

DFILE GI6NM130123-1 CARBON-1. jdf  
 COMNT Z4144 Exp55 EtOH(IPA)  
 DATIM 23-01-2013 17:00:43  
 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

- 911 -

Z4144

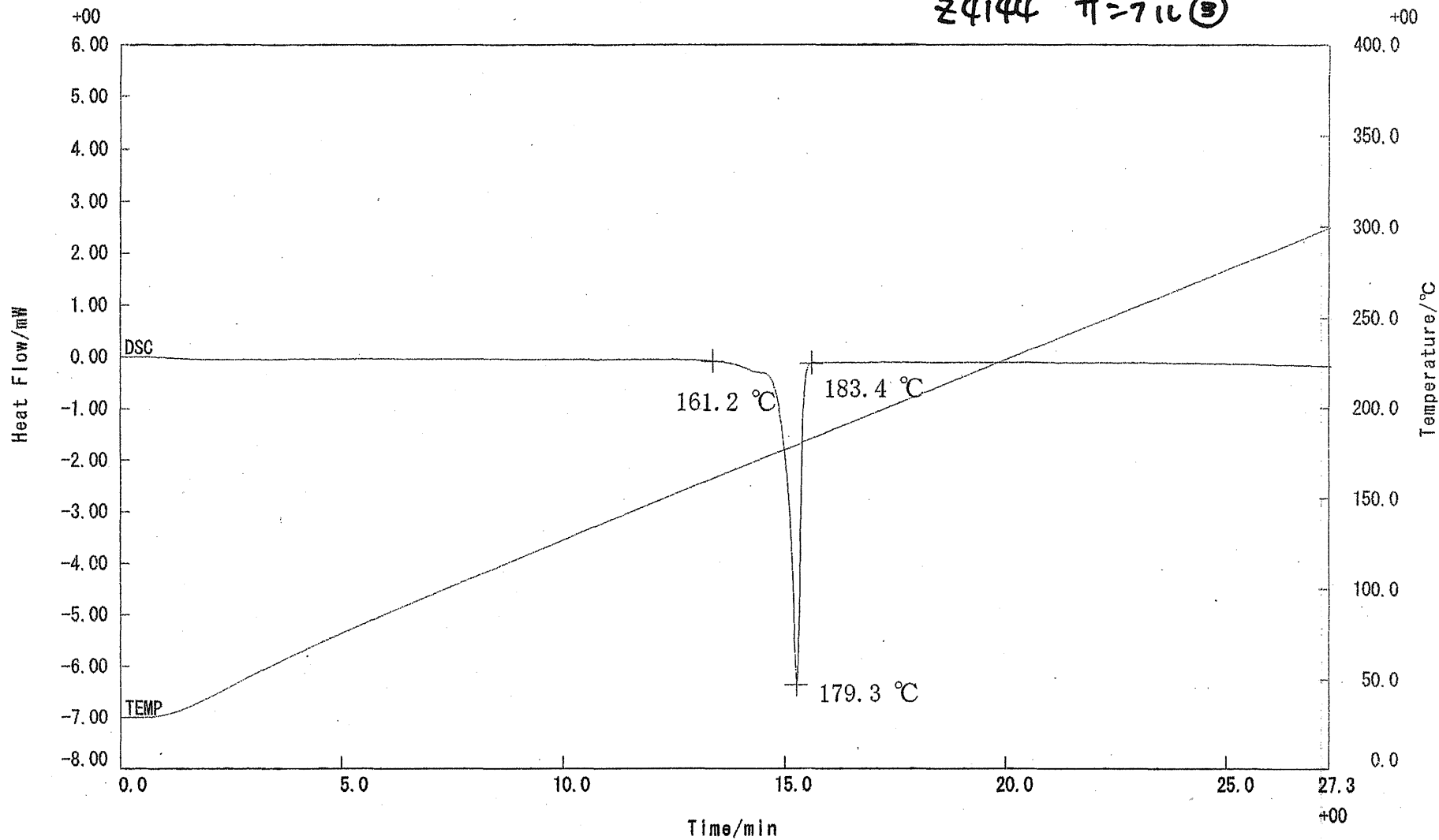
η=7.10③

Nickname : Evo2 DSC8230  
Model :  
Sample : Z4144Exp55 EtOH(IPA)-2  
Weight : 2.000 mg  
Sample Pan : Al  
Comments1 :  
Comments2 :

Reference : A1203  
Atmosphere : N2  
Rate : 10.0°C/min  
Sampling : 1.0 s  
Operator :

Directory : C:\TpEvo\Data\三山\Z4144  
Meas File : Z4144 Exp55 EtOH(IPA)...  
Record : 2013/01/12 14:31:50  
Print Out : 2013/01/23 11:48:42

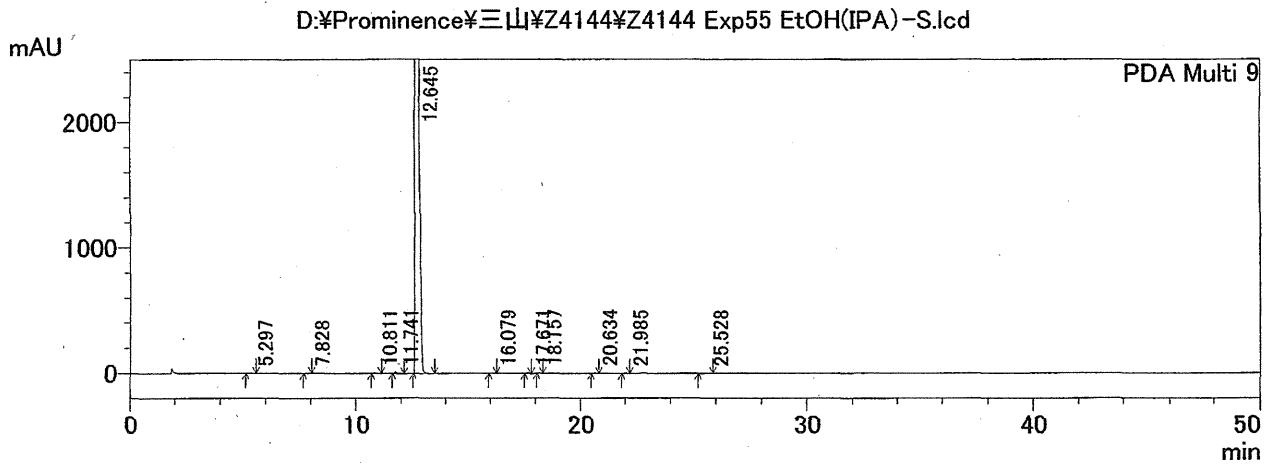
Z4144 #711 (3)



