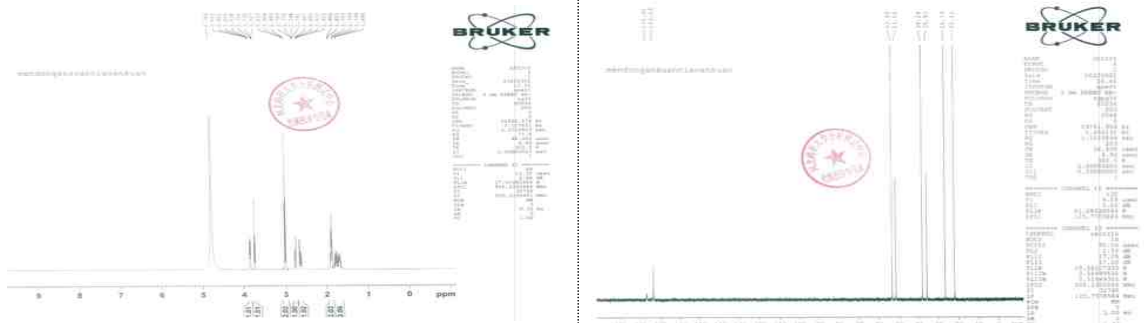
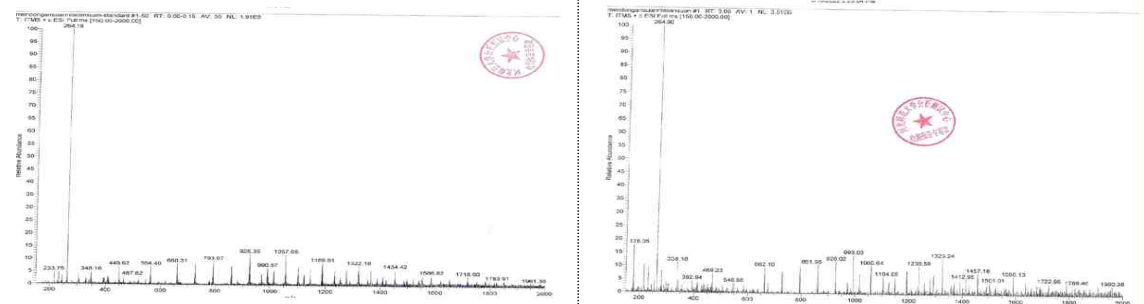


3.2.S.3.1 구조결정 및 기타 특성 (Elucidation of Structure and other Characteristics)

■ 기기분석에 관한 자료 [■ Mass, ■ NMR, ■ IR, □ UV, ■ 원소분석]

