

Would you like to learn more? Contact a customer service representative.

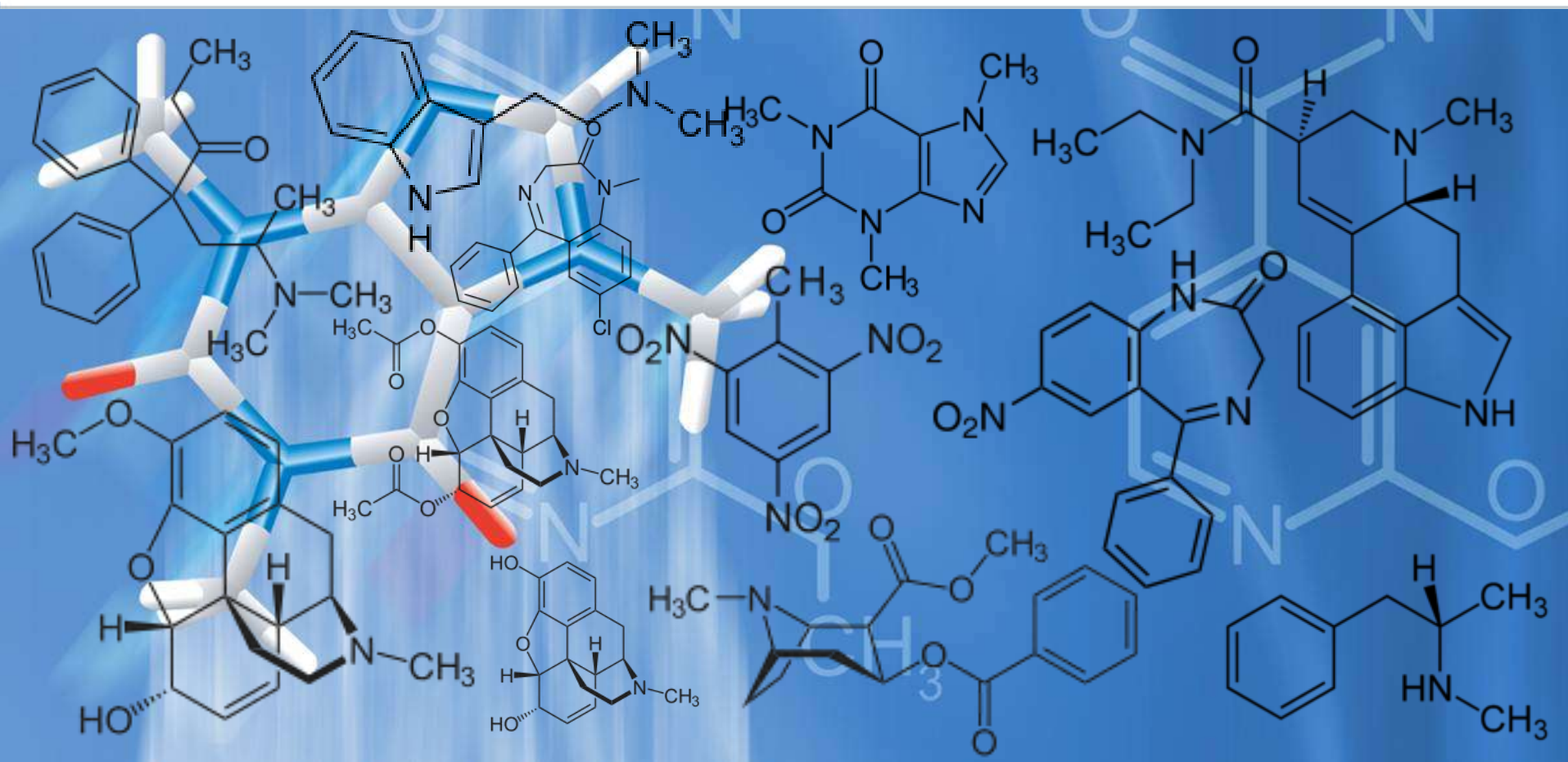


低分子のNMR実験とスペクトル解析

IconNMR
CMC-se
CMC-assist

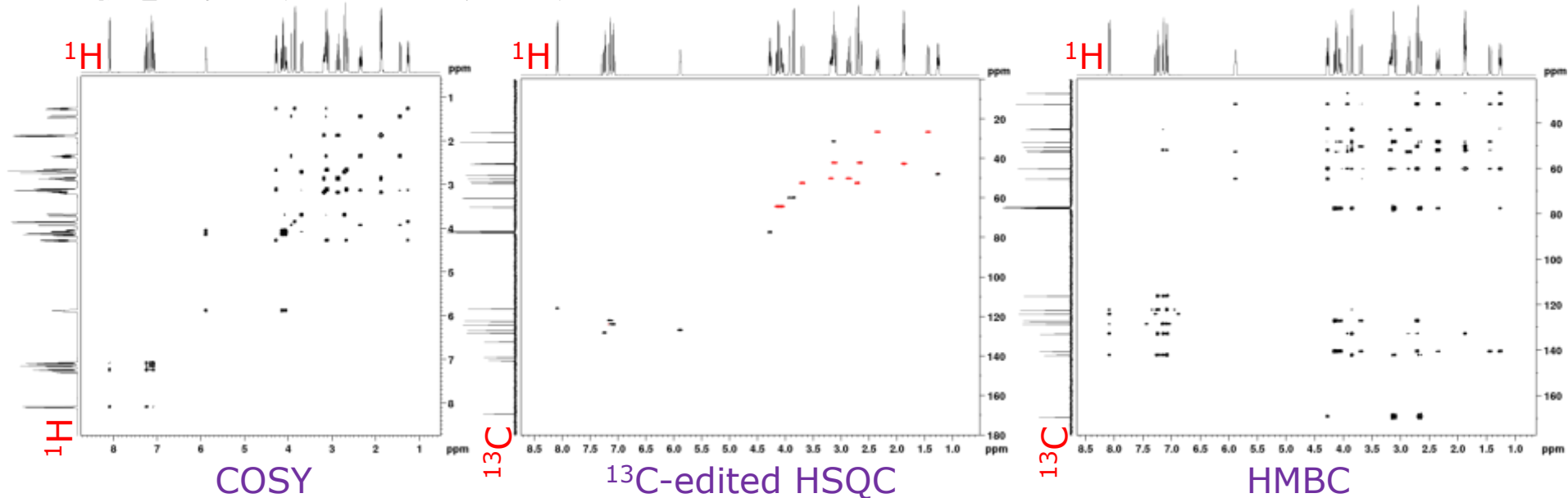
ブルカーバイオスピン(株)アプリケーション部

平野桐子・佐藤一



はじめに

- 核磁気共鳴(NMR)法は原子1個の分離能を有しています. 分光分析法の中では低感度であるにもかかわらず, 溶液または固体の状態で測定できるので, 有機化合物, 生体高分子, 材料などの分野に携わる研究者にとって欠くことのできない分析法となっています.
- NMRのハードウェアの進歩により, スペクトルの感度と分解能が向上しました. また, ソフトウェアの改良によりNMR実験の自動化が進みました. その結果, いまや誰もが高品質のスペクトルを容易に測定できるようになりました. ところが, スペクトルの解析には知識や経験を必要とすることがあります.

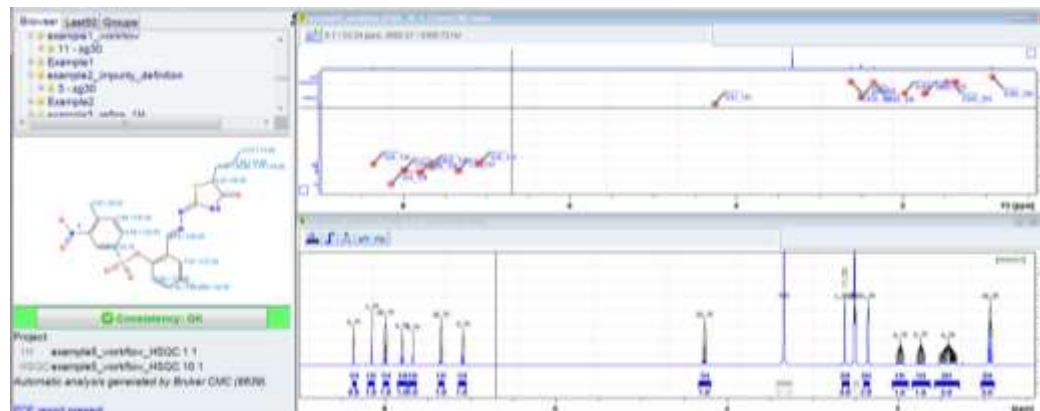


はじめに

- NMRメーカーである弊社はスペクトルの解析のところにも開発に力を注いでいます。弊社のソフトウェアを用いることにより、得られたスペクトルから構造式を計算したり、シグナルの帰属を行ったりすることができるようになりました。ユーザーは結果の再確認を行う必要があります。



CMC-seにより得られた相関表と構造式の候補

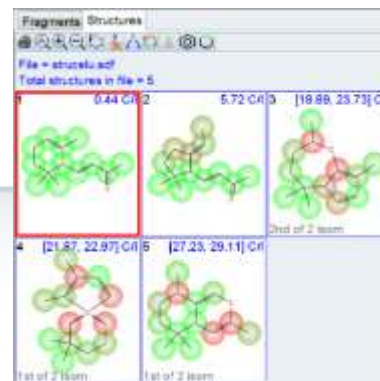


CMC-assistにより得られたシグナルの帰属

本Webinarの内容



低分子の測定と解析の流れ

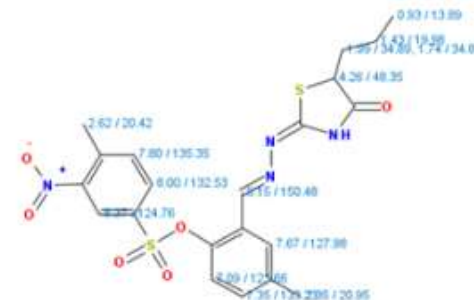


CMC-se

- NMRスペクトルと分子式を用いた構造解析
- 相関表の作成
- マニュアル操作による相関表の修正
- ^1H - ^{15}N と ^{13}C - ^{13}C 相関スペクトルの活用

未知化合物

既知化合物



CMC-assist



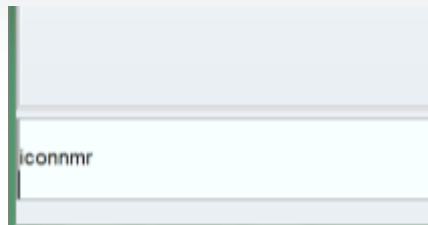
- NMRスペクトルと構造式を用いたシグナルの帰属
- 不純物由来シグナルの除外
- マニュアル操作による帰属の修正
- 二次元 ^1H - ^{13}C edited HSQCスペクトルの活用
- IconNMRとの連動操作



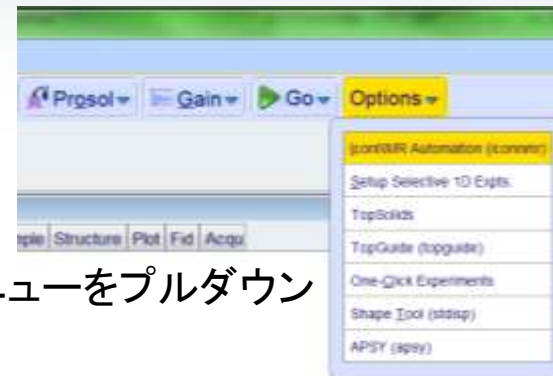
IconNMR

- NMRスペクトルの自動測定
- パラメータセットと環境設定

IconNMR — 起動



コマンド入力



メニューをプルダウン



IconNMRの初期画面

IconNMR — 自動

- サンプル挿入
- チューニングとマッチング
- ロック(磁場の固定)
- 試料管の回転, 分解能(シム)の調整
- 積算
- 処理(フーリエ変換, 位相補正, ベースライン補正, ピークピッキング, 積分など)
- 印刷



CMC-se用のパラメータセット (TopSpin 3.2 pl-6)

- CMCse_1H (一次元(1D) ^1H スペクトル)
- CMCse_13C (1D ^{13}C スペクトル)
- CMCse_COSY (2D ^1H - ^1H 相関スペクトル)
- CMCse_HSQC (2D ^1H - ^{13}C 1-bond相関スペクトル)
- CMCse_HMBC (2D ^1H - ^{13}C 2,3-bond相関スペクトル)
- CMCse_INAD (2D ^{13}C - ^{13}C 1-bond相関スペクトル)
- CMCse_15NHSQCf2 (2D ^1H - ^{15}N 1-bond相関スペクトル)
- CMCse_15NHMBCf2 (2D ^1H - ^{15}N 2,3-bond相関スペクトル)
- その他CMCseではじまるパラメータセット

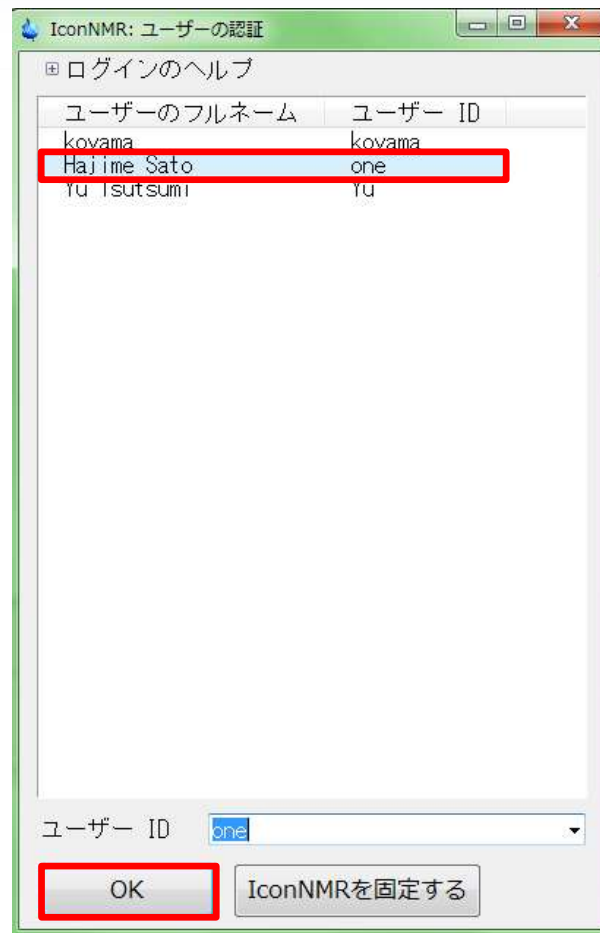
IconNMR — 連続自動測定

- 連続自動測定をクリックする。



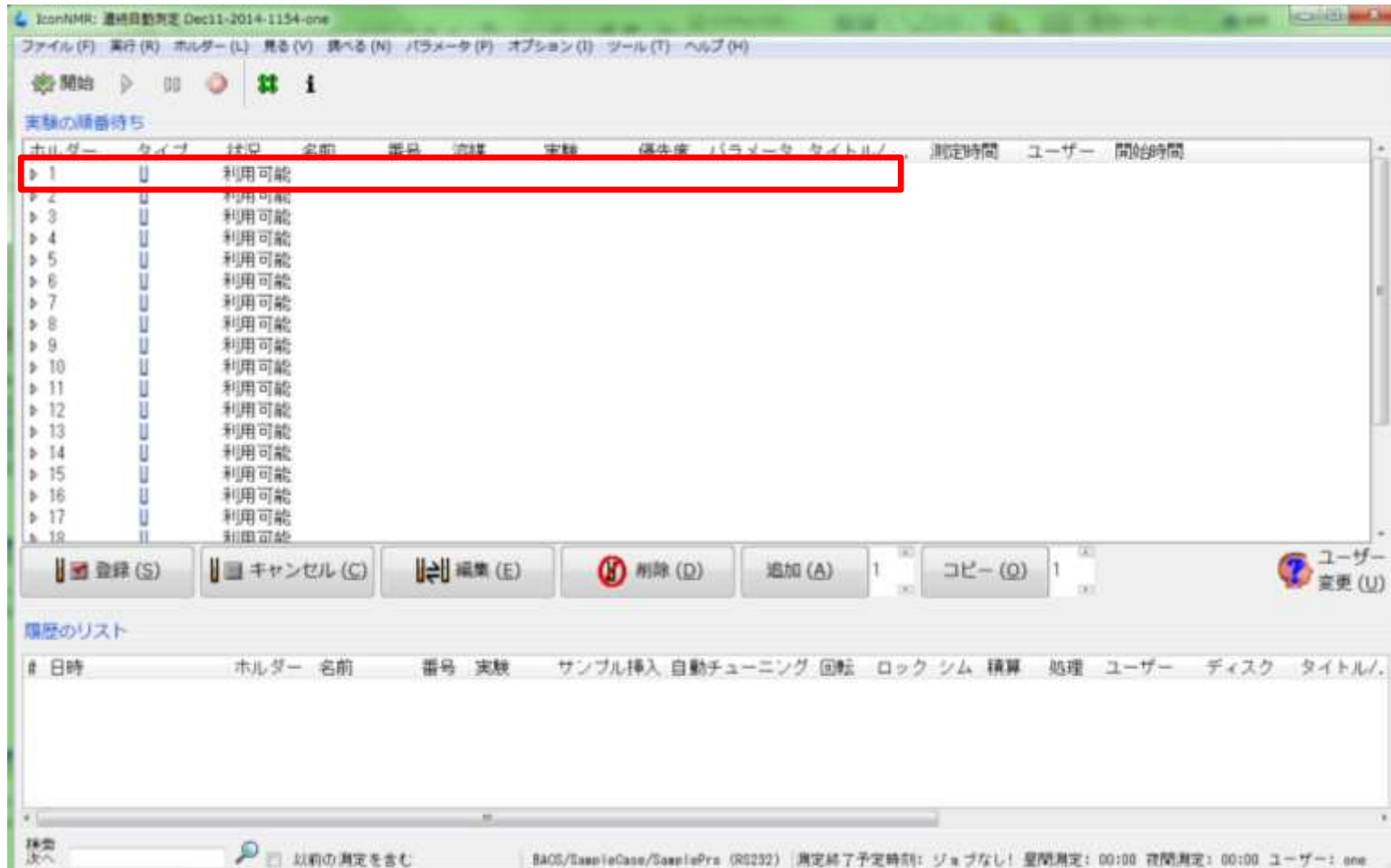
IconNMR — ログイン

- ユーザーIDを選び, OKする.



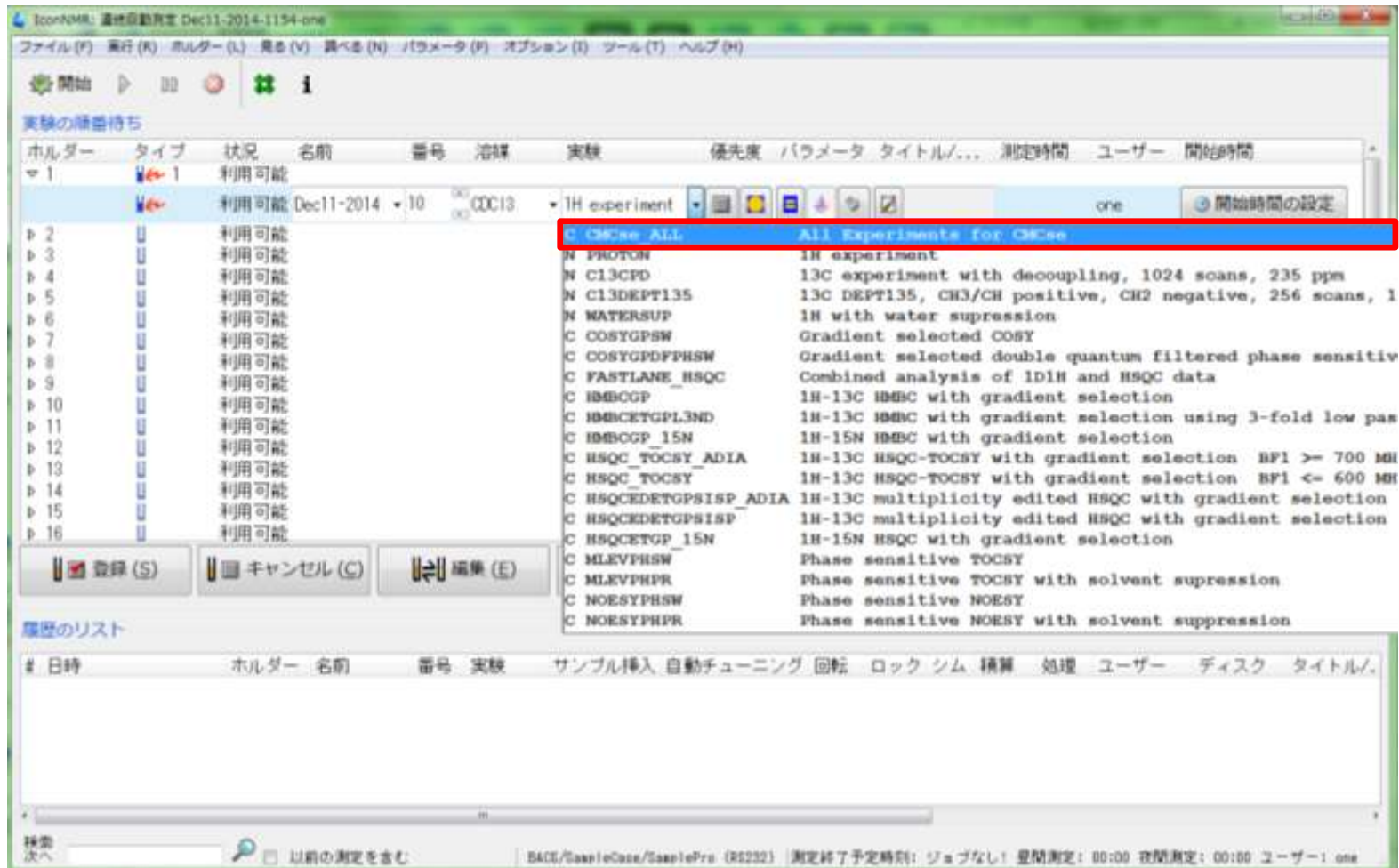
IconNMR — 測定のセットアップ

- ホルダー1の行をダブルクリックする。



IconNMR — 測定のセットアップ

- CMCse_ALLを選択する.



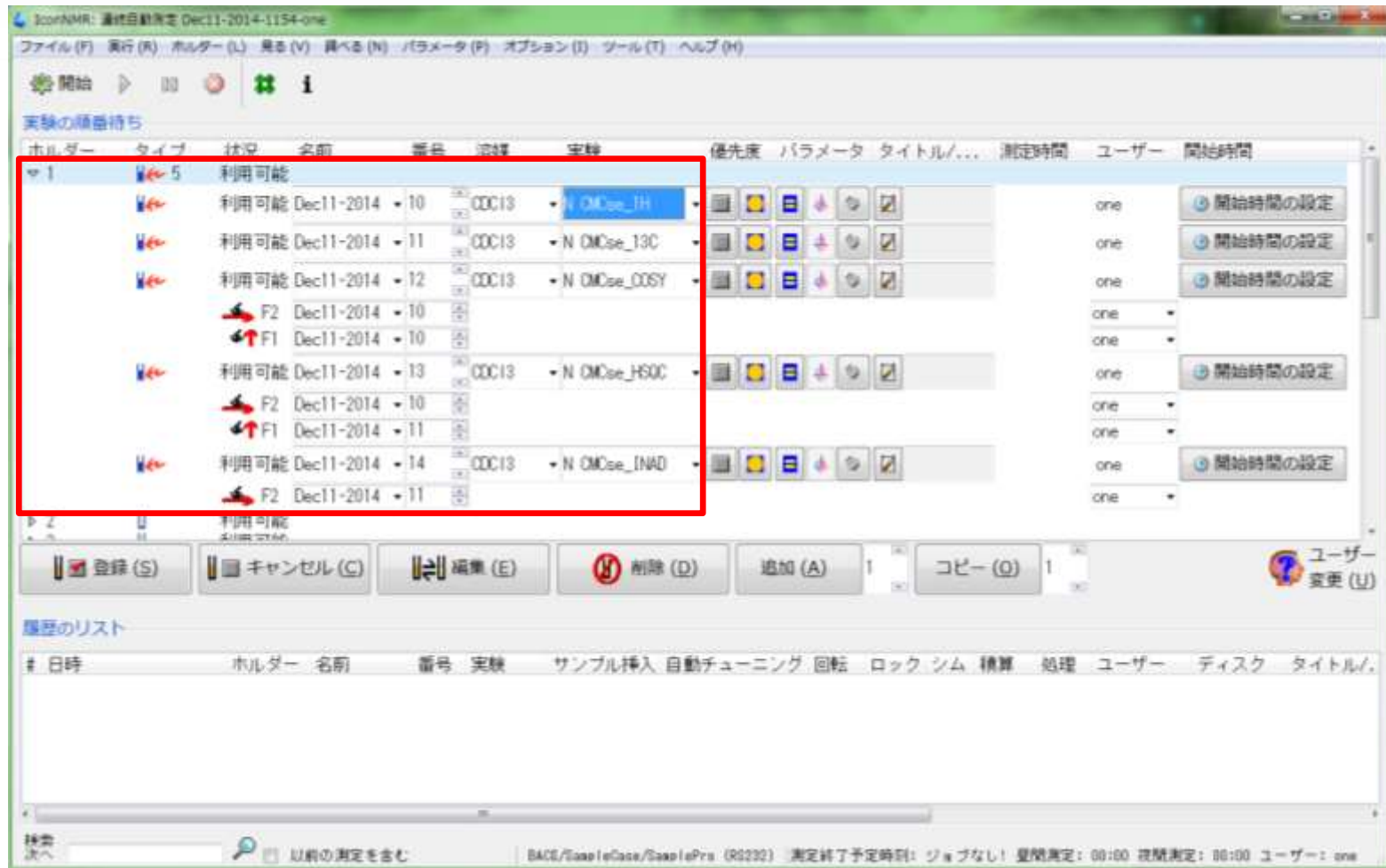
The screenshot shows the IconNMR software interface. The main window displays a list of experiments under the heading '実験の順番待ち'. The list includes columns for 'ホルダー' (Holder), 'タイプ' (Type), '状況' (Status), '名前' (Name), '番号' (Number), '溶媒' (Solvent), '実験' (Experiment), '優先度' (Priority), 'パラメータ' (Parameters), 'タイトル...' (Title...), '測定時間' (Measurement Time), 'ユーザー' (User), and '開始時間' (Start Time).

The 'CMCse_ALL' experiment is highlighted with a red box. Below the list, there are buttons for '登録 (S)' (Register), 'キャンセル (C)' (Cancel), and '編集 (E)' (Edit). At the bottom, there is a '履歴のリスト' (History List) section and a status bar with various system information.

