RGAIN

1H
 non
 500.00 MHz
 0.00 KHz
 162160.00 Hz
 8192
 10000.00 Hz
 8
 0.8192 sec
 6.1808 sec
 6.20 usec
 1H
 25.3 c
 CDCL3
 7.26 ppm
 0.12 Hz
 20



F:NMR DATA of K.R.K. 6,6-exo-Ph₂Cl

Tue Nov 08 14:37:42 2011

13C

bcm

125.65 MHz

0.00 KHz

127958.00 Hz

32768

33898.30 Hz

128

0.9667 sec

2.0333 sec

4.90 usec

1H

26.7 c

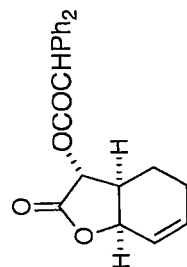
CDCL₃

77.00 ppm

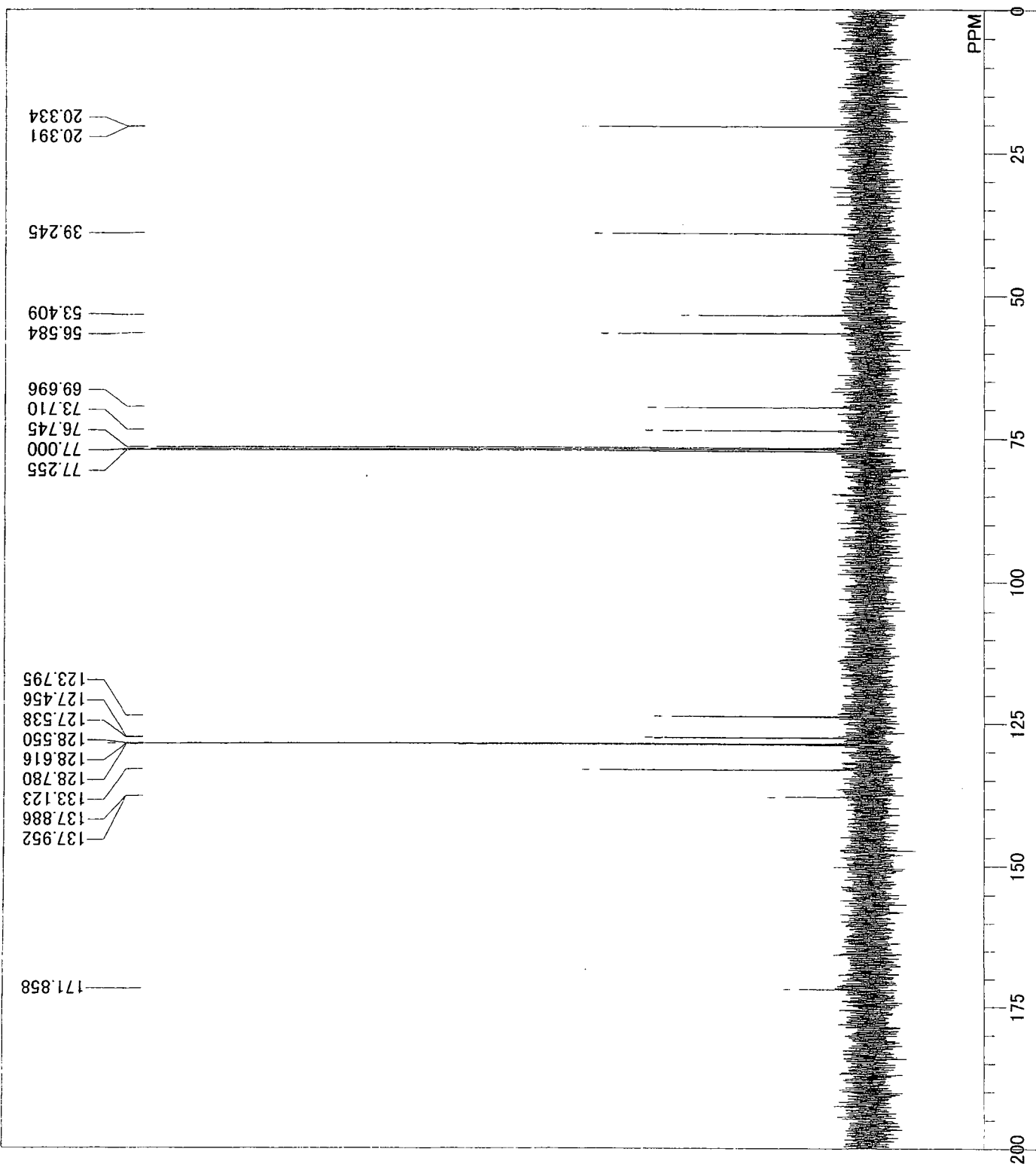
1.20 Hz

30

DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN



(R)-exo-2h



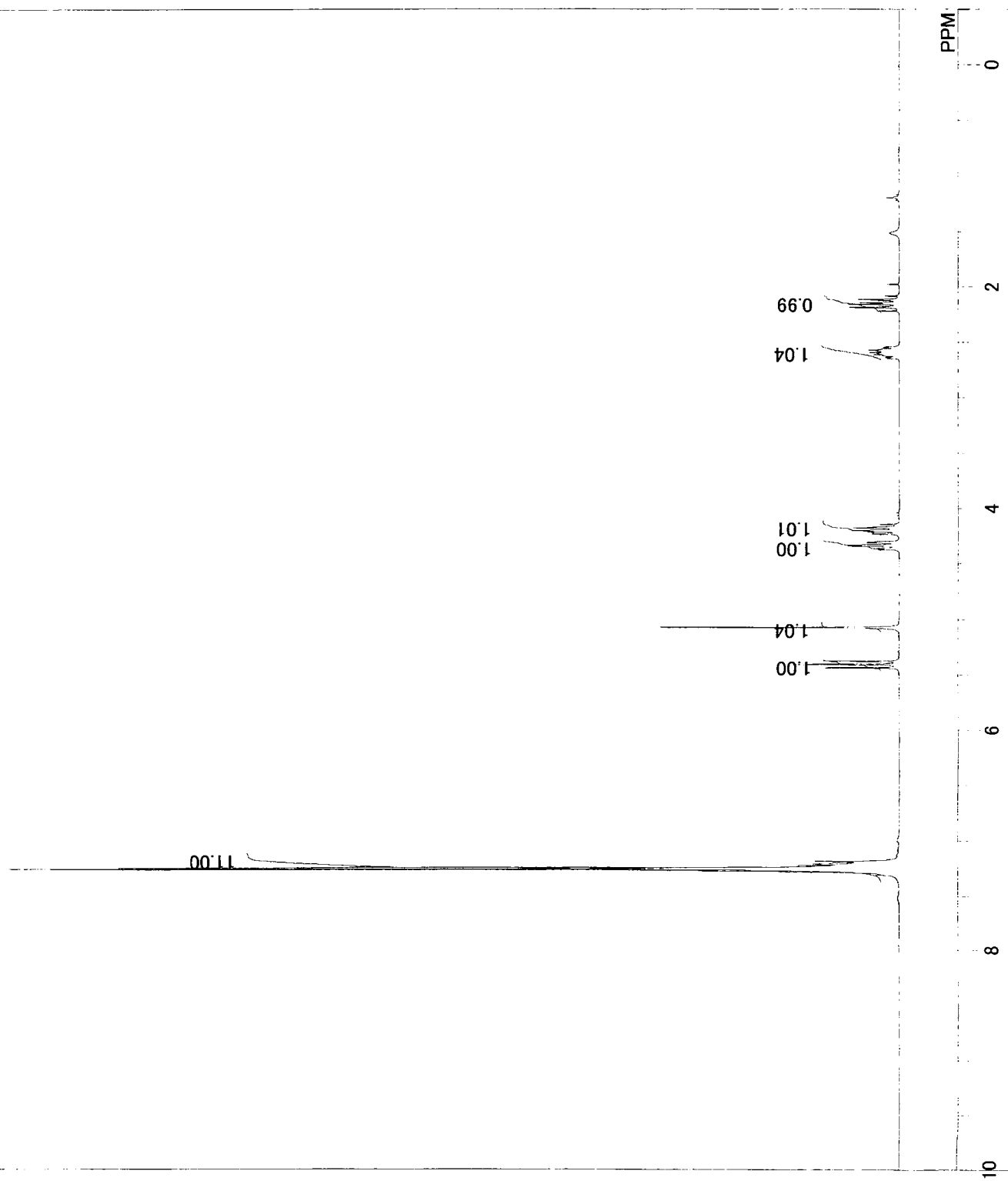
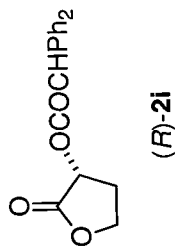
FILE F:\NMR DATA of K.R\A.2-Hydroxybutr
COMNT No.1-089-2.TM
DATIM Tue Oct 20 15:48:05 2009
OBNUC 1H
EXMOD NON