IR	실시배치	B.No: C552202010																																					
	표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																					
	<div><div></div><div></div></div> <div><div>- 기기: FT-MIR-RAM VERTEX 70 (BRUCKNER)5.2) 시험법: KBr</div><div>- 검체와 표준품의 IR 흡수 스펙트럼 일치, IR 흡수 밴드가 문헌과 일치</div></div>																																						
1H - NMR	실시배치	B.No: C552202010																																					
	표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																					
	<div><div></div><div></div></div> <table><thead><tr><th colspan="2">Chemical shift(δ)</th><th rowspan="2">Proton number</th><th rowspan="2">Multiplicity</th><th rowspan="2">Hydrogen identification</th></tr><tr><th>Sample (C552202010)</th><th>Standard product (07125-SLBW4848)</th></tr></thead><tbody><tr><td>1.716-1.743</td><td>1.694-1.709</td><td>2</td><td>m</td><td>H-2</td></tr><tr><td>1.787-1.805</td><td>1.769-1.783</td><td>2</td><td>m</td><td>H-3</td></tr><tr><td>2.622-2.809</td><td>2.615-2.783</td><td>2</td><td>m</td><td>H-8</td></tr><tr><td>3.011-3.041</td><td>2.989-3.019</td><td>2</td><td>t</td><td>H-1</td></tr><tr><td>3.745-3.769</td><td>3.727-3.751</td><td>1</td><td>t</td><td>H-4</td></tr><tr><td>3.858-3.883</td><td>3.838-3.862</td><td>1</td><td>dd</td><td>H-7</td></tr></tbody></table> <div><div>- 기기: Germany Bruker AV II-500 BKUKER, 용매: D2O</div><div>- 검체와 표준품의 프로톤 패턴이 일치. 전체 19개의 수소 중 3개의 하이드록실(-OH)과 3개의 아민(-NH₂)에서 발생하는 9개의 수소가 D₂ O와 빠르게 교환되어 표시되지 않음.</div></div>			Chemical shift(δ)		Proton number	Multiplicity	Hydrogen identification	Sample (C552202010)	Standard product (07125-SLBW4848)	1.716-1.743	1.694-1.709	2	m	H-2	1.787-1.805	1.769-1.783	2	m	H-3	2.622-2.809	2.615-2.783	2	m	H-8	3.011-3.041	2.989-3.019	2	t	H-1	3.745-3.769	3.727-3.751	1	t	H-4	3.858-3.883	3.838-3.862	1	dd
Chemical shift(δ)		Proton number	Multiplicity	Hydrogen identification																																			
Sample (C552202010)	Standard product (07125-SLBW4848)																																						
1.716-1.743	1.694-1.709	2	m	H-2																																			
1.787-1.805	1.769-1.783	2	m	H-3																																			
2.622-2.809	2.615-2.783	2	m	H-8																																			
3.011-3.041	2.989-3.019	2	t	H-1																																			
3.745-3.769	3.727-3.751	1	t	H-4																																			
3.858-3.883	3.838-3.862	1	dd	H-7																																			
13C - NMR	실시배치	B.No: C552202010																																					
	표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																					

																																																																								
	<table><tr><th colspan="2">Chemical shift(δ)</th><th rowspan="2">Carbon type</th><th rowspan="2">Carbon identification</th></tr><tr><th>Sample (C552202010))</th><th>Standard product (07125-SLBW4848)</th></tr><tr><td>22.12</td><td>22.13</td><td>Secondary carbon</td><td>C-2</td></tr><tr><td>26.79</td><td>26.81</td><td>Secondary carbon</td><td>C-3</td></tr><tr><td>35.93</td><td>35.93</td><td>Secondary carbon</td><td>C-1</td></tr><tr><td>38.24</td><td>38.27</td><td>Secondary carbon</td><td>C-8</td></tr><tr><td>51.56</td><td>51.62</td><td>Tertiary carbon</td><td>C-7</td></tr><tr><td>53.48</td><td>53.51</td><td>Tertiary carbon</td><td>C-4</td></tr><tr><td>173.53</td><td>173.51</td><td>Quaternary carbon</td><td>C-5</td></tr><tr><td>173.53</td><td>173.64</td><td>Quaternary carbon</td><td>C-6</td></tr><tr><td>176.92</td><td>176.96</td><td>Quaternary carbon</td><td>C-9</td></tr></table>	Chemical shift(δ)		Carbon type	Carbon identification	Sample (C552202010))	Standard product (07125-SLBW4848)	22.12	22.13	Secondary carbon	C-2	26.79	26.81	Secondary carbon	C-3	35.93	35.93	Secondary carbon	C-1	38.24	38.27	Secondary carbon	C-8	51.56	51.62	Tertiary carbon	C-7	53.48	53.51	Tertiary carbon	C-4	173.53	173.51	Quaternary carbon	C-5	173.53	173.64	Quaternary carbon	C-6	176.92	176.96	Quaternary carbon	C-9																													
Chemical shift(δ)		Carbon type	Carbon identification																																																																					
Sample (C552202010))	Standard product (07125-SLBW4848)																																																																							
22.12	22.13	Secondary carbon	C-2																																																																					
26.79	26.81	Secondary carbon	C-3																																																																					
35.93	35.93	Secondary carbon	C-1																																																																					
38.24	38.27	Secondary carbon	C-8																																																																					
51.56	51.62	Tertiary carbon	C-7																																																																					
53.48	53.51	Tertiary carbon	C-4																																																																					
173.53	173.51	Quaternary carbon	C-5																																																																					
173.53	173.64	Quaternary carbon	C-6																																																																					
176.92	176.96	Quaternary carbon	C-9																																																																					
<div>- 기기: Germany Bruker AV II-500 BKUKER, 용매: D2O</div> <div>- 시료와 기준물질 모두 9개의 탄소 피크 관찰, 분자 내 탄소 수와 일치.</div>																																																																								
MASS	실시배치	B.No: C552202010																																																																						
	표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																																																						
																																																																								