# ==== Shimadzu LCsolution 分析レポート ====

サンプル名 : Z4144 Exp55 EtOH(IPA)-S  
 サンプルID : Z4144 Exp55 EtOH(IPA)-S  
 データファイル : Z4144 Exp55 EtOH(IPA)-S.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 11:51:28  
 解析日時 : 2013/01/23 15:52:46

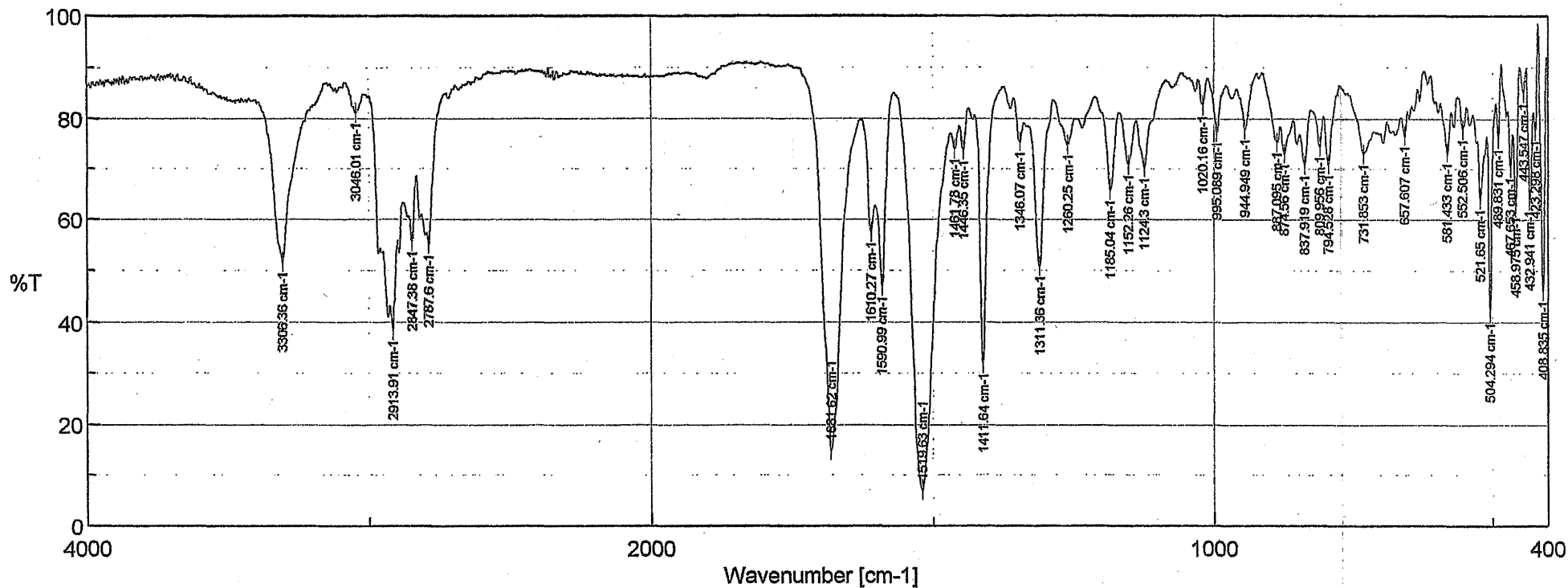
24144  
 #=710③



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	5.297	3132	0.077	26189	0.049
2	7.828	605	0.015	4783	0.009
3	10.811	4557	0.113	26499	0.049
4	11.741	11545	0.286	78960	0.147
5	12.645	3998997	98.921	53448027	99.433
6	16.079	2324	0.057	14428	0.027
7	17.671	10653	0.264	72334	0.135
8	18.157	5068	0.125	30259	0.056
9	20.634	3160	0.078	20555	0.038
10	21.985	1563	0.039	10299	0.019
11	25.528	1017	0.025	20294	0.038
合計		4042621	100.000	53752627	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 14:04  
等間隔 データ  
Wavenumber [cm-1]  
%T  
399.193 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)

