

*** 基本データ処理 ***

データ情報

グループ : 199772
 データ : #3
 サンプル名 : #3 Lot No. 65E3H
 コメント : #3 Lot No. 65E3H
 日付 & 時刻 : 12-12-17 12:01:47

測定条件

X線
 ターゲット : Cu
 管電圧 : 40.0 (kV)
 管電流 : 30.0 (mA)
 スリット
 Auto Slit : not Used
 ダイバージェンス : 0.10 (度)
 スキャタリング : 0.10 (度)
 レジビング : 0.30 (mm)
 走査
 駆動軸 : $\theta - 2\theta$
 範囲 : 5.0000 - 60.0000 (度)
 モード : 連続 スキャン
 速度 : 4.0000 (度/分)
 ステップ : 0.0200 (度)
 計数時間 : 0.30 (秒)

データ処理条件

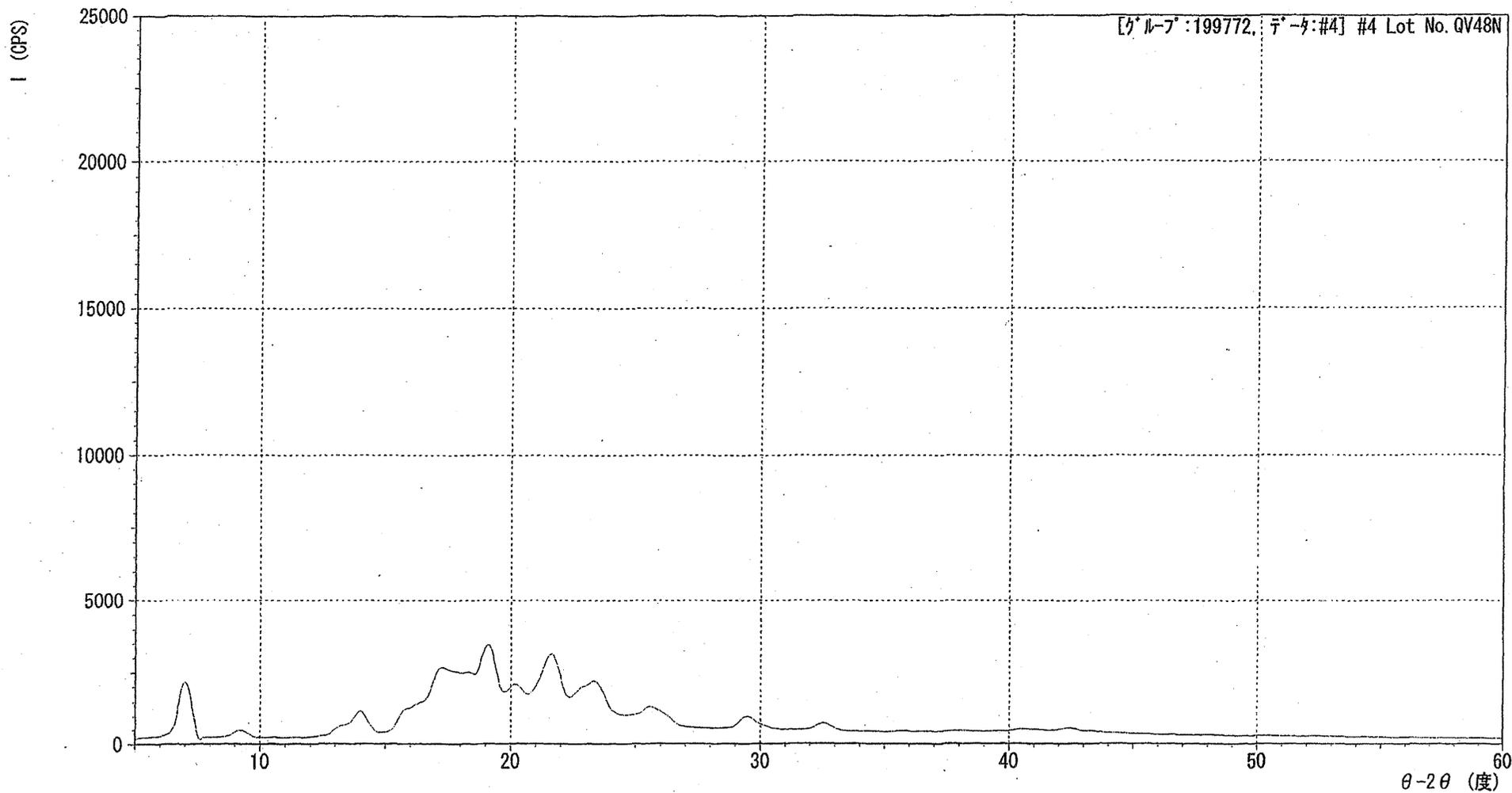
スムージング : [自動]
 平滑化点数 : 51
 バックグラウンド除去 : [自動]
 サンプル間隔 : 51
 繰り返し回数 : 30
 Ka1-a2 分離 : [手動]
 Ka1-a2 比 : 50 (%)
 ピークサーチ : [自動]
 微分点数 : 51
 半価幅しきい値 : 0.0500 (度)
 強度しきい値 : 30 (par mil)
 半価幅比 (n-1)/n : 2
 系統誤差補正 : [NO]
 内/外標準法補正 : [NO]

*** マルチプロット ***

ファイル名 : 199772#4
サンプル名 : #4 Lot No. QV48N
分析日時 : 12-12-17 13:04:19
分析条件

コメント : #4 Lot No. QV48N

X線管球 : Cu(1.54060 Å) 管電圧 : 40.0 kV 管電流 : 30.0 mA
測定範囲 : 5.0000 ~ 60.0000 度 ステップ幅 : 0.0200 度
計数時間 : 0.30 秒 スリット DS : 0.10 度 SS : 0.10 度 RS : 0.30 mm



*** 基本データ処理 ***

グループ : 199772
 データ : #4

#	3 強線 番号	ピーク 番号	2θ (度)	d (Å)	I/I1	半価幅 (度)	強度 (Counts)	積分強度 (Counts)
1	7	19.0600	4.65258	100	0.93600	557	36102	
2	9	21.5045	4.12891	87	1.18240	486	34636	
3	6	17.2000	5.15129	74	1.17340	413	32775	

#	ピーク 番号	データ リスト	2θ (度)	d (Å)	I/I1	半価幅 (度)	強度 (Counts)	積分強度 (Counts)
1			6.9967	12.62377	72	0.60810	403	13638
2			9.2000	9.60487	10	0.70000	58	2357
3			13.3600	6.62202	13	0.88000	70	2704
4			13.9125	6.36026	28	0.77500	156	4756
5			15.7400	5.62567	25	0.55340	137	5305
6			17.2000	5.15129	74	1.17340	413	32775
7			19.0600	4.65258	100	0.93600	557	36102
8			20.1400	4.40546	50	0.00000	277	0
9			21.5045	4.12891	87	1.18240	486	34636
10			23.2800	3.81787	54	1.12580	298	19681
11			25.4833	3.49255	24	1.64670	133	10534
12			29.4733	3.02819	15	0.74670	82	3637
13			32.5100	2.75193	9	0.70000	49	1952
14			40.8350	2.20806	4	1.27000	21	1768
15			42.3400	2.13299	5	0.96000	30	1298
16			43.2800	2.08882	3	0.52000	17	656

*** 基本データ処理 ***

データ情報

グループ : 199772
 データ : #4
 サンプル名 : #4 Lot No. QV48N
 コメント : #4 Lot No. QV48N
 日付 & 時刻 : 12-12-17 13:04:19

測定条件

X線
 ターゲット : Cu
 管電圧 : 40.0 (kV)
 管電流 : 30.0 (mA)
 スリット
 Auto Slit : not Used
 ダイバーゼンス : 0.10 (度)
 スキャタリング : 0.10 (度)
 ビシーティング : 0.30 (mm)
 走査
 駆動軸 : $\theta - 2\theta$
 範囲 : 5.0000 - 60.0000 (度)
 モード : 連続 スキャン
 速度 : 4.0000 (度/分)
 ステップ : 0.0200 (度)
 計数時間 : 0.30 (秒)

データ処理条件

スムージング : [自動]
 平滑化点数 : 51
 バックグラウンド除去 : [自動]
 サンプル間隔 : 51
 繰り返し回数 : 30
 Ka1-a2 分離 : [手動]
 Ka1-a2 比 : 50 (%)
 ピークサーチ : [自動]
 微分点数 : 51
 半価幅しきい値 : 0.0500 (度)
 強度しきい値 : 30 (par mil)
 半価幅比 (n-1)/n : 2
 系統誤差補正 : [NO]
 内/外標準法補正 : [NO]