OBFRQ 300.40 MHz
OBSET 130.00 KHz
OBFIN 1150.00 Hz
POINT 32768
FREQU 6020.40 Hz

SCANS 8
ACQTM 5.4428 sec
PD 1.5510 sec
PW1 5.40 usec

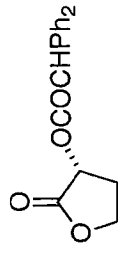
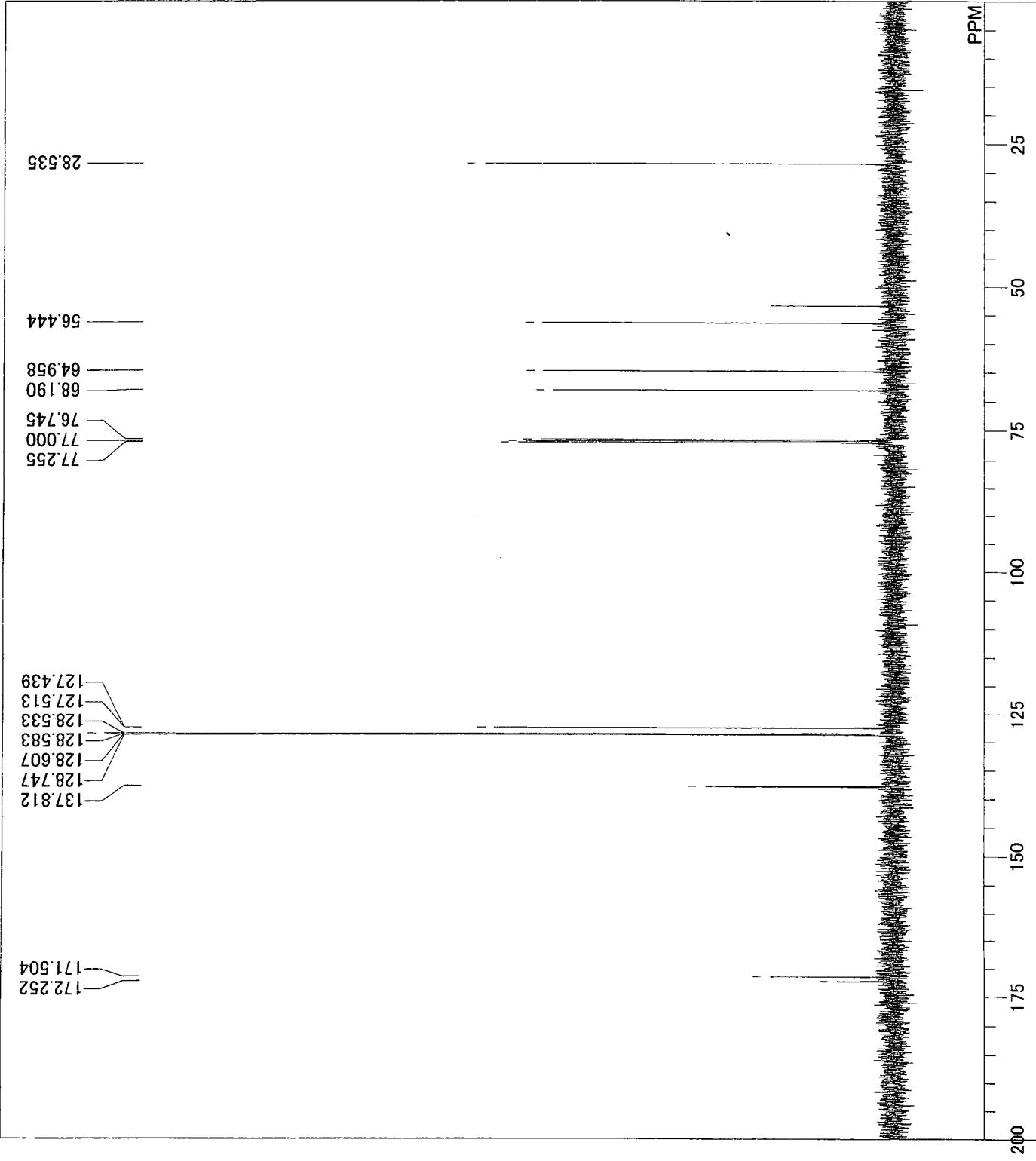
IRNUC 1H
CTEMP 21.8 c
SLVNT CDCL3

EXREF 7.26 ppm
BF 0.12 Hz
RGAIN 15



DFILE
COMNT
DATIM
OBNUC
EXMOD
OBFREQ
OBSET
OBFIN
POINT
FREQU
SCANS
ACQTM
PD
PW1
IRNUC
CTEMP
SLVNT
EXREF
BF
RGAIN

F:NMR DATA of K.R#A.2-Hydroxybutr
No.1-143
Sat Dec 24 16:20:44 2011
13C
bcm
125.65 MHz
0.00 KHz
127958.00 Hz
32768
33898.30 Hz
128
0.9667 sec
2.0333 sec
4.90 usec
1H
25.1 c
CDCL3
77.00 ppm
1.20 Hz
31



(R)-2i