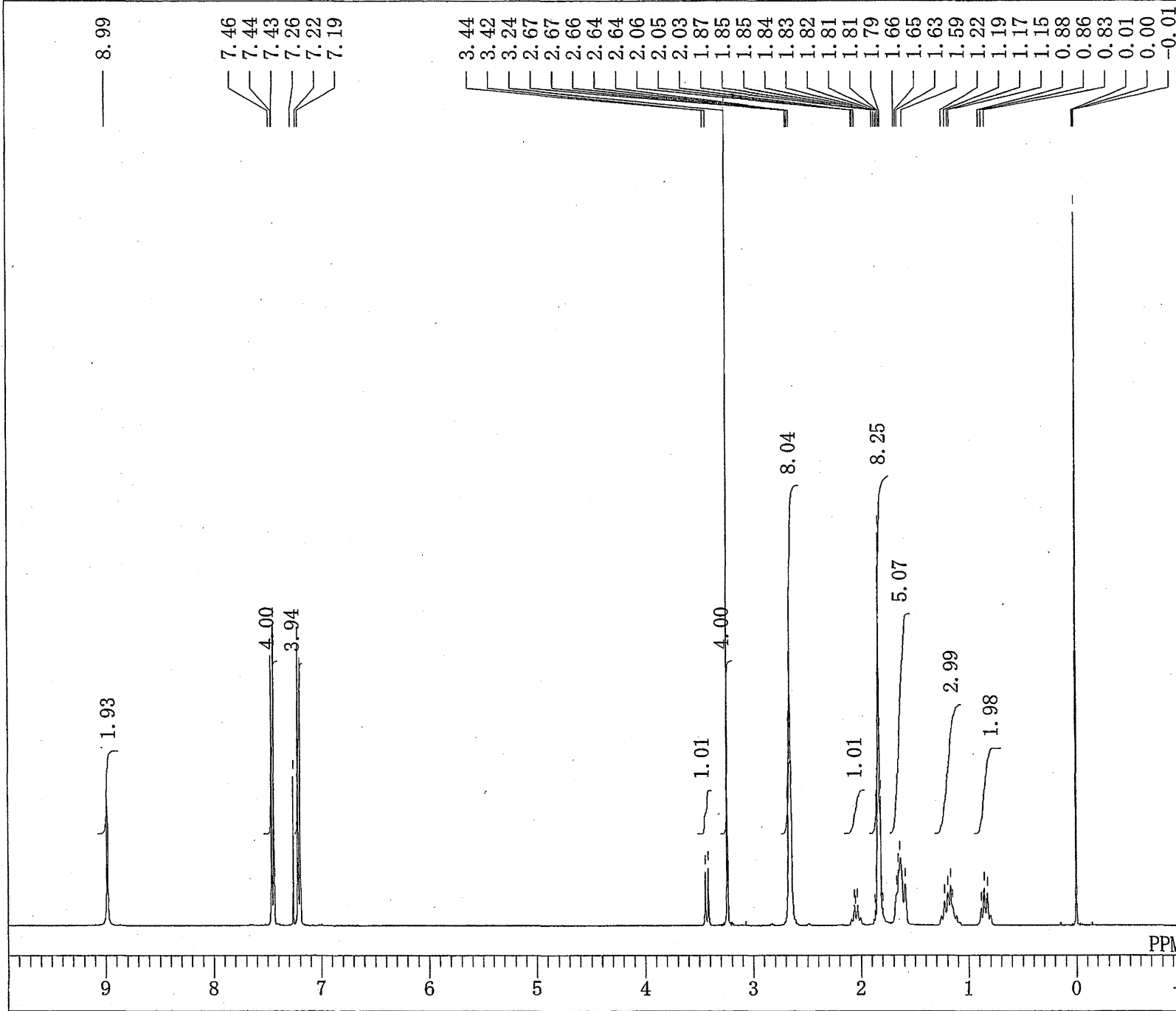
フィルタ

Auto (30000 Hz)

Memory-2

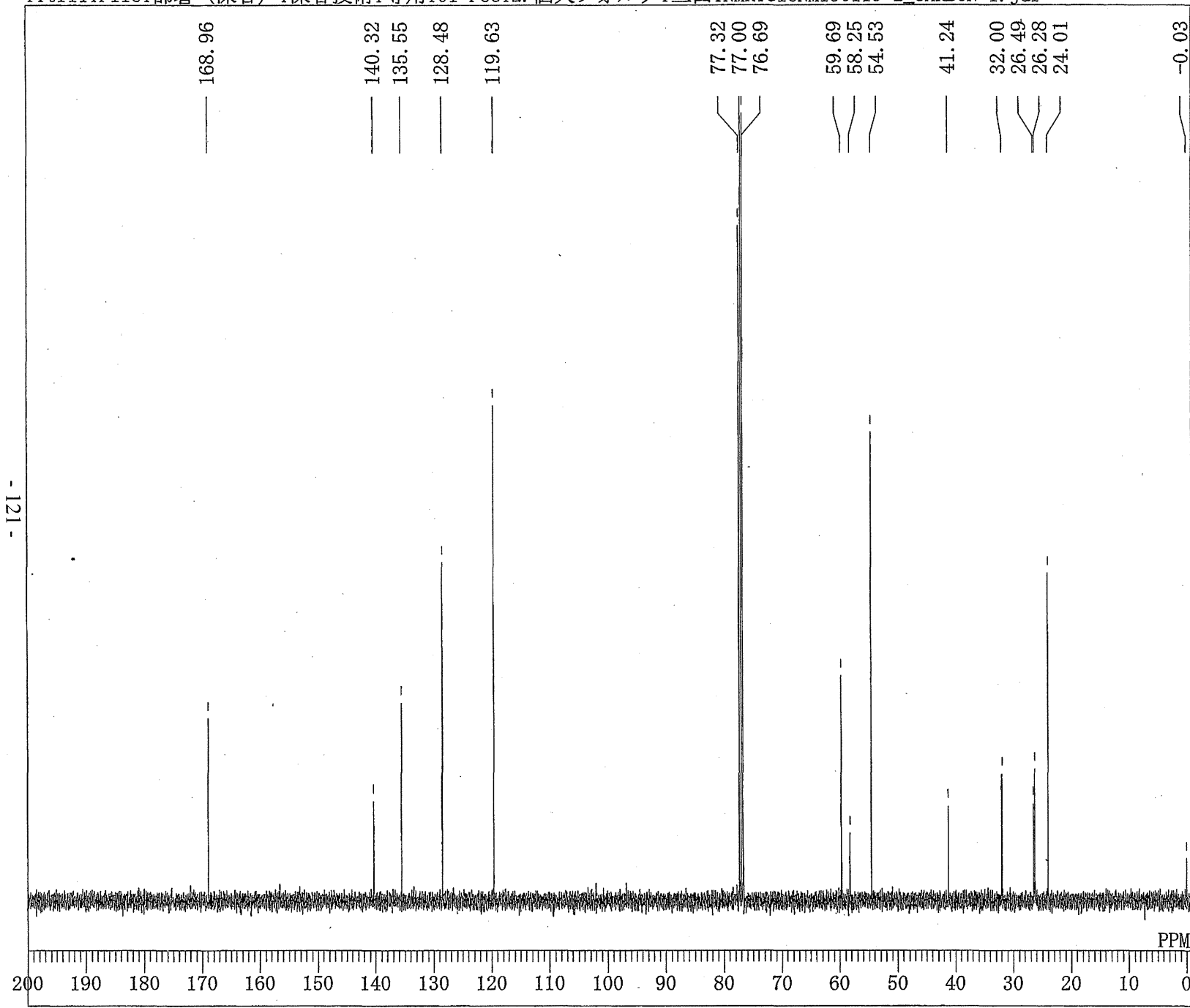
74144 7=700③

DFILE GI6NM130119-3\_PROTON-1. jdf  
 COMNT Z4144 Exp55 EtOH(Anh) +  
 DATIM 19-01-2013 09:51:06  
 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 20.6 c  
 SLVNT CDCL3  
 EXREF 0.00 ppm  
 BF 0.23 Hz  
 RGAIN 40



- 120 -

Z4144  
 サンプル④



DFILE GI6NM130119-2\_CARBO-1. jdf  
 COMNT Z4144 Exp55 EtOH(Anh)  
 DATIM 19-01-2013 11:27:54  
 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 77.00 ppm  
 BF 0.23 Hz  
 RGAIN 60