資料 1 有機合成

2. 結晶性及び塩の検討



試験成績書

2013年01月23日

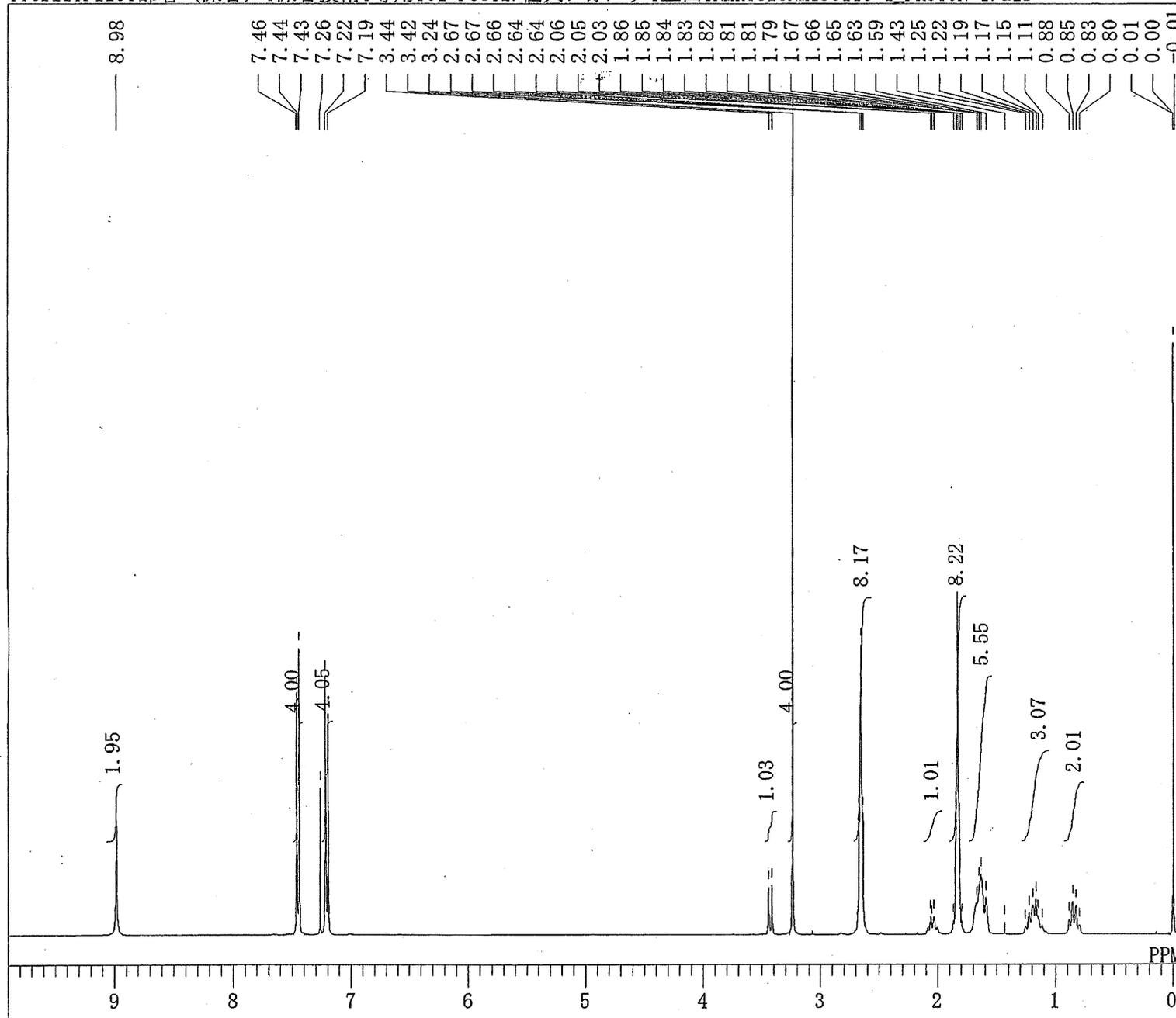
国立大学法人 岐阜大学大学院
連合創薬医療情報研究科 御中

東京化成工業(株)深谷工場 深谷試験グループ
〒366-0816
埼玉県深谷市榎合725番地
TEL:048-571-1107、FAX:048-572-9859



製品名 : P092 N, N' - [(シクロヘキシルメチレン)ジ-4, 1-フェニル]ピペリス[2-(1-ピロリジニル)アセトアミド]					
製品コード : Z4144 CAS : 1255766-05-2	等級 :	製品ロット : QWAUD	判定: 合格	数量 : 30g	

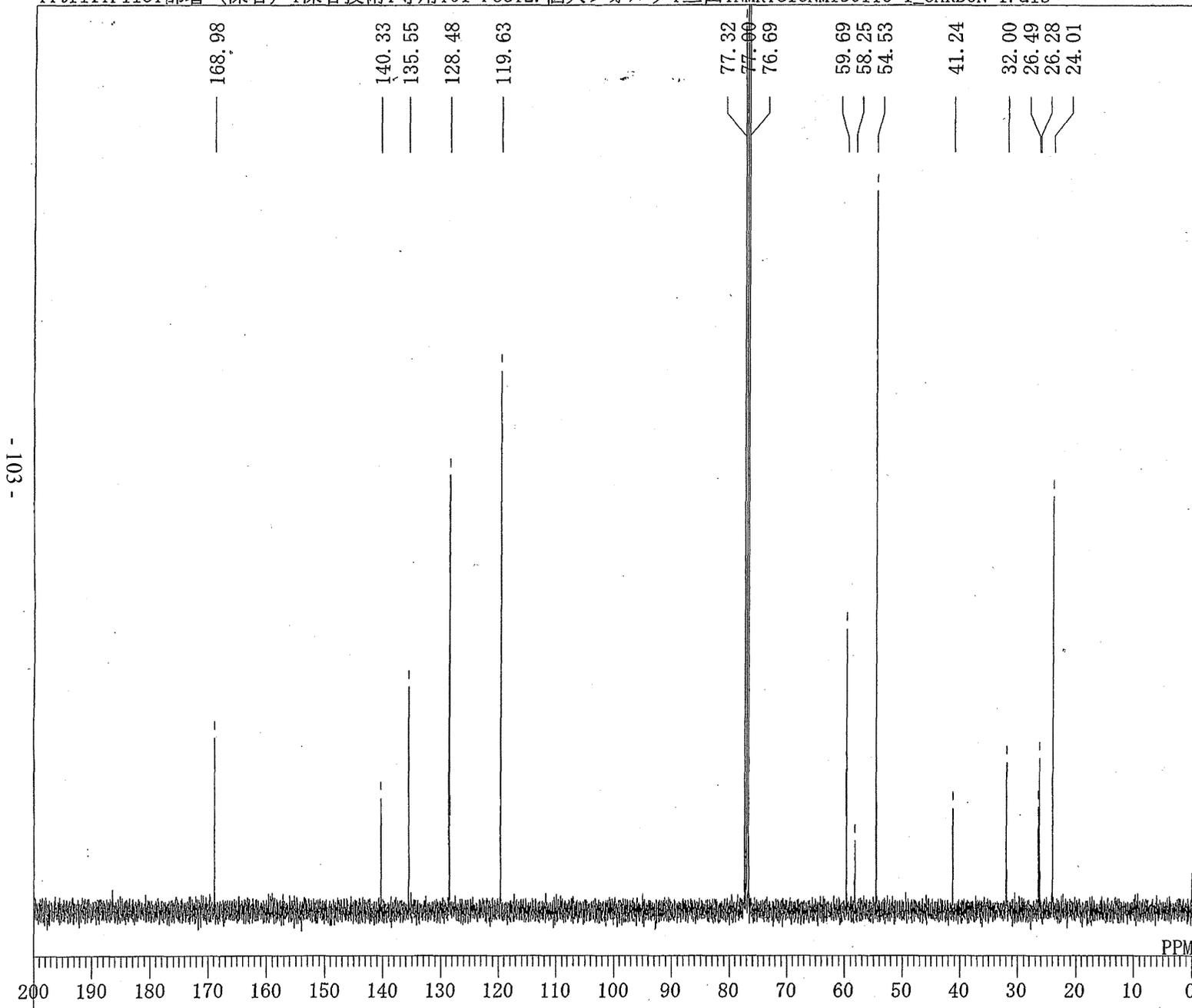
項目	結果
純度 (HPLC)	99.3 area%
純度 (Nより)	99.8 %
融点	176.1 deg-C