ホルダー	タイプ	状況	名前	番号	溶媒	実験	優先度	パラメータ	タイトル...	測定時間	ユーザー	開始時間
▼ 1	▼ 1	利用可能	Dec11-2014	10	CDCl3	1H experiment					one	開始時間の設定
▶ 2		利用可能				CMCse_ALL			All Experiments for CMCse			
▶ 3		利用可能				1H PROTON			1H experiment			
▶ 4		利用可能				N C13CPD			13C experiment with decoupling, 1024 scans, 235 ppm			
▶ 5		利用可能				N C13DEPT135			13C DEPT135, CH3/CH positive, CH2 negative, 256 scans, 1			
▶ 6		利用可能				N WATERSUP			1H with water suppression			
▶ 7		利用可能				C COSYGPSW			Gradient selected COSY			
▶ 8		利用可能				C COSYGPDFPSW			Gradient selected double quantum filtered phase sensitiv			
▶ 9		利用可能				C FASTLANE_HSQC			Combined analysis of 1D1H and HSQC data			
▶ 10		利用可能				C HMBGCP			1H-13C HMBBC with gradient selection			
▶ 11		利用可能				C HMBCEGTGPL3ND			1H-13C HMBBC with gradient selection using 3-fold low pas			
▶ 12		利用可能				C HMBGCP 15N			1H-15N HMBBC with gradient selection			
▶ 13		利用可能				C HSQC_TOCSY_ADIA			1H-13C HSQC-TOCSY with gradient selection BF1 >= 700 MHz			
▶ 14		利用可能				C HSQC_TOCSY			1H-13C HSQC-TOCSY with gradient selection BF1 <= 600 MHz			
▶ 15		利用可能				C HSQCEDETGPSISP_ADIA			1H-13C multiplicity edited HSQC with gradient selection			
▶ 16		利用可能				C HSQCEDETGPSISP			1H-13C multiplicity edited HSQC with gradient selection			
						C HSQCETGP 15N			1H-15N HSQC with gradient selection			
						C MLEVPHSW			Phase sensitive TOCSY			
						C MLEVPHPR			Phase sensitive TOCSY with solvent suppression			
						C NOESYPSW			Phase sensitive NOESY			
						C NOESYPHPR			Phase sensitive NOESY with solvent suppression			

IconNMR — 測定のセットアップ

- ワンクリックで、CMC-se用の複数個の実験が読み込まれます。



The screenshot shows the IconNMR software interface. The main window displays a list of experiments under the heading '実験の種類待ち'. The table below summarizes the visible data:

ホルダー	タイプ	状況	名前	番号	実験	優先度	パラメータ	タイトル...	測定時間	ユーザー	開始時間
マ1	5	利用可能								one	開始時間の設定
		利用可能	Dec11-2014	10	ODC13			N CMCse_IH		one	開始時間の設定
		利用可能	Dec11-2014	11	ODC13			N CMCse_I3C		one	開始時間の設定
		利用可能	Dec11-2014	12	ODC13			N CMCse_COSY		one	開始時間の設定
		F2	Dec11-2014	10						one	
		F1	Dec11-2014	10						one	
		利用可能	Dec11-2014	13	ODC13			N CMCse_HSQC		one	開始時間の設定
		F2	Dec11-2014	10						one	
		F1	Dec11-2014	11						one	
		利用可能	Dec11-2014	14	ODC13			N CMCse_INAD		one	開始時間の設定
		F2	Dec11-2014	11						one	

At the bottom of the window, there is a '履歴のリスト' (History List) section which is currently empty. The status bar at the very bottom shows: 'BACS/SampleCase/SamplePro (R0230) 測定終了予定時刻: ジョブなし! 昼間測定: 00:00 夜間測定: 00:00 ユーザー: one'.

IconNMR — 測定の登録と開始

- CMC-se用の複数個の実験が登録され、順次開始される。
- 測定から処理まで自動で行われる。



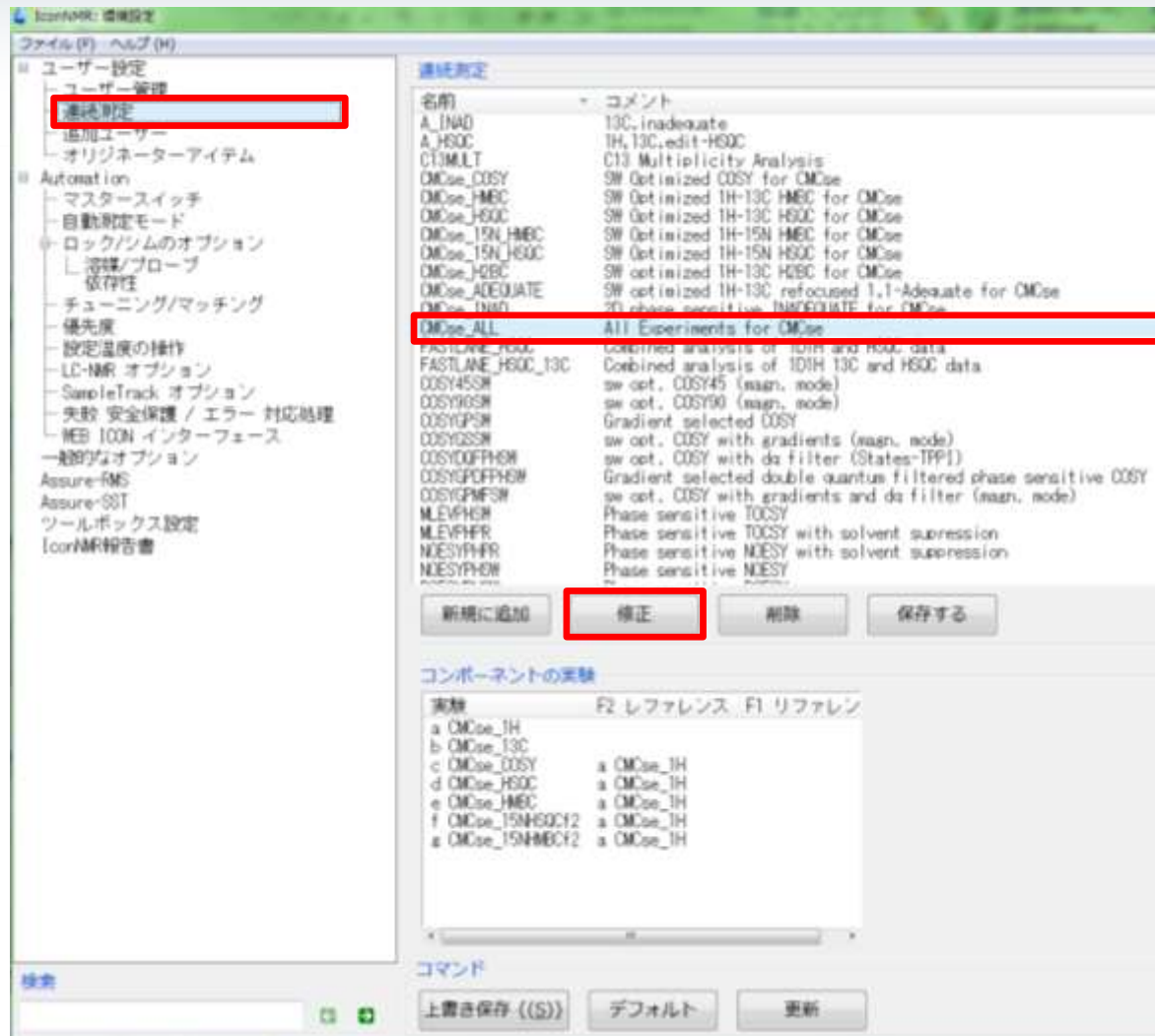
IconNMR — 環境設定

- 環境設定をクリックする.



IconNMR — 環境設定

- ① 連続測定をクリックする。
- ② CMCse_ALLをクリックする。
- ③ 修正をクリックする。

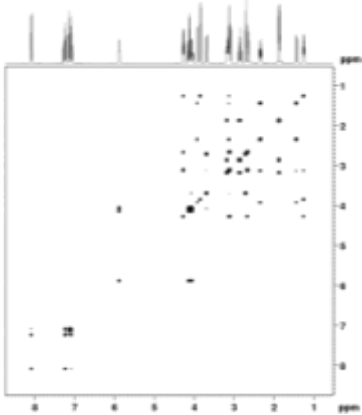


The screenshot shows the 'IconNMR: 環境設定' (IconNMR: Environment Settings) window. The left sidebar contains a tree view of settings categories, with '連続測定' (Continuous Measurement) selected and highlighted with a red box. The main area displays a list of experiments with columns for '名前' (Name) and 'コメント' (Comment). The entry 'CMCse_ALL' is highlighted with a red box. Below the list are buttons for '新規に追加' (Add New), '修正' (Modify), '削除' (Delete), and '保存する' (Save). The '修正' button is highlighted with a red box. At the bottom, there are buttons for '上書き保存 ((S))' (Save Overwrite), 'デフォルト' (Default), and '更新' (Update).

名前	コメント
A_1NAD	13C, inadequate
A_HSOC	1H, 13C, edit-HSOC
C13MULT	C13 Multiplicity Analysis
CMCse_COSY	SW Optimized COSY for CMCse
CMCse_HMEC	SW Optimized 1H-13C HMEC for CMCse
CMCse_HSOC	SW Optimized 1H-13C HSQC for CMCse
CMCse_15N_HMEC	SW Optimized 1H-15N HMEC for CMCse
CMCse_15N_HSOC	SW Optimized 1H-15N HSQC for CMCse
CMCse_H2BC	SW optimized 1H-13C H2BC for CMCse
CMCse_ADEQUATE	SW optimized 1H-13C refocused 1,1-Adequate for CMCse
CMCse_1NAD	3D phase sensitive 1NAD/ADEQUATE for CMCse
CMCse_ALL	All Experiments for CMCse
FASTLANE_HSOC	Combined analysis of 101H 13C and HSOC data
FASTLANE_HSOC_13C	Combined analysis of 101H 13C and HSOC data
COSY45SH	sw opt. COSY45 (asgn, node)
COSY90SH	sw opt. COSY90 (asgn, node)
COSYPSH	Gradient selected COSY
COSYGSSH	sw opt. COSY with gradients (asgn, node)
COSYDOPHSH	sw opt. COSY with da filter (States-TFPI)
COSYDOPHSH	Gradient selected double quantum filtered phase sensitive COSY
COSYGMFSH	sw opt. COSY with gradients and da filter (asgn, node)
MLEVPHSH	Phase sensitive TOCSY
MLEVPHSH	Phase sensitive TOCSY with solvent suppression
NOESYPHSH	Phase sensitive NOESY with solvent suppression
NOESYPHSH	Phase sensitive NOESY

IconNMR — 連続測定メニューの改善

- ① CMCse_COSYをクリックする.
- ② F1リファレンスをプルダウンする.
- ③ CMCse_1Hを選択する.



連続測定のエディター

連続測定の名前とコメントの追加/修正:

名前: CMCse_ALL
 コメント: All Experiments for CMCse

連続測定の追加/修正

元のディレクトリー: All Experiments
 実験名: CMCse_COSY
 F2 レファレンス: a CMCse_1H
 F1 リファレンス: なし

後に追加

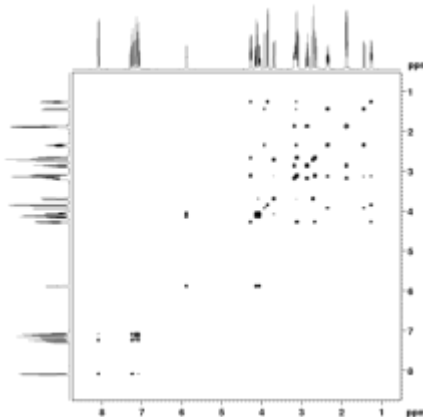
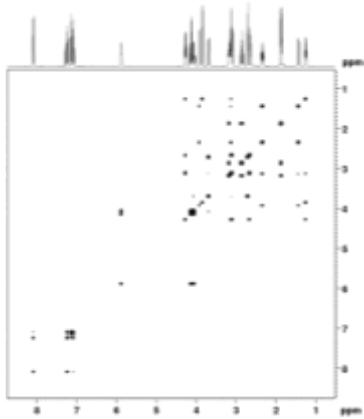
コンポーネントの実

実験	F2 レファレンス	F1 リファレンス
a CMCse_1H		
b CMCse_13C		
c CMCse_COSY	a CMCse_1H	
d CMCse_HSQC	a CMCse_1H	
e CMCse_HMBC	a CMCse_1H	
f CMCse_15NHSQCf2	a CMCse_1H	
g CMCse_15NHMBCf2	a CMCse_1H	

OK 適用 キャンセル {(&C)}

IconNMR — 連続測定メニューの改善

- 修正をクリックする。
- F1リファレンスにCMCse_1Hが追加されました。



連続測定のエディター

連続測定の名前とコメントの追加/修正:

名前: CMCse_ALL
 コメント: All Experiments for CMCse

連続測定の追加/修正

元のディレクトリー: All Experiments
 実験名: CMCse_COSY
 F2 レファレンス: a CMCse_1H
 F1 リファレンス: a CMCse_1H

後ろに追加 前に追加 **修正** 削除

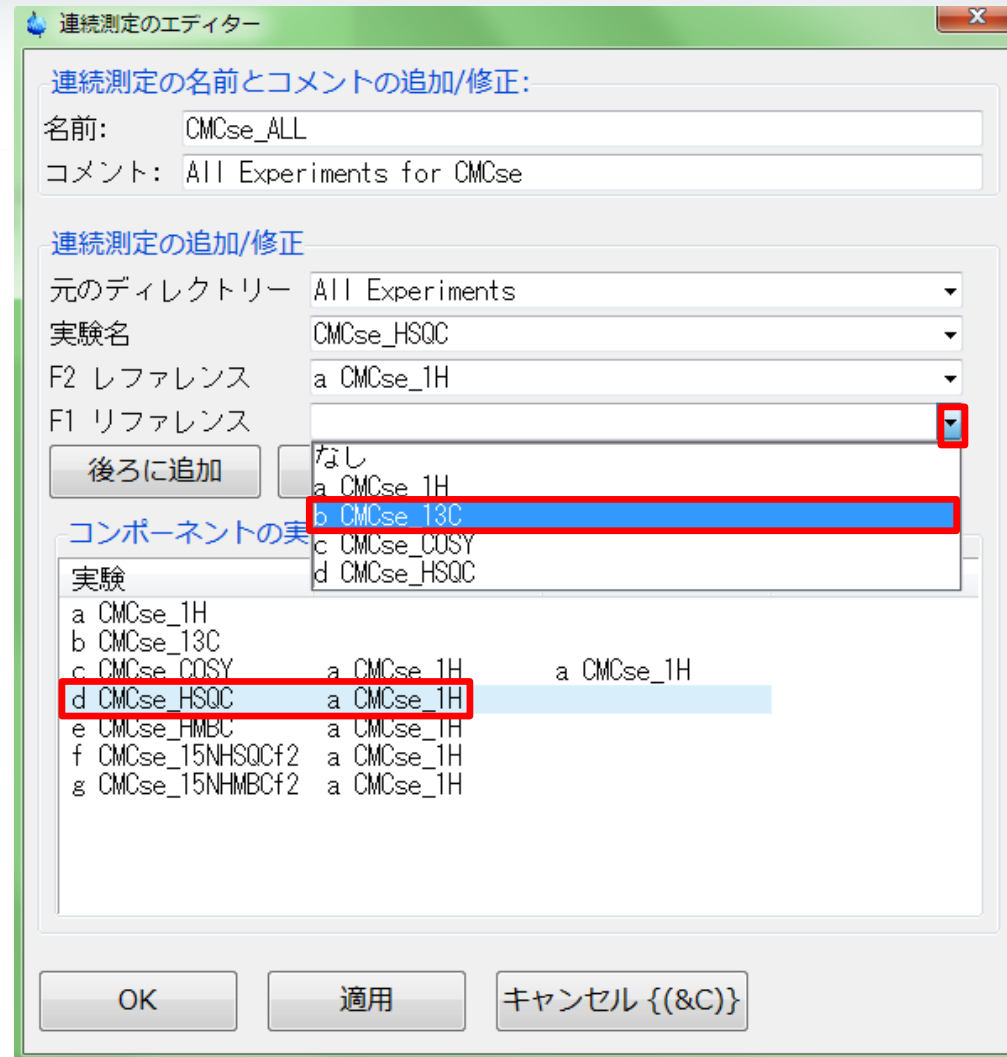
コンポーネントの実験

実験	F2 レファレンス	F1 リファレンス
a CMCse_1H		
b CMCse_13C		
c CMCse_COSY	a CMCse_1H	a CMCse_1H
d CMCse_HSQC	a CMCse_1H	
e CMCse_HMBC	a CMCse_1H	
f CMCse_15NHSQCf2	a CMCse_1H	
g CMCse_15NHMBCf2	a CMCse_1H	

OK 適用 キャンセル {(&C)}

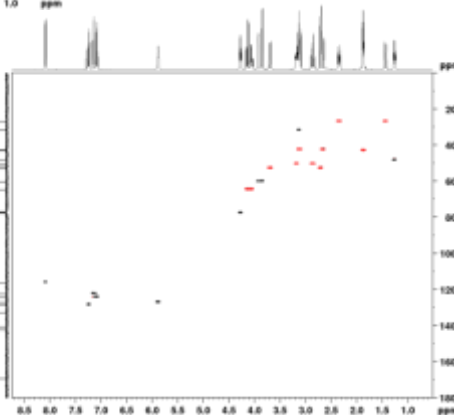
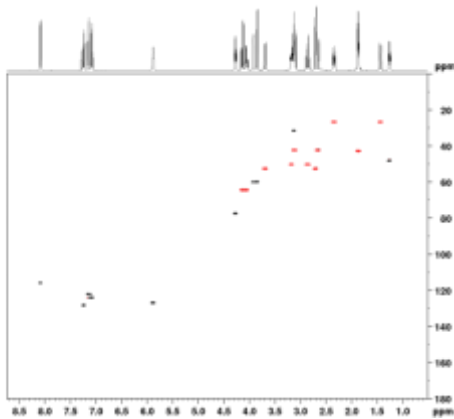
IconNMR — 連続測定メニューの改善

- ① CMCse_HSQCをクリックする.
- ② F1リファレンスをプルダウンする.
- ③ CMCse_13Cを選択する.



IconNMR — 連続測定メニューの修正

- CMCse_HSQCを修正する。
- F1リファレンスにCMCse_13Cが追加されました。



修正後

連続測定のエディター

連続測定の名前とコメントの追加/修正:

名前: CMCse_ALL
コメント: All Experiments for CMCse

連続測定の追加/修正

元のディレクトリー: All Experiments
実験名: CMCse_HSQC
F2 レファレンス: a CMCse_1H
F1 リファレンス: b CMCse_13C

後ろに追加 前に追加 **修正** 削除

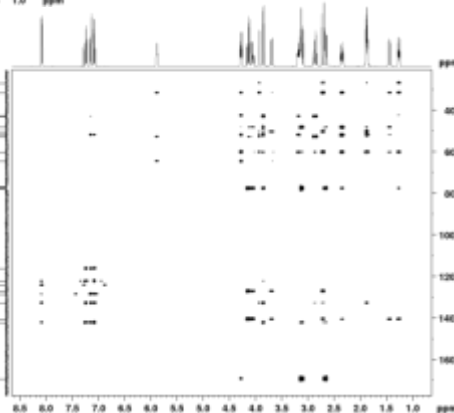
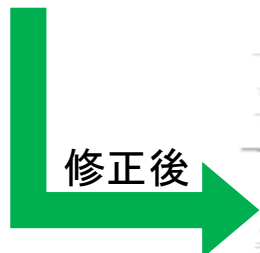
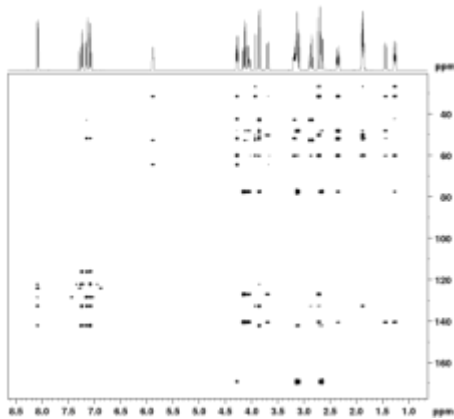
コンポーネントの実験

実験	F2 レファレンス	F1 リファレンス
a CMCse_1H		
b CMCse_13C		
c CMCse_COSY	a CMCse_1H	a CMCse_1H
d CMCse_HSQC	a CMCse_1H	b CMCse_13C
e CMCse_HMBC	a CMCse_1H	
f CMCse_15NHSQCf2	a CMCse_1H	
g CMCse_15NHMBCf2	a CMCse_1H	

OK 適用 キャンセル {(&C)}

IconNMR — 連続測定メニューの修正

- 同様に, CMCse_HMBCを修正する.
- F1リファレンスにCMCse_13Cが追加されました.



連続測定のエディター

連続測定の名前とコメントの追加/修正:

名前: CMCse_ALL
コメント: All Experiments for CMCse

連続測定の追加/修正

元のディレクトリー: All Experiments
実験名: CMCse_HMBC
F2 レファレンス: a CMCse_1H
F1 リファレンス: b CMCse_13C

後ろに追加 前に追加 修正 削除

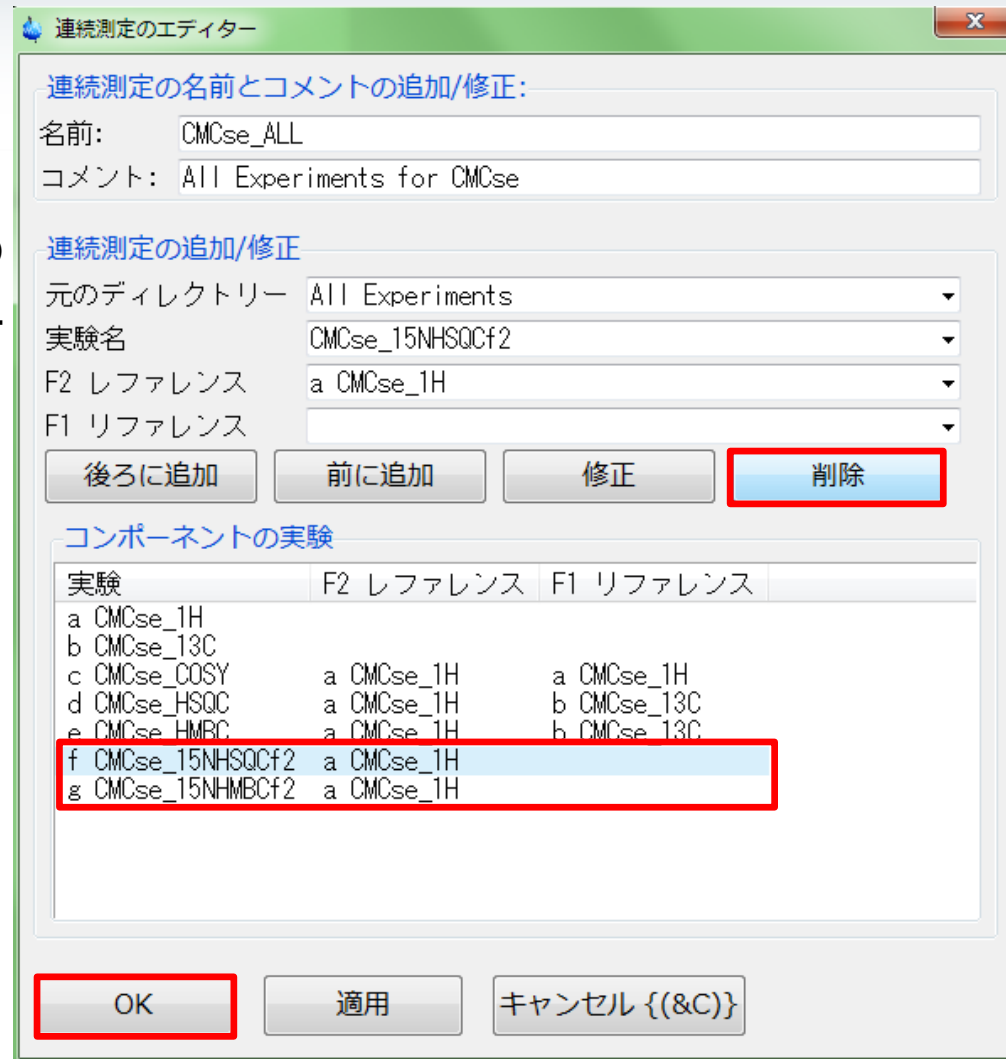
コンポーネントの実験

実験	F2 レファレンス	F1 リファレンス
a CMCse_1H		
b CMCse_13C		
c CMCse_COSY	a CMCse_1H	a CMCse_1H
d CMCse_HSQC	a CMCse_1H	b CMCse_13C
e CMCse_HMBC	a CMCse_1H	b CMCse_13C
f CMCse_15NHSQCf2	a CMCse_1H	
g CMCse_15NHMBCf2	a CMCse_1H	

OK 適用 キャンセル {(C)}

IconNMR — 連続測定メニューの改善

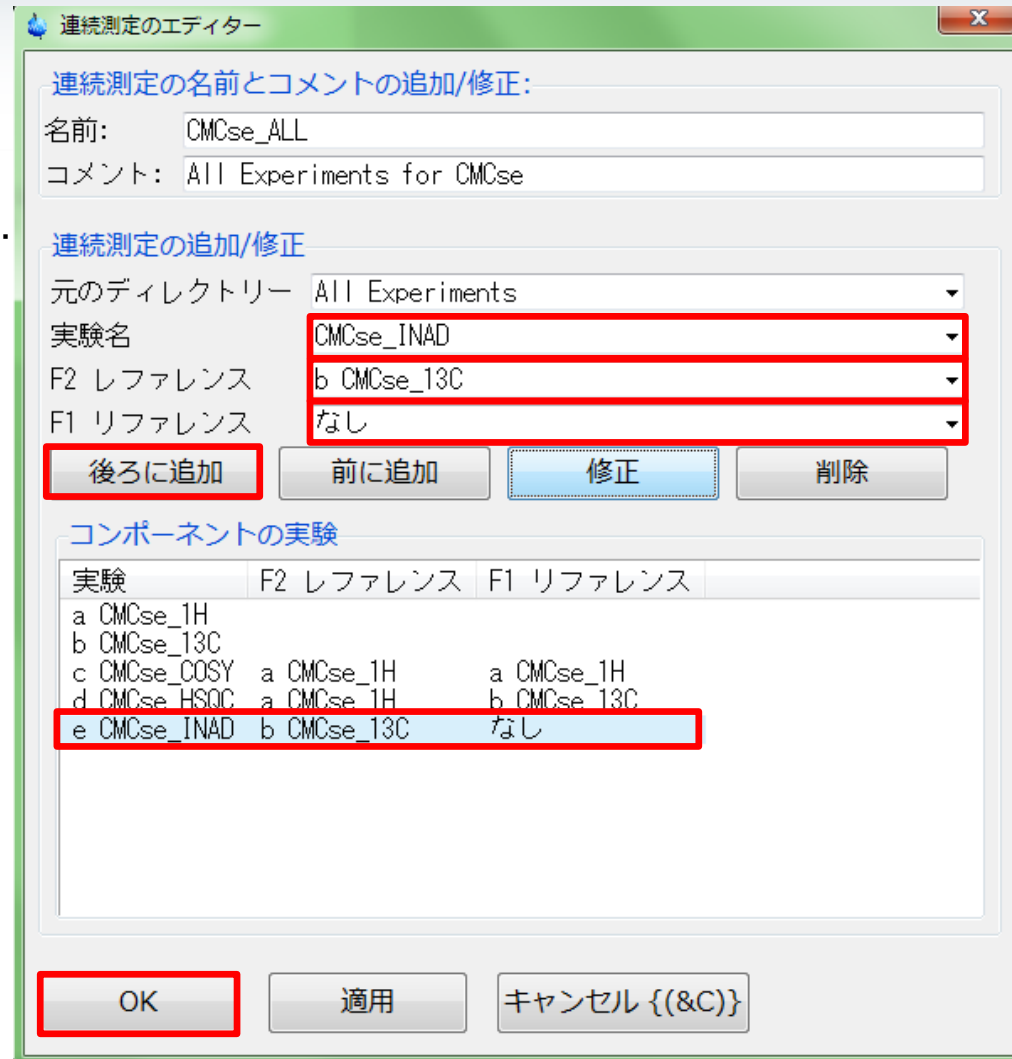
- CMCse_15NHSQCF2および CMCse_15NHMBCF2を削除する。
- 補足: ^{13}C と比べて低感度の実験なので削除する(測定しない)という考え方。
(削除をしなくてももちろんよい)



IconNMR — 連続測定メニューの改善

- ① 実験名をプルダウンする.
- ② CMCse_INADを選択する.
- ③ F2リファレンスをCMCse_13Cにする.
- ④ F1リファレンスを「なし」にする.
- ⑤ 後ろに追加をクリックする.
- ⑥ CMCse_INADが追加されました.