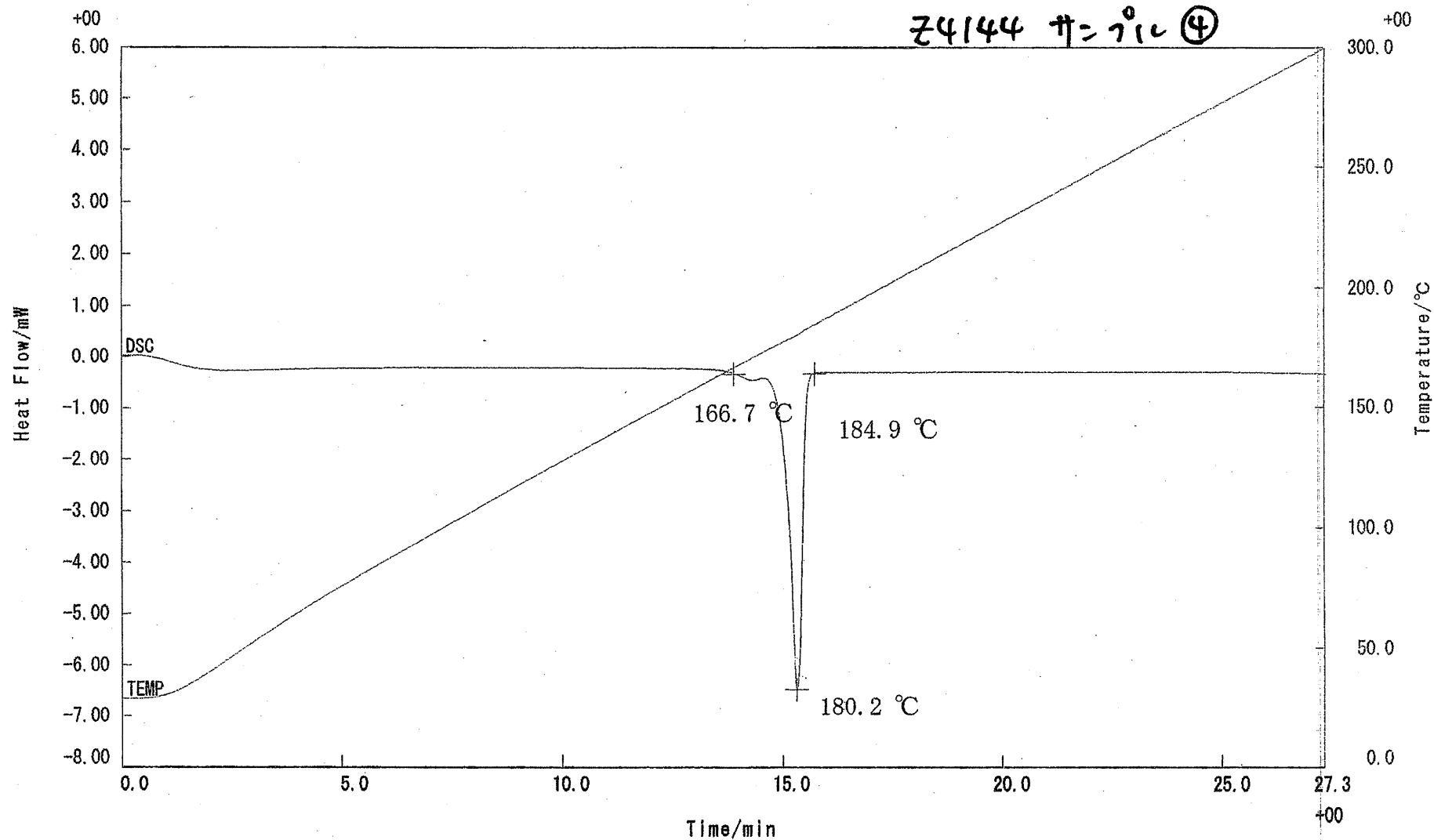
Z4144

サニール ④

Nickname : Evo2 DSC8230  
Model :  
Sample : Z4144 Exp55 EtPH (Anh)  
Weight : 1.700 mg  
Sample Pan : Al  
Comments1 :  
Comments2 :

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

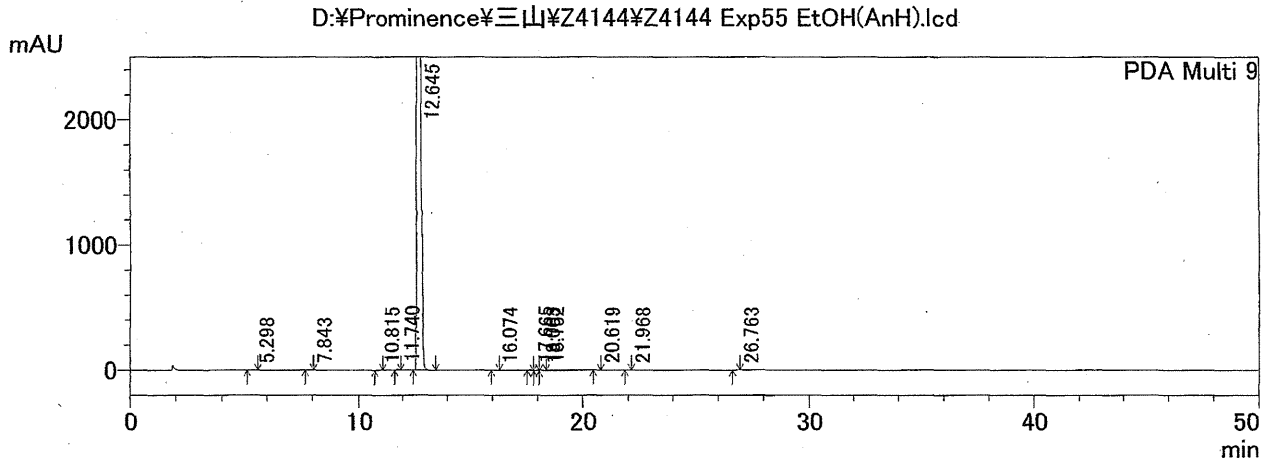
Directory : C:\TpEvo\Data\三山\Z4144  
Meas File : Z4144 Exp55 EtOH (Anh) ...  
Record : 2013/01/19 12:46:05  
Print Out : 2013/01/23 11:44:13



# ==== Shimadzu LCsolution 分析レポート ====

サンプル名 : Z4144 Exp55 EtOH(AnH)  
 サンプルID : Z4144 Exp55 EtOH(AnH)  
 データファイル : Z4144 Exp55 EtOH(AnH).lcd  
 バッチファイル :  
 レポートファイル : Default.lcr  
 分析日時 : 2013/01/19 16:04:38  
 解析日時 : 2013/01/22 10:24:22

