

DFILE GI6NM130119-2 CARBON-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

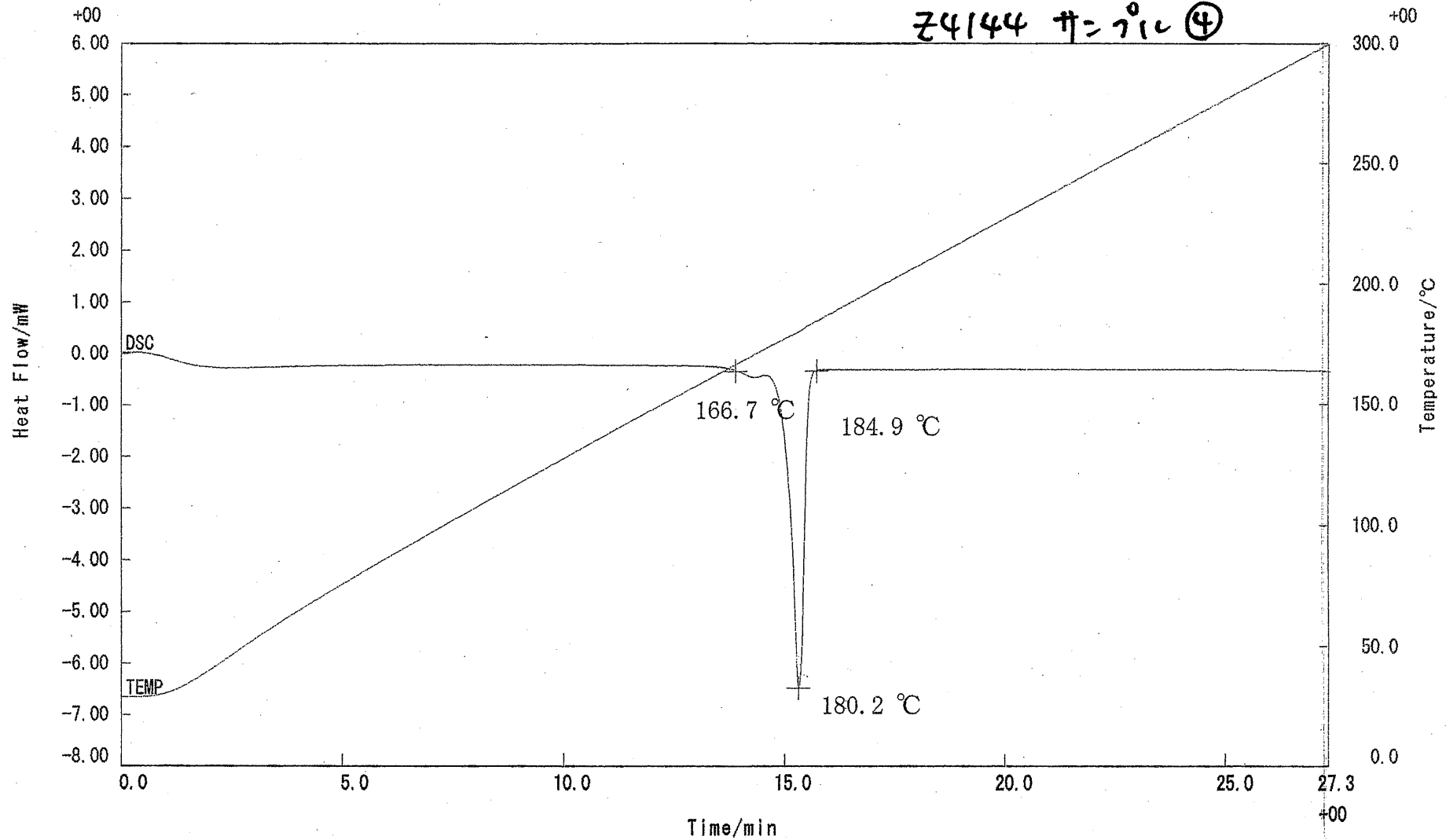
Z4144

サンプル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 :