DFILE GI6NM130116-1_PROTON-1. als
 COMNT Z4144 exp54 THF-IPE 0116
 DATIM 16-01-2013 09:31:34
 OBNUC 1H
 EXMOD single_pulse.ex2
 OBFRQ 399.78 MHz
 OBSET 4.19 KHz
 OBFIN 7.29 Hz
 POINT 13107
 FREQU 6002.31 Hz
 SCANS 16
 ACQTM 2.1837 sec
 PD 5.0000 sec
 PW1 5.40 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 20.0 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 0.00 ppm
 BF 0.23 Hz
 RGAIN 40

Z4144 exp54 THF-IPE 0116

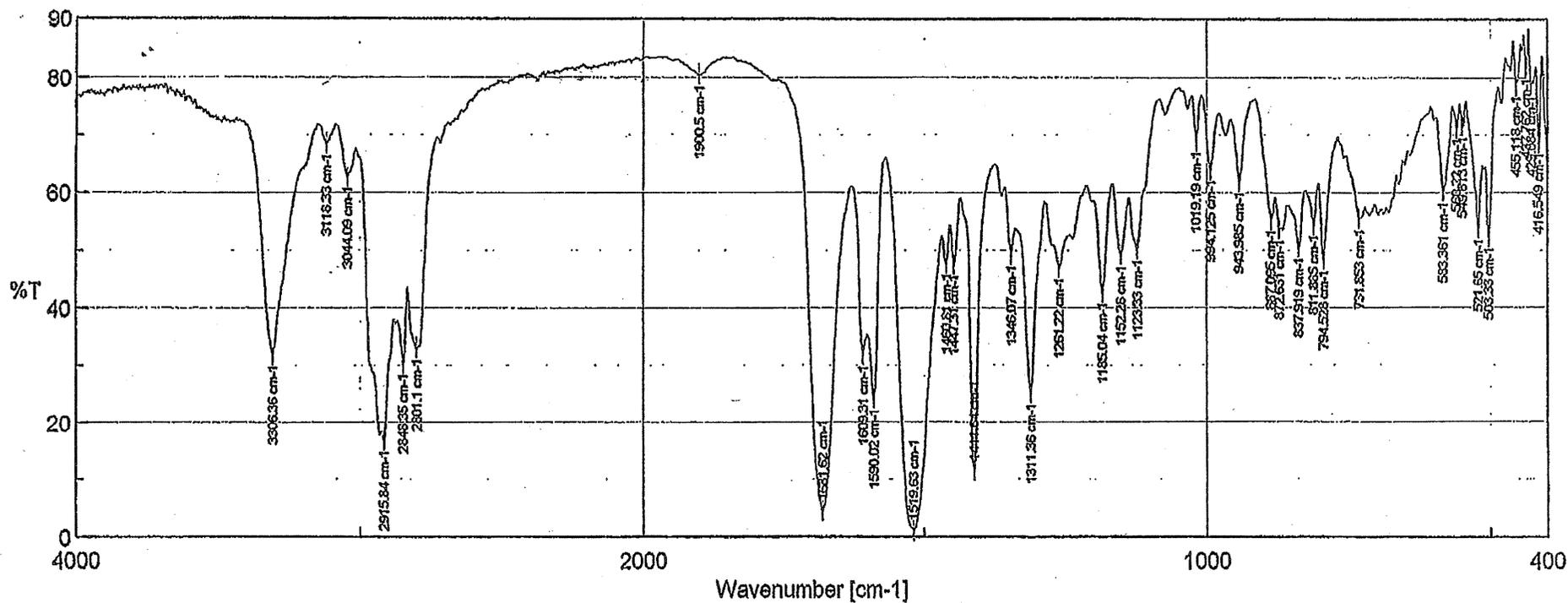
¥¥tf11¥File¥部署 (深谷) ¥深谷技術¥専用¥01 PCG¥2. 個人フォルダ¥三山¥NMR¥GI6NM130116-1 CARBON-1. als



DFILE GI6NM130116-1 CARBON-1. als
COMNT Z4144 exp54 THF-IPE 0116
DATIM 16-01-2013 09:46:50
OBNUC 13C
EXMOD single_pulse_dec
OBFRQ 100.53 MHz
OBSET 5.35 KHz
OBFIN 5.86 Hz
POINT 26214
FREQU 25125.24 Hz
SCANS 256
ACQTM 1.0433 sec
PD 2.0000 sec
PW1 3.00 uséc
IRNUC 1H
CTEMP 20.3 c
SLVNT CDCL3
EXREF 77.00 ppm
BF 0.23 Hz
RGAIN 60

- 301 -

QWAUD Z4144



[コメント情報]

試料名
コメント
測定者
所属
会社

東京化成工業(株)

[データ情報]

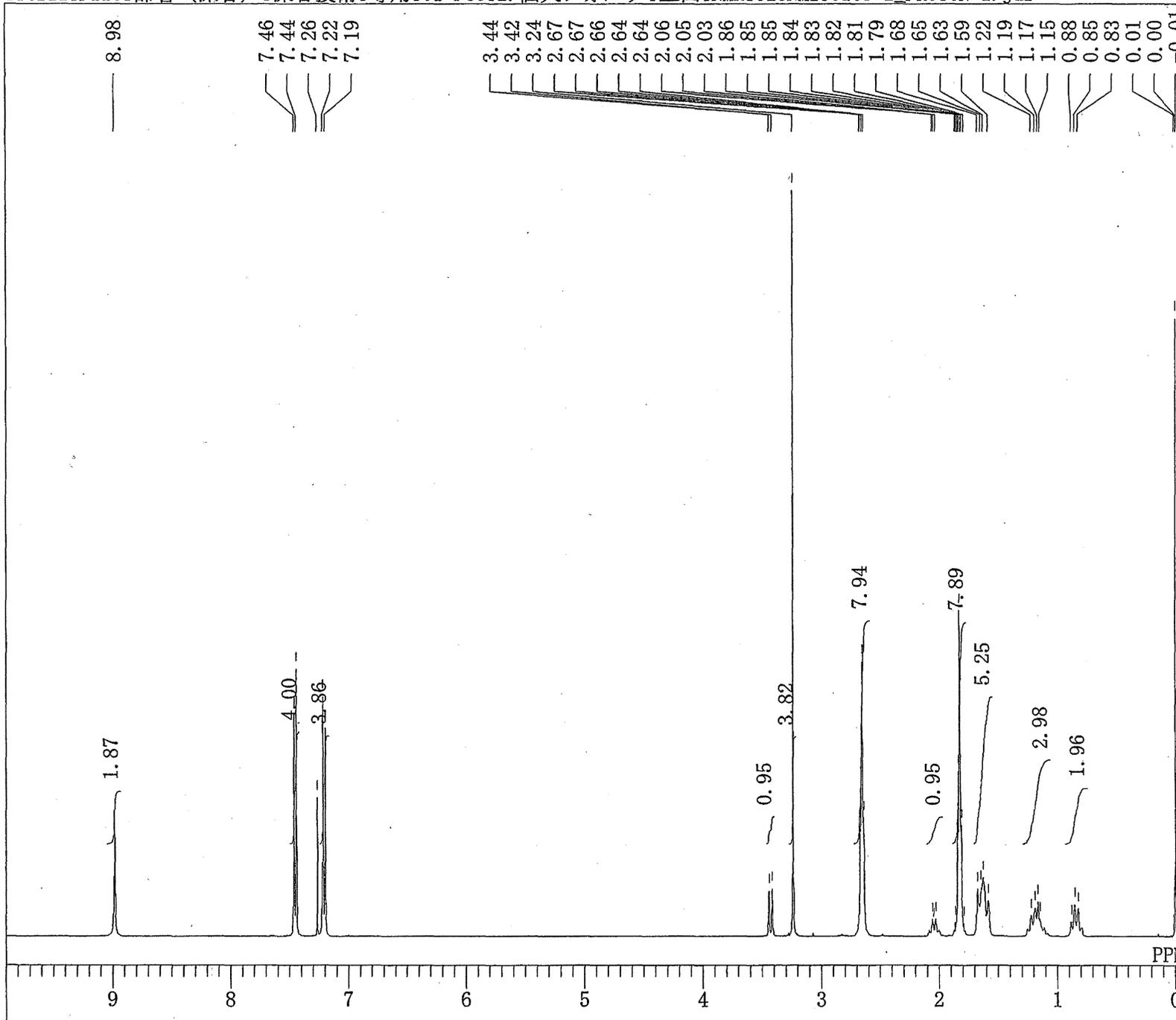
作成日時 2013/01/17 11:38
データタイプ 等間隔 データ
横軸 Wavenumber [cm-1]
縦軸 %T
スタート 399.193 cm-1
エンド 4000.6 cm-1
データ間隔 0.964233 cm-1
データ数 3736