- 補足: 非常に低感度の実験なので
必ずしも追加する必要はない.



IconNMR — 連続測定メニューの保存

- OKまたは適用ボタンをクリックする.

連続測定のエディター

連続測定の名前とコメントの追加/修正:

名前: CMCse_ALL
 コメント: All Experiments for CMCse

連続測定の追加/修正

元のディレクトリー: All Experiments
 実験名: CMCse_INAD
 F2 レファレンス: b CMCse_13C
 F1 リファレンス: なし

後ろに追加 前に追加 修正 削除

コンポーネントの実験

実験	F2 レファレンス	F1 リファレンス
a CMCse_1H		
b CMCse_13C		
c CMCse_COSY	a CMCse_1H	a CMCse_1H
d CMCse_HSQC	a CMCse_1H	b CMCse_13C
e CMCse_INAD	b CMCse_13C	なし

OK 適用 キャンセル {(&C)}

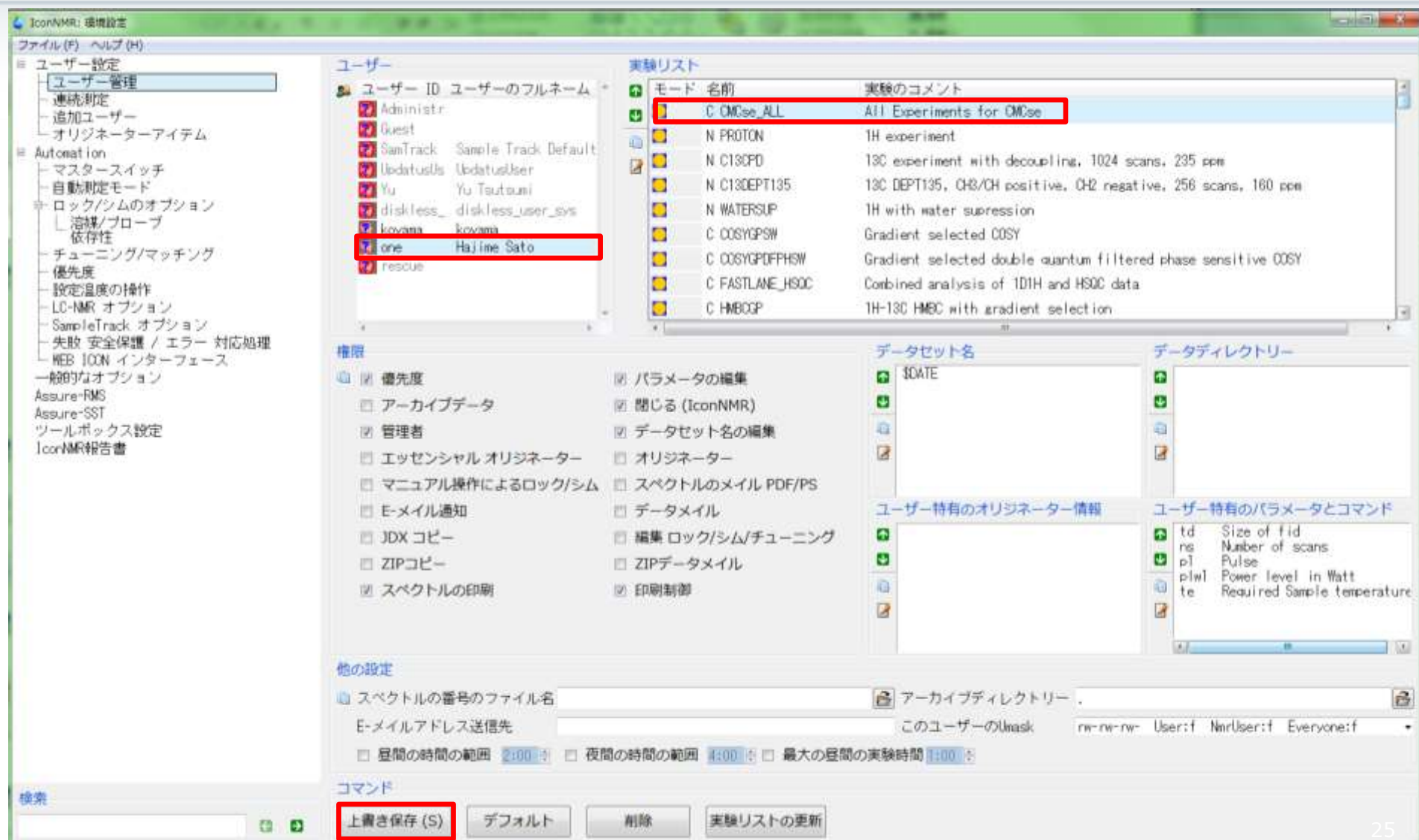
IconNMR — 連続測定メニューの保存

- ① 保存する.
- ② ユーザーIDを選択する.
- ③ 上書き保存する.
- ④ 上書き保存する.



The screenshot displays the IconNMR software interface. The main window shows a list of experiments with columns for name and description. Below the list are buttons for '新規に追加', '修正', '削除', and '保存する'. A dialog box titled 'ユーザーに実験を割り当てる' is open, showing a table with columns 'ユーザー ID' and 'ユーザーのフルネーム'. The table contains one entry: 'one' and 'Hajime Sato'. Below the table are buttons for '上書き保存 ((S))' and '閉じる ((C))'. At the bottom of the main window, there is a 'コマンド' section with buttons for '上書き保存 ((S))', 'デフォルト', and '更新'.

IconNMR — 連続測定メニューの完成



The screenshot shows the IconNMR software interface with the following sections:

- ユーザー管理 (User Management):** A list of users with columns for 'ユーザー ID' and 'ユーザーのフルネーム'. The user 'one' with the name 'Hajime Sato' is highlighted with a red box.
- 実験リスト (Experiment List):** A table of experiments with columns for 'モード', '名前', and '実験のコメント'. The entry 'C OMCse_ALL' with the comment 'All Experiments for OMCse' is highlighted with a red box.
- 権限 (Permissions):** A list of permissions for the selected user, including '優先度', 'アーカイブデータ', '管理者', etc.
- データセット名 (Dataset Name):** A field containing '\$DATE'.
- データディレクトリー (Data Directory):** An empty field.
- ユーザー特有のオリジネーター情報 (User-specific Originator Information):** A list of parameters like 'td', 'ns', 'p1', etc.
- ユーザー特有のパラメータとコマンド (User-specific Parameters and Commands):** A list of parameters like 'td', 'ns', 'p1', etc.
- 他の設定 (Other Settings):** Fields for 'スペクトルの番号のファイル名', 'アーカイブディレクトリー', and 'E-メールアドレス送信先'.
- コマンド (Commands):** A list of buttons including '上書き保存 (S)', 'デフォルト', '削除', and '実験リストの更新'.

低分子の測定と解析の流れ



IconNMR

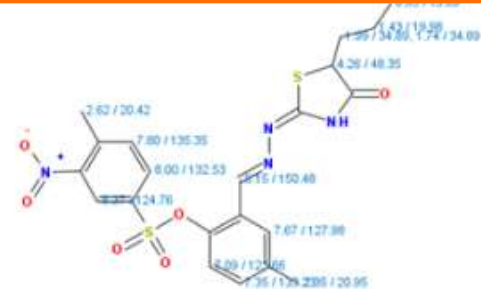
- NMRスペクトルの自動測定
- パラメータセットと環境設定

未知化合物

CMC-se

- NMRスペクトルと分子式を用いた構造解析
- 相関表の作成
- マニュアル操作による相関表の修正
- ^1H - ^{15}N と ^{13}C - ^{13}C 相関スペクトルの活用

既知化合物



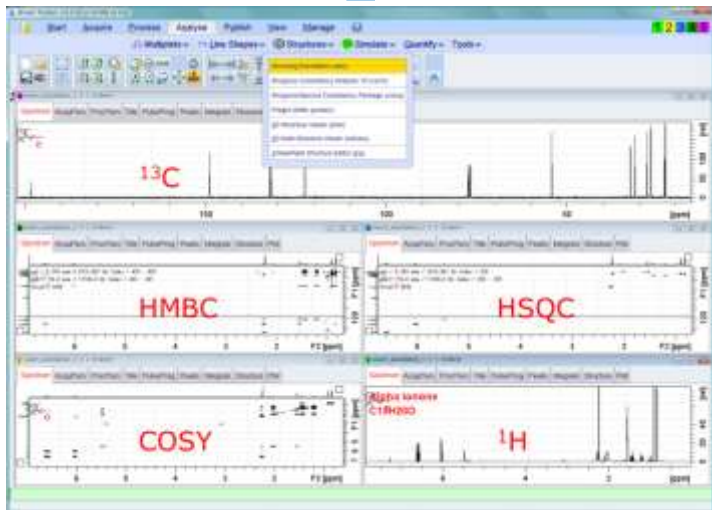
CMC-assist



- NMRスペクトルと構造式を用いたシグナルの帰属
- 不純物由来シグナルの除外
- マニュアル操作による帰属の修正
- 二次元 ^1H - ^{13}C edited HSQCスペクトルの活用
- IconNMRとの連動操作

CMC-se — 分子式とスペクトルを満たす構造式を計算する

- 分子式: $C_{13}H_{20}O$



- NMRスペクトル



- 構造式



¹H table of assignments

Atom	Shift [ppm]	Multiplicity	Bound to	Correlation table
C9	0.83		(C9)	H11
C11	0.91		(C11)	H10
C8'	1.2		(C8)	H9
C8	1.44		(C8)	H8
C13	1.54		(C13)	H7
C12	2.03		(C12)	H5
C10	2.23		(C10)	H5
C6	2.26		(C6)	H4
C5	5.47		(C5)	H3
C3	6.03		(C3)	H2
C2	6.6		(C2)	H1

¹³C table of assignments

Atoms assigned to fragments are shown in italic.

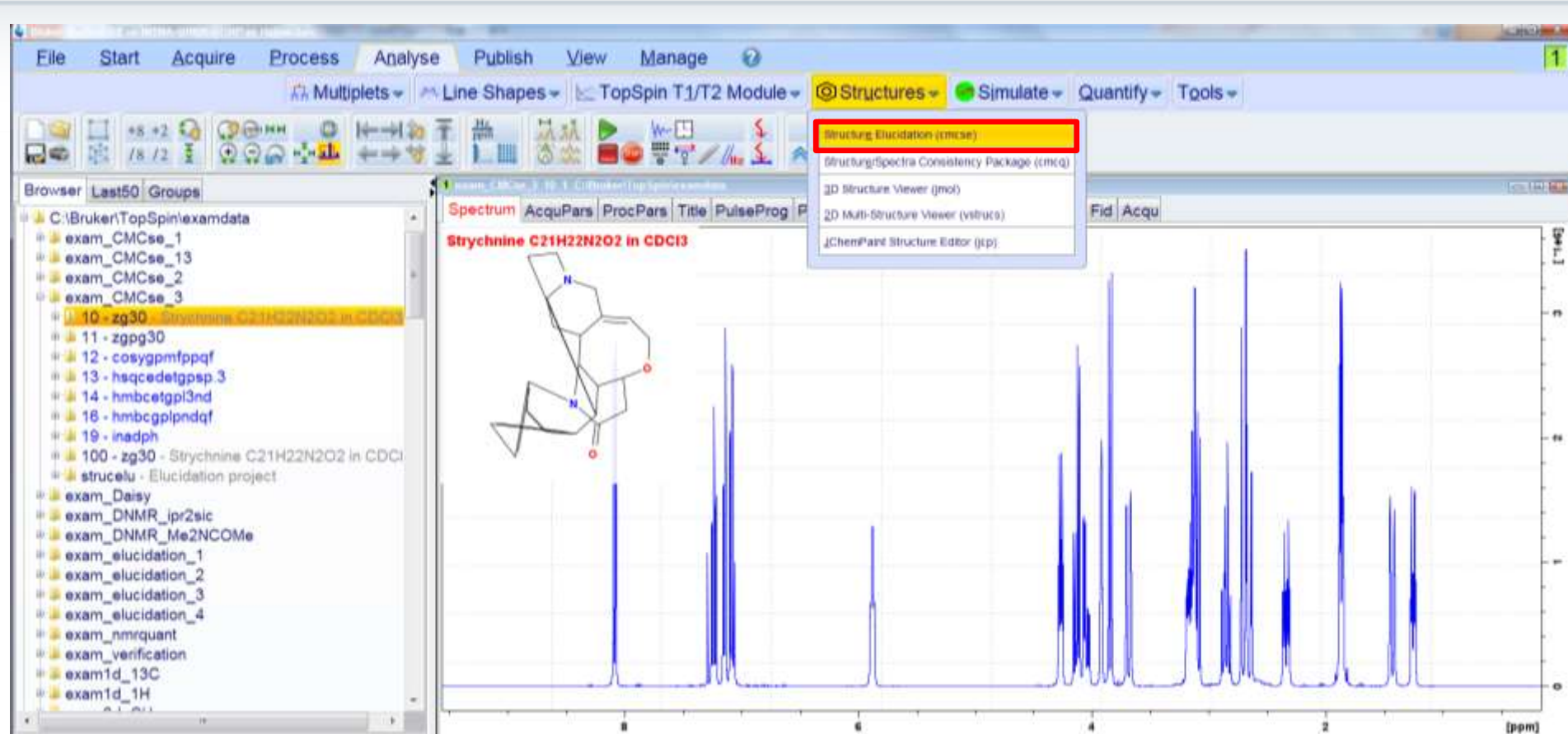
Atom	Shift [ppm]	# H's	Correlation table
	22.72	3	C13
	22.97	2	C12
	26.75	3	C11
	26.89	3	C10
	27.74	3	C9
	31.18	2	C8
	32.46	0	C7
	54.26	1	C6
	122.62	1	C5
	131.87	0	C4
	132.3	1	C3
	148.95	1	C2
	190.35	0	C1

- シグナルの帰属

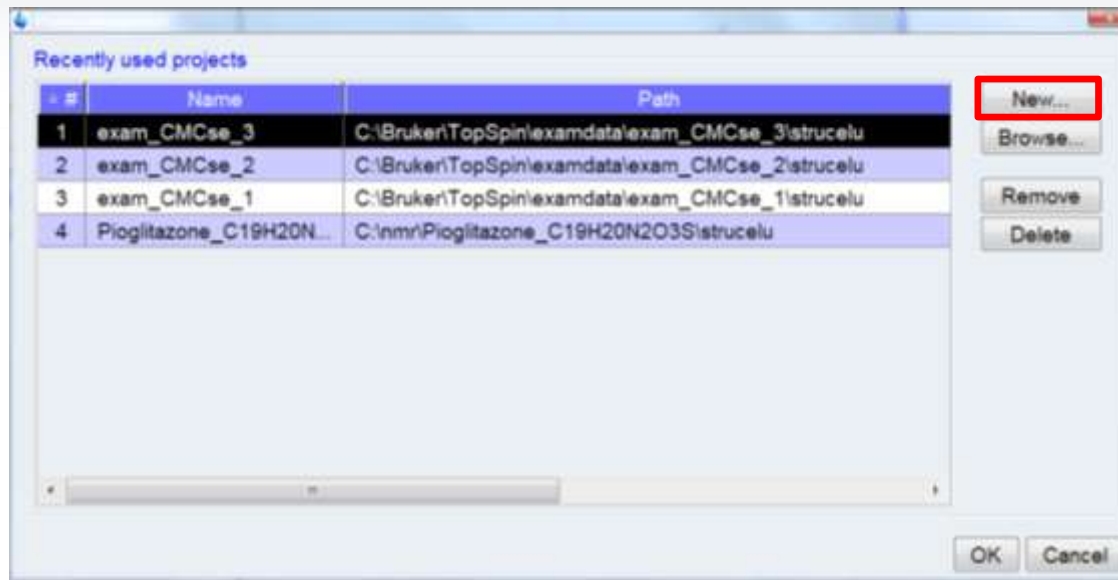


Name	Shift	#H	Eqiv	Hydr	Funct. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11
C13	22.72	3	sp3													
C12	22.97	2	sp3													
C11	26.75	3	sp3													
C10	26.89	3	sp3													
C9	27.74	3	sp3													
C8	31.18	2	sp3													
C7	32.46	0	sp3													
C6	54.26	1	sp3													
C5	122.62	1	sp2													
C4	131.87	0	sp2													
C3	132.3	1	sp2													
C2	148.95	1	sp2													
C1	190.35	0	sp2													

CMC-se 一起動



CMC-se — Projectの作成



CMC-se — Project名, 分子式, 溶媒, データセット

Project

Project name **strucelu**

Location C:\Bruker\TopSpin\examdata\exam_CMCse_13

Sample

Molecular formula **C21H22N2O2**

Solvent **CDCl3**

Description

Options

Derive proton names from skeleton atom

Used spectra

#	Valid	Description	Solvent	Path
1	✓	PROTON [1H]	CDCl3	exam_CMCse_13 10 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
2	✓	C13 [13C]	CDCl3	exam_CMCse_13 11 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
3	✓	HSQC [1H, 13C]	CDCl3	exam_CMCse_13 13 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
4	✓	HMBC [1H, 13C]	CDCl3	exam_CMCse_13 14 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
5	✓	HMBC [1H, 15N]	CDCl3	exam_CMCse_13 16 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
6	✓	COSY [1H, 1H]	CDCl3	exam_CMCse_13 12 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata
7	✓	INADEQUATE [13...	CDCl3	exam_CMCse_13 19 1 C:\Bruker\TopSpin\examdata

Add...
Groups...
Add open datasets
Edit...
Display
Remove

OK Cancel

CMC-se — Automatic analysis of spectra

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2 Start automatic analysis of spectra: 0

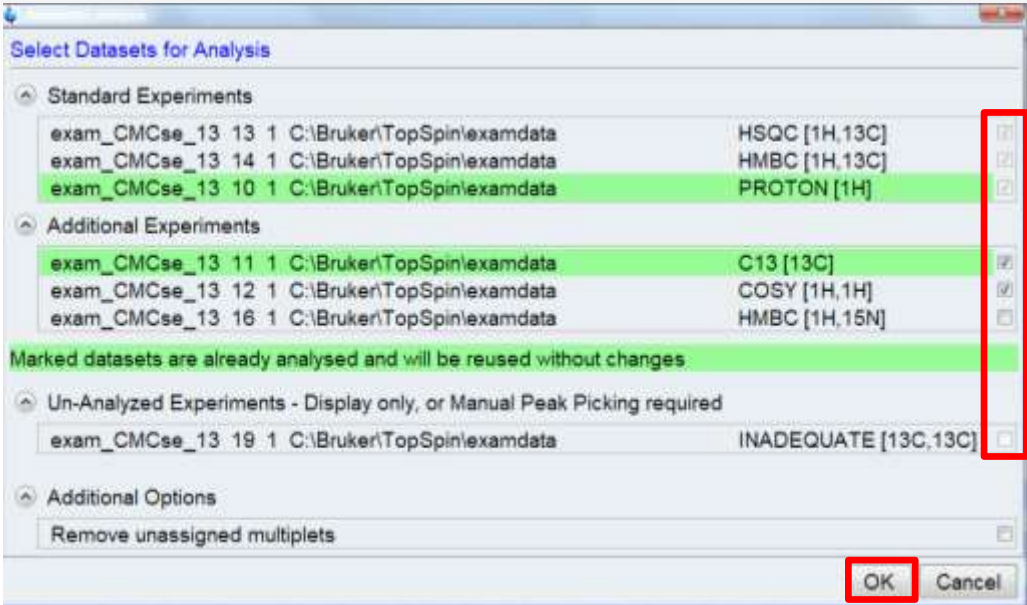
H-C H-H C-C

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	H16	H17	H18	H19	H20	H21	H22	
C21						-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
C20																												
C19																												
C18																												
C17																												
C16																												
C15																												
C14																												
C13																												
C12																												
C11																												
C10																												
C9																												
C8																												
C7																												
C6																												
C5																												
C4																												
C3																												
C2																												
C1																												
N22																												

Structures
Fragments

- CHO
- CHO
- CH
- C 130
- C 132
- N

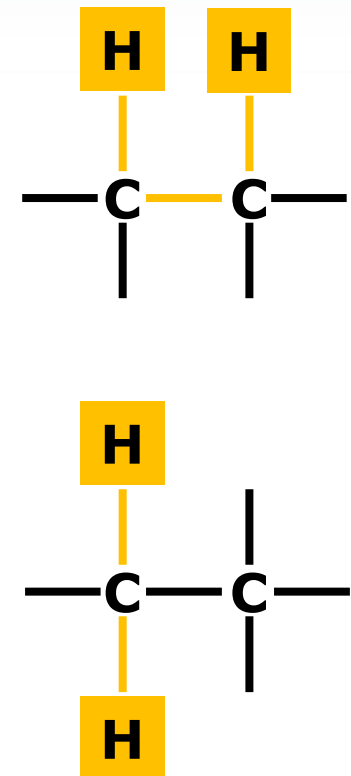
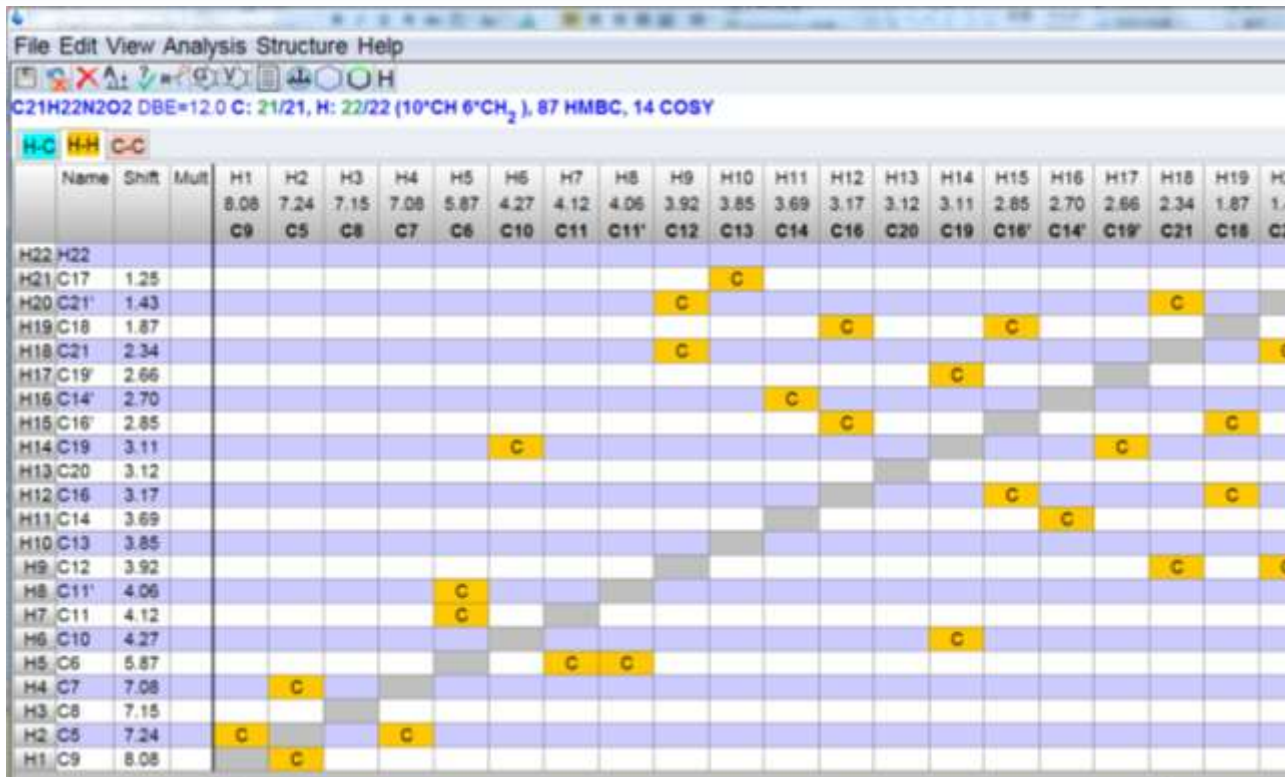
CMC-se — 解析するデータの選択



CMCse — Automatic Analysis 1



- H-Hタブ: COSY



CMCse — Automatic Analysis 1



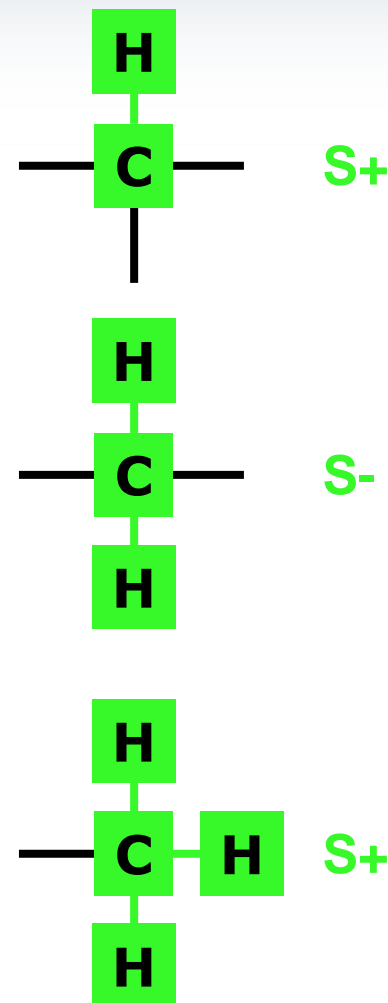
- H-Cタブ: ^{13}C -multiplicity edited HSQC (S+, S-)

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (10^oCH 6^oCH₂), 87 HMBC, 14 COSY