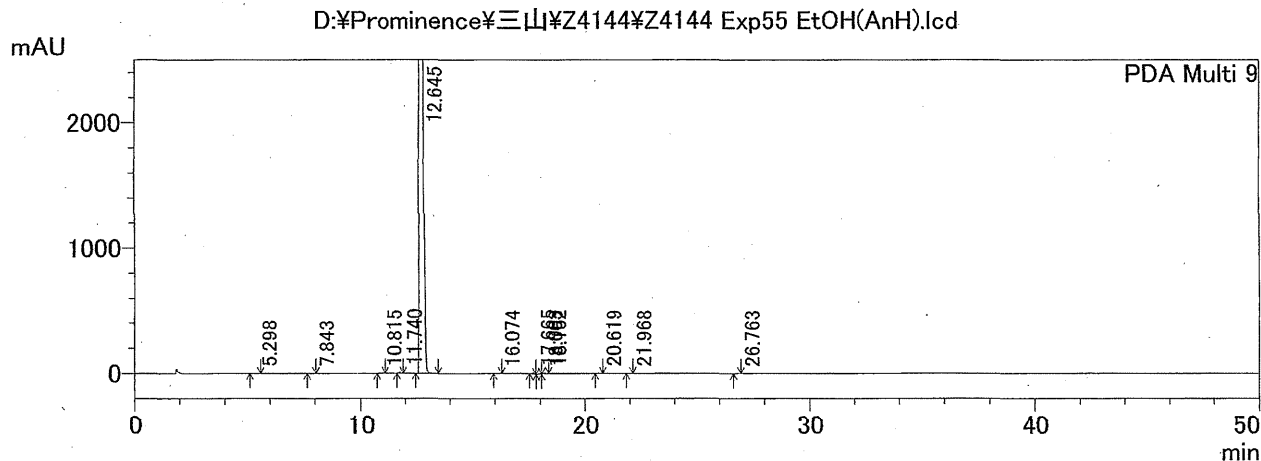
Directory : C:\TpEvo\Data\三山\Z4144
Meas File : Z4144 Exp55 EtOH(Anh) ...
Record : 2013/01/19 12:46:05
Print Out : 2013/01/23 11:44:13



==== 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
 11-7011(4)