[測定情報]

機種名 FT/IR-4100typeA
シリアル番号 A002261016
光源 第1光源
検出器 第1検出器

積算回数 16
分解 4 cm-1
ゼロフィリング On
アポダイゼーション Cosine
ゲイン Auto (16)
アパーチャ Auto (7.1 mm)
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)
フィルタ Auto (30000 Hz)

Memory-1



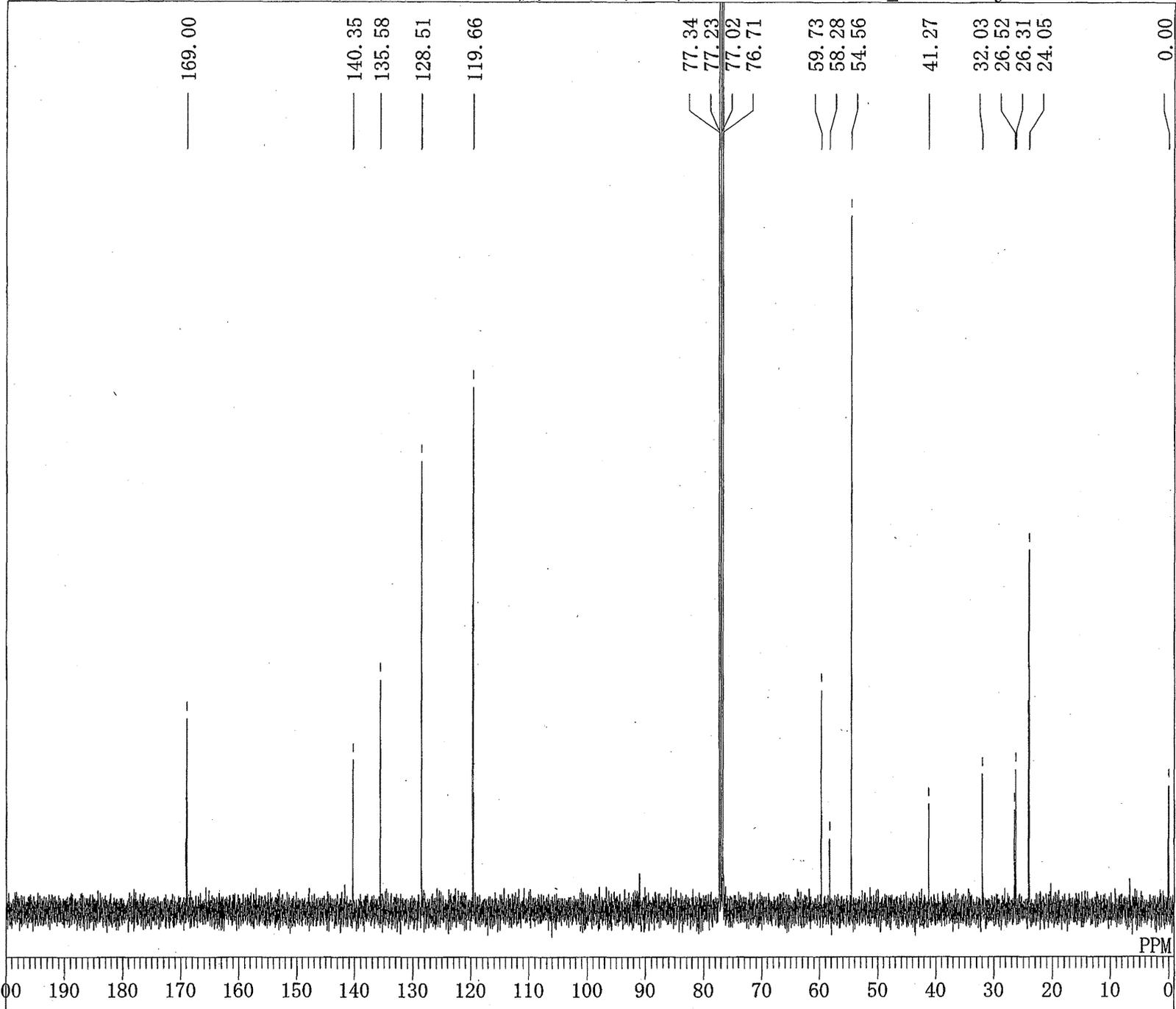
DFILE GI6NM130109-2_PROTON-1. jdf
 COMNT Z4144 Exp50 2g EtOH(IPA)
 DATIM 09-01-2013 09:12:37
 OBNUC 1H
 EXMOD single_pulse. ex2
 OBFREQ 399.78 MHz
 OBSET 4.19 KHz
 OBFIN 7.29 Hz
 POINT 16384
 FREQU 7503.00 Hz
 SCANS 16
 ACQTM 2.1837 sec
 PD 5.0000 sec
 PW1 5.40 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 20.2 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 0.00 ppm
 BF 0.23 Hz
 RGAIN 40

Z4144

サ=70il ①

Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA)

¥¥tfl1¥File¥部署 (深谷) ¥深谷技術¥専用¥01 PCG¥2. 個人フォルダ¥三山¥NMR¥GI6NM130123-2_CARBON-1. jdf



DFILE GI6NM130123-2_CARBON-1. jdf
COMNT Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA)
DATIM 23-01-2013 17:22:04
OBNUC 13C
EXMOD single_pulse_dec
OBFRQ 100.53 MHz
OBSET 5.35 KHz
OBFIN 5.86 Hz
POINT 32768
FREQU 31407.03 Hz
SCANS 256
ACQTM 1.0433 sec
PD 2.0000 sec
PW1 3.00 usec
IRNUC 1H
CTEMP 21.1 c
SLVNT CDCL3
EXREF 0.00 ppm
BF 0.23 Hz
RGAIN 60