H-C H-H C-C

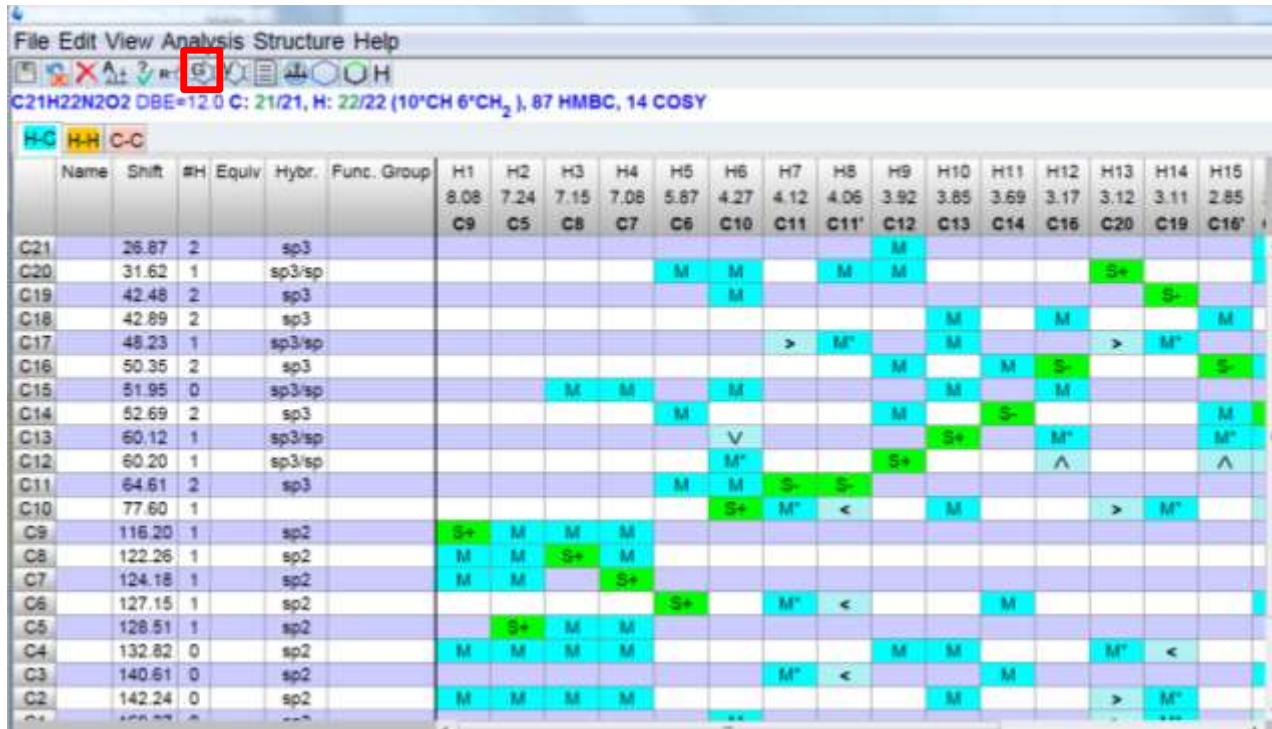
Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	
						8.08	7.24	7.15	7.08	5.87	4.27	4.12	4.06	3.92	3.85	3.69	3.17	3.12	3.11	2.85	
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	C12	C13	C14	C16	C20	C19	C16'	
C21	26.87	2		sp3										M							
C20	31.62	1		sp3/sp						M	M		M	M				S+			
C19	42.48	2		sp3							M				M				S-		M
C18	42.89	2		sp3											M						M
C17	48.23	1		sp3/sp								>	M'		M				>	M'	
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-				S-
C15	51.95	0		sp3/sp				M	M		M				M		M				M
C14	52.69	2		sp3						M				M		S-					M
C13	60.12	1		sp3/sp							V				S+		M'				M'
C12	60.20	1		sp3/sp							M'			S+			^				^
C11	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-								
C10	77.60	1									S+	M'	<		M				>	M'	
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M												
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M												
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+												
C6	127.15	1		sp2						S+		M'	<			M					
C5	128.51	1		sp2			S+	M	M												
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M				M'	<	
C3	140.61	0		sp2									M'	<		M					
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M				>	M'	



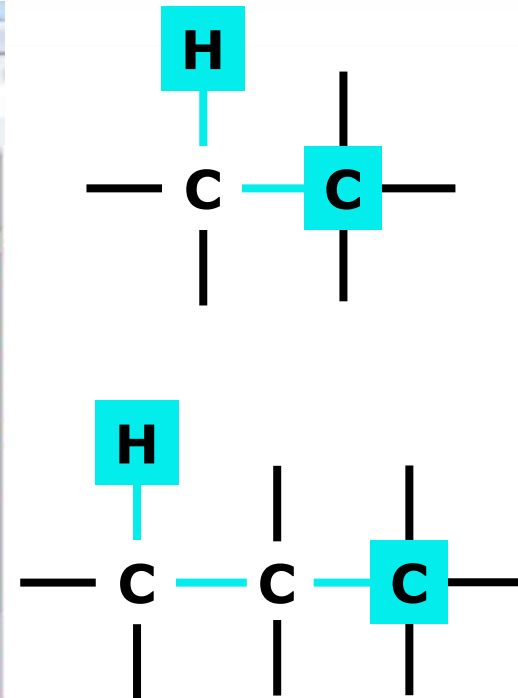
CMCse — Automatic Analysis 1



- H-Cタブ: HMBC (M) と“fuzzy” HMBC (M*, <, >)



Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	C12	C13	C14	C16	C20	C19	C16'
C21	26.87	2		sp3										M						
C20	31.62	1		sp3/sp					M	M		M	M				S+			
C19	42.48	2		sp3						M								S-		
C18	42.89	2		sp3										M		M				M
C17	48.23	1		sp3/sp								>	M*		M			>	M*	
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-			S-
C15	51.95	0		sp3/sp			M	M		M				M		M				
C14	52.69	2		sp3					M					M		S-				M
C13	60.12	1		sp3/sp						V				S+		M*				M*
C12	60.20	1		sp3/sp						M*				S+			^			^
C11	64.61	2		sp3					M	M	S-	S-								
C10	77.60	1								S+	M*	<			M			>	M*	
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M										>	M*
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M											
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+											
C6	127.15	1		sp2					S+		M*	<			M					
C5	128.51	1		sp2		S+	M	M												
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M				M*	<
C3	140.61	0		sp2								M*	<			M				
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M				>	M*

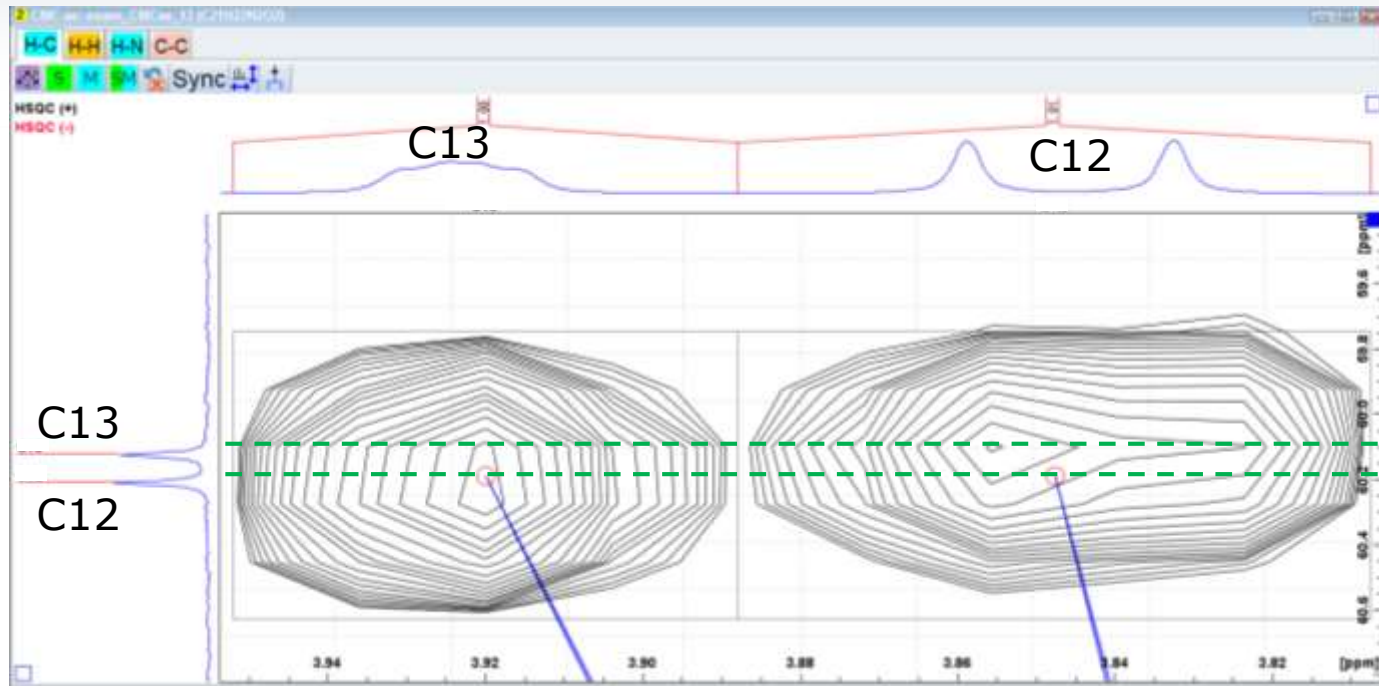


- Generate Structure Proposals

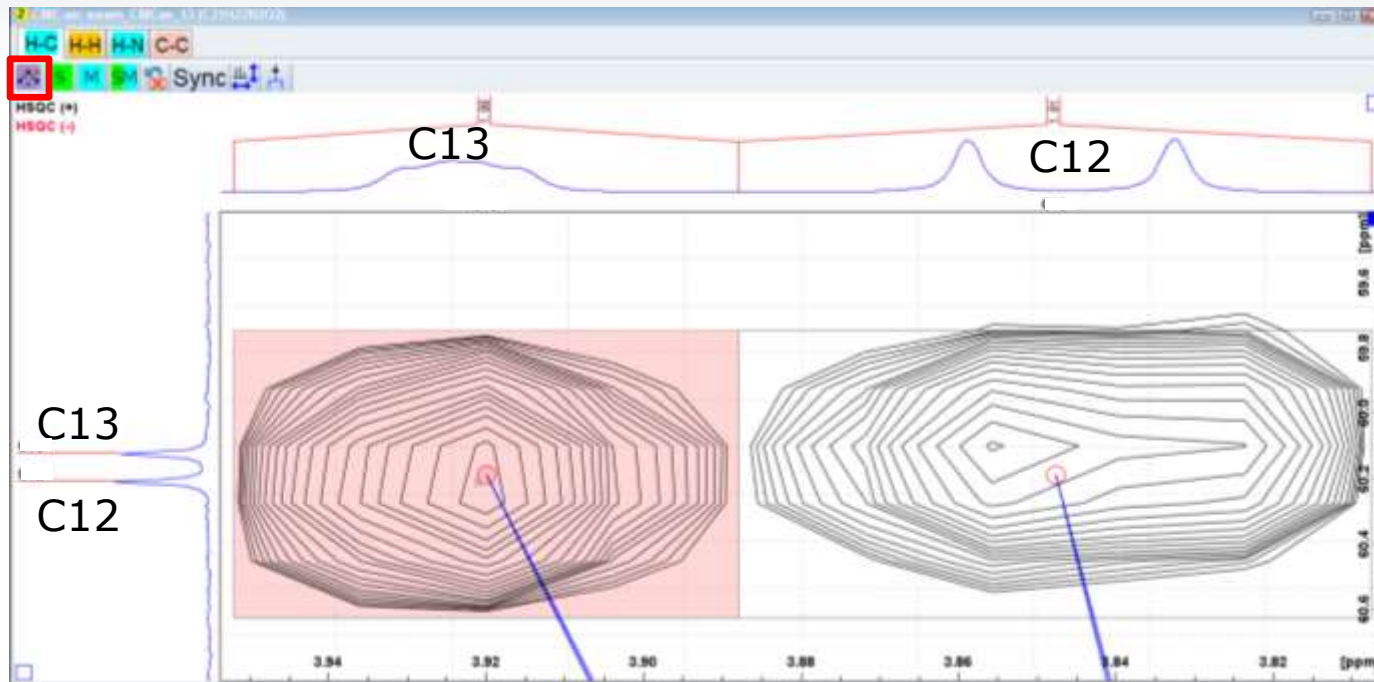


→ 構造式の候補が計算される。
計算されないこともある。

CMC-se — 自動解析におけるミス (HSQC拡大図)



CMC-se — 自動解析におけるミス (HSQC拡大図)



CMC-se — ピークの削除

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (10°C^H 6°C^{H2}), 87 HMBC, 14 COSY

H-C H-H C-C

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	H16	H17	H18	H19	H20	H21	H22
						8.08	7.24	7.15	7.08	5.87	4.27	4.12	4.06	3.92	3.85	3.69	3.17	3.12	3.11	2.85	2.70	2.66	2.34	1.87	1.43	1.25	-
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	C13	C12	C14	C16	C20	C19	C16'	C14'	C19'	C21	C18	C21'	C17	H22
C21	26.87	2		sp3										M							M		S-		S-	M	
C20	31.62	1		sp3/sp						M	M			M	M				S+		M		M		M	M	
C19	42.48	2		sp3							M									S-		S-					
C18	42.89	2		sp3											M		M				M			S-			
C17	48.23	1		sp3/sp									>	M*		M					M*			M		M	S+
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-				S-	M		M			
C15	51.95	0		sp3/sp					M	M		M			M								M	M	M		
C14	52.69	2		sp3						M					M		S-				M	S-					
C13	60.12	1		sp3/sp							V				S+						M*	M*		V	M*	M*	M*
C12	60.20	1		sp3/sp							M*											^	^	M*	^	^	^
C11	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-														
C10	77.60	1									S+	M*	<														M
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M																		
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M																		
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+																		
C6	127.15	1		sp2						S+		M*	<														
C5	128.51	1		sp2			S+	M	M																		
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M				M*	<					M		
C3	140.61	0		sp2								M*	<			M						M		M		M	M
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M					>	M*						
C1	169.27	0		sp2							M									>	M*		>	M*			

HSQC (+)
HSQC (-)
HMBC
Delete
Clear current row...
Disable or enable current correlation
Edit

CMC-se — ピークの追加

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 21/22 (9*CH 6*CH₂), 87 HMBC, 14 COSY

H-C H-H C-C

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	H16	H17	H18	H19	H20	H21	H22
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	H9	C12	C14	C16	C20	C19	C16'	C14'	C19'	C21	C18	C21'	C17	
C21	26.87	2		sp3										M							M		S-		S-	M	
C20	31.62	1		sp3/sp						M	M			M				S+			M		M		M	M	
C19	42.48	2		sp3							M								S-			S-					
C18	42.89	2		sp3											M		M			M				S-			
C17	48.23	1		sp3/sp								>	M*		M				>	M*				M		M	S+
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-			S-	M			M		M	
C15	51.95	0		sp3/sp				M	M						M		M						M	M	M		
C14	52.69	2		sp3						M					M		S-				M	S-					
C13	60.12	0		sp3/sp							V										M*	M*	V	M*	M*	M*	
C12	60.20	1		sp3/sp							M*																
C11	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-														
C10	77.60	1									S+	M*	<														
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M																		
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M																		
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+																		
C6	127.15	1		sp2						S+			M*	<													
C5	128.51	1		sp2			S+	M	M																		
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M						M	M			M*	<					M		
C3	140.61	0		sp2									M*	<			M						M		M	M	M
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M																		
C1	169.27	0		sp2							M																

CMC-se — ピークの追加/修正

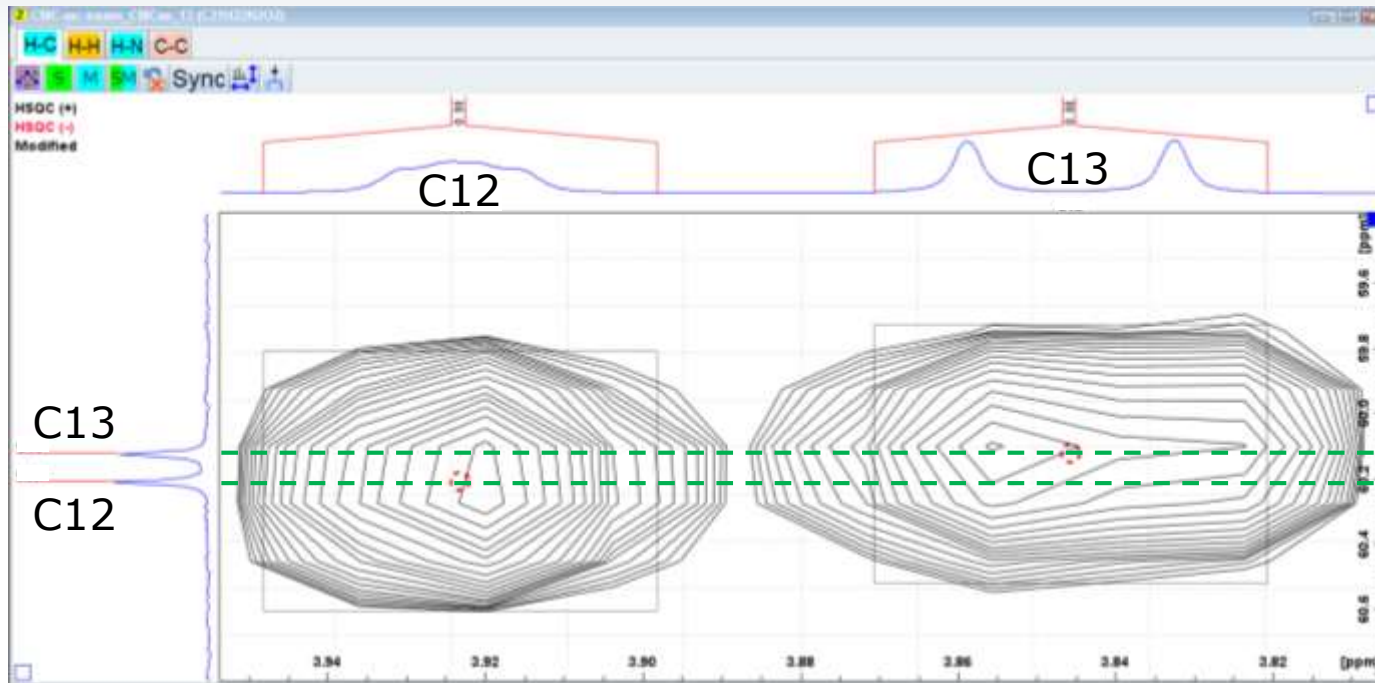
File Edit View Analysis Structure Help

C₂₁H₂₂N₂O₂ DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (10*CH 6*CH₂), 87 HMBC, 14 COSY

H-C H-H C-C

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	H16	H17	H18	H19	H20	H21	H22
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	C12	C13	C14	C16	C20	C19	C16'	C14'	C19'	C21	C18	C21'	C17	H22
C21	26.87	2		sp3										M						M		S-		S-	M		
C20	31.62	1		sp3/sp					M	M			M	M				S+		M		M		M	M		
C19	42.48	2		sp3						M									S-			S-					
C18	42.89	2		sp3										M		M				M			S-				
C17	48.23	1		sp3/sp								>	M*		M				>	M*			M		M	S+	
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-			S-	M		M		M		
C15	51.95	0		sp3/sp				M	M		M				M								M	M	M		
C14	52.69	2		sp3					M					M		S-				M	S-						
C13	60.12	1		sp3/sp						V				M*	S+				M*	M*		V	M*	M*	M*		
C12	60.20	1		sp3/sp						M*				S+													
C11	64.61	2		sp3				M	M	S-	S-																
C10	77.60	1								S+	M*	<			M				>	M*		>	M*	M		M	
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M																		
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M																		
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+																		
C6	127.15	1		sp2						S+		M*	<			M						M					
C5	128.51	1		sp2			S+	M	M																		
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M						M	M			M*	<				M			
C3	140.61	0		sp2								M*	<			M						M		M	M	M	
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M					>	M*						
C1	169.27	0		sp2							M									>	M*		>	M*			

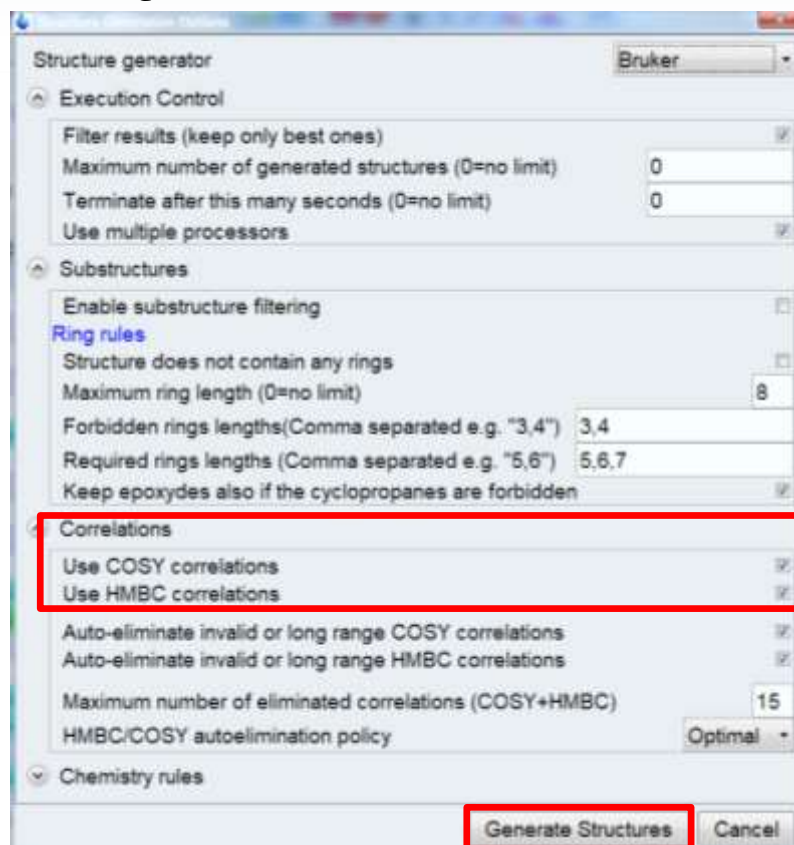
CMC-se — ピークの修正



CMC-se — Generate Structure Proposals 1



- ^1H , COSY, ^1H - ^{13}C HSQC/HMBCを用いた解析



CMC-se — Generate Structure Proposals 1

- 構造式の候補：多数

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (10°CH 6°CH₂), 87 HMBC, 14 COSY

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	
						C9	C5	C8	C7	C6	C10	C11	C11'	C12	C13	C14	C16	C20	C19	C16'	
C21	26.87	2		sp3										M							
C20	31.62	1		sp3/sp						M	M		M	M				S+			
C19	42.48	2		sp3							M								S-		
C18	42.89	2		sp3											M		M				M
C17	48.23	1		sp3/sp								>	M*		M			>	M*		
C16	50.35	2		sp3										M		M	S-				S-
C15	51.95	0		sp3/sp				M	M		M			M		M	M				
C14	52.69	2		sp3					M					M		S-					M
C13	60.12	1		sp3/sp							V				S+		M*				M*
C12	60.20	1		sp3/sp							M*			S+				^			^
C11	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-								
C10	77.60	1									S+	M*	<		M			>	M*		
C9	116.20	1		sp2		S+	M	M	M												
C8	122.26	1		sp2		M	M	S+	M												
C7	124.18	1		sp2		M	M		S+												
C6	127.15	1		sp2						S+		M*	<		M						
C5	128.51	1		sp2			S+	M	M												
C4	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M			M*	<		
C3	140.61	0		sp2								M*	<		M						
C2	142.24	0		sp2		M	M	M	M					M				>	M*		

Fragments Structures

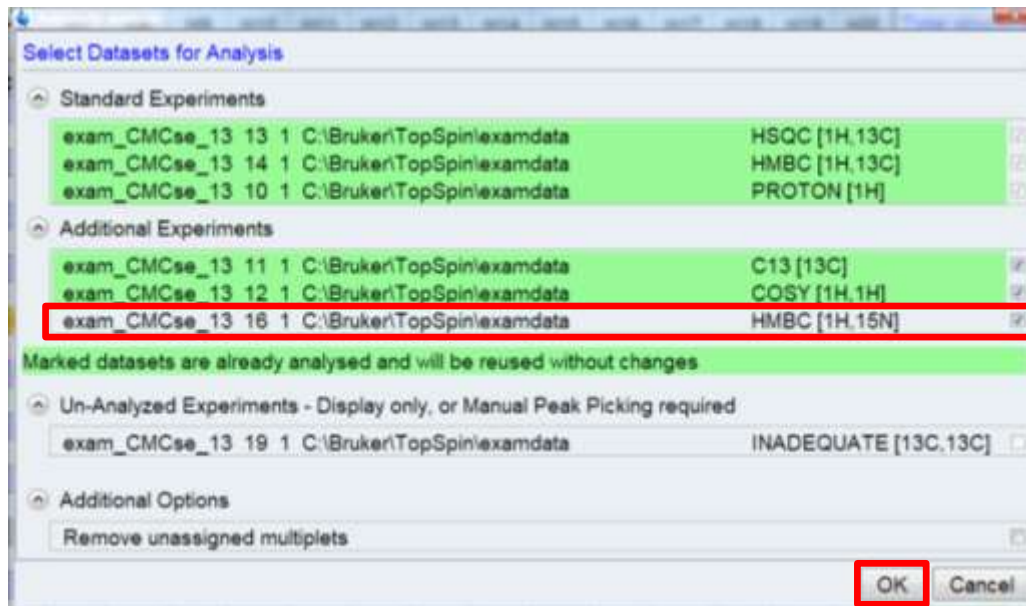
File = strucelu.sdf
Total structures in file = 365



CMC-se — Automatic Analysis 2



- ^1H - ^{15}N HMBCの追加
- 一度解析したスペクトルは、再計算しない。



CMC-se — Automatic Analysis 2



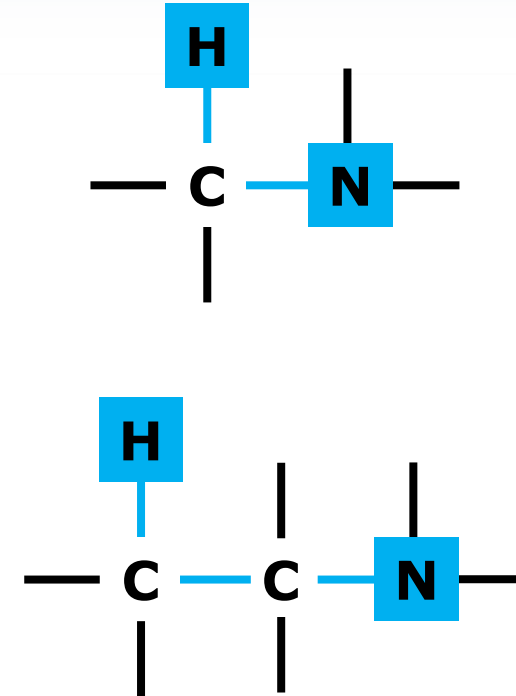
- H-Cタブ: N22とN23が追加された. ^1H - ^{15}N HMBC関連.