	<table><tr><th>Batch number</th><th>Mass-to-charge ratio(m/z)</th><th>Relative abundance</th><th>Remarks</th></tr><tr><td>Sample</td><td>264.90</td><td>100</td><td>---</td></tr><tr><td>Standard product</td><td>264.18</td><td>100</td><td>---</td></tr></table>		Batch number	Mass-to-charge ratio(m/z)	Relative abundance	Remarks	Sample	264.90	100	---	Standard product	264.18	100	---																																																										
Batch number	Mass-to-charge ratio(m/z)	Relative abundance	Remarks																																																																					
Sample	264.90	100	---																																																																					
Standard product	264.18	100	---																																																																					
<div>- 기기: Thermofisher LTQ</div> <div>- 분자량 264. 검체와 표준품간 m/z 264.90 vs 264.18, 상대강도 일치</div>																																																																								
원소분석	실시배치	B.No: C552202010																																																																						
	표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																																																						
	<div>检测结果</div> <div>第 2 页 共 2 页</div> <div>원료 검 (化) 字 (2022) 第 02002 号</div> <table><tr><th>序号(原样号)</th><th>检测项目(参数)</th><th>理论值</th><th>实测结果</th><th>结论</th></tr><tr><td rowspan="4">07125-SLBW4848</td><td>氮 (%)</td><td>—</td><td>15.21</td><td>—</td></tr><tr><td>碳 (%)</td><td>—</td><td>39.49</td><td>—</td></tr><tr><td>氢 (%)</td><td>—</td><td>7.50</td><td>—</td></tr><tr><td>氧 (%)</td><td>—</td><td>39.96</td><td>—</td></tr><tr><td rowspan="4">C552202010</td><td>氮 (%)</td><td>—</td><td>15.63</td><td>—</td></tr><tr><td>碳 (%)</td><td>—</td><td>39.96</td><td>—</td></tr><tr><td>氢 (%)</td><td>—</td><td>7.49</td><td>—</td></tr><tr><td>氧 (%)</td><td>—</td><td>39.96</td><td>—</td></tr></table> <table><tr><th colspan="2">Element</th><th>Actual test value (%)</th><th>Theoretical value (%)</th><th>Atomic weight</th></tr><tr><td rowspan="3">Standard</td><td>C</td><td>39.49%</td><td>40.71%</td><td>12.0107</td></tr><tr><td>H</td><td>7.50%</td><td>7.22%</td><td>1.00794</td></tr><tr><td>N</td><td>15.21%</td><td>15.84%</td><td>15.9999</td></tr><tr><td rowspan="3">sample</td><td>C</td><td>39.96%</td><td>40.71%</td><td>12.0107</td></tr><tr><td>H</td><td>7.49%</td><td>7.22%</td><td>1.00794</td></tr><tr><td>N</td><td>15.63%</td><td>15.84%</td><td>15.9999</td></tr></table>		序号(原样号)	检测项目(参数)	理论值	实测结果	结论	07125-SLBW4848	氮 (%)	—	15.21	—	碳 (%)	—	39.49	—	氢 (%)	—	7.50	—	氧 (%)	—	39.96	—	C552202010	氮 (%)	—	15.63	—	碳 (%)	—	39.96	—	氢 (%)	—	7.49	—	氧 (%)	—	39.96	—	Element		Actual test value (%)	Theoretical value (%)	Atomic weight	Standard	C	39.49%	40.71%	12.0107	H	7.50%	7.22%	1.00794	N	15.21%	15.84%	15.9999	sample	C	39.96%	40.71%	12.0107	H	7.49%	7.22%	1.00794	N	15.63%	15.84%	15.9999
	序号(原样号)	检测项目(参数)	理论值	实测结果	结论																																																																			
07125-SLBW4848	氮 (%)	—	15.21	—																																																																				
	碳 (%)	—	39.49	—																																																																				
	氢 (%)	—	7.50	—																																																																				
	氧 (%)	—	39.96	—																																																																				
C552202010	氮 (%)	—	15.63	—																																																																				
	碳 (%)	—	39.96	—																																																																				
	氢 (%)	—	7.49	—																																																																				
	氧 (%)	—	39.96	—																																																																				
Element		Actual test value (%)	Theoretical value (%)	Atomic weight																																																																				
Standard	C	39.49%	40.71%	12.0107																																																																				
	H	7.50%	7.22%	1.00794																																																																				
	N	15.21%	15.84%	15.9999																																																																				
sample	C	39.96%	40.71%	12.0107																																																																				
	H	7.49%	7.22%	1.00794																																																																				
	N	15.63%	15.84%	15.9999																																																																				
<div>- 기기: Model Vario EL III CHNSO, Germany</div> <div>- 검체와 표준품의 C, H, N 비율이 일치</div>																																																																								