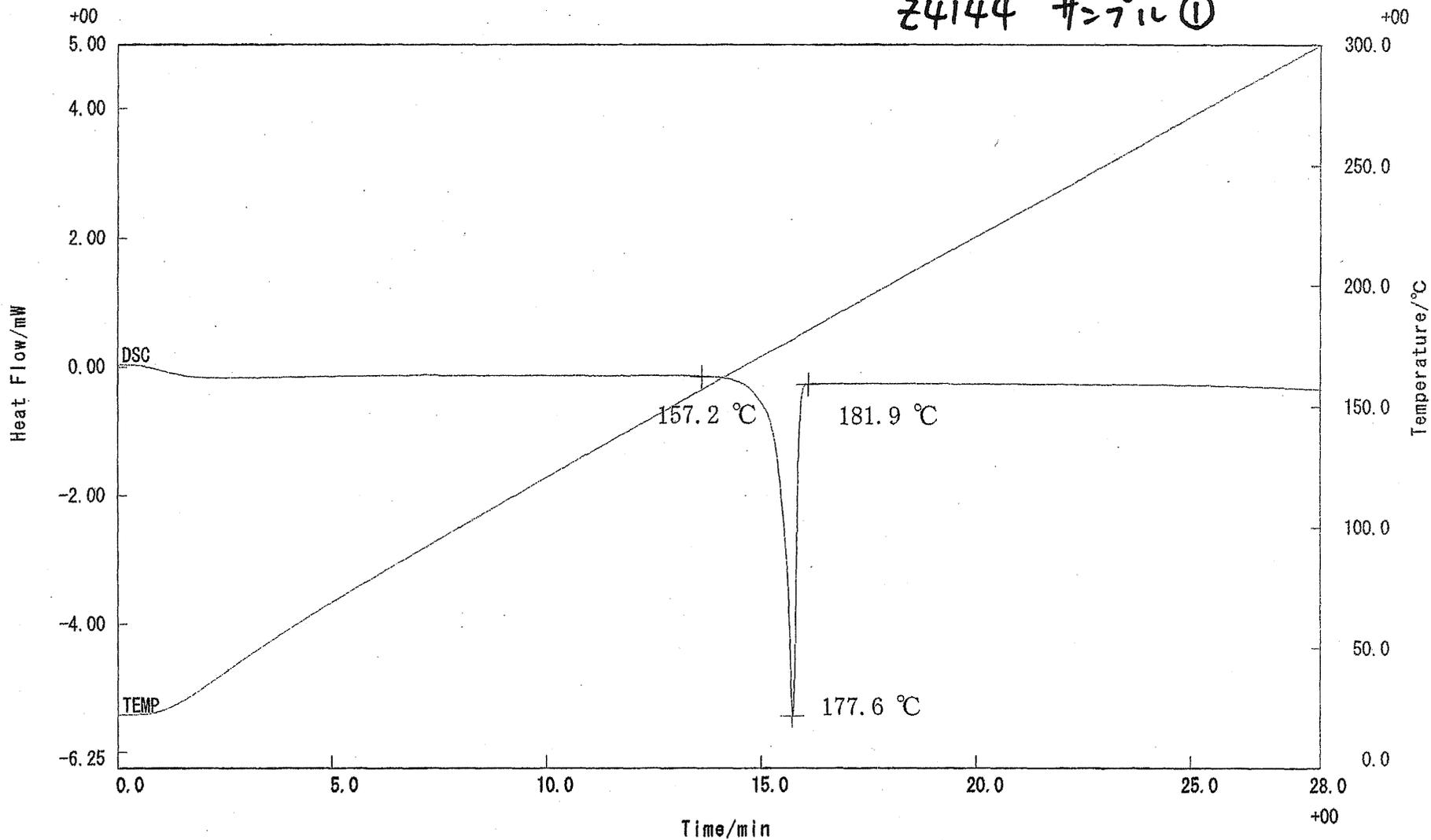
Z4144
サンプル①

Nickname : Evo2 DSC8230
Model :
Sample : Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA)-2
Weight : 1.500 mg
Sample Pan : Al
Comments1 :
Comments2 :

Reference : Al2O3
Atmosphere : N2
Rate : 10.0°C/min
Sampling : 1.0 s
Operator :

Directory : C:\TpEvo\Data\山\Z4144
Meas File : Z4144 (J2FNO)-EtOH(IP...
Record : 2013/01/09 14:20:25
Print Out : 2013/01/09 14:35:03

Z4144 サンプル①

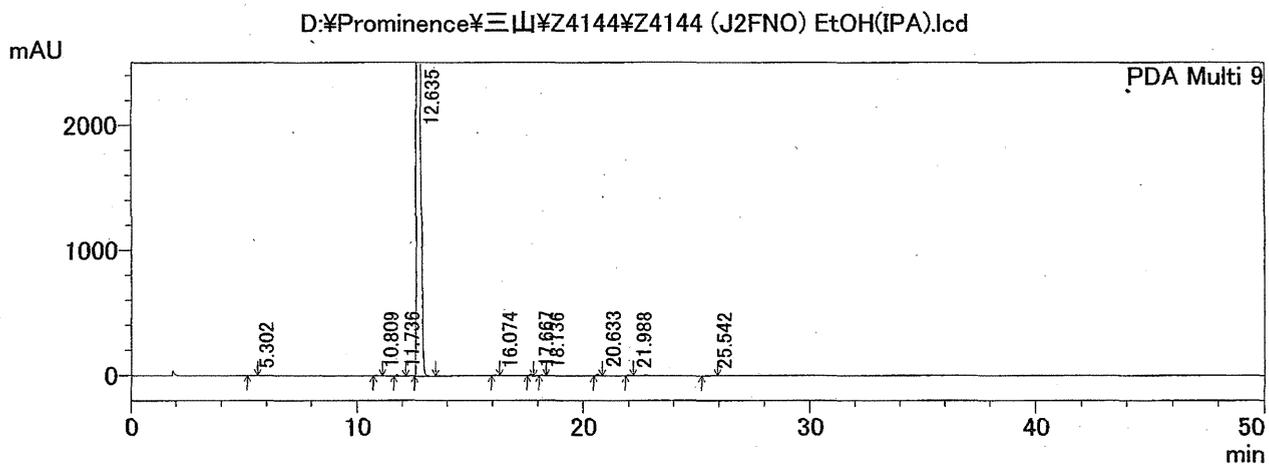


==== Shimadzu LCsolution 分析レポート ====

サンプル名 : Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA)
 サンプルID : Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA)
 データファイル : Z4144 (J2FNO) EtOH(IPA).lcd
 バッチファイル :
 レポートファイル : Default.lcr
 分析日時 : 2013/01/23 14:33:07
 解析日時 : 2013/01/23 15:34:14

Z4144

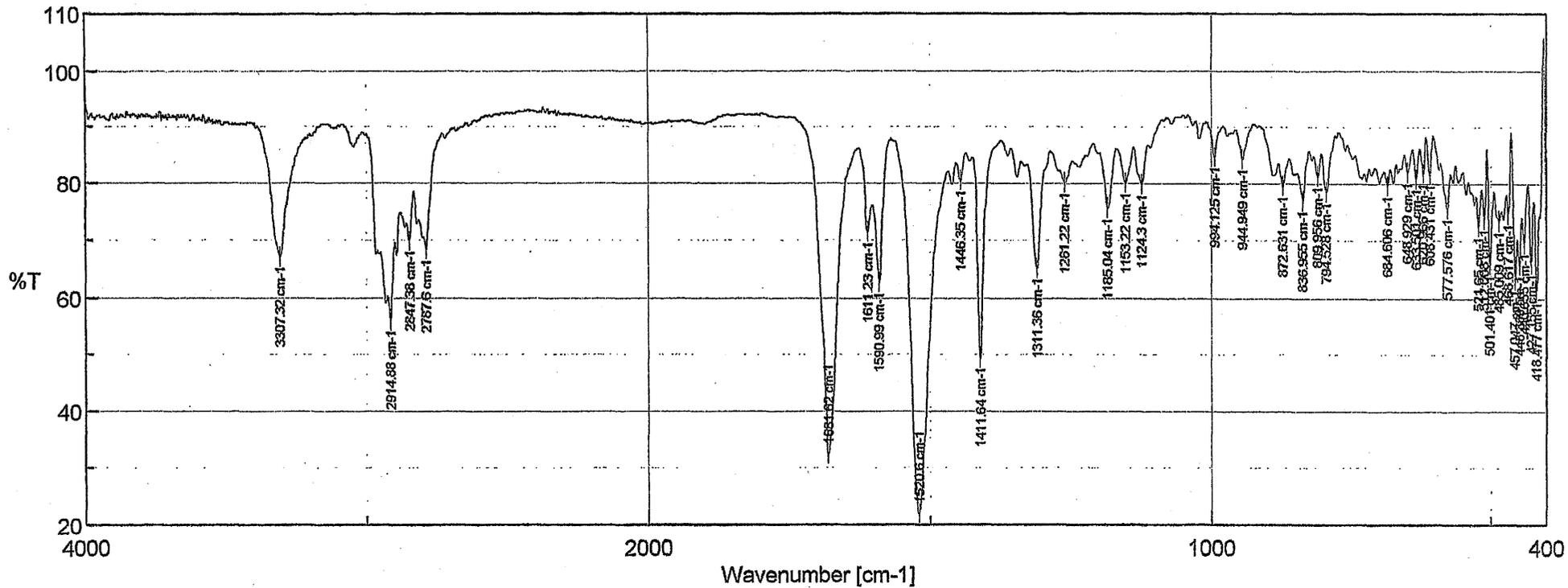
サンプル①



1 PDA Multi 9/254nm 4nm

ピークテーブル

PDA Ch9 254nm 4nm					
ピーク#	保持時間	高さ	高さ%	面積	面積%
1	5.302	3119	0.077	26233	0.048
2	10.809	7388	0.182	42070	0.077
3	11.736	11831	0.291	81416	0.149
4	12.635	3999317	98.340	54009103	99.155
5	16.074	5395	0.133	37427	0.069
6	17.667	16189	0.398	105589	0.194
7	18.136	4695	0.115	29204	0.054
8	20.633	13180	0.324	84570	0.155
9	21.988	4623	0.114	29938	0.055
10	25.542	1083	0.027	23686	0.043
合計		4066820	100.000	54469238	100.000



[コメント情報]

試料名
コメント
測定者
所属
会社

東京化成工業(株)

[データ情報]

作成日時
データタイプ
横軸
縦軸
スタート
エンド
データ間隔
データ数

2013/01/19 13:56
等間隔 データ
Wavenumber [cm-1]
%T
398.193 cm-1
4000.6 cm-1
0.964233 cm-1
3736

[測定情報]