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (^{10}CH 6°CH_2), 97 HMBC, 14 COSY, 19 INADEQ

H-C H-H C-C

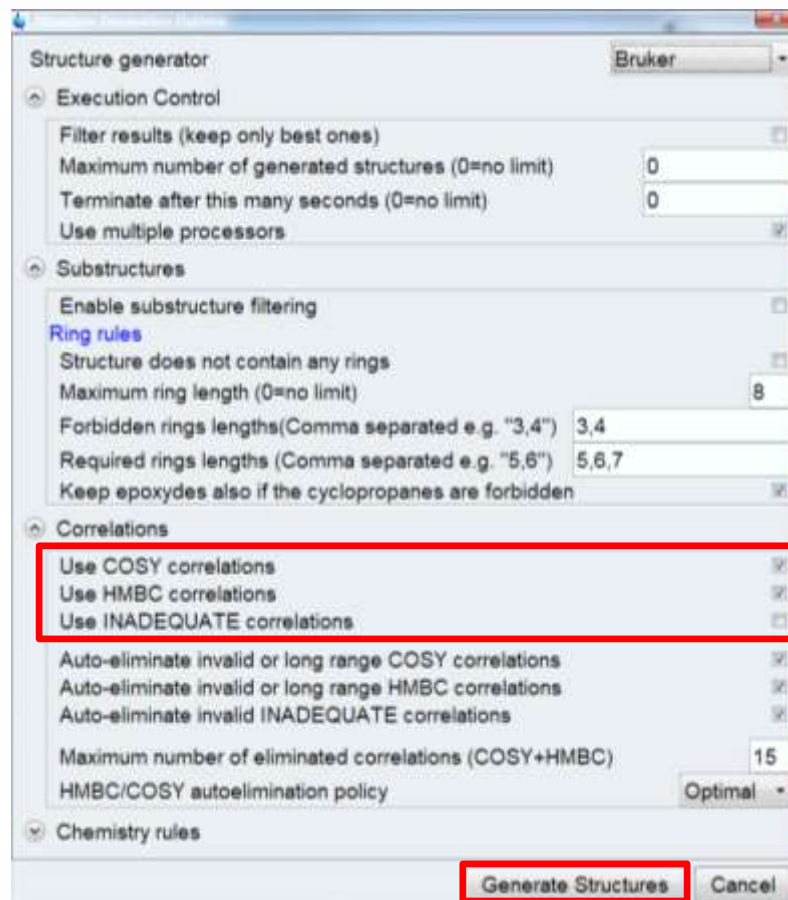
Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	H14	H15	
						8.07	7.23	7.14	7.07	5.86	4.26	4.11	4.05	3.91	3.84	3.68	3.16	3.12	3.10	2.84	
						1	3	3'	1'	5	16	8	8'	19	17	11	7	15	10	7'	
C21_9	26.87	2		sp3										M							
C20_15	31.62	1		sp3/sp						M	M			M	M			S+			
C19_10	42.48	2		sp3							M*				V		V		S-	V	
C18_6	42.89	2		sp3							^				M*		M*			M*	
C17_20	48.23	1		sp3/sp						M					M			M*	<		
C16_7	50.35	2		sp3										M		M	S-			S-	
C15_21	51.95	0		sp3/sp					M*	M*	V	M			M		M			V	
C14_11	52.69	2		sp3				^	^	M*				M		S-				M*	
C13_17	60.20	1		sp3/sp							M*				S+					M*	
C12_19	60.12	1		sp3/sp						^				S+						^	
C11_8	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-								
C10_16	77.60	1								S+	M*	<			M			M*	<		
C9_1	116.20	1		sp2		S+	M	M	M												
C8_3	122.26	1		sp2		M	M	S+	M												
C7_1	124.18	1		sp2		M	M		S+												
C6_5	127.15	1		sp2						S+		M*	<			M					
C5_3	128.51	1		sp2		S+	M	M													
C4_13	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M						
C3_12	140.61	0		sp2								M*	<			M					
C2_14	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M			M*	<		
C1_18	169.27	0		sp2							M							>	M*		
N22	153.44						M								M			M			
N23	39.21													M		M	M				M
O24_24																					
O25_25																					



CMC-se — Generate Structure Proposals 2



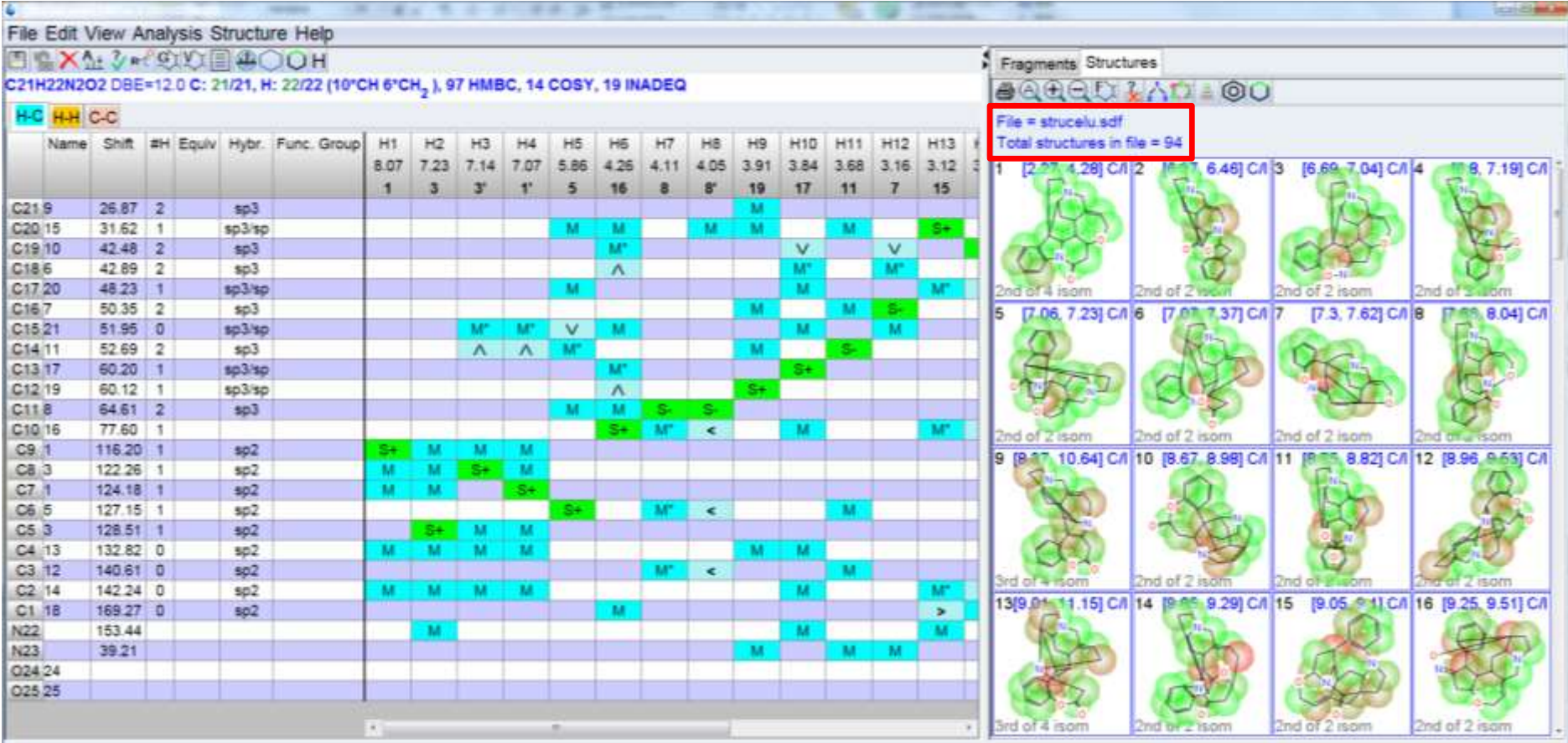
- ^1H , COSY, HSQC, HMBCを用いた解析



CMC-se — Generate Structure Proposals 2



- 構造式の候補: 94個



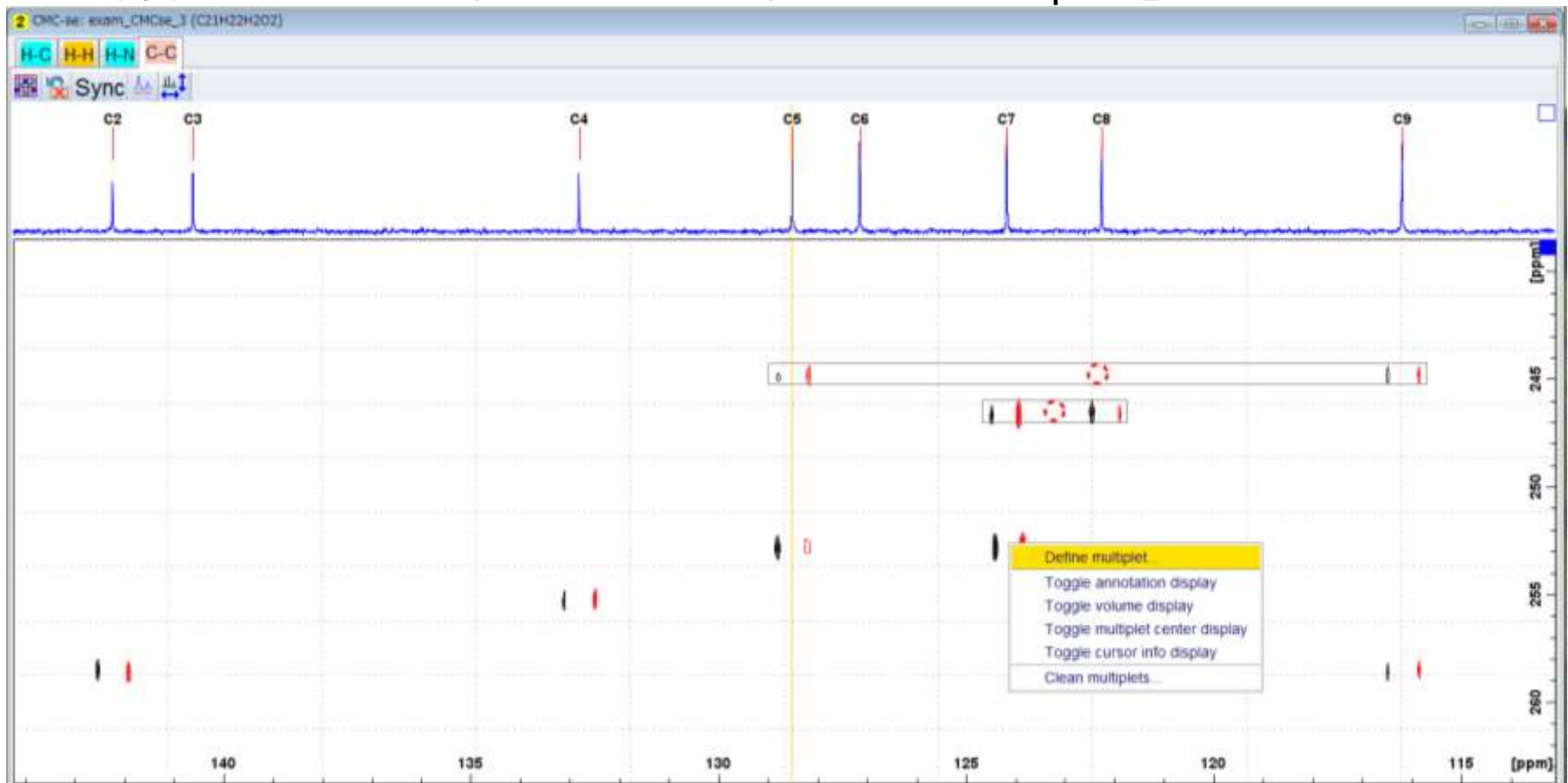
The screenshot displays the Bruker CMC-se software interface. On the left, a table lists NMR data for various carbon atoms. On the right, a grid of 16 chemical structure proposals is shown, each with a label indicating its rank and associated chemical shifts.

Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9	H10	H11	H12	H13	
						8.07	7.23	7.14	7.07	5.86	4.26	4.11	4.05	3.91	3.84	3.68	3.16	3.12	
						1	3	3'	1'	5	16	8	8'	19	17	11	7	15	
C21 9	26.87	2		sp3										M					
C20 15	31.62	1		sp3/sp						M	M		M	M		M			S+
C19 10	42.48	2		sp3							M*				V		V		
C18 6	42.89	2		sp3							Δ				M*		M*		
C17 20	48.23	1		sp3/sp						M					M				M*
C16 7	50.35	2		sp3										M		M		S-	
C15 21	51.95	0		sp3/sp				M*	M*	V	M				M				M
C14 11	52.69	2		sp3				Δ	Δ	M*				M		S-			
C13 17	60.20	1		sp3/sp							M*				S+				
C12 19	60.12	1		sp3/sp							Δ				S+				
C11 8	64.61	2		sp3						M	M	S-	S-						
C10 16	77.60	1									S+	M*	<		M				M*
C9 1	116.20	1		sp2		S+	M	M	M										
C8 3	122.26	1		sp2		M	M	S+	M										
C7 1	124.18	1		sp2		M	M		S+										
C6 5	127.15	1		sp2						S+		M*	<			M			
C5 3	128.51	1		sp2			S+	M	M										
C4 13	132.82	0		sp2		M	M	M	M					M	M				
C3 12	140.61	0		sp2								M*	<			M			
C2 14	142.24	0		sp2		M	M	M	M						M				M*
C1 18	169.27	0		sp2															>
N22	153.44														M				M
N23	39.21													M		M	M		
O24 24																			
O25 25																			

The right panel shows 16 structure proposals (1-16) with labels like "1 [2.27, 4.28] C/I", "2 [5.77, 6.48] C/I", etc. A red box highlights the text "File = structelu.sdf" and "Total structures in file = 94".

CMC-se — INADEQUATEの追加

- マニュアル操作によるINADEQUATE相関ピークのピックアップ
- 相関ピークのところで、右プルダウンし、Define multipletをクリックする。



CMC-se — C-Cタブ

- INADEQUATEの相関表の完成

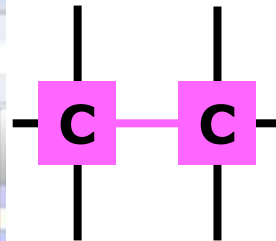
CMC-se: exam_CMCse_3 (C21H22H2O2)

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22H2O2 DBE=10.0 C: 21/21, H: 22/24 (10°CH 6°CH₂), 87 HMBC, 14 COSY, 18 INADEQ

H-C H-H C-C

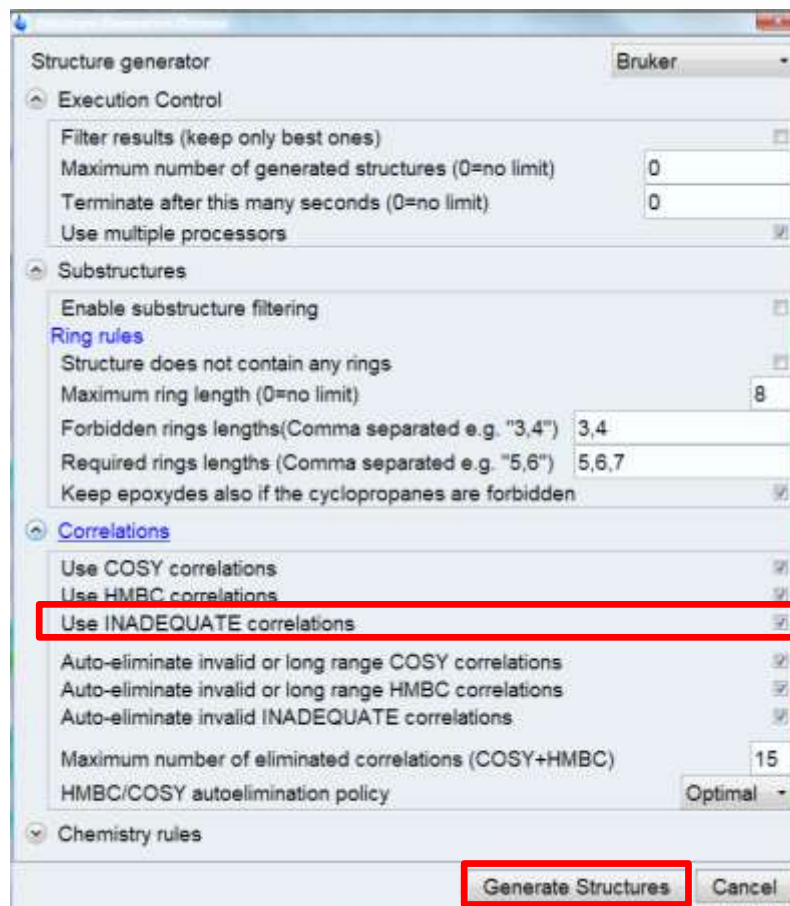
Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18	C19	C20	C21
						169.27	142.24	140.61	132.82	128.51	127.15	124.18	122.26	116.20	77.60	64.61	60.20	60.12	52.69	51.95	50.35	48.23	42.89	42.48	31.62	26.87
C21	26.87	2		sp3																						
C20	31.62	1		sp3/sp																						
C19	42.48	2		sp3																						
C18	42.89	2		sp3																						
C17	48.23	1		sp3/sp																						
C16	50.35	2		sp3																						
C15	51.95	0		sp3/sp																						
C14	52.69	2		sp3																						
C13	60.12	1		sp3/sp																						
C12	60.20	1		sp3/sp																						
C11	64.61	2		sp3																						
C10	77.60	1																								
C9	116.20	1		sp2																						
C8	122.26	1		sp2																						
C7	124.18	1		sp2																						
C6	127.15	1		sp2																						
C5	128.51	1		sp2																						
C4	132.82	0		sp2																						
C3	140.61	0		sp2																						
C2	142.24	0		sp2																						
C1	169.27	0		sp2																						
O22																										
O23																										



CMC-se — Generate Structure Proposals 3



- INADEQUATEを含めた解析



CMC-se — Generate Structure Proposals 3



- C-Cタブ: INADEQUATE
- 構造式の候補: 3個

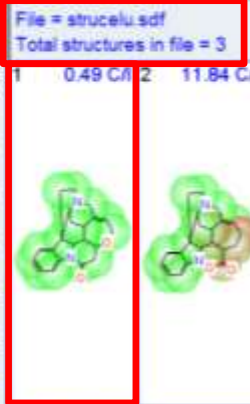

File Edit View Analysis Structure Help

C21H22N2O2 DBE=12.0 C: 21/21, H: 22/22 (10°CH 6°CH₂), 97 HMBC, 14 COSY, 19 INADEQ

H-C H-H C-C

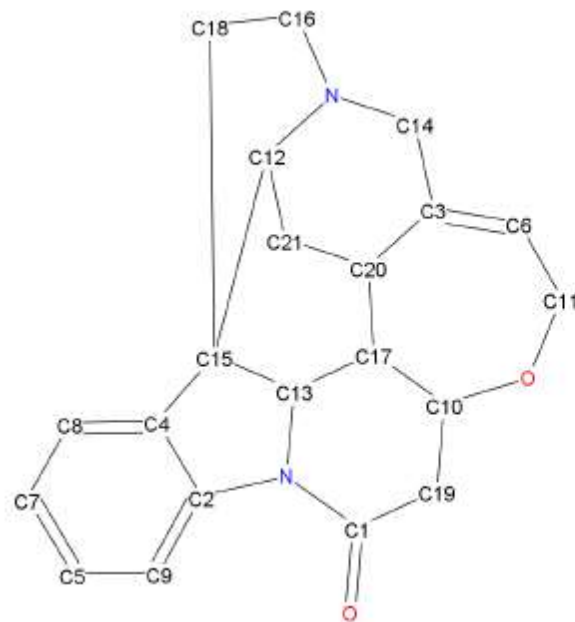
Name	Shift	#H	Equiv	Hybr.	Func. Group	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13	C14	C15	C16	C17	C18	C19	C20	C21
						169.27	142.24	140.61	132.82	128.51	127.15	124.18	122.26	116.20	77.60	64.61	60.12	60.20	52.69	51.95	50.35	48.23	42.89	42.89	42.89	42.89
						18	14	12	13	3	5	1	3	1	16	8	19	17	11	21	7	20	6			
C21 9	26.87	2		sp3																						
C20 15	31.62	1		sp3/sp																						
C19 10	42.48	2		sp3																						
C18 6	42.89	2		sp3																						
C17 20	48.23	1		sp3/sp																						
C16 7	50.35	2		sp3																						
C15 21	51.95	0		sp3/sp																						
C14 11	52.69	2		sp3																						
C13 17	60.20	1		sp3/sp																						
C12 19	60.12	1		sp3/sp																						
C11 8	64.61	2		sp3																						
C10 16	77.60	1																								
C9 1	116.20	1		sp2																						
C8 3	122.26	1		sp2																						
C7 1	124.18	1		sp2																						
C6 5	127.15	1		sp2																						
C5 3	128.51	1		sp2																						
C4 13	132.82	0		sp2																						
C3 12	140.61	0		sp2																						
C2 14	142.24	0		sp2																						
C1 18	169.27	0		sp2																						
N22	153.44																									
N23	39.21																									
O24 24																										
O25 25																										

File = strucelu.sdf
Total structures in file = 3

CMC-se レポート

- 得られた構造式



Details

Chemical formula: C₂₁H₂₂N₂O₂

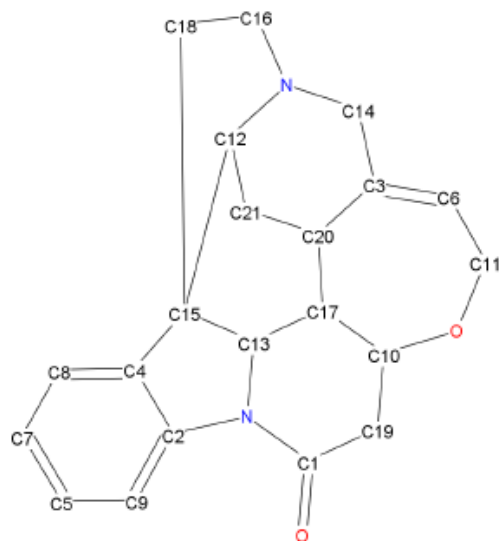
Mass [Da]: 334.17

Solvent: CDCl₃

Description:



- 得られた帰属表



¹H table of assignments

Atom	Shift [ppm]	Multiplicity	Bound to	Correlation table
C17	1.25		(C17)	H21
C21'	1.43		(C21)	H20
C18	1.87		(C18)	H19
C21	2.34		(C21)	H18
C19'	2.66		(C19)	H17
C14'	2.7		(C14)	H16
C16'	2.85		(C16)	H15
C19	3.11		(C19)	H14
C20	3.12		(C20)	H13
C16	3.17		(C16)	H12
C14	3.69		(C14)	H11
C13	3.85		(C13)	H10
C12	3.92		(C12)	H9
C11'	4.06		(C11)	H8
C11	4.12		(C11)	H7
C10	4.27		(C10)	H6
C6	5.87		(C6)	H5
C7	7.08		(C7)	H4
C8	7.15		(C8)	H3
C5	7.24		(C5)	H2
C9	8.08		(C9)	H1

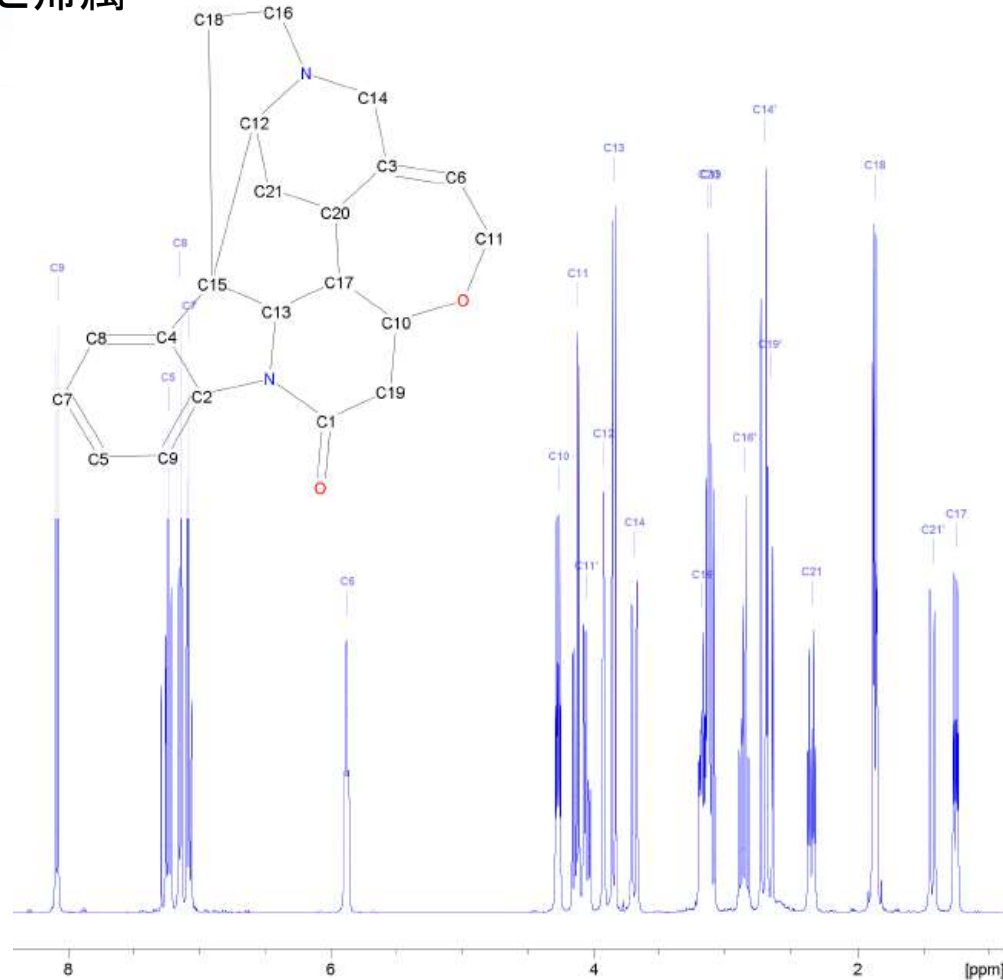
¹³C table of assignments

Atoms assigned to fragments are shown in *italic*.

