

構造式	実験者	データ確認者	最終更新日 2021/01/27	化合物番号
	実験番号 (関連するもの全て記載)			
化合物名 (新規・既知)	¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃ , 0.03% TMS) δ			
	CAS 番号 (<i>R</i> , <i>S</i> , <i>rac</i>)			
CAS 番号 (<i>R</i> , <i>S</i> , <i>rac</i>)	総プロトン数 :		FID ファイル名 :	
文献 (合成法・物性データ←文献後に記入)	注意 : s = singlet, d = doublet, t = triplet, q = quartet, quin = quintet, sext = sextet, sep = septet, b = broad, m = multiplet			
分子式	ケミカルシフトは降べき順に記載し, 範囲を示す場合は en dash (-) を使用する. カップリングしているもの同士は同じ <i>J</i> 値 (平均値) を記載すること. 記入例 : ¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ. 8.05 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 7.50–7.40 (m, 4H), 7.38–7.28 (m, 6H), 7.22 (t, <i>J</i> = 7.2 Hz, 1H), 6.98 (d, <i>J</i> = 8.4 Hz, 1H), 2.56 (dq, <i>J</i> = 13.9, 7.4 Hz, 1H), 2.42 (dq, <i>J</i> = 13.9, 7.4 Hz, 1H), 0.86 (t, <i>J</i> = 7.4 Hz, 3H)			
分子量	¹³ C NMR (100 MHz, CDCl ₃ , 0.03% TMS) δ			
色・状態	mp 83.6–84.2			
mp 83.6–84.2	総カーボン数 :		FID ファイル名 :	
HRMS (FAB ⁺) [M+Na] ⁺ calculated for C ₂₀ H ₂₄ O ₃ Na 335.1617, found 335.1625;	注意 : ケミカルシフトは降べき順に記載し, 小数点以下第二位を四捨五入する. ケミカルシフトが同じものが二つある場合は 126.7 (2) と記載する. 含フッ素・リン化合物は <i>J</i> 値も記載する. 記入例 : ¹³ C NMR (150 MHz, CDCl ₃) δ 171.8, 167.5, 150.4, 150.2, 149.3, 140.0, 130.0, 129.7, 129.6, 126.7 (2), 126.5, 125.8, 123.3, 121.6, 121.3, 115.9, 60.9, 28.4, 8.3			
元素分析	IR (neat or KBr) 2972, 1732, 1470, 1263, 1067 cm ⁻¹			
calcd: C, H, N, found: C, H, N,	HPLC・GC 分離条件 (チャート添付必要)		比旋光度 (既知化合物の場合, その文献値も併記)	
単結晶 X 線構造解析 : 有・無	DAICEL CHIRALPAK® IA-3 (hexane/ <i>i</i> -PrOH = 95/5, v/v, flow rate = 1.0 mL/min, 30 °C, UV = 254 nm), T _R = 10.5 min (minor)		[α] _D ²⁰ +34.0 (c 0.16, CHCl ₃ , 92:8 er).	
萬代の確認	and T _R = 12.7 min (major), 97:3 er		文献値 : [α] _D ²⁰ +34.0 (c 0.16, CHCl ₃ , 92:8 er).	

クリアファイルに入れるものチェックリスト

↓該当するものに○	化合物 データカード	¹ H NMR チャート	¹³ C NMR チャート	IR チャート	文献コピー	ハイマス (元分) の 測定データ (紙)	¹ H, ¹³ C NMR, IR 生データ保存	光学活性化合物の場合	
								HPLC	比旋光度
従来法とは全く異なる方法で合成した既知化合物 (不斉触媒反応による合成も含む)									
新規化合物									

太枠は必須項目。上記必須項目の電子データは化合物ごとにフォルダを作り、それらを共通 HDD と CD-ROM (萬代に提出) に保存すること。

新規化合物の場合 (化合物データが報告されていない既知化合物を含む)