機種名
シリアル番号
光源
検出器

FT/IR-4100typeA
A002261016
第1光源
第1検出器

積算回数

16

分解

4 cm-1

ゼロフィリング

On

アポダイゼーション

Cosine

ゲイン

Auto (16)

アパーチャー

Auto (7.1 mm)

スキャンスピード

Auto (2 mm/sec)

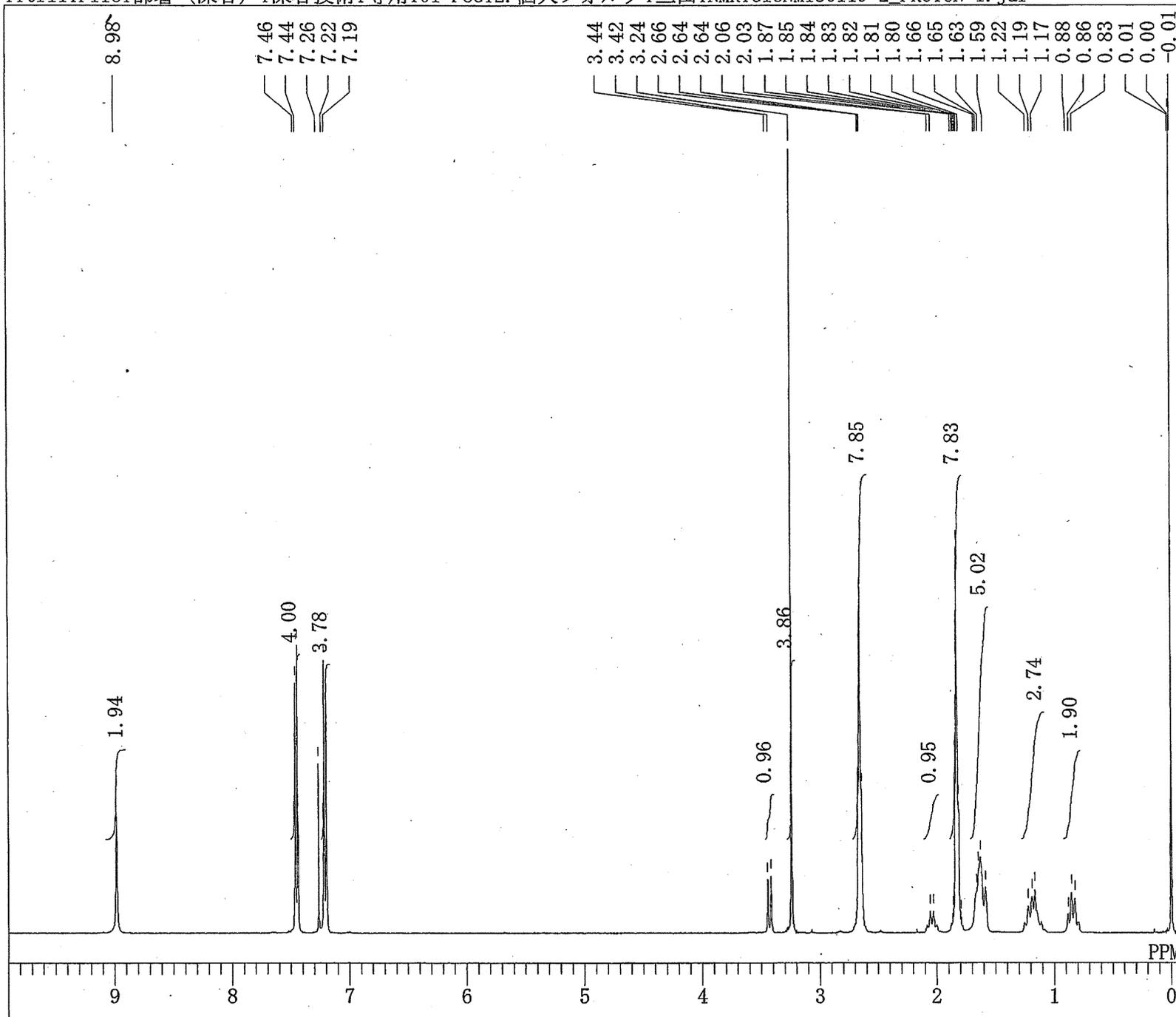
フィルタ

Auto (30000 Hz)

Memory-5

74144

サンプル ①

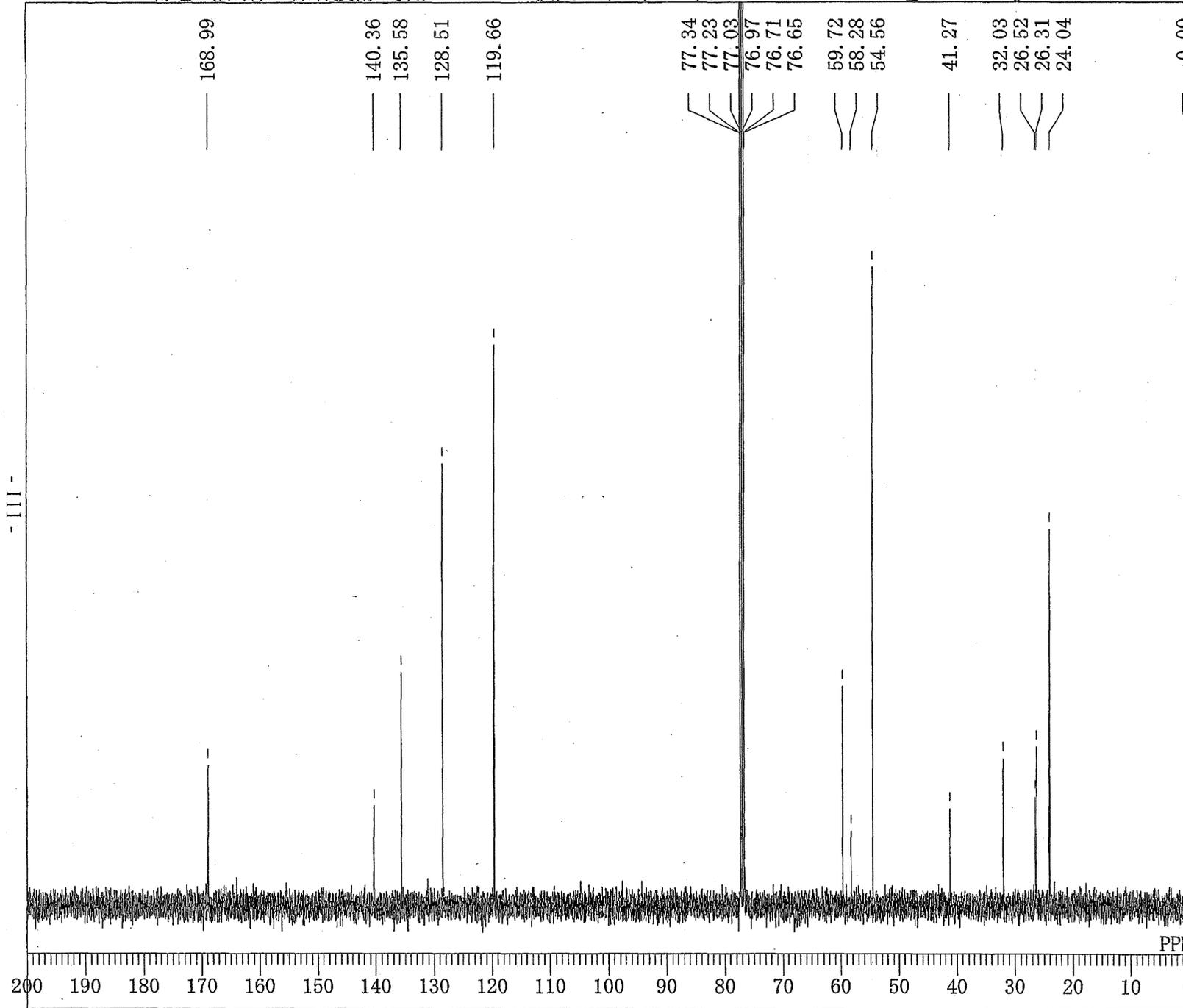


DFILE GI6NM130119-2_PROTON-1. jdf
 COMNT Z4144 (J2FNO) EtOH(Anh)
 DATIM 19-01-2013 10:51:09
 OBNUC 1H
 EXMOD single_pulse.ex2
 OBFRQ 399.78 MHz
 OBSET 4.19 KHz
 OBFIN 7.29 Hz
 POINT 16384
 FREQU 7503.00 Hz
 SCANS 16
 ACQTM 2.1837 sec
 PD 5.0000 sec
 PW1 5.40 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 20.4 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 0.00 ppm
 BF 0.23 Hz
 RGAIN 40

