



産業

Fourier 80 ChemLab (混合物プロファイリングモジュール搭載)

アプリケーションノート

Innovation with Integrity

核磁気共鳴(NMR)による化学物質混合物分析

化学製品の製造では通常、原料受入から加工、最終製品の品質管理まで、数多くの試験が求められます。一般的な方法としては、各種の装置、方法、ユーザーの専門性レベルを必要とする、各種ターゲットを絞ったテスト手法が適用されます。一部のケースでは、テストが完全に省略されることもあります。核磁気共鳴(NMR)は、化学混合物中の複数の化合物を同定・定量する包括的なツールを提供します。

プロトン核磁気共鳴(NMR)の主な利点の一つは、完全に非選択型検出器である、という点です。プロトン核磁気共鳴(NMR)は、プロトンを含むあらゆる化合物を測定することができます。核磁気共鳴(NMR)のアプリケーションは、複雑な混合物を分子レベルで分析するため、世界中で広く受け入れられています。また、既知および未知の化合物のターゲットおよび非ターゲットの同定と定量を提供します。既知の分子構造の検証や新しい分子構造の解明を容易に実行することができます。核磁気共鳴(NMR)はまた、化合物固有のリファレンスサンプルを必要としない定量も可能です。

核磁気共鳴(NMR)技術を広く普及させる上での唯一の制約は、分光学的専門知識や特定のインフラ・設備投資(特別な実験室構成や液体冷媒など)が必要である、という点です。製造現場では、結果が出るまでの時間が重視され、サンプルを特定の場所へ送って分析する方法は、必ずしも時間的期待に添えるものではありません。ブルカーは現在、複雑ではない混合物中の成分を同定および定量化し、最も必要とされる場所(入荷商品の搬入口、製造工程、最終製品の品質管理など)で結果を提供する、簡単に導入でき堅牢な核磁気共鳴(NMR)メソッドを提供しています。ブルカー Fourier 80 ベンチトップ型核磁気共鳴(NMR)システムは、核磁気共鳴(NMR)の適用範囲を大幅に拡張します。また日常的な化学混合物分析で、サンプルからレポートまでのデータベース主導のエンドツーエンドのワークフローを提供します(図1)。

Fourier 80 ChemLab Mixture Profiler: The Workflow



図1: Fourier 80混合物プロファイラーの核磁気共鳴(NMR)ワークフロー概要

新たなエンドツーエンド・プッシュボタン・ソリューション

ブルカーの新ChemLab(核磁気共鳴(NMR)混合物プロファイラーモジュール搭載)は、ブルカー Fourier 80 FT-核磁気共鳴(NMR)ベンチトッププラットフォームで動作します(図2)。核磁気共鳴(NMR)混合物プロファイルは、混合物中の化合物の同定および定量を行う化学業界向けの独自のエンドツーエンドソリューションを提供します。本ソリューションは、最大120サンプルまでのハイスループット自動サンプルチェンジャーなどを実現する、高性能80MHzベンチトップ核磁気共鳴(NMR)システムFourier 80をベースとしています。本装置は、ブルカーの業界標準であるTopSpin™核磁気共鳴(NMR)ソフトウェア、そしてサンプル追跡ソフトウェアIconNMR™で操作されます。GoScan™と呼ばれる高度にカスタマイズ可能なプッシュボタンユーザーインターフェイスにより、専門家でないユーザーでも簡単に操作することができます。完全自動化されたワークフローは、ユーザーが操作することなく、サンプル測定からレポートまで、すべてのステップをカバーします。そのため、核磁気共鳴(NMR)の知識がないオペレータでも、データの自動解釈やレポート作成など、高度な核磁気共鳴(NMR)解析を実行することができます。データベースは完全にカスタマイズ可能で、化学処理業界に比類のない機能を提供し、入荷品管理、処理、完成品品質チェックに関する課題に合わせてソリューションを調整します。



図2: ブルカー独自の機能:フロアスタンド型とベンチトップ型核磁気共鳴(NMR)を同一ソフトで操作

化学業界の事例

- 入荷製品管理
- プロセスイノベーション
- プロセス制御
- 出荷製品品質管理

利点

- TopSpin™のパワー、GoScan™の簡単ワークフロー
- 完全自動化: サンプルからレポートまで
- 特定と定量がワンステップ
- フルカスタマイズ可能なスペクトルデータベース
- スタータースペクトラデータベースキット(82スペクトル)
- 混合物分析に要する時間-約20分
- 120サンプルのピックアンドプレース自動化(オプション)