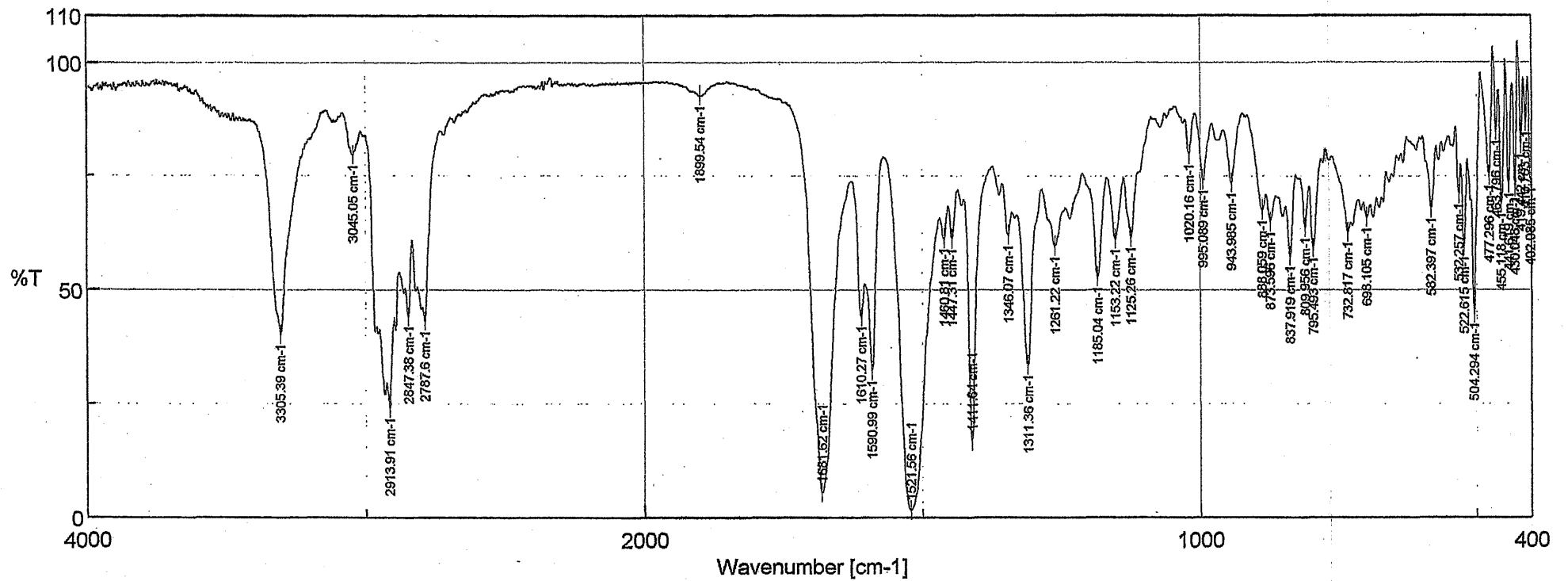


1 PDA Multi 9/254nm 4nm

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



- 174 -

[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

Z4144

サニール 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	θ - 2θ
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 : 201038¥①