- C, H, N 비율이 이론값 대비 $\pm 0.3\%$ 이내로 일치

■ 융점, 열분석치 (유 / 무 / ☐미흡)

- 미제출.

보완사유 : 미제출.

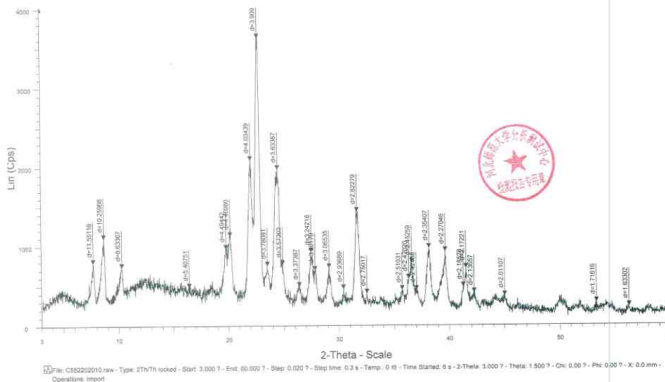
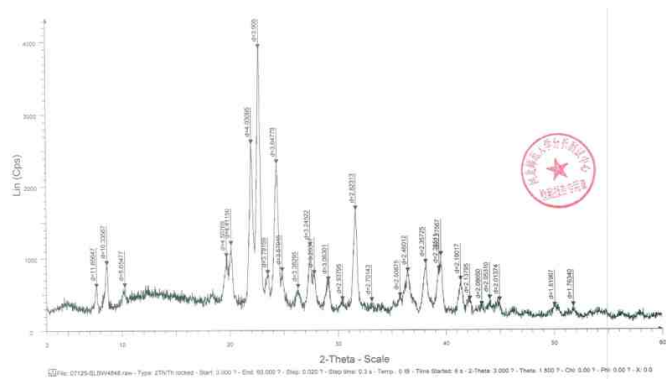
<보완> (3.2.S.3.1) 융점(분해유무 포함) 및 열분석치(배치정보, 열분석 기기 종류 및 분석 자료 등)을 통한 결정형과의 연관성, 수화형태의 안정성, 분해유무 등의 고찰자료 제출.

■ 결정다형 (유 / 무 / 해당사항 없음 / ☐미흡)

가. 결정다형 고찰

- 미제출. XRD 결과만 제출함.