Atom	Shift [ppm]	# H's	Correlation table
<i>C21</i>	26.87	2	C21
<i>C20</i>	31.62	1	C20
<i>C19</i>	42.48	2	C19
<i>C18</i>	42.89	2	C18
<i>C17</i>	48.23	1	C17
<i>C16</i>	50.35	2	C16
<i>C15</i>	51.95	0	C15
<i>C14</i>	52.69	2	C14
<i>C13</i>	60.12	1	C13
<i>C12</i>	60.2	1	C12
<i>C11</i>	64.61	2	C11
<i>C10</i>	77.6	1	C10
<i>C9</i>	116.2	1	C9
<i>C8</i>	122.26	1	C8
<i>C7</i>	124.18	1	C7
<i>C6</i>	127.15	1	C6
<i>C5</i>	128.51	1	C5
<i>C4</i>	132.82	0	C4
<i>C3</i>	140.61	0	C3
<i>C2</i>	142.24	0	C2
<i>C1</i>	169.27	0	C1

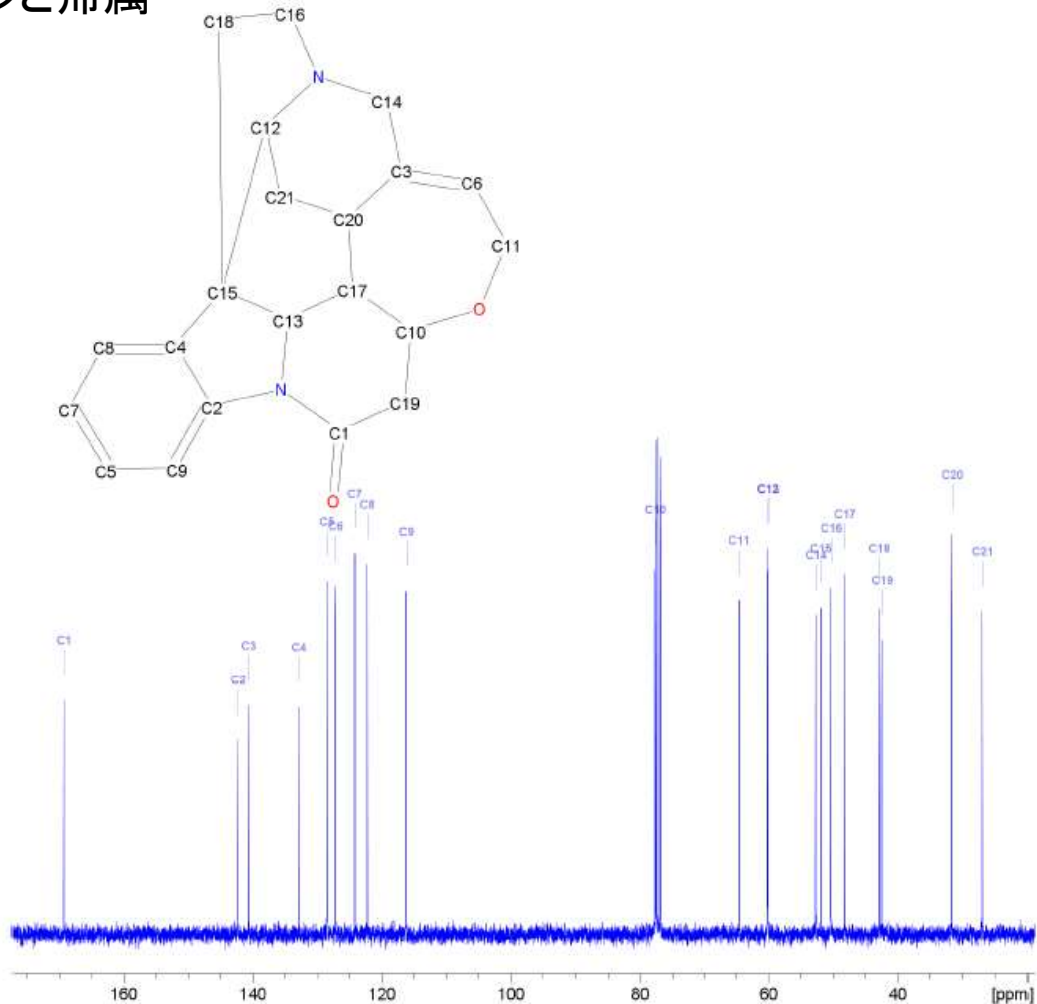
CMC-se レポート

- ^1H スペクトルと帰属



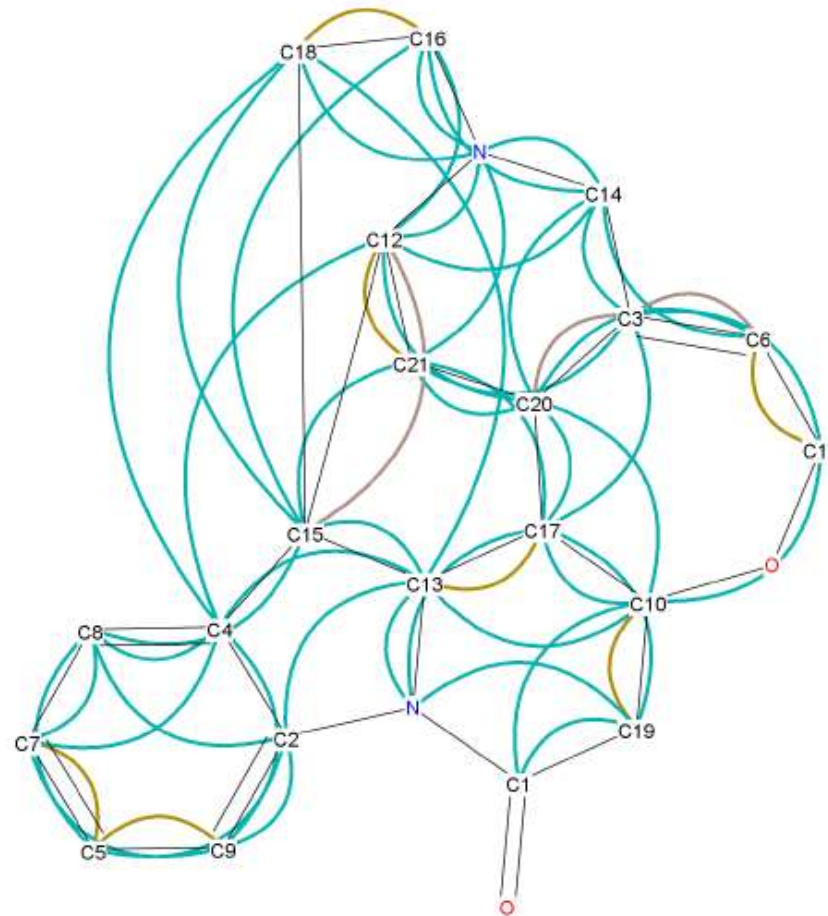
CMC-se レポート

- ^{13}C スペクトルと帰属



CMC-se — レポート

- 解析に用いられた相関



低分子の測定と解析の流れ



CMC-se

- NMRスペクトルと分子式を用いた構造解析
- 相関表の作成
- マニュアル操作による相関表の修正
- ^1H - ^{15}N と ^{13}C - ^{13}C 相関スペクトルの活用

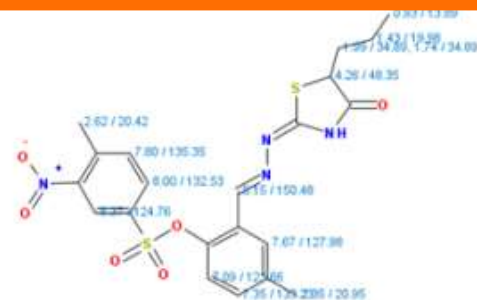
未知化合物



IconNMR

- NMRスペクトルの自動測定
- パラメータセットと環境設定

既知化合物

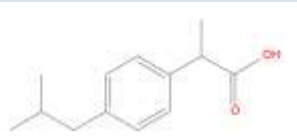


CMC-assist

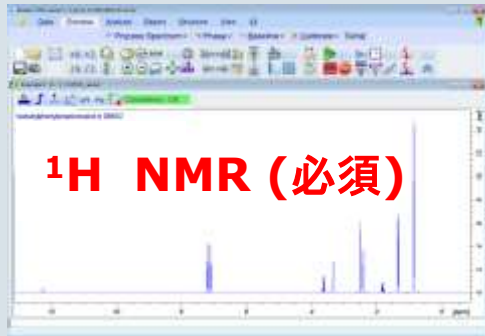


- NMRスペクトルと構造式を用いたシグナルの帰属
- 不純物由来シグナルの除外
- マニュアル操作による帰属の修正
- 二次元 ^1H - ^{13}C edited HSQCスペクトルの活用
- IconNMRとの連動操作

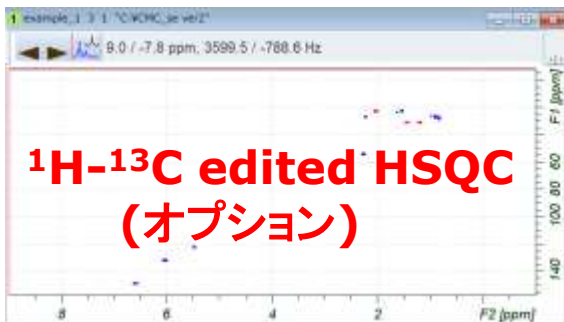
CMC-assist –特徴



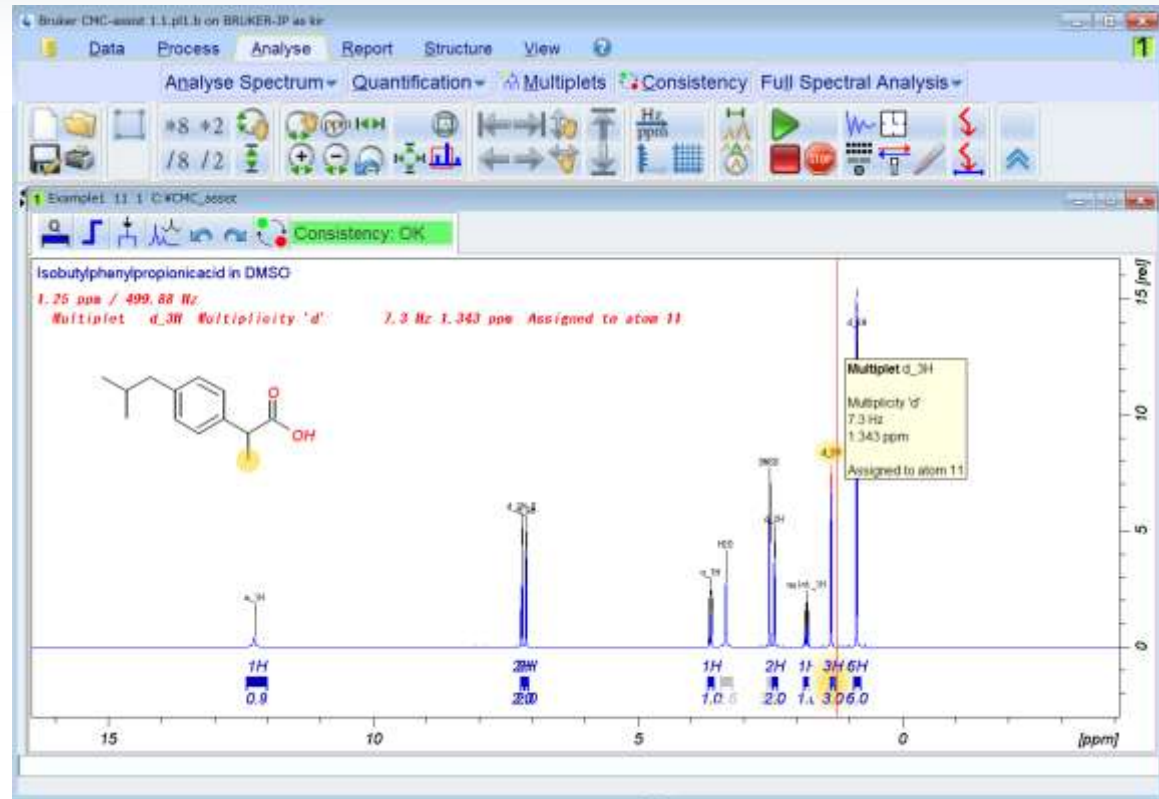
構造式(必須)



^1H NMR (必須)

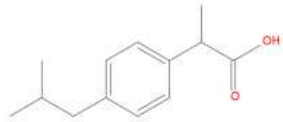


^1H - ^{13}C edited HSQC
(オプション)

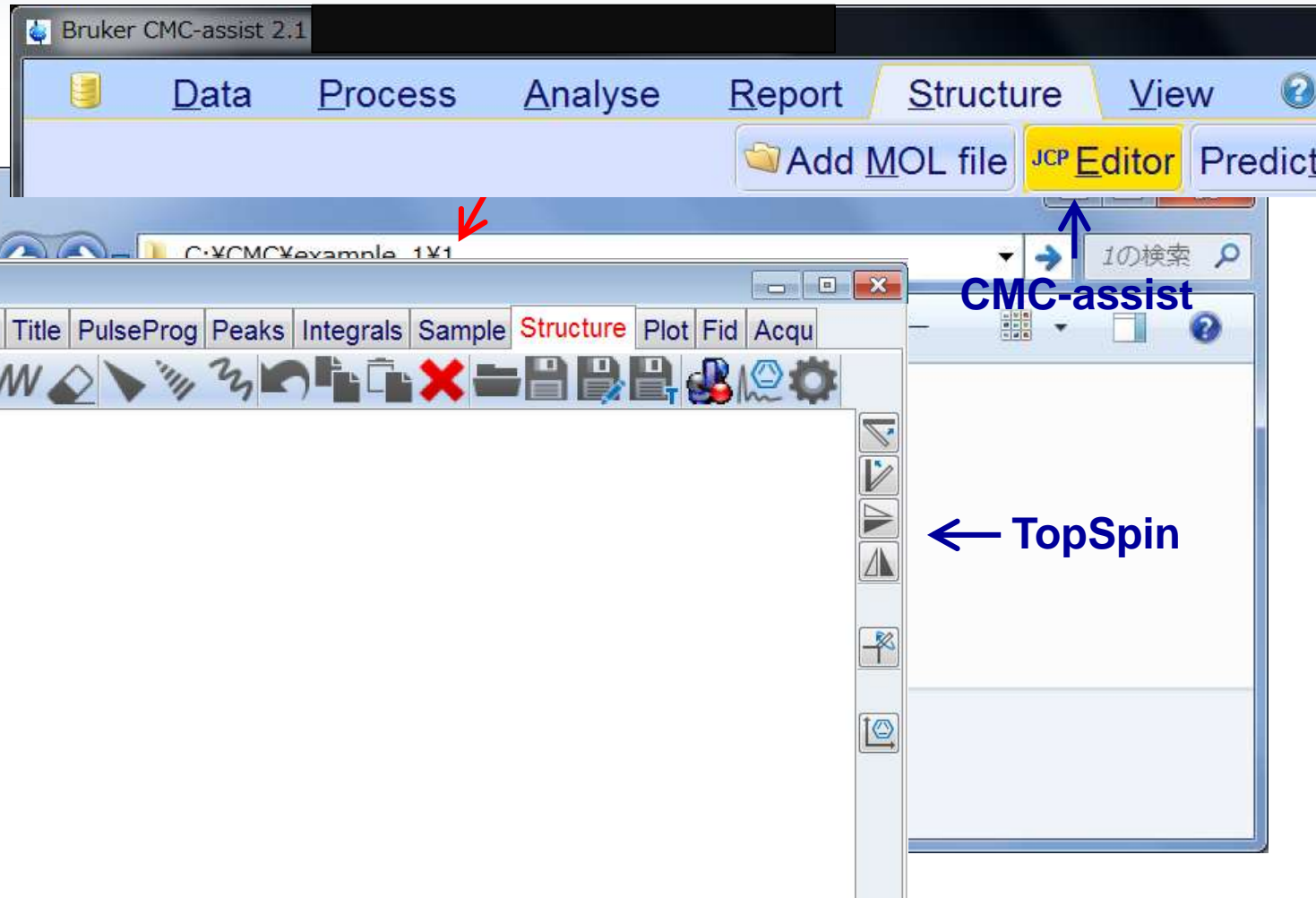


帰属, レポート

CMC-assist -molファイル

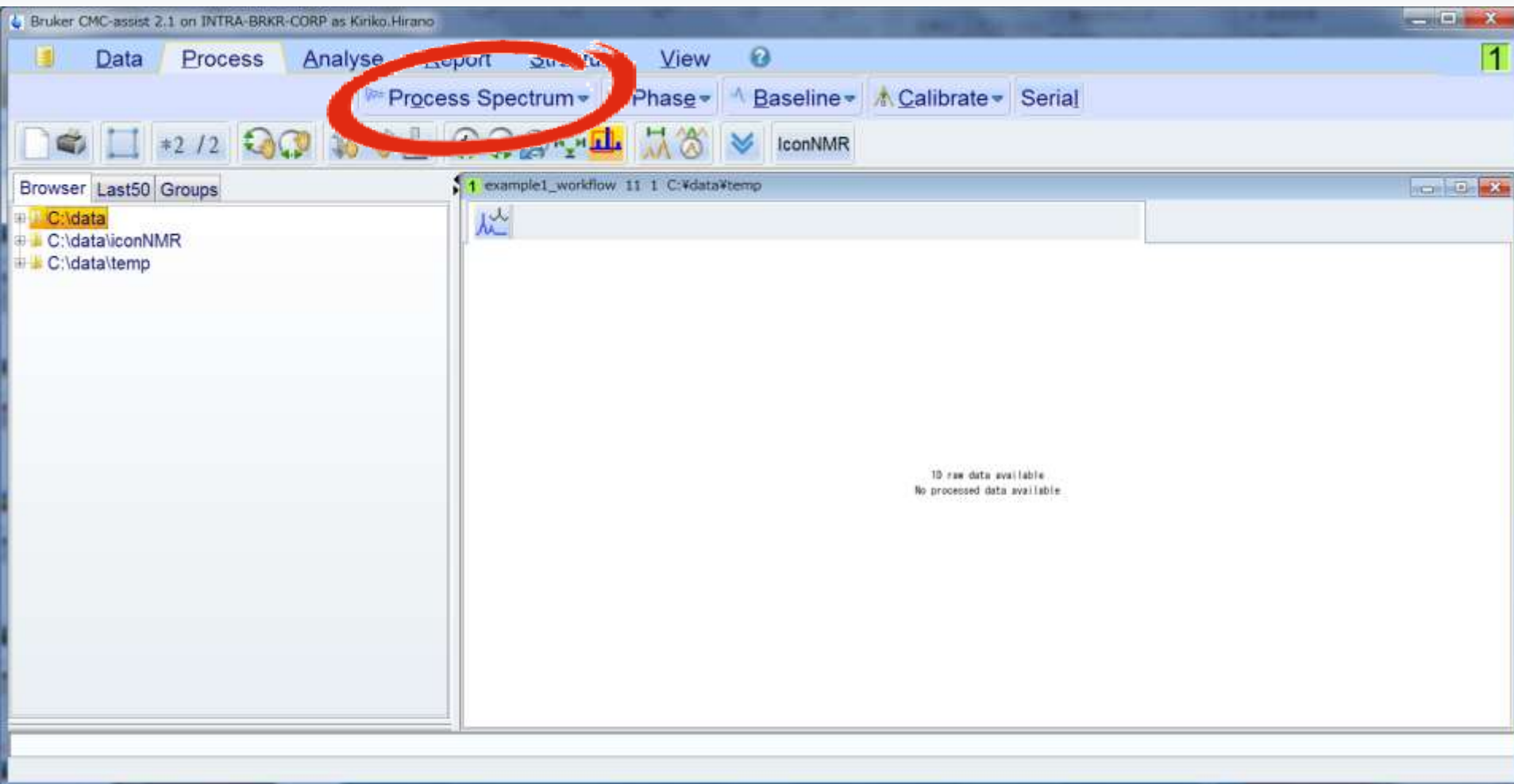


(構造式)

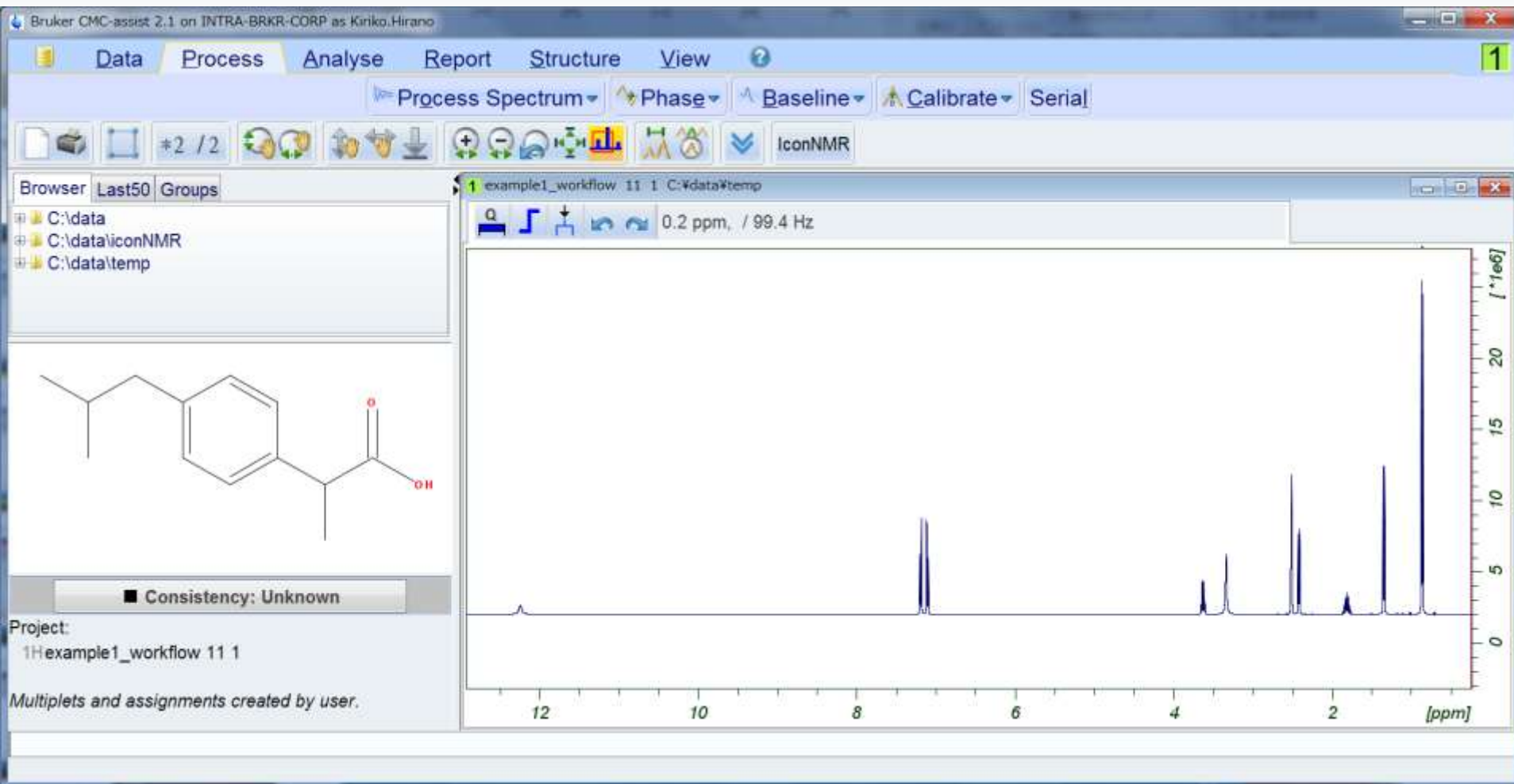


The screenshot shows the Bruker CMC-assist 2.1 software interface. The main window has a menu bar with 'Data', 'Process', 'Analyse', 'Report', 'Structure', and 'View'. Below the menu bar, there are buttons for 'Add MOL file', 'JCP Editor', and 'Predict'. A red arrow points to the 'JCP Editor' button. In the foreground, there is a smaller window titled 'test 1 1 C:\data\test' with a toolbar containing various icons for spectrum analysis. A blue arrow labeled 'CMC-assist' points to the 'JCP Editor' button, and another blue arrow labeled 'TopSpin' points to the 'Structure' menu item.