サンプル名 : Lot No. Z4144①

コメント : Lot No. Z4144①

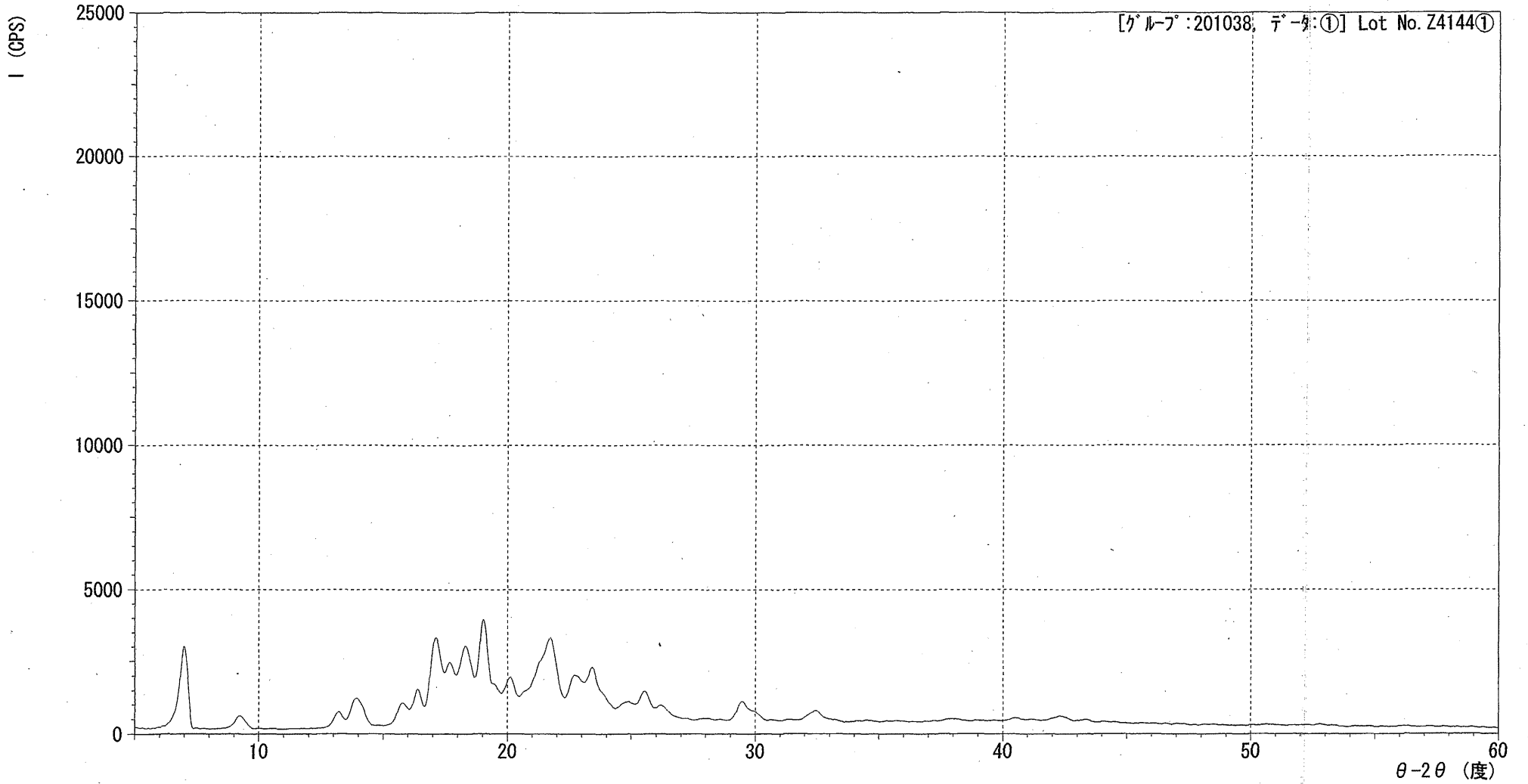
分析日時 : 13-02-13 10:32:52

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/I ₁	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/I ₁	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)
 スキャタリング : 1.00 (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 : 25

バックグランド除去 : [自動]