나. PXRD 결과

실시배치	B.No: C552202010																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
표준품	Standard B.No: 07125-SLBW4848																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
<p>C552202010.raw</p> <table><tr><th>Caption</th><th>Angle 2-Theta ?</th><th>d value Angstrom</th><th>Intensity Cps</th><th>Intensity %</th></tr><tr><td>d=11.55116</td><td>7.647</td><td>11.55116</td><td>787</td><td>21.6</td></tr><tr><td>d=10.25956</td><td>8.612</td><td>10.25956</td><td>1100</td><td>30.2</td></tr><tr><td>d=8.63367</td><td>10.238</td><td>8.63367</td><td>733</td><td>20.1</td></tr><tr><td>d=5.40751</td><td>16.379</td><td>5.40751</td><td>480</td><td>13.2</td></tr><tr><td>d=4.49442</td><td>19.737</td><td>4.49442</td><td>967</td><td>26.6</td></tr><tr><td>d=4.40980</td><td>20.12</td><td>4.4098</td><td>1127</td><td>31</td></tr><tr><td>d=4.03439</td><td>22.015</td><td>4.03439</td><td>2097</td><td>57.6</td></tr><tr><td>d=3.90933</td><td>22.728</td><td>3.90933</td><td>3640</td><td>100</td></tr><tr><td>d=3.78081</td><td>23.511</td><td>3.78081</td><td>750</td><td>20.6</td></tr><tr><td>d=3.63387</td><td>24.477</td><td>3.63387</td><td>1977</td><td>54.3</td></tr><tr><td>d=3.57303</td><td>24.9</td><td>3.57303</td><td>767</td><td>21.1</td></tr><tr><td>d=3.37387</td><td>26.396</td><td>3.37387</td><td>490</td><td>13.5</td></tr><tr><td>d=3.24218</td><td>27.488</td><td>3.24218</td><td>923</td><td>25.4</td></tr><tr><td>d=3.20170</td><td>27.843</td><td>3.2017</td><td>690</td><td>19</td></tr><tr><td>d=3.06535</td><td>29.108</td><td>3.06535</td><td>723</td><td>19.9</td></tr><tr><td>d=2.93689</td><td>30.411</td><td>2.93689</td><td>457</td><td>12.5</td></tr><tr><td>d=2.82279</td><td>31.672</td><td>2.82279</td><td>1437</td><td>39.5</td></tr><tr><td>d=2.75017</td><td>32.531</td><td>2.75017</td><td>400</td><td>11</td></tr><tr><td>d=2.51031</td><td>35.74</td><td>2.51031</td><td>440</td><td>12.1</td></tr><tr><td>d=2.47020</td><td>36.34</td><td>2.4702</td><td>583</td><td>16</td></tr><tr><td>d=2.45259</td><td>36.61</td><td>2.45259</td><td>783</td><td>21.5</td></tr><tr><td>d=2.42488</td><td>37.044</td><td>2.42488</td><td>440</td><td>12.1</td></tr><tr><td>d=2.35407</td><td>38.2</td><td>2.35407</td><td>970</td><td>26.6</td></tr><tr><td>d=2.27046</td><td>39.665</td><td>2.27046</td><td>927</td><td>25.5</td></tr><tr><td>d=2.18528</td><td>41.28</td><td>2.18528</td><td>477</td><td>13.1</td></tr><tr><td>d=2.17221</td><td>41.54</td><td>2.17221</td><td>713</td><td>19.6</td></tr><tr><td>d=2.13657</td><td>42.266</td><td>2.13657</td><td>403</td><td>11.1</td></tr><tr><td>d=2.01107</td><td>45.043</td><td>2.01107</td><td>363</td><td>10</td></tr><tr><td>d=1.71616</td><td>53.34</td><td>1.71616</td><td>277</td><td>7.6</td></tr><tr><td>d=1.63302</td><td>56.29</td><td>1.63302</td><td>223</td><td>6.1</td></tr></table>	Caption	Angle 2-Theta ?	d value Angstrom	Intensity Cps	Intensity %	d=11.55116	7.647	11.55116	787	21.6	d=10.25956	8.612	10.25956	1100	30.2	d=8.63367	10.238	8.63367	733	20.1	d=5.40751	16.379	5.40751	480	13.2	d=4.49442	19.737	4.49442	967	26.6	d=4.40980	20.12	4.4098	1127	31	d=4.03439	22.015	4.03439	2097	57.6	d=3.90933	22.728	3.90933	3640	100	d=3.78081	23.511	3.78081	750	20.6	d=3.63387	24.477	3.63387	1977	54.3	d=3.57303	24.9	3.57303	767	21.1	d=3.37387	26.396	3.37387	490	13.5	d=3.24218	27.488	3.24218	923	25.4	d=3.20170	27.843	3.2017	690	19	d=3.06535	29.108	3.06535	723	19.9	d=2.93689	30.411	2.93689	457	12.5	d=2.82279	31.672	2.82279	1437	39.5	d=2.75017	32.531	2.75017	400	11	d=2.51031	35.74	2.51031	440	12.1	d=2.47020	36.34	2.4702	583	16	d=2.45259	36.61	2.45259	783	21.5	d=2.42488	37.044	2.42488	440	12.1	d=2.35407	38.2	2.35407	970	26.6	d=2.27046	39.665	2.27046	927	25.5	d=2.18528	41.28	2.18528	477	13.1	d=2.17221	41.54	2.17221	713	19.6	d=2.13657	42.266	2.13657	403	11.1	d=2.01107	45.043	2.01107	363	10	d=1.71616	53.34	1.71616	277	7.6	d=1.63302	56.29	1.63302	223	6.1	<p>07125-SLBW4848.raw</p> <table><tr><th>Caption</th><th>Angle 2-Theta ?