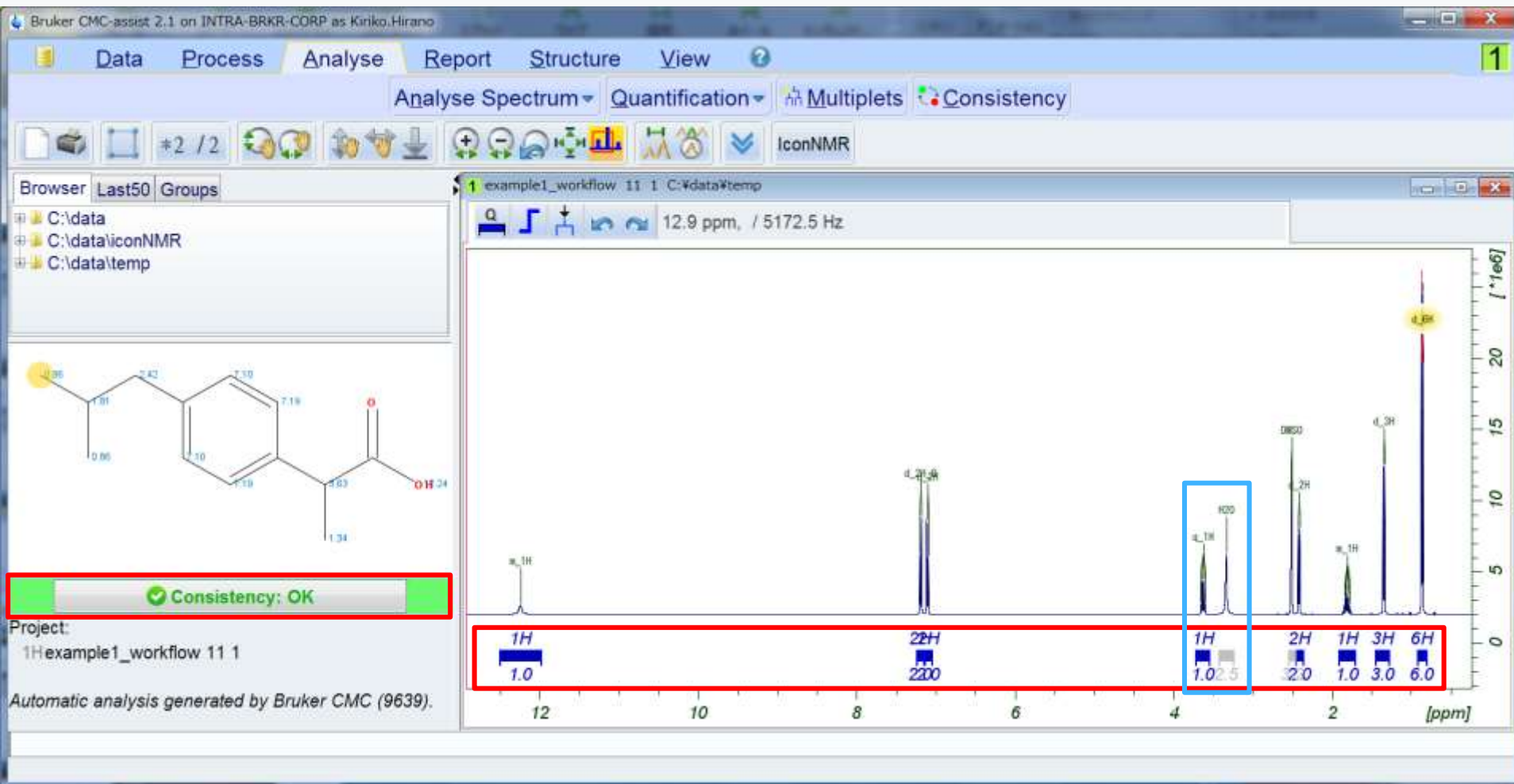
CMC-assist: 基本 - 处理前



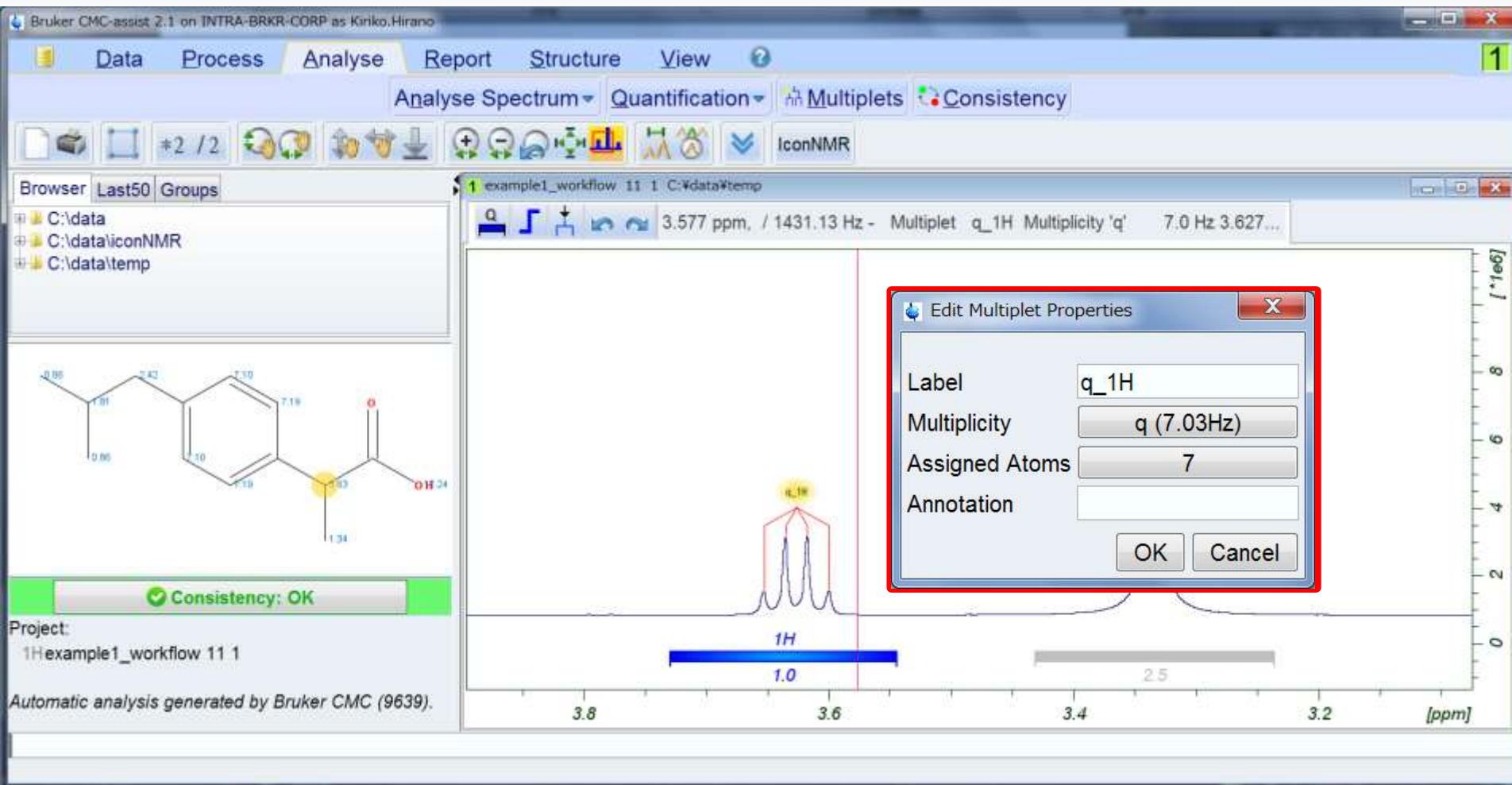
CMC-assist: 基本 - 処理後



CMC-assist: 基本 - 解析



CMC-assist: 基本 - Multiplet解析



Project: 1Hexample1_workflow 11 1
Automatic analysis generated by Bruker CMC (9639).

Consistency: OK

3.577 ppm, / 1431.13 Hz - Multiplet q_1H Multiplicity 'q' 7.0 Hz 3.627...

Label: q_1H
Multiplicity: q (7.03Hz)
Assigned Atoms: 7
Annotation:

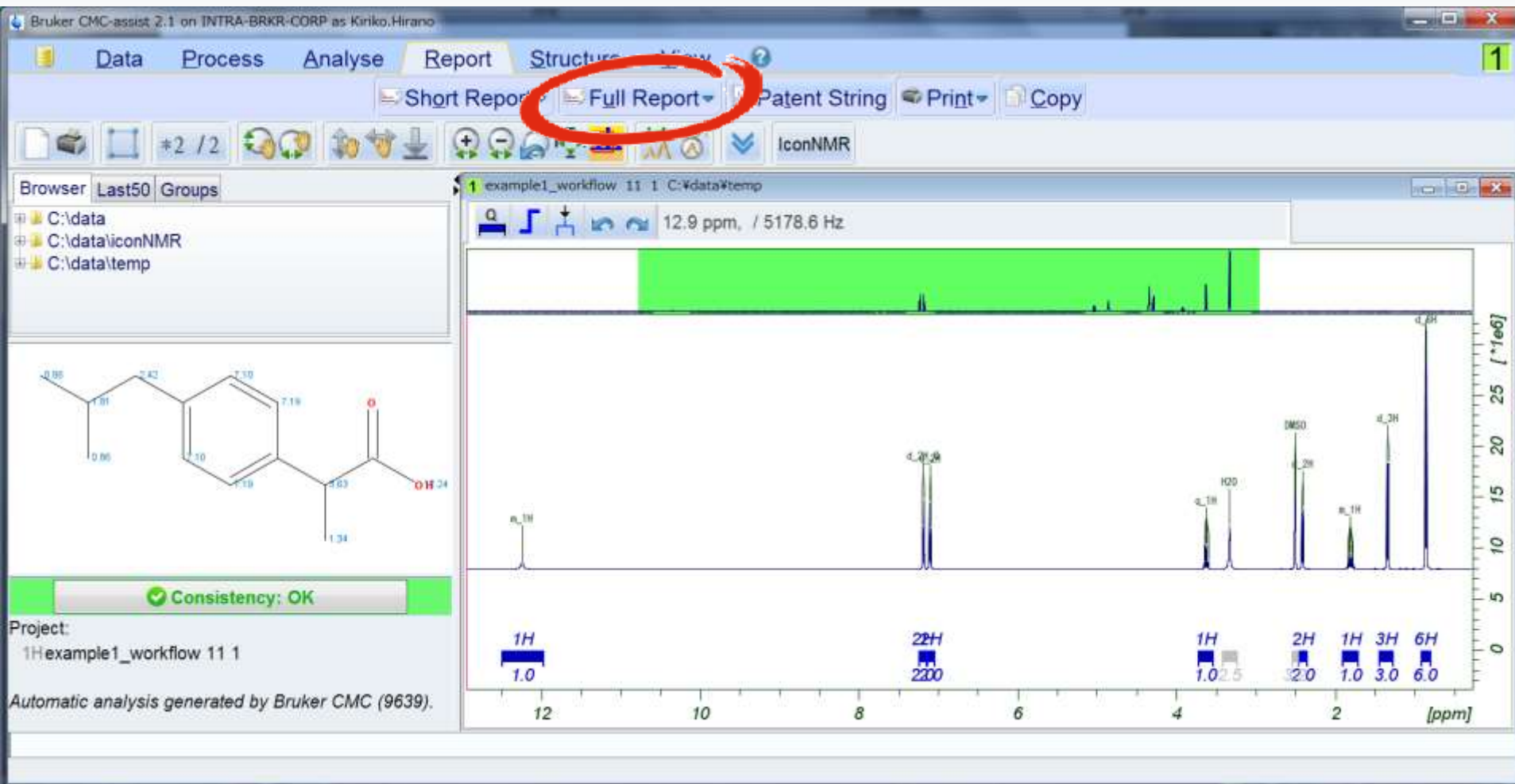
OK Cancel

1H
1.0
2.5

3.8 3.6 3.4 3.2 [ppm]

[1e6]

CMC-assist: 基本 - 解析結果のレポート



CMC-assist: 基本 - 詳細なNMRスペクトルのレポート

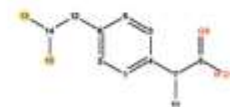
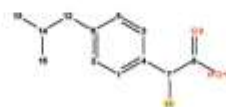
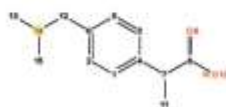
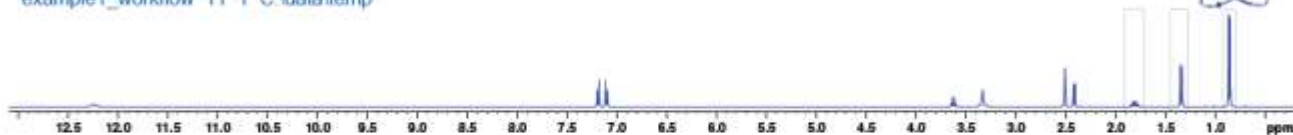
**OK, 13.02
purity**

Data set: example1
 Structure: C:\data\...
 Acquisition date: August 2...
 Solvent: DMSO
 Probe: 5 mm P...
 Eretio reference: C:\User\...

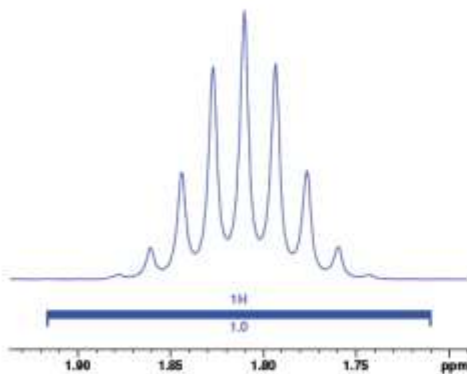
Comments:
 Automatic evaluation: Spectrum
 spectrum could be assigned. All
 in the spectrum. All given input

CMC-assist
 example1_workflow

CMC-assist
 example1_workflow 11 1 C:\data\temp

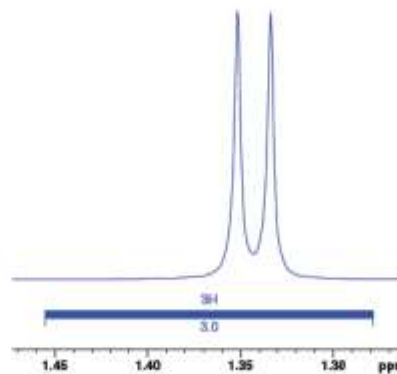


m, 1H
 at 1.811 ppm

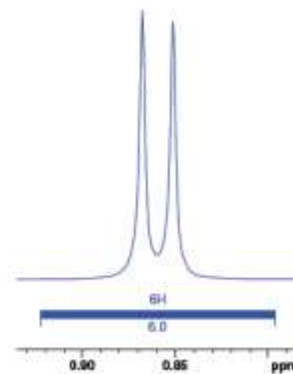


Feb 28, 2015 (7:33:04 AM)

d, 2H
 7.5 Hz (d)
 at 1.344 ppm

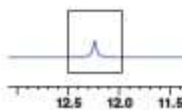


d, 6H
 6.5 Hz (d)
 at 0.886 ppm



Page 6 of 9

10



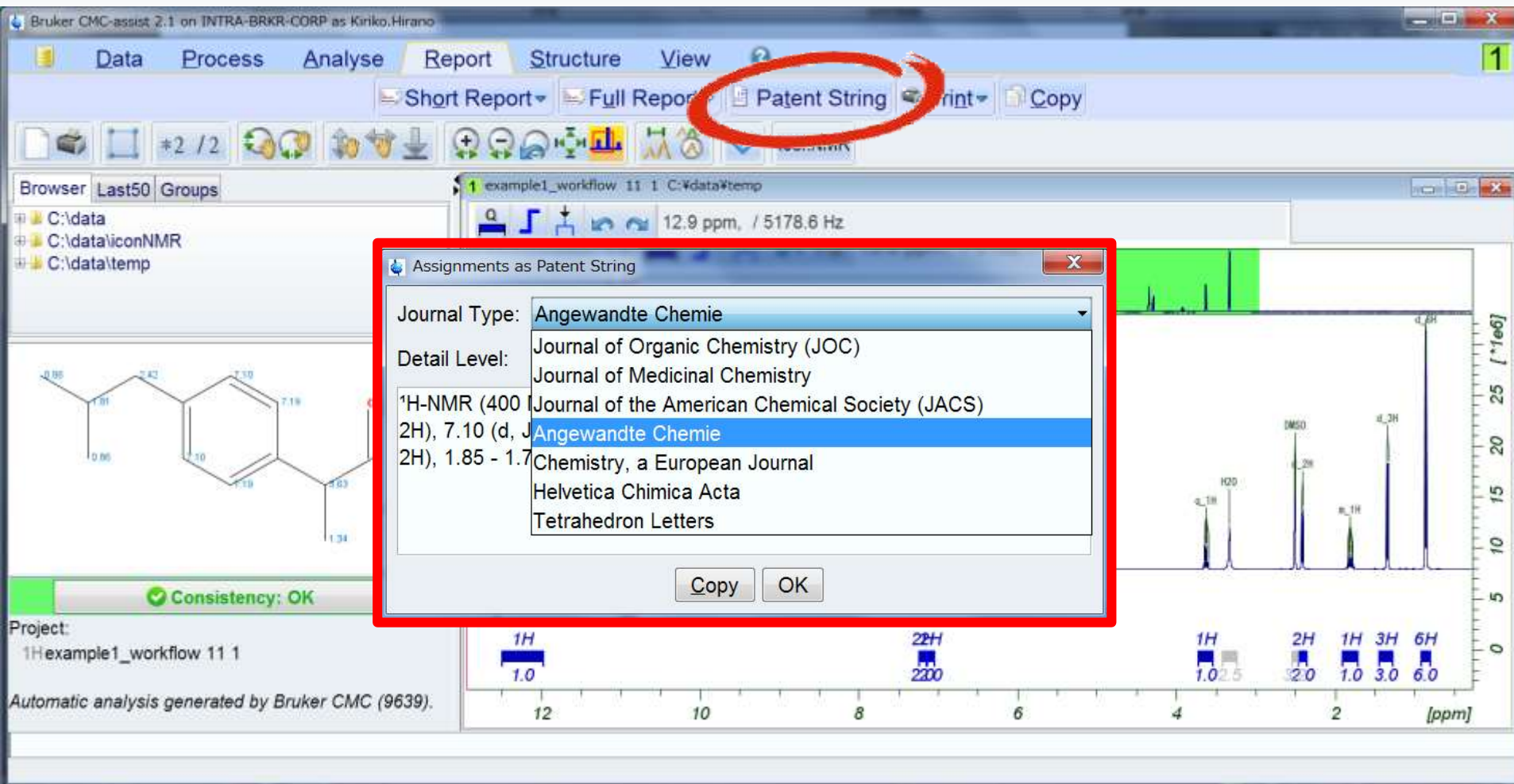
Feb 28, 2015 (7:33:04 AM)

Page 2 of 3

Feb 28, 2015 (7:33:04 AM)

Page 1 of 3

CMC-assist: 基本 - Patent String



The screenshot shows the Bruker CMC-assist 2.1 software interface. The 'Patent String' menu option is circled in red. A dialog box titled 'Assignments as Patent String' is open, showing a list of journal types. The 'Angewandte Chemie' option is selected and highlighted in blue. The dialog box also includes a 'Detail Level' dropdown and 'Copy' and 'OK' buttons.

Assignments as Patent String

Journal Type: **Angewandte Chemie**

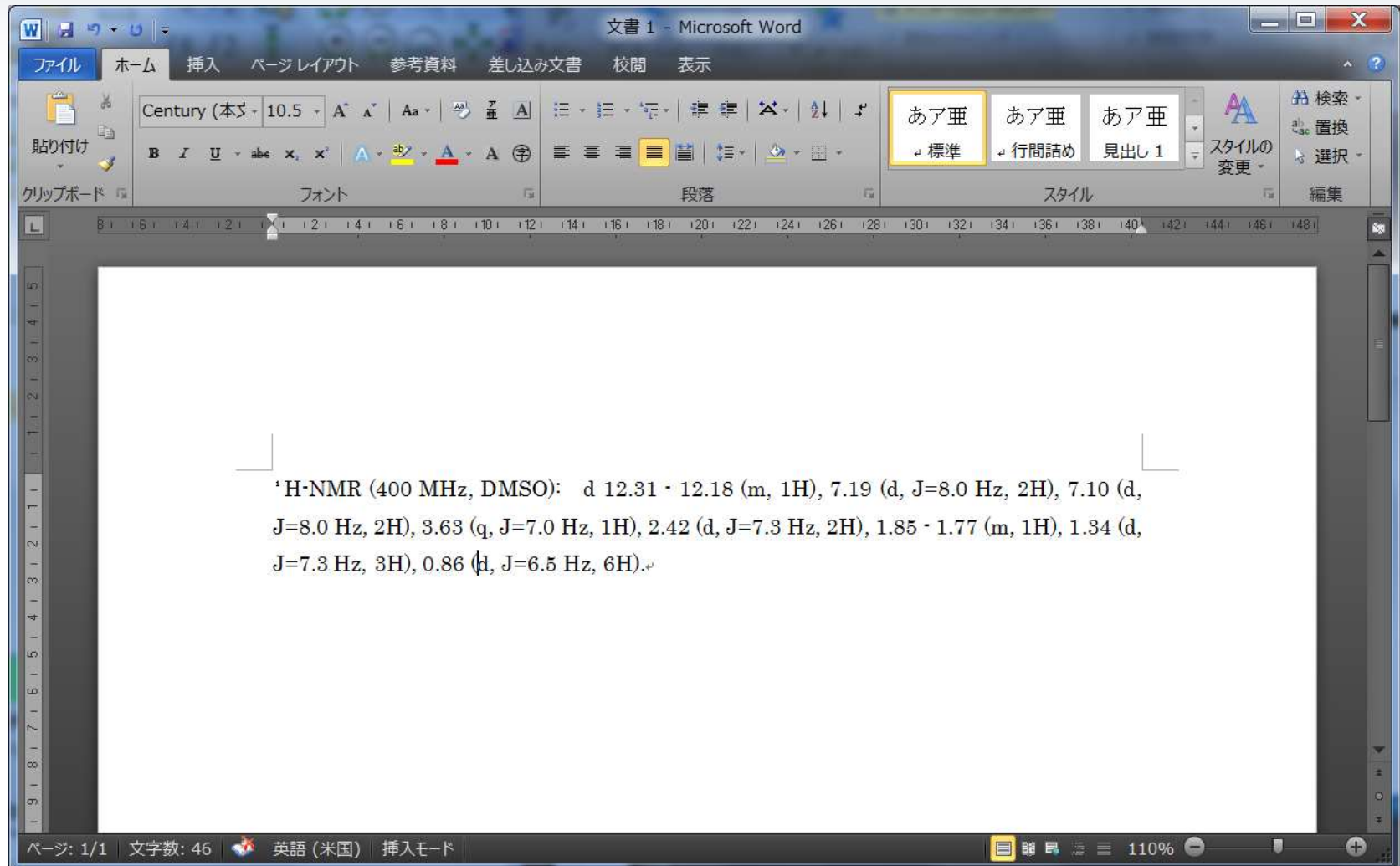
Detail Level:

- Journal of Organic Chemistry (JOC)
- Journal of Medicinal Chemistry
- Journal of the American Chemical Society (JACS)
- Angewandte Chemie**
- Chemistry, a European Journal
- Helvetica Chimica Acta
- Tetrahedron Letters

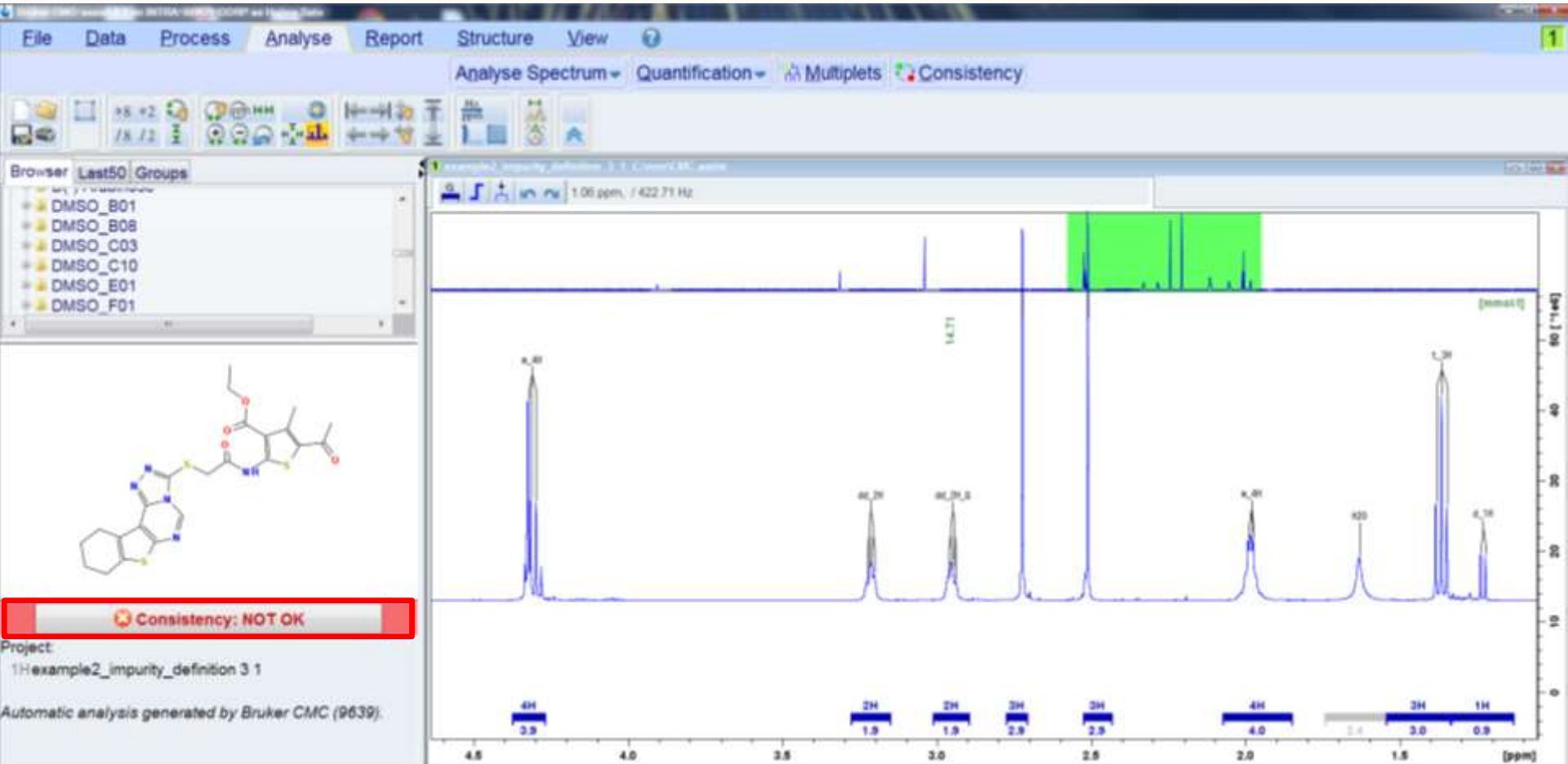
Buttons: Copy, OK

The background interface shows a chemical structure with NMR assignments and a spectrum plot. The spectrum plot shows peaks at approximately 1.0, 1.2, 1.5, 2.0, 3.0, and 4.0 ppm. The x-axis is labeled [ppm] and the y-axis is labeled [1e6].