サンプリング間隔 : 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

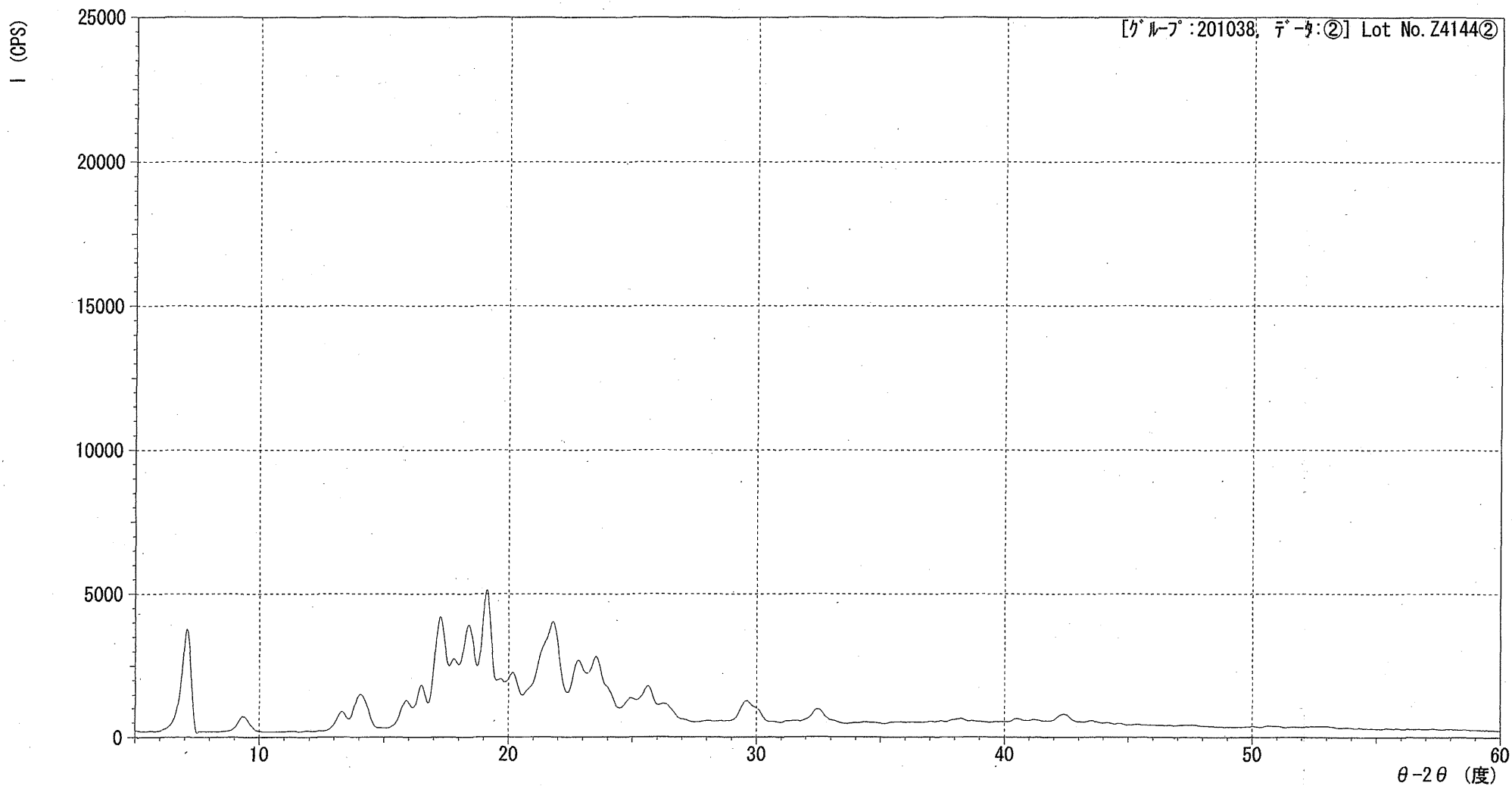
分析日時 : 13-02-13 11:27:46

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

ピークデータリスト

番号	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)
 スキャタリング : 1.00 (度)
 レジolving : 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 : 201038¥③