</th><th>d value Angstrom</th><th>Intensity Cps</th><th>Intensity %</th></tr><tr><td>d=11.65647</td><td>7.578</td><td>11.65647</td><td>590</td><td>15.1</td></tr><tr><td>d=10.33567</td><td>8.548</td><td>10.33567</td><td>903</td><td>23</td></tr><tr><td>d=8.65477</td><td>10.213</td><td>8.65477</td><td>593</td><td>15.1</td></tr><tr><td>d=4.50769</td><td>19.679</td><td>4.50769</td><td>1007</td><td>25.7</td></tr><tr><td>d=4.41150</td><td>20.112</td><td>4.4115</td><td>1177</td><td>30</td></tr><tr><td>d=4.03095</td><td>22.034</td><td>4.03095</td><td>2597</td><td>66.2</td></tr><tr><td>d=3.90571</td><td>22.749</td><td>3.90571</td><td>3920</td><td>100</td></tr><tr><td>d=3.78159</td><td>23.506</td><td>3.78159</td><td>770</td><td>19.6</td></tr><tr><td>d=3.64778</td><td>24.382</td><td>3.64778</td><td>2317</td><td>59.1</td></tr><tr><td>d=3.57946</td><td>24.855</td><td>3.57946</td><td>807</td><td>20.6</td></tr><tr><td>d=3.38295</td><td>26.324</td><td>3.38295</td><td>573</td><td>14.6</td></tr><tr><td>d=3.24522</td><td>27.462</td><td>3.24522</td><td>1157</td><td>29.5</td></tr><tr><td>d=3.20347</td><td>27.827</td><td>3.20347</td><td>767</td><td>19.6</td></tr><tr><td>d=3.06301</td><td>29.131</td><td>3.06301</td><td>677</td><td>17.3</td></tr><tr><td>d=2.93795</td><td>30.4</td><td>2.93795</td><td>400</td><td>10.2</td></tr><tr><td>d=2.82313</td><td>31.668</td><td>2.82313</td><td>1663</td><td>42.4</td></tr><tr><td>d=2.70143</td><td>33.135</td><td>2.70143</td><td>387</td><td>9.9</td></tr><tr><td>d=2.50875</td><td>35.763</td><td>2.50875</td><td>450</td><td>11.5</td></tr><tr><td>d=2.46012</td><td>36.494</td><td>2.46012</td><td>797</td><td>20.3</td></tr><tr><td>d=2.35725</td><td>38.147</td><td>2.35725</td><td>913</td><td>23.3</td></tr><tr><td>d=2.28511</td><td>39.4</td><td>2.28511</td><td>820</td><td>20.9</td></tr><tr><td>d=2.27567</td><td>39.57</td><td>2.27567</td><td>1023</td><td>26.1</td></tr><tr><td>d=2.18017</td><td>41.381</td><td>2.18017</td><td>677</td><td>17.3</td></tr><tr><td>d=2.13795</td><td>42.237</td><td>2.13795</td><td>400</td><td>10.2</td></tr><tr><td>d=2.08650</td><td>43.33</td><td>2.0865</td><td>323</td><td>8.2</td></tr><tr><td>d=2.05310</td><td>44.072</td><td>2.0531</td><td>413</td><td>10.5</td></tr><tr><td>d=2.01374</td><td>44.98</td><td>2.01374</td><td>387</td><td>9.9</td></tr><tr><td>d=1.81967</td><td>50.089</td><td>1.81967</td><td>310</td><td>7.9</td></tr><tr><td>d=1.76340</td><td>51.803</td><td>1.7634</td><td>313</td><td>8</td></tr></table>	Caption	Angle 2-Theta ?	d value Angstrom	Intensity Cps	Intensity %	d=11.65647	7.578	11.65647	590	15.1	d=10.33567	8.548	10.33567	903	23	d=8.65477	10.213	8.65477	593	15.1	d=4.50769	19.679	4.50769	1007	25.7	d=4.41150	20.112	4.4115	1177	30	d=4.03095	22.034	4.03095	2597	66.2	d=3.90571	22.749	3.90571	3920	100	d=3.78159	23.506	3.78159	770	19.6	d=3.64778	24.382	3.64778	2317	59.1	d=3.57946	24.855	3.57946	807	20.6	d=3.38295	26.324	3.38295	573	14.6	d=3.24522	27.462	3.24522	1157	29.5	d=3.20347	27.827	3.20347	767	19.6	d=3.06301	29.131	3.06301	677	17.3	d=2.93795	30.4	2.93795	400	10.2	d=2.82313	31.668	2.82313	1663	42.4	d=2.70143	33.135	2.70143	387	9.9	d=2.50875	35.763	2.50875	450	11.5	d=2.46012	36.494	2.46012	797	20.3	d=2.35725	38.147	2.35725	913	23.3	d=2.28511	39.4	2.28511	820	20.9	d=2.27567	39.57	2.27567	1023	26.1	d=2.18017	41.381	2.18017	677	17.3	d=2.13795	42.237	2.13795	400	10.2	d=2.08650	43.33	2.0865	323	8.2	d=2.05310	44.072	2.0531	413	10.5	d=2.01374	44.98	2.01374	387	9.9	d=1.81967	50.089	1.81967	310	7.9	d=1.76340	51.803	1.7634	313	8
Caption	Angle 2-Theta ?	d value Angstrom	Intensity Cps	Intensity %																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=11.55116	7.647	11.55116	787	21.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=10.25956	8.612	10.25956	1100	30.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=8.63367	10.238	8.63367	733	20.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=5.40751	16.379	5.40751	480	13.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.49442	19.737	4.49442	967	26.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.40980	20.12	4.4098	1127	31																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.03439	22.015	4.03439	2097	57.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.90933	22.728	3.90933	3640	100																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.78081	23.511	3.78081	750	20.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.63387	24.477	3.63387	1977	54.3																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.57303	24.9	3.57303	767	21.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.37387	26.396	3.37387	490	13.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.24218	27.488	3.24218	923	25.4																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.20170	27.843	3.2017	690	19																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.06535	29.108	3.06535	723	19.9																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.93689	30.411	2.93689	457	12.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.82279	31.672	2.82279	1437	39.