Z4144

 $\eta = 1.0 \text{ dl/g}$ 


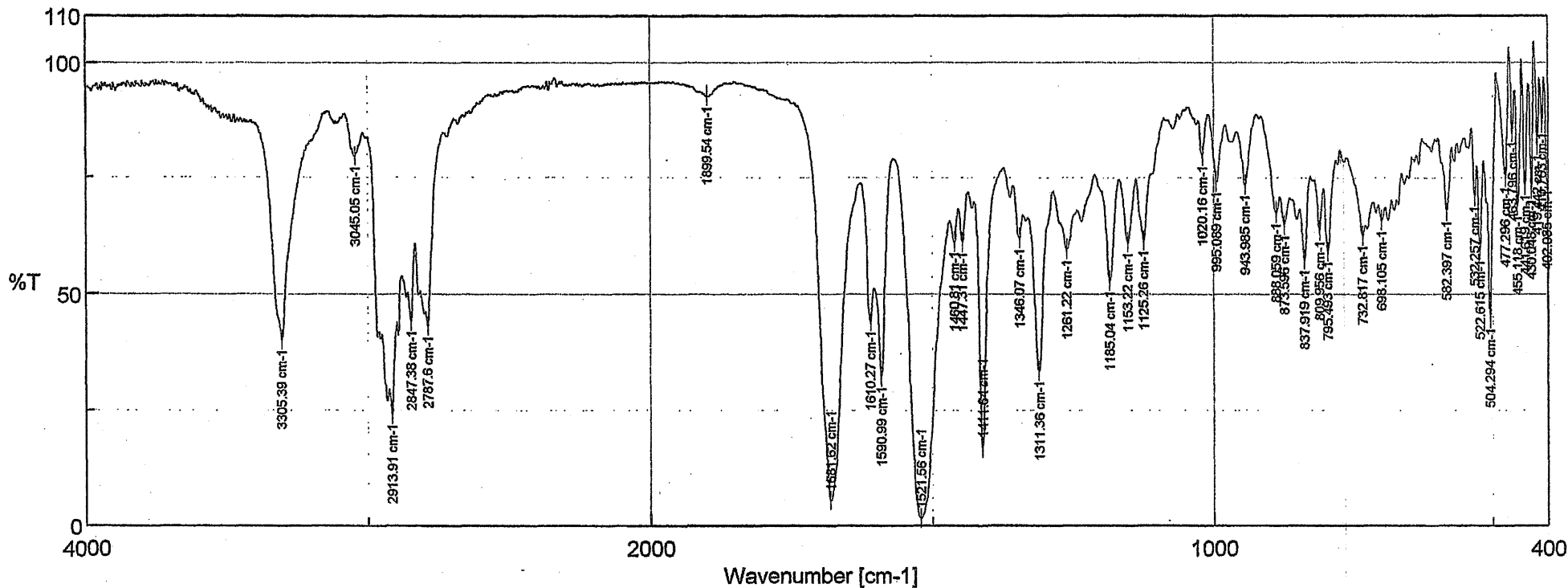
1 PDA Multi 9/254nm 4nm

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	5.298	3127	0.077	26408	0.049
2	7.843	597	0.015	4821	0.009
3	10.815	4707	0.116	26983	0.050
4	11.740	10633	0.263	58119	0.109
5	12.645	3999608	98.789	53131419	99.348
6	16.074	2163	0.053	13496	0.025
7	17.665	10669	0.264	72020	0.135
8	18.003	4890	0.121	48466	0.091
9	18.152	7419	0.183	66425	0.124
10	20.619	3171	0.078	20685	0.039
11	21.968	1532	0.038	9885	0.018
12	26.763	120	0.003	1111	0.002
合計		4048637	100.000	53479840	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 14:29  
 等間隔 データ  
 Wavenumber [cm-1]  
 %T  
 399.193 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  
 分解  
 ゼロフィリング  
 アポダイゼーション  
 ゲイン  
 アパーチャー  
 スキャンスピード  
 フィルタ

16  
 4 cm-1  
 On  
 Cosine  
 Auto (16)  
 Auto (7.1 mm)  
 Auto (2 mm/sec)  
 Auto (30000 Hz)

Memory-2

24144  
 サンプル ④

## 測定結果報告書

発行年月日 平成25年02月13日

ご報告先：岐阜大学大学院 連合創薬医療情報研究科 殿


 受注番号：201038  
 島津テクノリサーチ

〒604-8436 京都市中京区西ノ京下合町1

Phone (075)811-3181

FAX (075)821-7837

測定結果を下記のとおり報告します。

件名 粉末 X 線回折

ご依頼者：岐阜大学大学院 連合創薬医療情報研究科  
 試験名：粉末 X 線測定  
 測定方法：下記のとおり，粉末 X 線回折測定 (n=1) を実施した。  
 測定結果：別紙参照

## 測定概要

使用機器：XRD-6100 (島津製作所)

## 検体

Lot No.	Z4144①
	Z4144②
	Z4144③
	Z4144④
	QWAUD

## 測定条件

X 線管球	Cu
管電圧	40 kV
管電流	30 mA
測定範囲	5.000~60.000 度
ステップ幅	0.02 度
計数時間	0.30 秒
ゴニオメーターの駆動軸	$\theta$ - $2\theta$
ダイバージェンス	1.00 度
スキャタリング	1.00 度
レシーピング	0.30 mm