サンプル名 : Lot No. Z4144③

コメント : Lot No. Z4144③

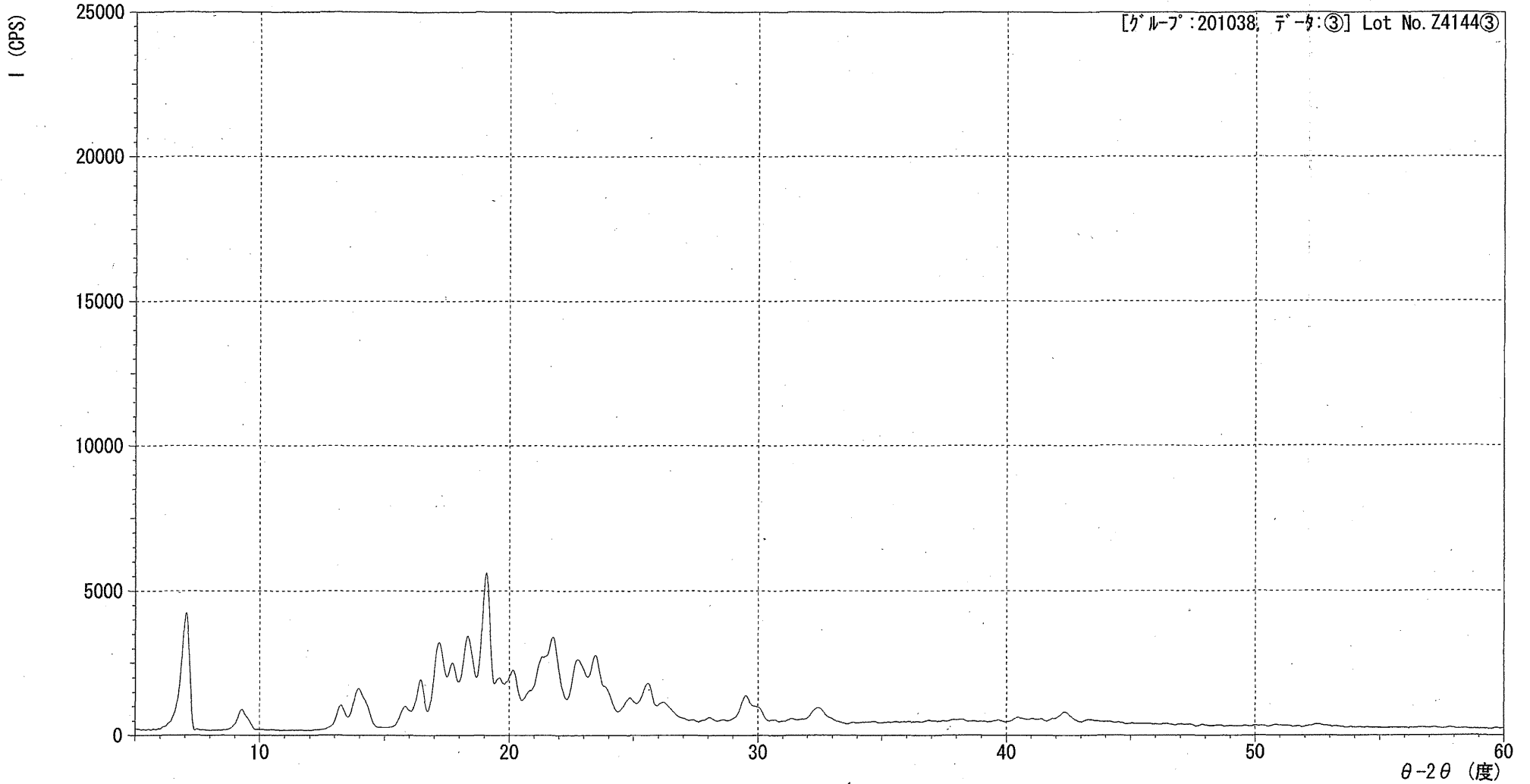
分析日時 : 13-02-13 11:52:16

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/I1	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	2θ (度)	d (Å)	I/I1	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)
 レジヒング : 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

バックグラウンド除去

[自動]

サンプル間隔 : 23

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 : 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

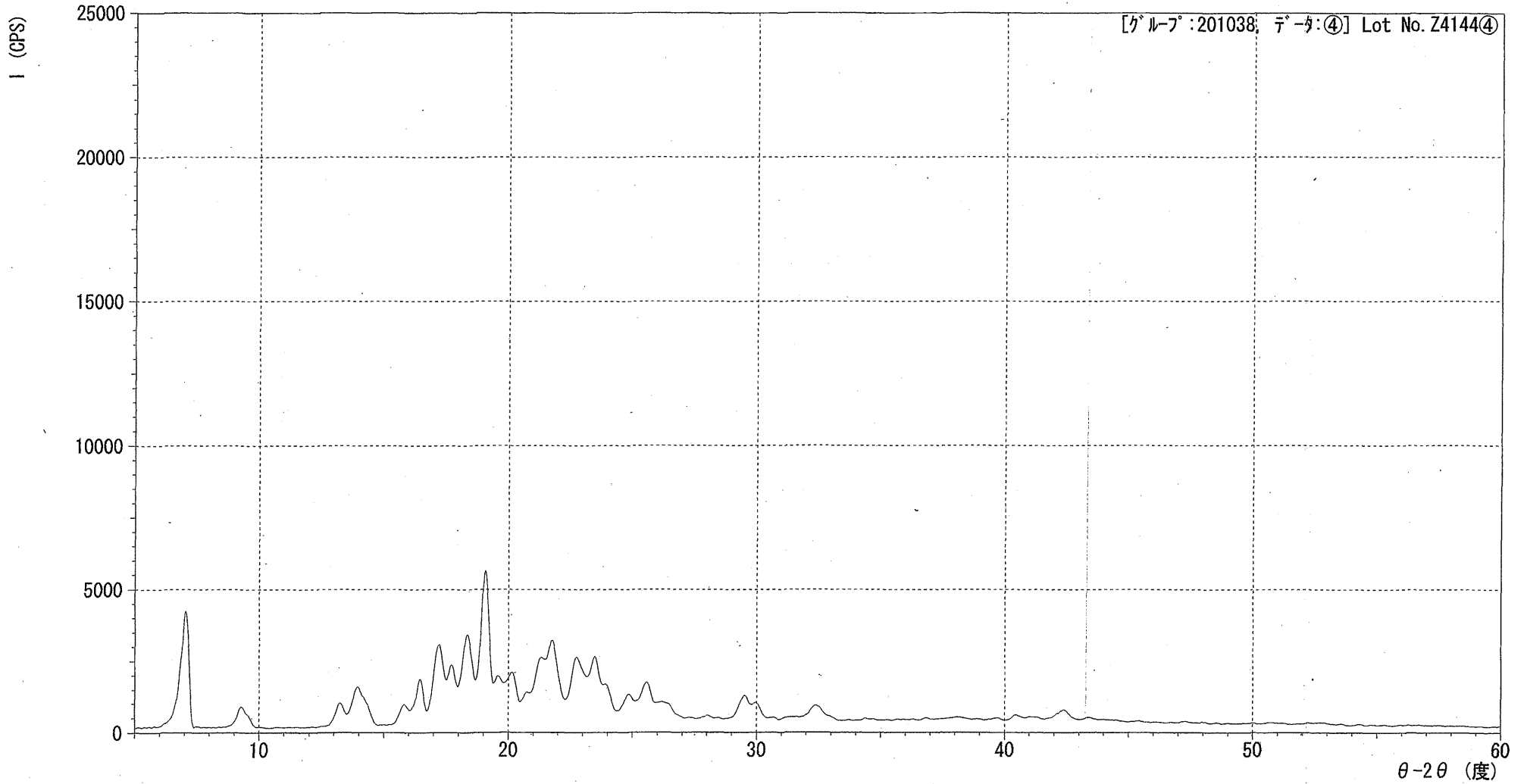
[NO]