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.75017	32.531	2.75017	400	11																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.51031	35.74	2.51031	440	12.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.47020	36.34	2.4702	583	16																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.45259	36.61	2.45259	783	21.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.42488	37.044	2.42488	440	12.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.35407	38.2	2.35407	970	26.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.27046	39.665	2.27046	927	25.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.18528	41.28	2.18528	477	13.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.17221	41.54	2.17221	713	19.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.13657	42.266	2.13657	403	11.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.01107	45.043	2.01107	363	10																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=1.71616	53.34	1.71616	277	7.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=1.63302	56.29	1.63302	223	6.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
Caption	Angle 2-Theta ?	d value Angstrom	Intensity Cps	Intensity %																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=11.65647	7.578	11.65647	590	15.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=10.33567	8.548	10.33567	903	23																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=8.65477	10.213	8.65477	593	15.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.50769	19.679	4.50769	1007	25.7																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.41150	20.112	4.4115	1177	30																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=4.03095	22.034	4.03095	2597	66.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.90571	22.749	3.90571	3920	100																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.78159	23.506	3.78159	770	19.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.64778	24.382	3.64778	2317	59.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.57946	24.855	3.57946	807	20.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.38295	26.324	3.38295	573	14.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.24522	27.462	3.24522	1157	29.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.20347	27.827	3.20347	767	19.6																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=3.06301	29.131	3.06301	677	17.3																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.93795	30.4	2.93795	400	10.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.82313	31.668	2.82313	1663	42.4																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.70143	33.135	2.70143	387	9.9																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.50875	35.763	2.50875	450	11.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.46012	36.494	2.46012	797	20.3																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.35725	38.147	2.35725	913	23.3																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.28511	39.4	2.28511	820	20.9																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.27567	39.57	2.27567	1023	26.1																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.18017	41.381	2.18017	677	17.3																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.13795	42.237	2.13795	400	10.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.08650	43.33	2.0865	323	8.2																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.05310	44.072	2.0531	413	10.5																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=2.01374	44.98	2.01374	387	9.9																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=1.81967	50.089	1.81967	310	7.9																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
d=1.76340	51.803	1.7634	313	8																																																																																																																																																																																																																																																																																																														
<p>- 기기: Bruker D8 Advance, Germany 시료 준비: 검체와 표준품의 압축물 분석 (검토의견) 검체와 표준품의 패턴이 유사하다고 제출. DMF 등록된 원료 이력에는 결정다형 없다고 하였으나, 문헌 정보에 따르면 결정다형 Form I, Form II, Solvate, 무수물, 일수화물, 반수화물 등 존재함.</p>																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		