※試料ホルダーは硬質ガラス製ホルダーを使用した。

以下余白

承認	確認	作成

\*\*\* マルチプロット \*\*\*

ファイル名 : 201038①

サンプル名 : Lot No. Z4144①

コメント : Lot No. Z4144①

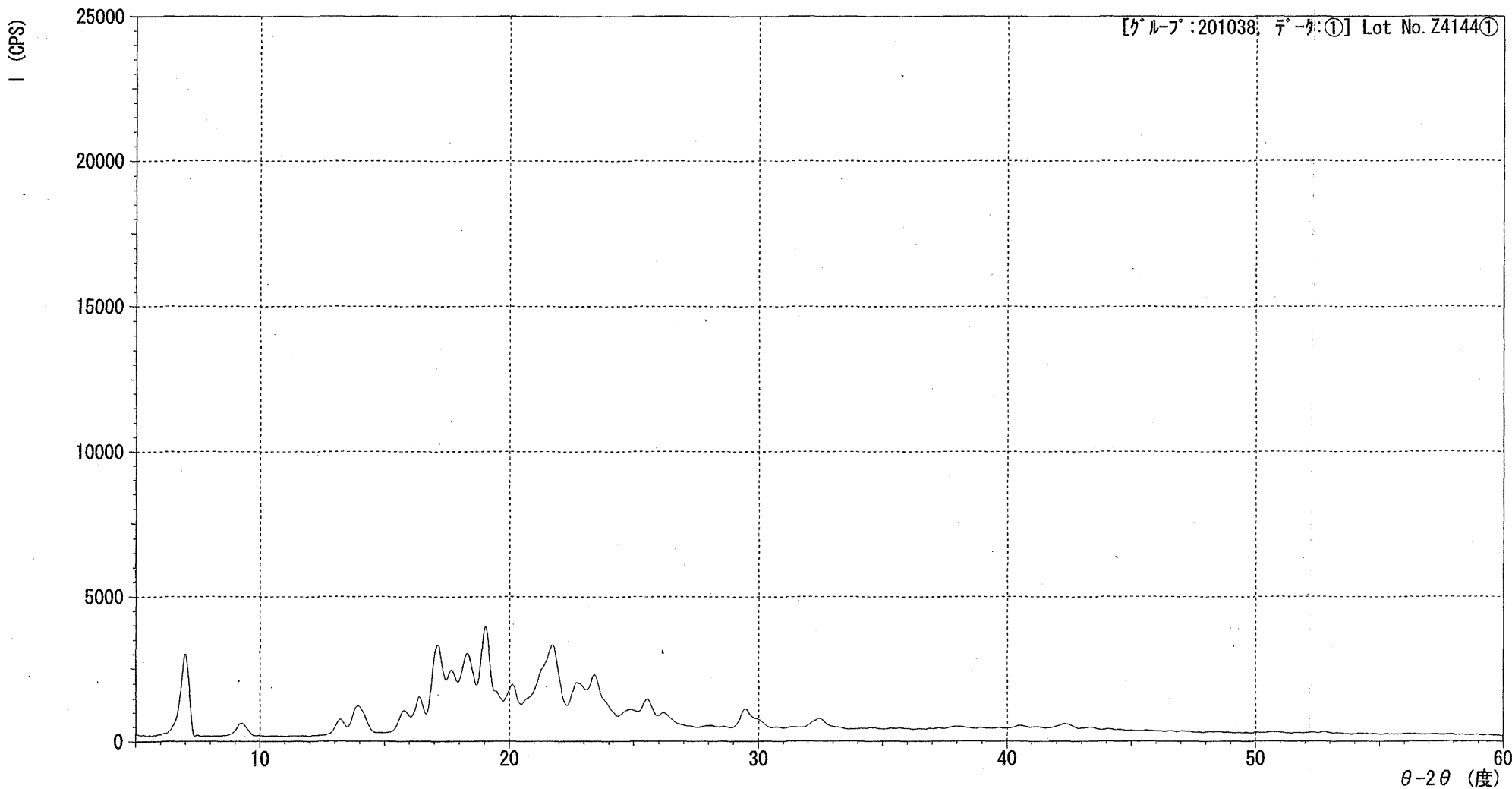
分析日時 : 13-02-13 10:32:52

分析条件

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 : 1.00 度 SS : 1.00 度 RS : 0.30 mm



\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

グループ : 201038  
 データ : ①

# 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	11	19.0149	4.66351	100	0.41240	600	13319
2	2	6.9760	12.66118	95	0.37720	570	10794
3	8	17.1000	5.18119	87	0.48000	520	16087

# ピークデータリスト

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		6.4400	13.71372	9	0.29000	51	1641
2		6.9760	12.66118	95	0.37720	570	10794
3		9.2588	9.54400	15	0.46630	89	2430
4		13.2133	6.69521	18	0.42670	105	2382
5		13.9573	6.33994	33	0.58540	197	5771
6		15.7990	5.60479	19	0.46200	115	2575
7		16.3691	5.41085	31	0.35820	188	3410
8		17.1000	5.18119	87	0.48000	520	16087
9		17.6400	5.02378	54	0.00000	326	0
10		18.2800	4.84931	71	0.65460	428	16749
11		19.0149	4.66351	100	0.41240	600	13319
12		19.5000	4.54858	23	0.00000	138	0
13		20.0680	4.42110	30	0.46100	182	5205
14		20.7200	4.28343	15	0.46000	89	2252
15		21.2000	4.18752	42	0.50800	253	5841
16		21.7000	4.09215	76	0.57260	455	12241
17		22.6800	3.91750	35	0.43000	208	5256
18		23.3800	3.80177	45	0.56000	268	7757
19		23.9600	3.71103	11	0.24000	68	1213
20		24.8400	3.58152	10	0.59000	61	1831
21		25.5180	3.48788	26	0.45890	154	3254
22		26.1750	3.40180	12	0.55000	69	2037
23		29.5155	3.02395	22	0.56890	134	3302
24		29.9600	2.98009	11	0.43000	65	1442
25		32.3850	2.76226	12	0.61000	72	2709
26		37.9700	2.36782	3	0.60000	20	733
27		40.5075	2.22515	4	0.37500	22	630
28		42.3006	2.13488	7	0.65470	40	1455
29		43.2966	2.08805	3	0.32670	19	428

\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

# データ情報

グループ : 201038  
 データ : ①  
 サンプル名 : Lot No. Z4144①  
 コメント : Lot No. Z4144①  
 日付 & 時刻 : 13-02-13 10:32:52

# 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 : 1.00 (度)  
 スキャリング : 1.00 (度)  
 レシービング : 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 : 25  
 バックグラウンド除去 : [ 自動 ]  
 サンプル間隔 : 29  
 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 : 23  
 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 : 201038#②