Z4144

7=711 (2)

- 011 -



DFILE GI6NM130119-3 CARBON-1. jdf
 COMNT Z4144 (J2FNO) EtOH(Anh)
 DATIM 19-01-2013 11:06:24
 OBNUC 13C
 EXMOD single_pulse_dec
 OBFREQ 100.53 MHz
 OBSET 5.35 KHz
 OBFIN 5.86 Hz
 POINT 32768
 FREQU 31407.03 Hz
 SCANS 256
 ACQTM 1.0433 sec
 PD 2.0000 sec
 PW1 3.00 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 20.8 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 0.00 ppm
 BF 0.23 Hz
 RGAIN 60

Z4144
 π = 710 ②

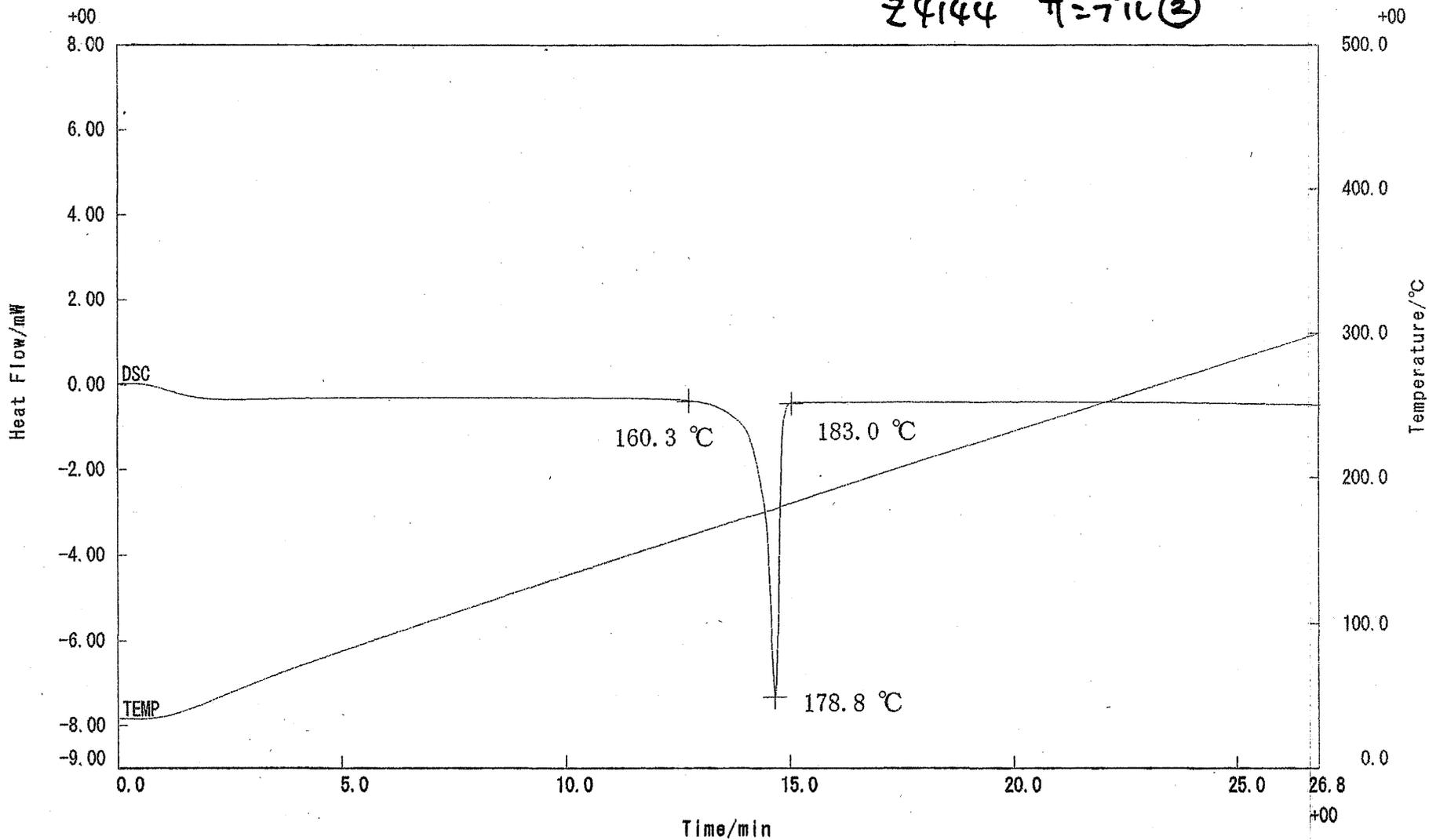
- III -

Nickname : Evo2 DSC8230
Model :
Sample : Z4144 (J2FNO) EtPH(Anh)
Weight : 2.000 mg
Sample Pan : Al
Comments1 :
Comments2 :

Reference : Al2O3
Atmosphere : N2
Rate : 10.0°C/min
Sampling : 1.0 s
Operator :

Directory : C:\TpEvo\Data\J1111*DSC
Meas File : Z4144 (J2FNO) EtOH(An...
Record : 2013/01/19 15:37:23
Print Out : 2013/01/23 11:41:24

Z4144 $\eta = 7.11$ (2)

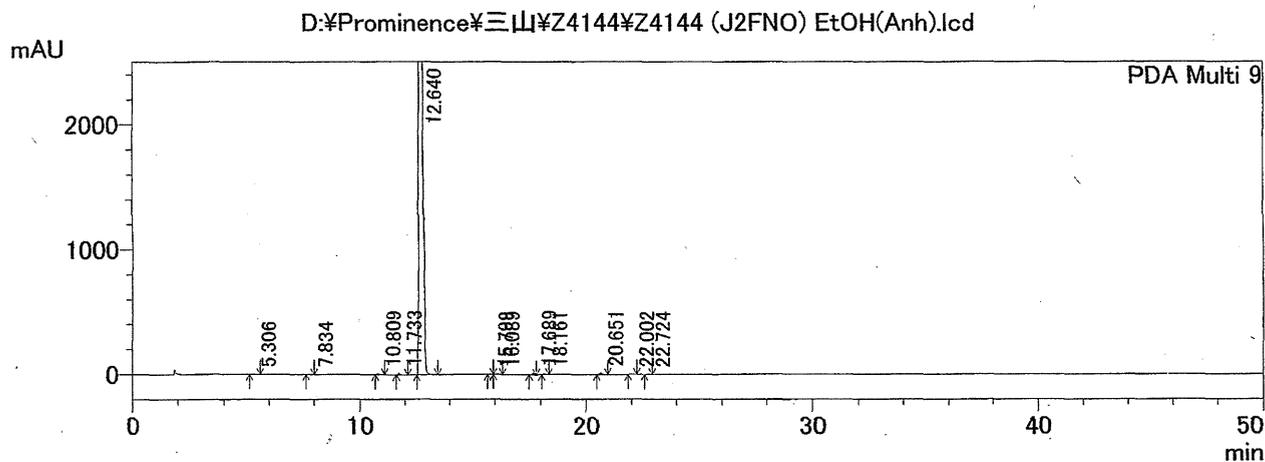


==== Shimadzu LCsolution 分析レポート ====

サンプル名 : Z4144 (J2FNO) EtOH(Anh)
 サンプルID : Z4144 (J2FNO) EtOH(Anh)
 データファイル : Z4144 (J2FNO) EtOH(Anh).lcd
 バッチファイル :
 レポートファイル : Default.lcr
 分析日時 : 2013/01/23 13:06:25
 解析日時 : 2013/01/23 15:50:34