<p>보완사유 : 결정형에 관한 자료 중 XRD 측정결과만 제출 되었으나, 결정다형이 있음이 확인되므로 고찰자료 제출 필요.</p> <p><보완> (3.2.S.3.1) 신청 원료의약품의 결정형(수화물 형태 포함), 결정형의 안정성(사용기간 까지 결정형 유지 여부 등)자료, 알려진 결정형간의 상호관계 및 각 결정형의 물리적성질(결정다형간 용해도 비교분석자료 등)에 관한 자료 제출.</p>

※ 수화물 형태에 대한 추가 검토의견

- 신청 원료의약품은 채널·층상 구조 없어 무수물 또는 1/2수화물, 1수화물, 2수화물 등 다양한 고정수화물 형태가 특허 및 문헌자료에 보고되어 있음.
- 구조분석 자료에서는 무수물 또는 1/2~1수화물 여부를 구분할 수 있는 근거가 되는 분석결과 없음.
- KP 일수화물 수분기준 4~7%이나, 기준 7%이하로 설정하였으며 3배치 실측치 0.66%, 0.77%, 0.81%로 시험결과는 무수물 결과로 판단됨.

- 다만, 흡습성이 있는 성분으로 결정다형 자료 중 탈수에 의한 상 전이도 다수 보고되므로 무수물 또는 수화물 (수화물인 경우 수화물수)의 근거 제출 필요.

보완사유 : 제출된 구조분석 자료에서 수화물 여부 확인되지 않으므로, 무수물 또는 수화물 여부를 명확하게 기재하여야 하며 그 근거자료 제출 필요.

<보완> (3.2.S) 신청 원료의약품은 무수물, 다수의 수화물 형태가 보고된 경우로, 제출한 CTD 각 항목에 무수물 또는 수화물수 명확하게 기재하고 그 근거자료(결정다형·열분석치를 포함한 기타 구조분석 자료를 통한 수화물 수 입증, 공정 일관성 등)제출.

- 참고로, 완제의약품에서 기허가된 제조원 1의 경우 건조감량 3 % 부근으로, 1/2수화물 또는 1수화물 수준의 결과로 추정되며 수화물에 따른 결정형 간 용해도 차이 보고되어 있음.