*** マルチプロット ***

ファイル名 : 201038¥④
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



*** 基本データ処理 ***

グループ : 201038
 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	11	19.0449	4.65624	100	0.35090	924	18482
2	2	7.0068	12.60560	89	0.37800	821	16742
3	10	18.3222	4.83824	53	0.45330	488	11216

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		6.2200	14.19827	4	0.24000	33	1156
2		7.0068	12.60560	89	0.37800	821	16742
3		9.3525	9.44859	16	0.51500	146	4011
4		13.2605	6.67148	18	0.45240	164	3940
5		14.0150	6.31397	30	0.67000	278	9010
6		15.8205	5.59723	11	0.37890	101	2005
7		16.4265	5.39207	27	0.30430	251	4005
8		17.1982	5.15183	49	0.45350	457	9885
9		17.7000	5.00688	32	0.40000	296	5642
10		18.3222	4.83824	53	0.45330	488	11216
11		19.0449	4.65624	100	0.35090	924	18482
12		19.5400	4.53936	19	0.00000	178	0
13		20.1200	4.40979	21	0.33720	196	6050
14		20.7400	4.27935	6	0.26000	57	810
15		21.3000	4.16809	33	0.48600	305	6838
16		21.7200	4.08843	47	0.51160	435	9706
17		22.7200	3.91069	36	0.41200	335	8547
18		23.4800	3.78580	39	0.44580	360	7969
19		23.8600	3.72636	19	0.48360	177	3998
20		24.8000	3.58721	14	0.31700	128	2512
21		25.5228	3.48723	25	0.48570	227	5303
22		26.2000	3.39861	11	0.80000	101	4594
23		29.4800	3.02751	18	0.46180	164	3475
24		29.9200	2.98399	12	0.44580	113	2527
25		32.3936	2.76155	11	0.55930	100	3724
26		40.4660	2.22734	4	0.38800	37	1382
27		42.2900	2.13540	8	0.54000	71	2735

*** 基本データ処理 ***

データ情報

グループ : 201038
 データ : ④
 サンプル名 : Lot No. Z4144④
 コメント : Lot No. Z4144④
 日付 & 時刻 : 13-02-13 12:09:08

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
 バックグラウンド除去 : [自動]
 サンプル間隔 : 23
 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 : 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 : 201038¥QWAUD