- ¹H NMR, ¹³C NMR, IR, 元素分析 or HRMS, 固体の場合は mp 例 : 54.6–56.0 °C, 蒸留精製の場合は bp と mmHg 例 : 76.4–79.0 °C (18.6 mmHg)
- ¹H NMR, ¹³C NMR, IR のスペクトルチャート
- 測定オペレーターからもらった元素分析 or HRMS (exact mass の計算値および測定値)の測定データの印刷物
- 旋光度 (光学活性化合物の場合)
- ラセミ体及び er 決定に用いた HPLC 又は GC チャート (光学活性化合物の場合)
- X 線測定時は、ORTEP 図、rtf ファイル、cif ファイル

従来法と同じ手順で合成した既知化合物の場合 (触媒, 反応基質など)

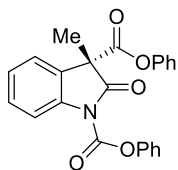
- その合成法と化合物データの記された文献.

従来法とは全く異なる方法で合成した既知化合物の場合 (従来法の改良も含む)

- 新規化合物の場合に準ずる。ただ mp とハイマスが文献で報告されている場合は、そのデータは必要なし。
- ¹H NMR, ¹³C NMR, IR のスペクトルチャート

実験項記入例

(S)-Diphenyl 3-methyl-2-oxindoline-1,3-dicarboxylate (3a)



According to the general procedure, substrate **2a** (38.7 mg, 0.100 mmol) with catalyst **1a** (3.60 mg, 9.88 μ mol) in THF (0.250 mL) at 0 °C gave a pale yellow solid (38.3 mg, 98.9 μ mol, >98% yield): enantiomeric ratio was determined by HPLC with DAICEL CHIRALPAK[®] AD-H (hexane/*i*-PrOH = 97.5/2.5, v/v, flow rate = 1.00 mL/min, 30 °C, UV = 254 nm), T_R = 25.5 min (minor) and T_R = 38.4 min (major), 92:8 er; ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.05 (d, *J* = 8.4, 1H), 7.49–7.40 (m, 4H), 7.37–7.28 (m, 6H), 7.24–7.16 (m, 1H), 7.00–6.95 (m, 2H), 1.90 (s, 3H); ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃) δ 151.3, 151.0, 150.0, 148.7, 149.3, 137.2, 132.3, 129.8, 129.7, 128.2, 126.7, 126.6, 125.3, 123.8, 121.7, 120.8, 119.2, 115.6, 106.5, 7.1; IR (KBr) 2360, 1810, 1784, 1750, 1480, 1349, 1190, 1161, 985 cm⁻¹; $[\alpha]_D^{20}$ +34.0 (*c* 0.16, CHCl₃, 92:8 er).

Racemic sample of 3a				(S)- 3a from 1a				(S)- 3a from 1c			
Peak #	Ret. Time	Area	Area %	Peak #	Ret. Time	Area	Area %	Peak #	Ret. Time	Area	Area %
1	25.783	848083	49.208	1	25.487	22100	8.025	1	25.288	4318673	5.243
2	39.633	875374	50.792	2	38.422	130713	91.975	2	36.155	78058936	94.757

注意事項（触媒組共通ルールから一部抜粋）

- 実験項の試薬などの数字は有効数字3桁で揃える。ただし、反応に対して当量関係のないものについては揃えなくて良い。
例: クエンチで使用した水 (10 mL), 分液時の洗浄に用いた水 (5 mL × 2) 収率 (90% yield).
- 白色固体(White solid)とは言わない。この場合は無色固体(colorless solid).
- “範囲”と“マイナス”を示すときは en dash (-) を使う
例: 7.00–6.95 (m, 2H) mp 133.1–133.7 °C など
- HPLC のラセミ体と触媒反応で得られた生成物のチャートの時間の範囲を合わせ、チャートの線は3ポイントにする。
- 比旋光度の濃度(*c*)は出来るだけ1に近づける（常識です）。