Z4144

サンプル②

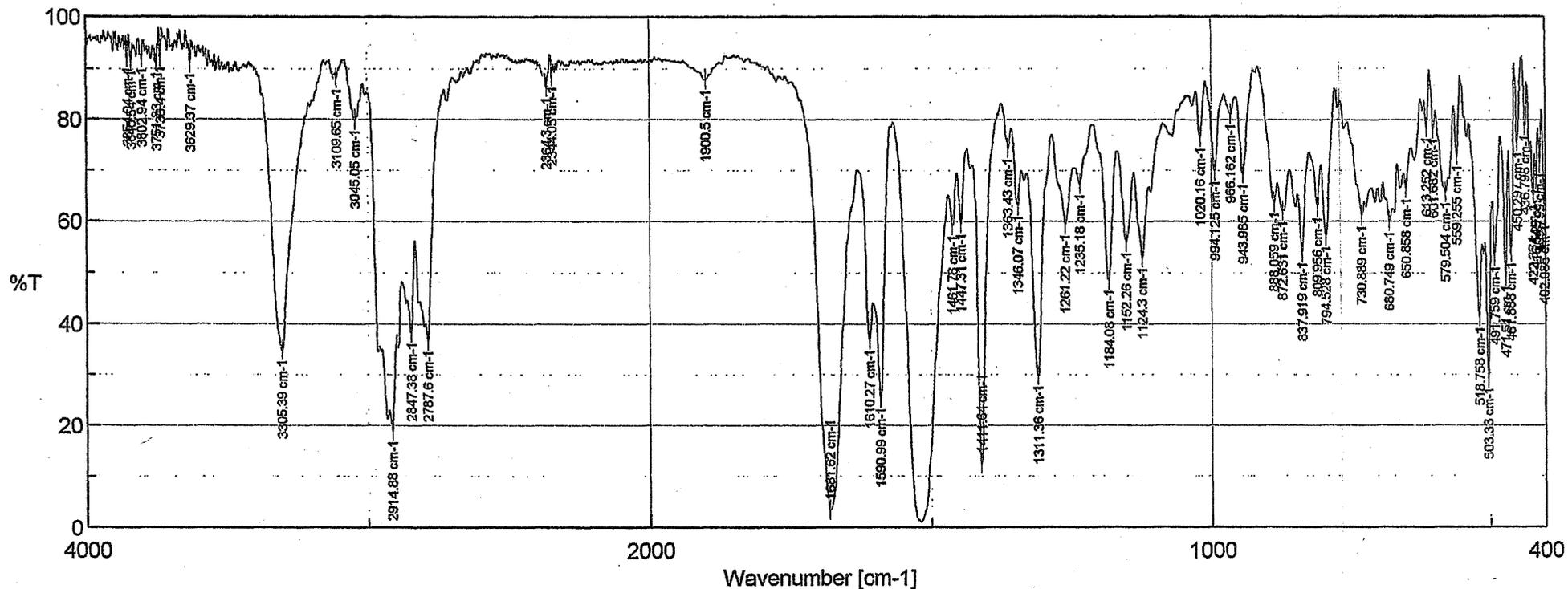


1 PDA Multi 9/254nm 4nm

ピークテーブル

PDA Ch9 254nm 4nm

ピーク#	保持時間	高さ	高さ%	面積	面積%
1	5.306	3191	0.078	26747	0.050
2	7.834	1150	0.028	9102	0.017
3	10.809	8482	0.208	47916	0.089
4	11.733	11880	0.292	81705	0.151
5	12.640	3999459	98.231	53559530	99.124
6	15.799	1882	0.046	11272	0.021
7	16.089	5965	0.146	42299	0.078
8	17.689	16661	0.409	106334	0.197
9	18.161	5241	0.129	32615	0.060
10	20.651	12540	0.308	81651	0.151
11	22.002	4495	0.110	29444	0.054
12	22.724	531	0.013	4438	0.008
合計		4071478	100.000	54033052	100.000



[コメント情報]

試料名
コメント
測定者
所属
会社

東京化成工業(株)

[データ情報]

作成日時 2013/01/19 14:37
データタイプ 等間隔データ
横軸 Wavenumber [cm-1]
縦軸 %T
スタート 399.193 cm-1
エンド 4000.6 cm-1
データ間隔 0.964233 cm-1
データ数 3736

[測定情報]

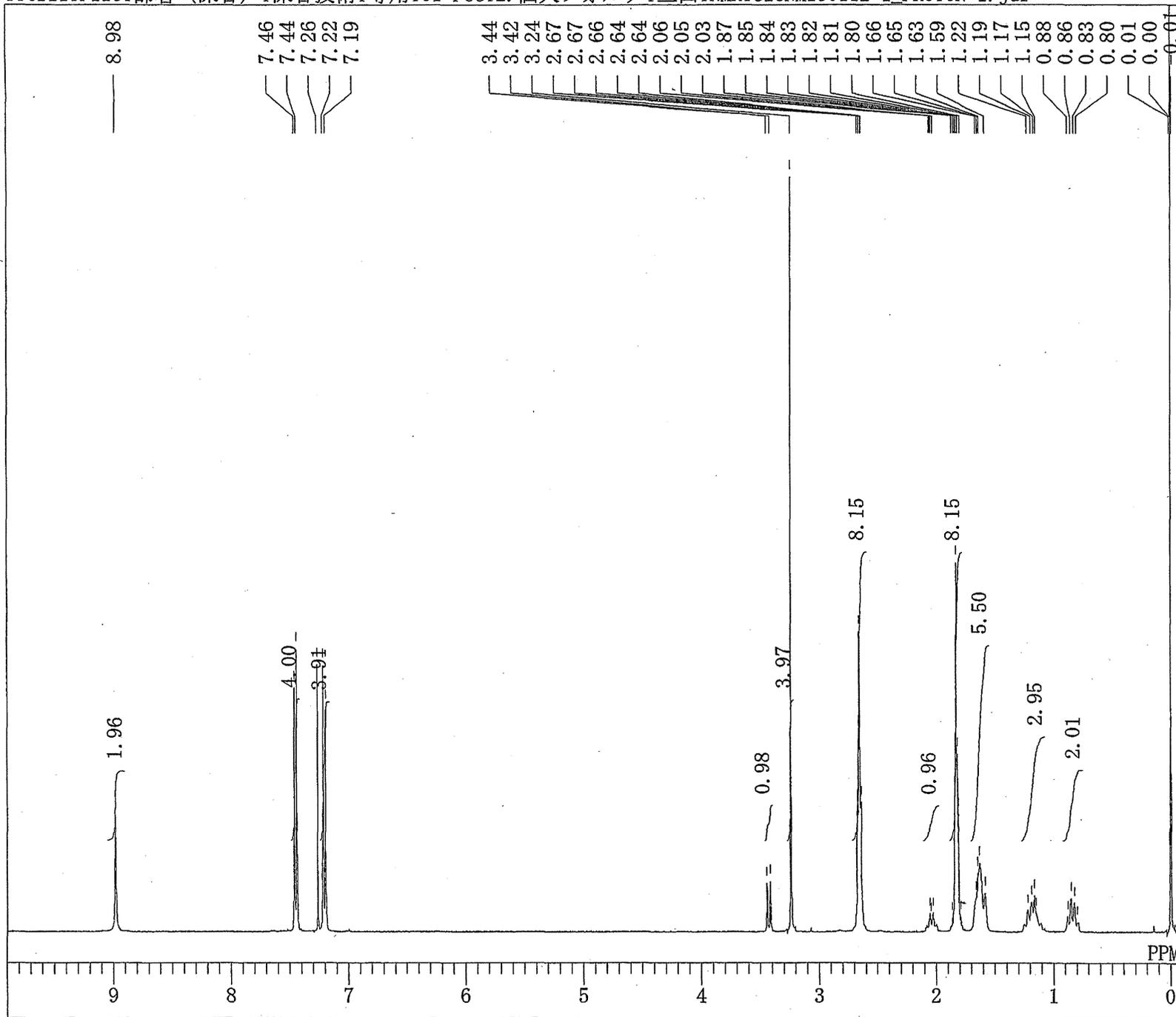
機種名 FT/IR-4100typeA
シリアル番号 A002261016
光源 第1光源
検出器 第1検出器

積算回数 16
分解 4 cm-1
ゼロフィリング On
アポダイゼーション Cosine
ゲイン Auto (16)
アバーチャー Auto (7.1 mm)
スキャンスピード Auto (2 mm/sec)
フィルタ Auto (30000 Hz)

Memory-2

24144 #710 ②

DFILE GI6NM130112-1_PROTON-1. jdf
 COMINT Z4144 Exp55 EtOH(IPA)
 DATIM 12-01-2013 10:54:50
 OBNUC 1H
 EXMOD single_pulse.ex2
 OBFREQ 399.78 MHz
 OBSET 4.19 KHz
 OBFIN 7.29 Hz
 POINT 16384
 FREQU 7503.00 Hz
 SCANS 16
 ACQTM 2.1837 sec
 PD 5.0000 sec
 PW1 5.40 usec
 IRNUC 1H
 CTEMP 20.8 c
 SLVNT CDCL3
 EXREF 0.00 ppm
 BF 0.23 Hz
 RGAIN 44



Z4144

11-711(3)