サンプル名 : Lot No. QWAUD

コメント : Lot No. QWAUD

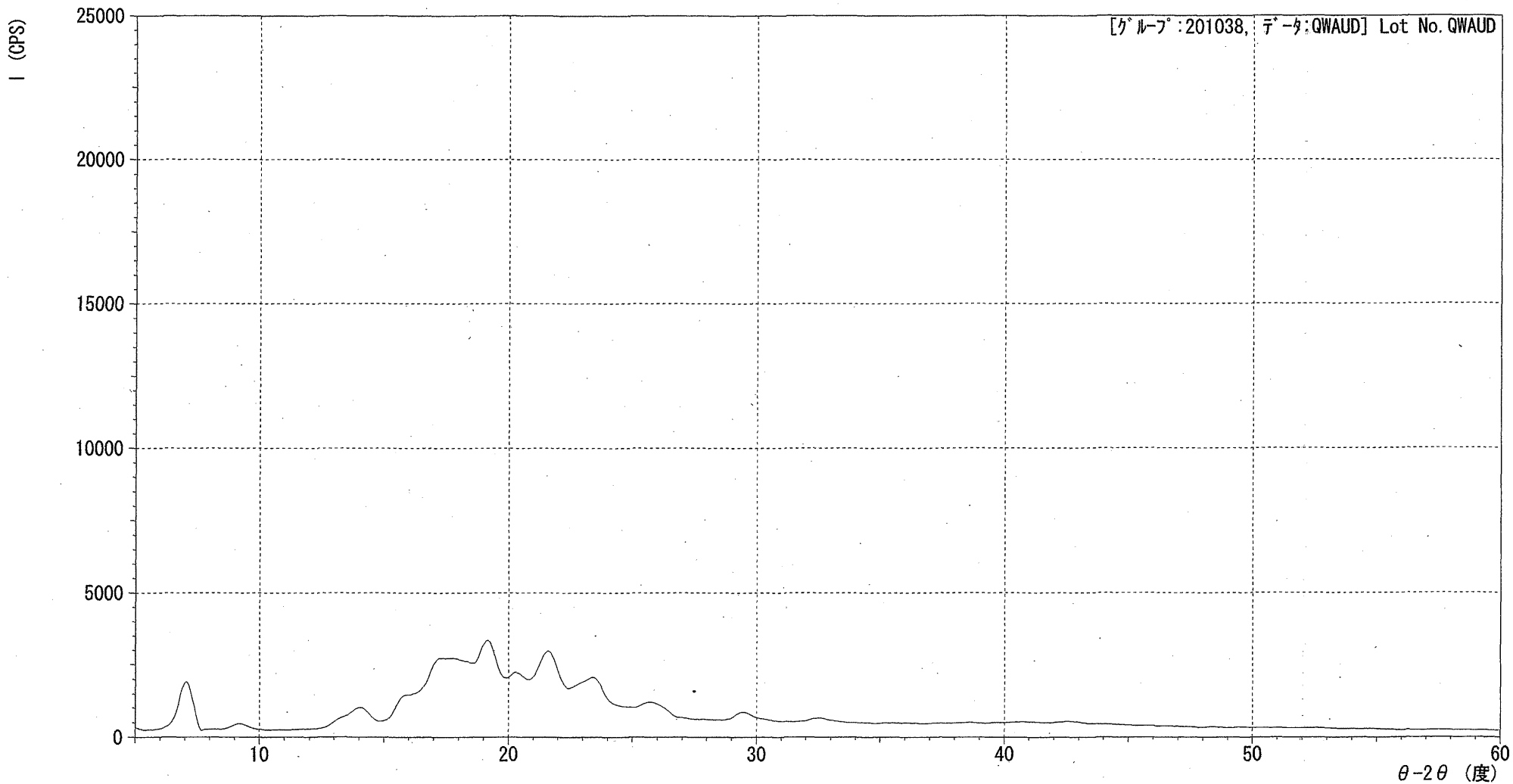
分析日時 : 13-02-13 13:08:20

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 : QWAUD

#	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	6		19.1000	4.64293	100	1.30000	511	34932
2	8		21.5800	4.11463	85	1.18000	434	33031
3	5		17.3800	5.09834	79	1.75000	403	34207

#	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			7.0432	12.54053	64	0.62360	327	10886
2			9.1883	9.61707	8	0.72330	40	1557
3			13.8608	6.38387	21	1.06830	109	5879
4			15.9000	5.56942	32	0.90000	165	7840
5			17.3800	5.09834	79	1.75000	403	34207
6			19.1000	4.64293	100	1.30000	511	34932
7			20.2600	4.37964	55	0.00000	282	0
8			21.5800	4.11463	85	1.18000	434	33031
9			23.3800	3.80177	50	1.04660	257	17254
10			25.7000	3.46359	20	1.29340	103	8024
11			29.4750	3.02802	11	0.81000	57	2706
12			32.4750	2.75481	6	0.79000	31	1415
13			40.9800	2.20058	3	1.40000	15	1665
14			42.5866	2.12121	5	1.21330	24	1623

*** 基本データ処理 ***

データ情報

グループ : 201038
 データ : QWAUD
 サンプル名 : Lot No. QWAUD
 コメント : Lot No. QWAUD
 日付 & 時刻 : 13-02-13 13:08:20

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)
 レジヒング : 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]