サンプル名 : Lot No. Z4144②

コメント : Lot No. Z4144②

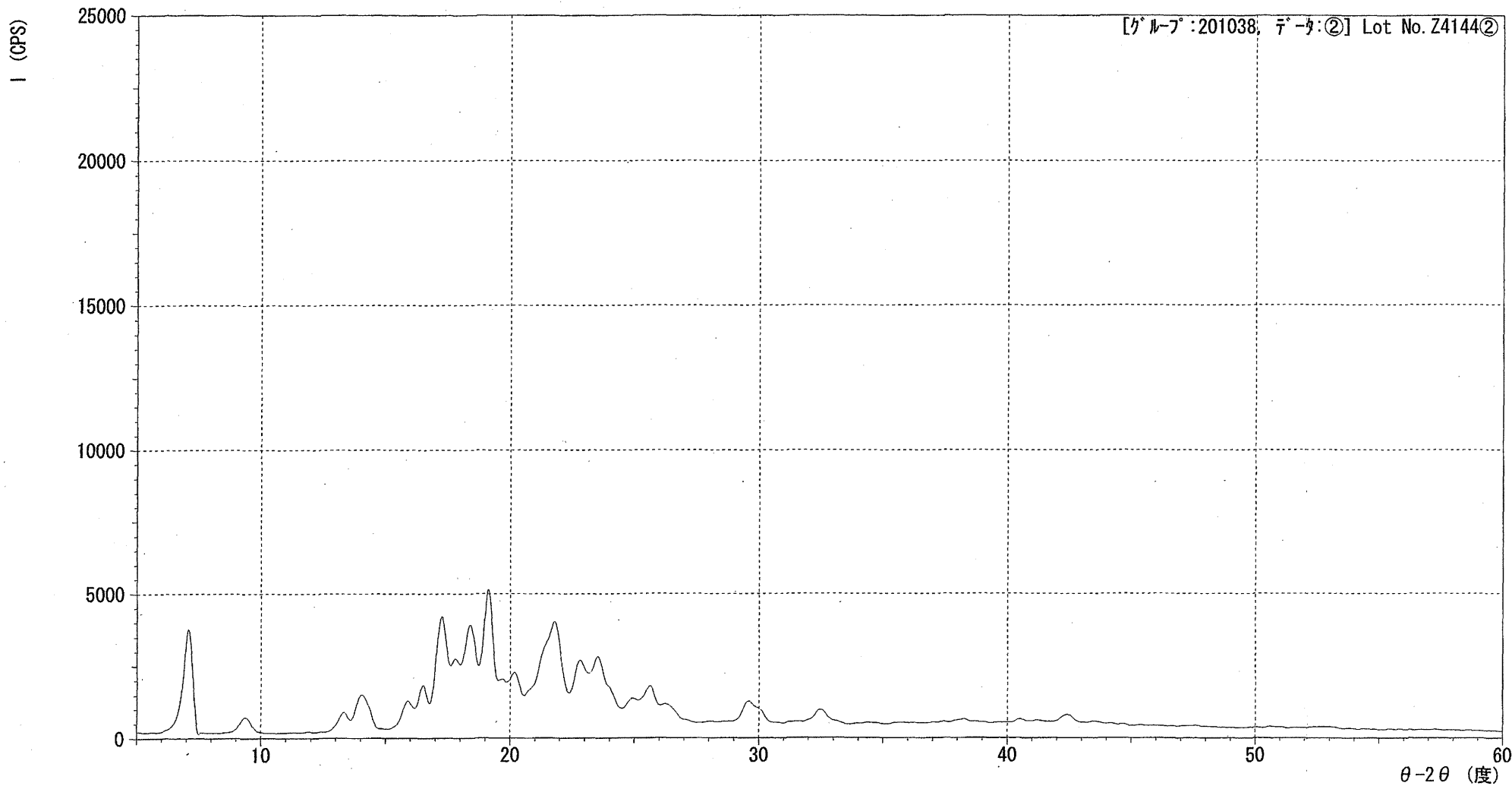
分析日時 : 13-02-13 11:27:46

分析条件

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 : 1.00 度 SS : 1.00 度 RS : 0.30 mm



\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

グループ : 201038  
データ : ②

#	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	10		19.0933	4.64454	100	0.44300	811	19401
2	1		7.0596	12.51144	89	0.40940	723	16840
3	7		17.2588	5.13387	84	0.55320	678	20560

#	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			7.0596	12.51144	89	0.40940	723	16840
2			9.3623	9.43872	13	0.49810	109	3168
3			13.3400	6.63190	16	0.56000	128	3383
4			14.0634	6.29235	30	0.63970	244	7478
5			15.8400	5.59038	18	0.36800	149	3165
6			16.4771	5.37563	28	0.39830	229	4878
7			17.2588	5.13387	84	0.55320	678	20560
8			17.7600	4.99010	45	0.00000	362	0
9			18.3800	4.82315	71	0.63280	578	21128
10			19.0933	4.64454	100	0.44300	811	19401
11			19.6600	4.51192	22	0.00000	178	0
12			20.1400	4.40546	26	0.48000	214	6569
13			20.8000	4.26714	12	0.55000	100	2786
14			21.3000	4.16809	45	0.48660	366	7195
15			21.7400	4.08471	70	0.62620	565	15449
16			22.7800	3.90052	38	0.48480	307	8540
17			23.5200	3.77945	43	0.56800	346	10230
18			24.1000	3.68979	12	0.24440	100	1891
19			24.8800	3.57585	11	0.42660	88	2071
20			25.5566	3.48270	24	0.58180	193	4893
21			26.2400	3.39352	11	0.73720	92	3411
22			29.5400	3.02150	18	0.49340	150	4685
23			30.1000	2.96655	9	0.22660	77	1436
24			32.0200	2.79291	3	0.32000	25	697
25			32.4675	2.75543	12	0.53500	95	2709
26			38.0950	2.36034	4	0.55000	29	1233
27			40.5133	2.22485	4	0.40000	29	969
28			42.3500	2.13251	8	0.60660	61	2345
29			43.4950	2.07899	3	0.43000	25	856

\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

# データ情報  
 グループ : 201038  
 データ : ②  
 サンプル名 : Lot No. Z4144②  
 コメント : Lot No. Z4144②  
 日付 & 時刻 : 13-02-13 11:27:46

# 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 : 1.00 (度)  
 スキャリング : 1.00 (度)  
 レジピンング : 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 : 27  
 バックグラウンド除去 : [ 自動 ]  
 サンプル間隔 : 29  
 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 : 23  
 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 : 201038③