分析結果は、PDFおよびインタラクティブ核磁気共鳴(NMR)スペクトル可視化ソフトウェアで表示されます。レポートでは、同定・定量された化合物が見やすい表(図3)で表示されます。データベースと一致した化合物に関するグラフィカルフィードバックは、分析の正確性と一貫性を示した残差プロット(図5)とともに、レポート(図4)に記載されます。

核磁気共鳴(NMR)スペクトルのシグナルが既存のデータベースエントリーとマッチングできない場合、さらに詳しい調査を行うよう、レポート内でハイライト表示されます。これらは既知または未知の化合物である可能性があります。異常値のある化合物は、高分解能核磁気共鳴(NMR)などの別の手法でさらに分析を行います。

Fourier 80 ChemLab(混合物プロファイリングモジュール搭載)は、ブルカー独自のDLT(分散ラポトポロジ)コンセプトにより、高分解能のフロアスタンド型核磁気共鳴(NMR)装置と配置の容易なベンチトップ装置を直結させることができます。

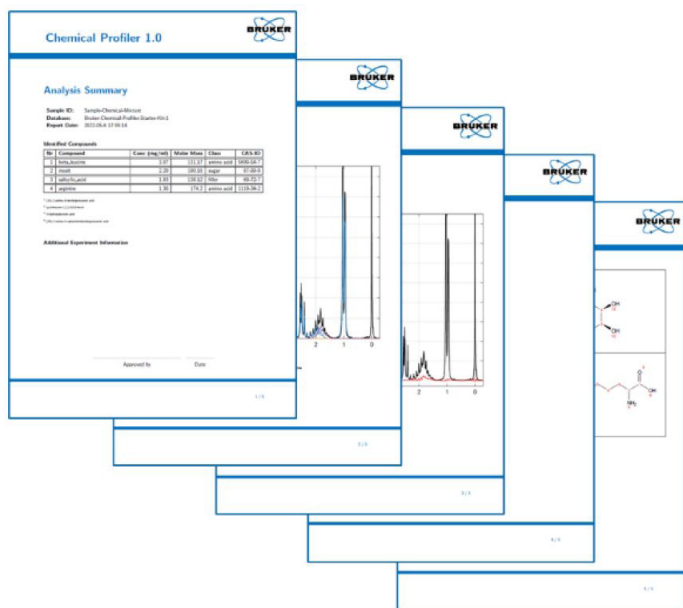


図3: Fourier 80 ChemLab(混合物プロファイリングモジュール搭載)レポート

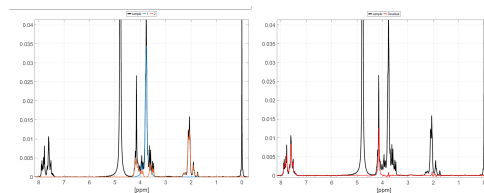


図4: 左側:現在の核磁気共鳴(NMR)スペクトルを再構築するためのデータベースエントリーを色分け(黒)。右側:現在のスペクトル(黒)とマッチしたデータベースエントリーの残差プロット(赤)。赤線の有意なパターンは、データベースエントリーに割り当てられない物質がサンプル中存在することを示しています。

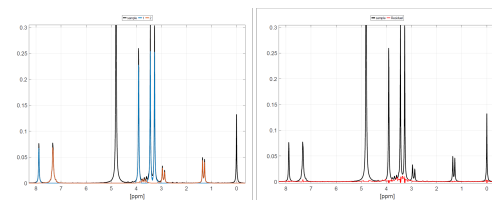


図5: 左側:現在の核磁気共鳴(NMR)スペクトルを再構築するためのデータベースエントリーを色分け(黒)。右側:現在のスペクトル(黒)とマッチしたデータベースエントリーの残差プロット(赤)。平らな赤線は、すべてのシグナル、つまり混合物中のすべての化合物の同定に成功したことを示しています。

ブルカー(Bruker BioSpin)は、製品の改良を常時行っており、予告なく仕様を変更する権利を有します。オーダー番号 T190285 © 09/2022 ブルカー (Bruker BioSpin)。

Bruker BioSpin
info@bruker.com

bruker.com

カスタマーサポート
<https://www.bruker.com/en/services/support.html>

オンライン情報
[bruker.com/](https://www.bruker.com/)