サンプル名 : Lot No. Z4144③

コメント : Lot No. Z4144③

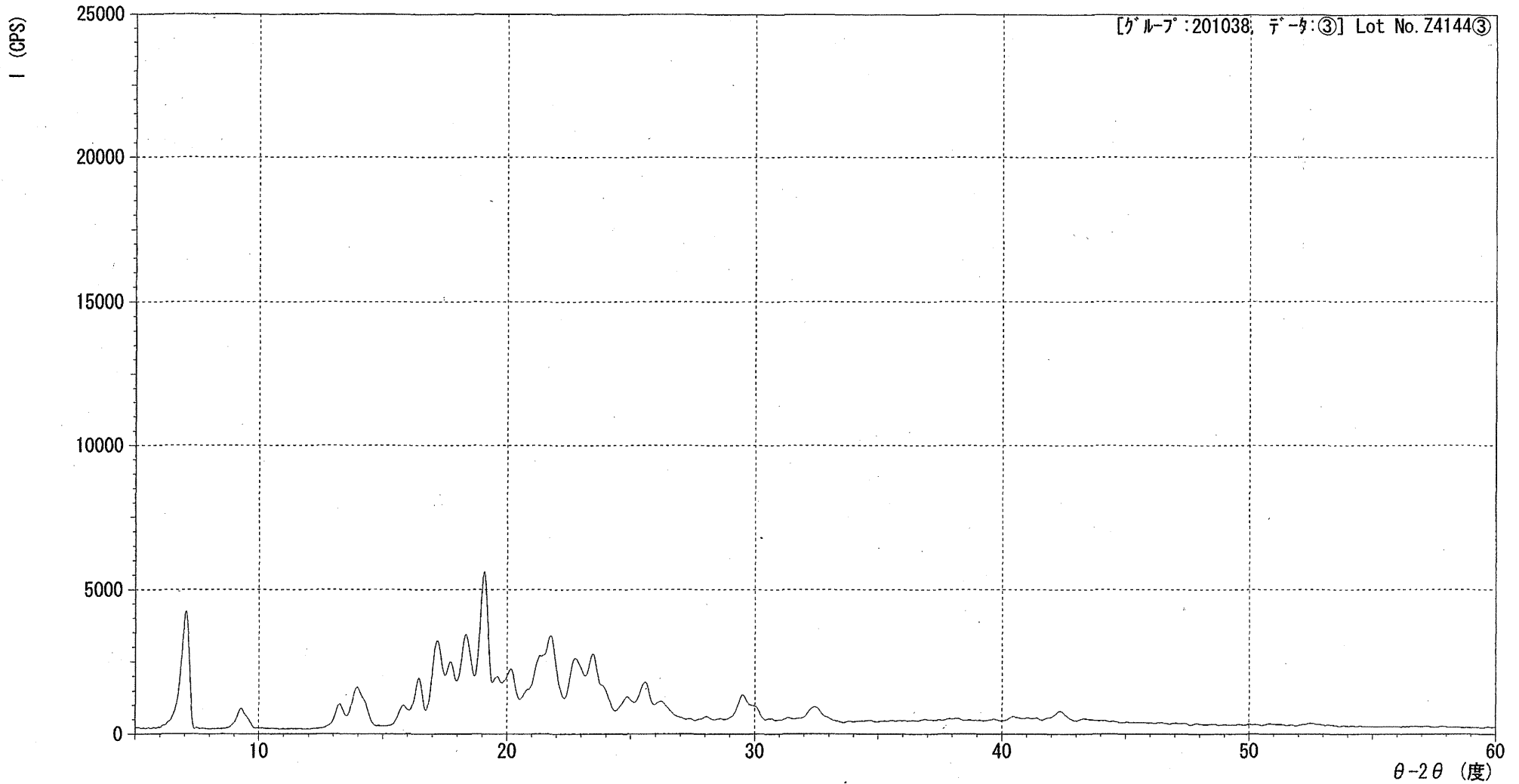
分析日時 : 13-02-13 11:52:16

分析条件

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 : 1.00 度 SS : 1.00 度 RS : 0.30 mm



\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

グループ : 201038  
 データ : ③

# 3 強線

番号	ピーク 番号	2θ (度)	d (Å)	I/I <sub>1</sub>	半価幅 (度)	強度 (Counts)	積分強度 (Counts)
1	11	19.0530	4.65428	100	0.35480	911	18691
2	2	7.0140	12.59267	89	0.36660	814	15654
3	10	18.3268	4.83703	53	0.47700	479	15071

# ピークデータリスト

番号	ピーク 番号	2θ (度)	d (Å)	I/I <sub>1</sub>	半価幅 (度)	強度 (Counts)	積分強度 (Counts)
1		6.3800	13.84255	5	0.29340	50	1805
2		7.0140	12.59267	89	0.36660	814	15654
3		9.3227	9.47873	16	0.47890	143	3675
4		13.2722	6.66563	18	0.42890	162	3685
5		14.0173	6.31294	30	0.64230	275	8591
6		15.8388	5.59080	11	0.41580	97	2029
7		16.4162	5.39543	28	0.32580	254	4138
8		17.1989	5.15162	52	0.47640	474	13578
9		17.7000	5.00688	34	0.00000	312	0
10		18.3268	4.83703	53	0.47700	479	15071
11		19.0530	4.65428	100	0.35480	911	18691
12		19.6000	4.52560	18	0.00000	166	0
13		20.1400	4.40546	23	0.31500	214	5943
14		20.8000	4.26714	8	0.31280	75	1291
15		21.3000	4.16809	35	0.51060	318	7236
16		21.7400	4.08471	50	0.48000	454	10472
17		22.7200	3.91069	35	0.43100	318	8123
18		23.4400	3.79217	40	0.50400	368	10230
19		24.0200	3.70190	12	0.22500	106	1950
20		24.8200	3.58436	12	0.39500	109	2440
21		25.5216	3.48739	25	0.48330	224	4953
22		26.1400	3.40628	11	0.78660	104	3928
23		28.0291	3.18085	4	0.27170	32	492
24		29.6460	3.01094	20	0.74800	182	5287
25		30.0800	2.96848	10	0.21780	87	1061
26		32.4091	2.76027	11	0.62970	99	3413
27		32.9400	2.71698	3	0.24000	29	583
28		40.4983	2.22564	4	0.46330	36	1394
29		42.3000	2.13491	8	0.49000	70	2391

\*\*\* 基本データ処理 \*\*\*

# データ情報

グループ : 201038  
 データ : ③  
 サンプル名 : Lot No. Z4144③  
 コメント : Lot No. Z4144③  
 日付 & 時刻 : 13-02-13 11:52:16

# 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 : 1.00 (度)  
 スキャタリング : 1.00 (度)  
 レシービング : 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 : 21  
 バックグラント除去 : [ 自動 ]  
 サプリング間隔 : 23  
 繰り返し回数 : 30  
 Kal-a2 分離 : [ 手動 ]  
 Kal-a2 比 : 50 (%)  
 ピークサーチ : [ 自動 ]  
 微分点数 : 19  
 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 : 201038④  
サンプル名 : Lot No. Z4144④  
分析日時 : 13-02-13 12:09:08  
分析条件

コメント : Lot No. Z4144④

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 : 1.00 度 SS : 1.00 度 RS : 0.30 mm