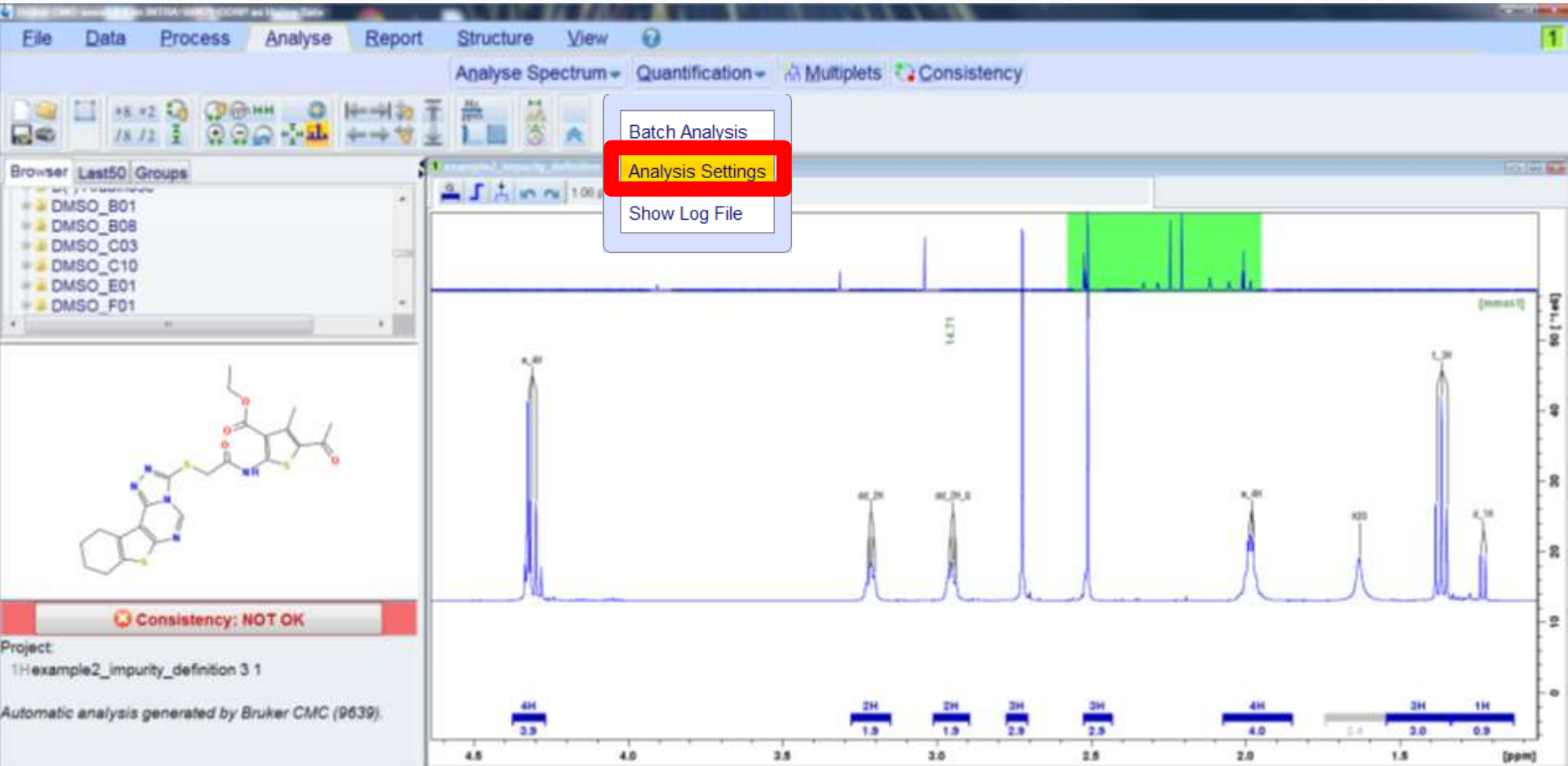
CMC-assist: 基本 - 投稿フォーマット



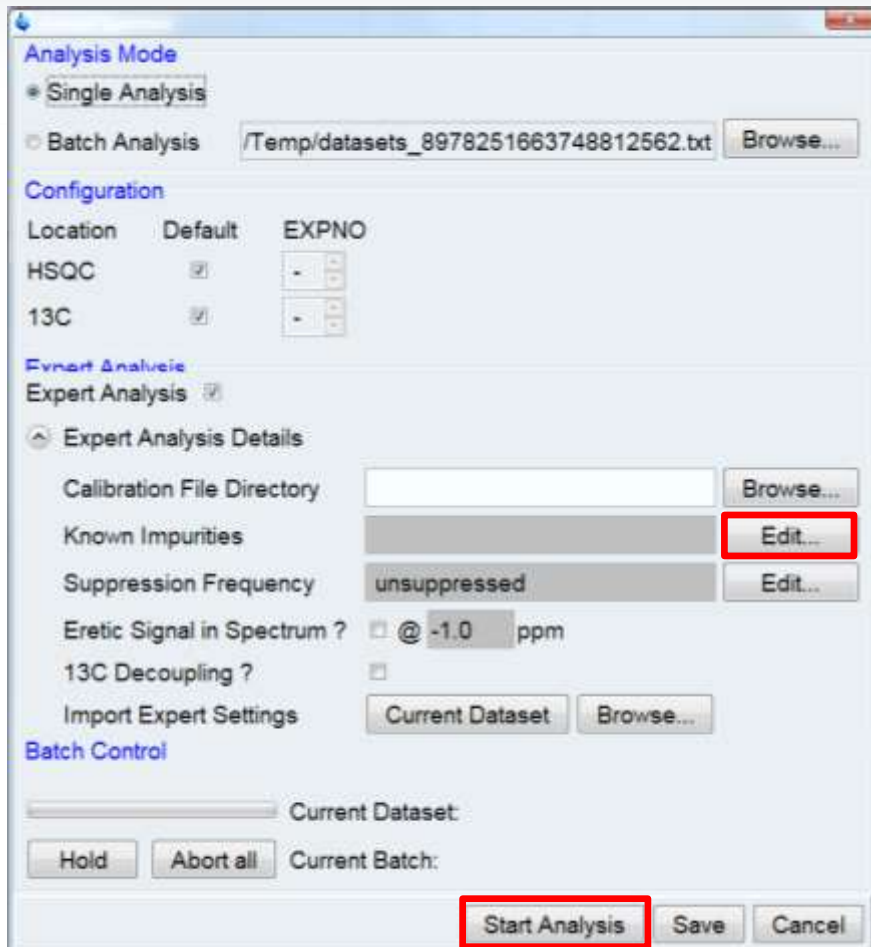
CMC-assist: 不純物が含まれる場合



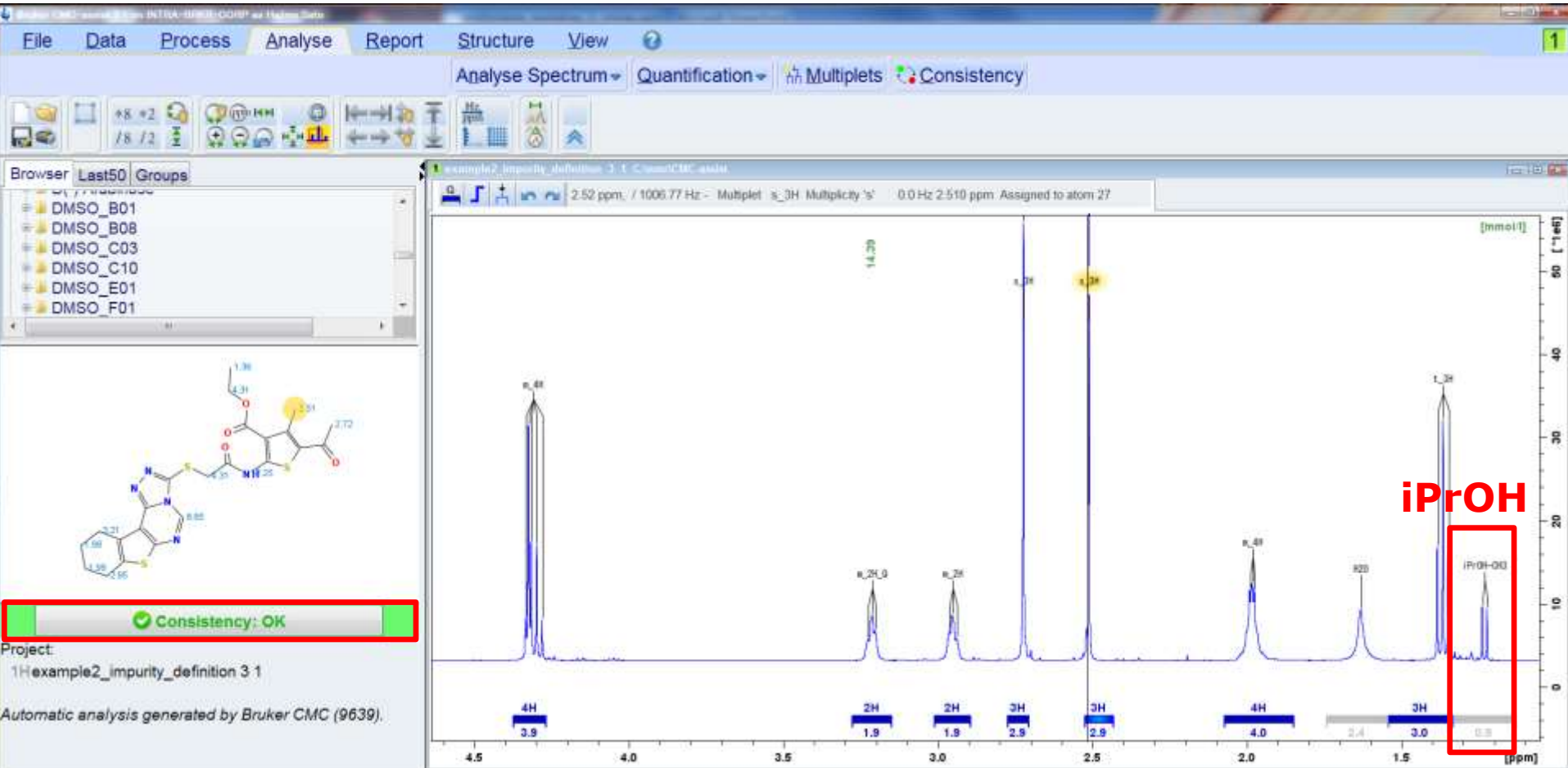
CMC-assist: 不純物が含まれる場合



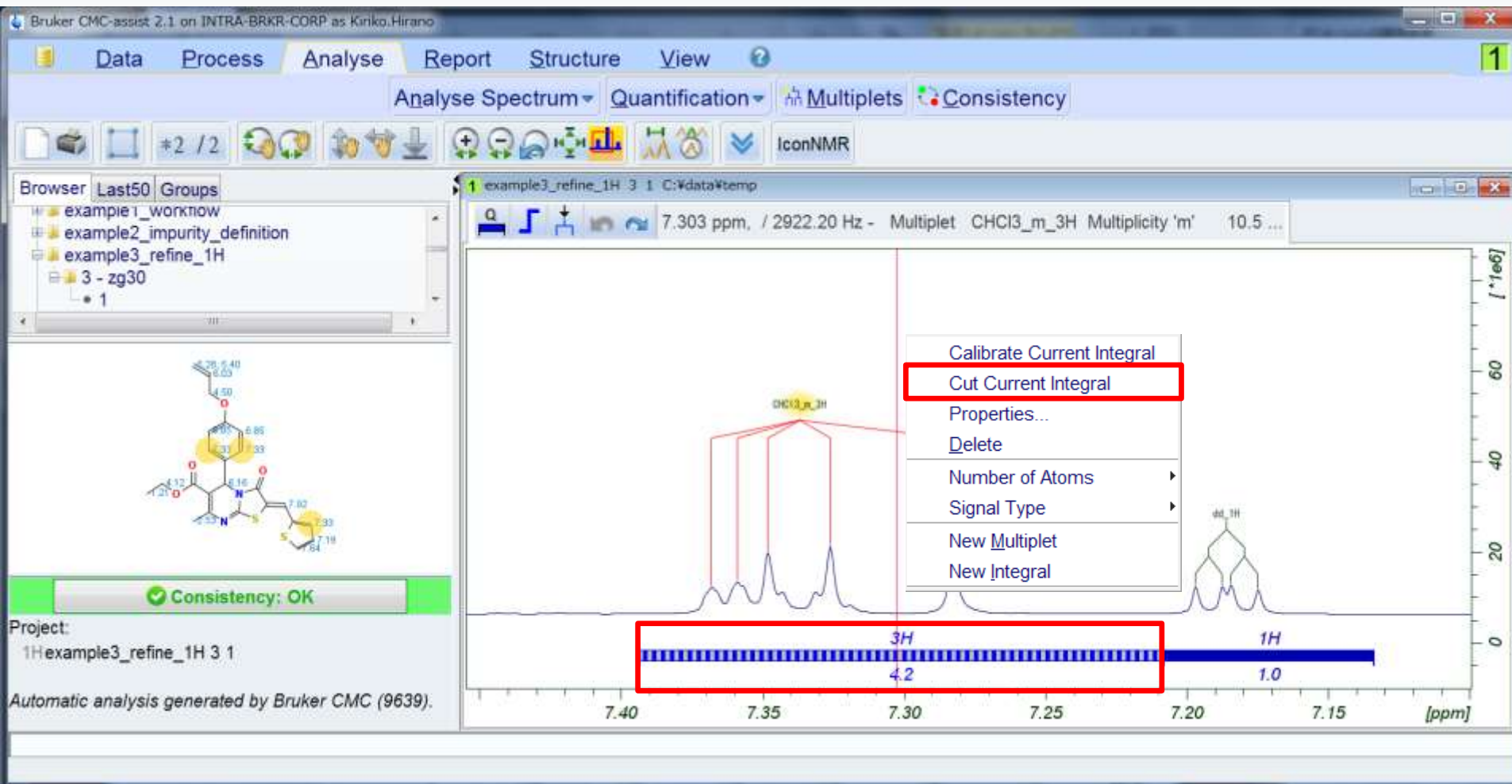
CMC-assist: 不純物が含まれる場合



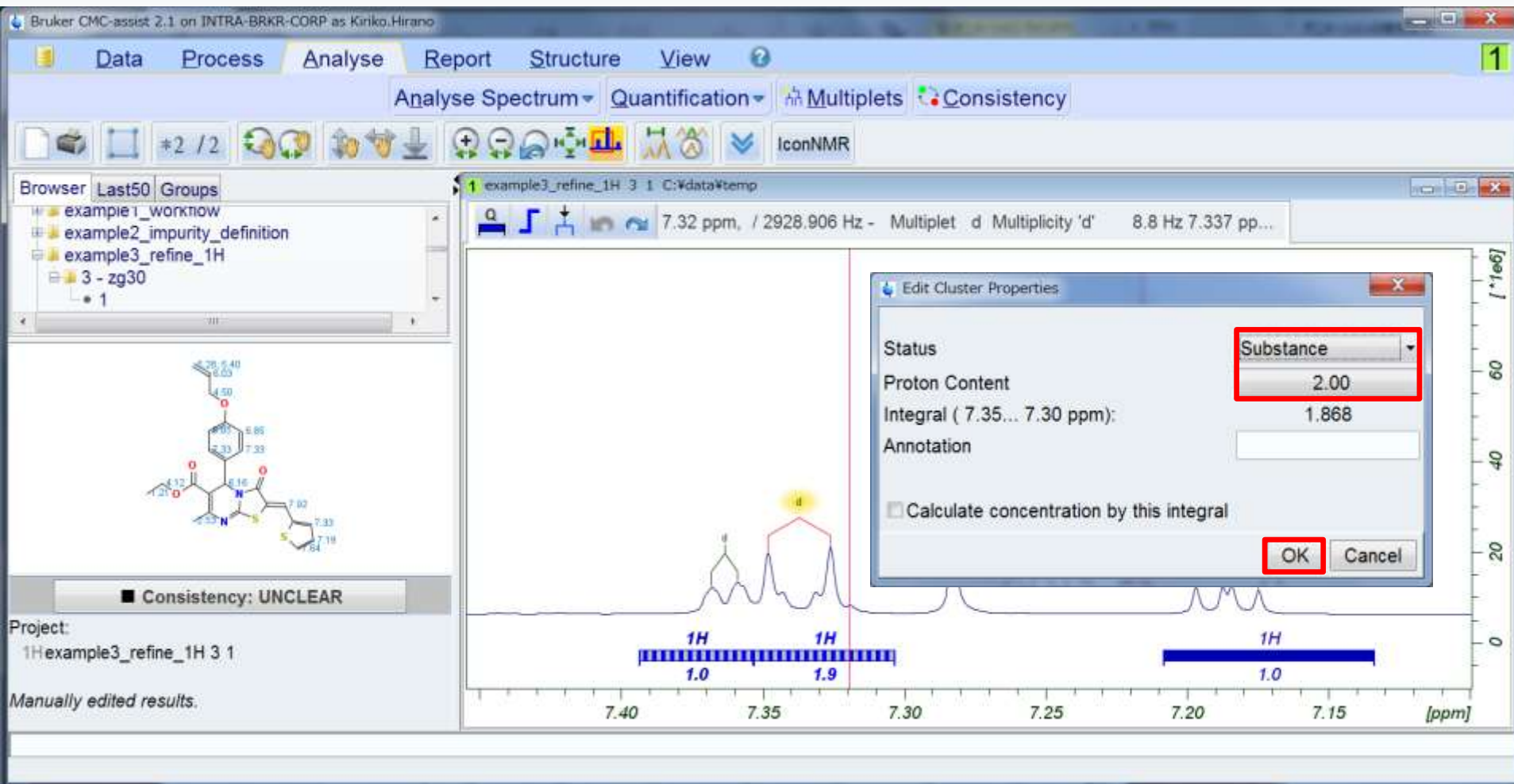
CMC-assist: 不純物が含まれる場合



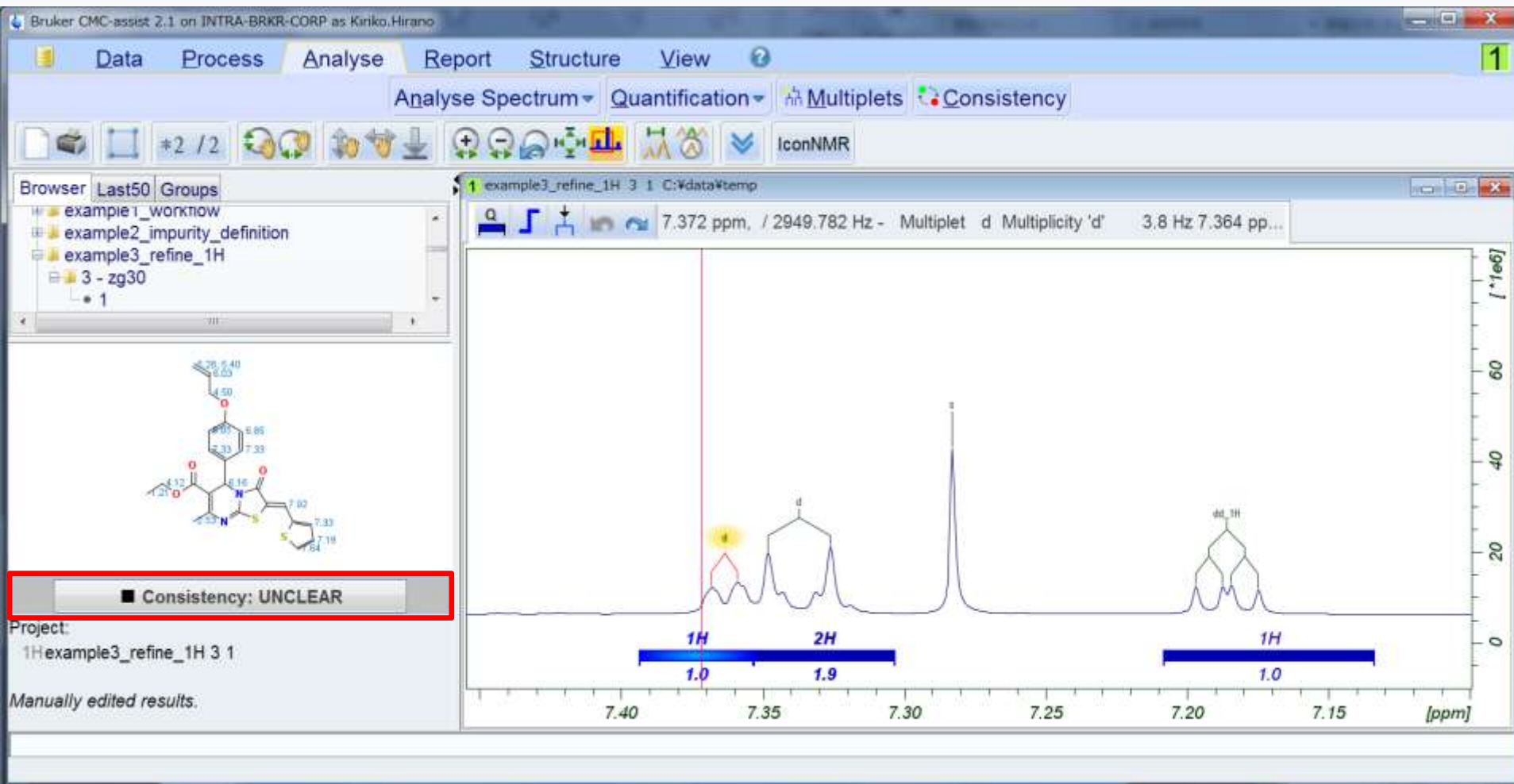
CMC-assist: 解析結果の改善 - 溶媒の削除



CMC-assist: 解析結果の改善 - 溶媒の削除



CMC-assist: 解析結果の改善 - Multiplet解析



CMC-assist: 解析結果の改善 - Multiplet解析

Project Status / Description

Consistency:

OK (by automatic analysis) OK NOT OK UNCLEAR

Purity:

High (by automatic analysis) Very High High Medium Low Unknown

Result Source:

Automatic analysis generated by Bruker CMC (9639). Manually edited by user.

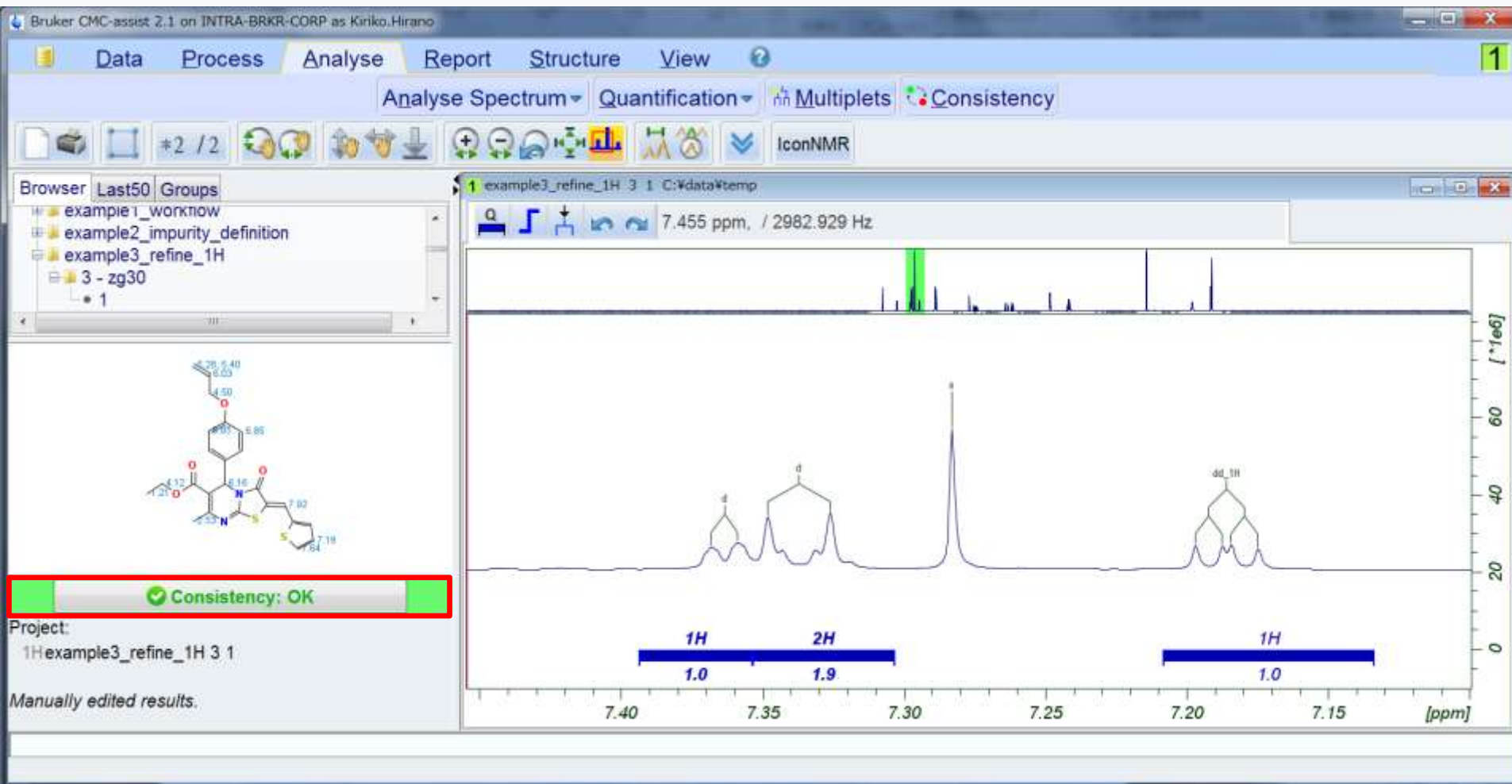
Result Summary

コメント記入(任意)

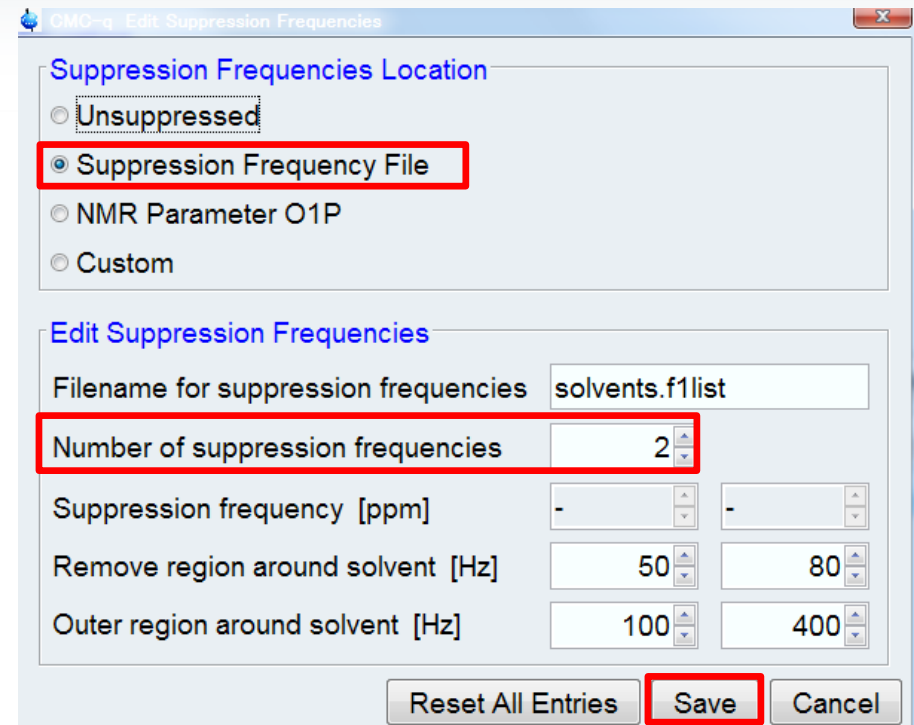
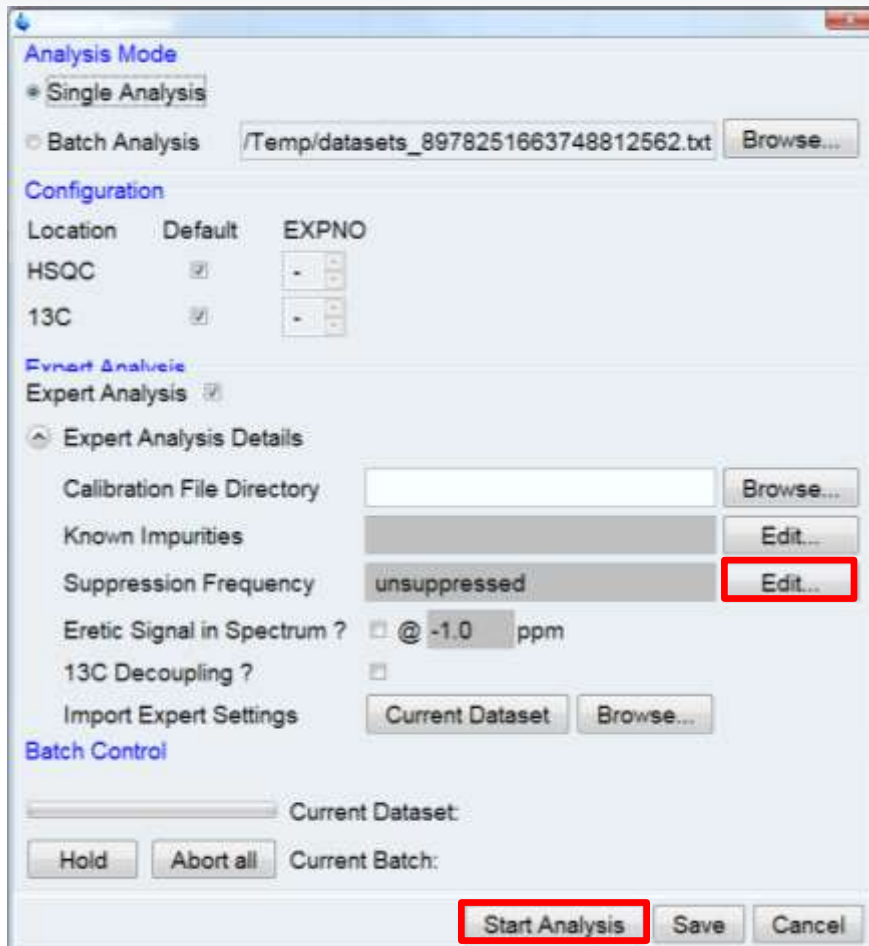
Result Details

OK Cancel

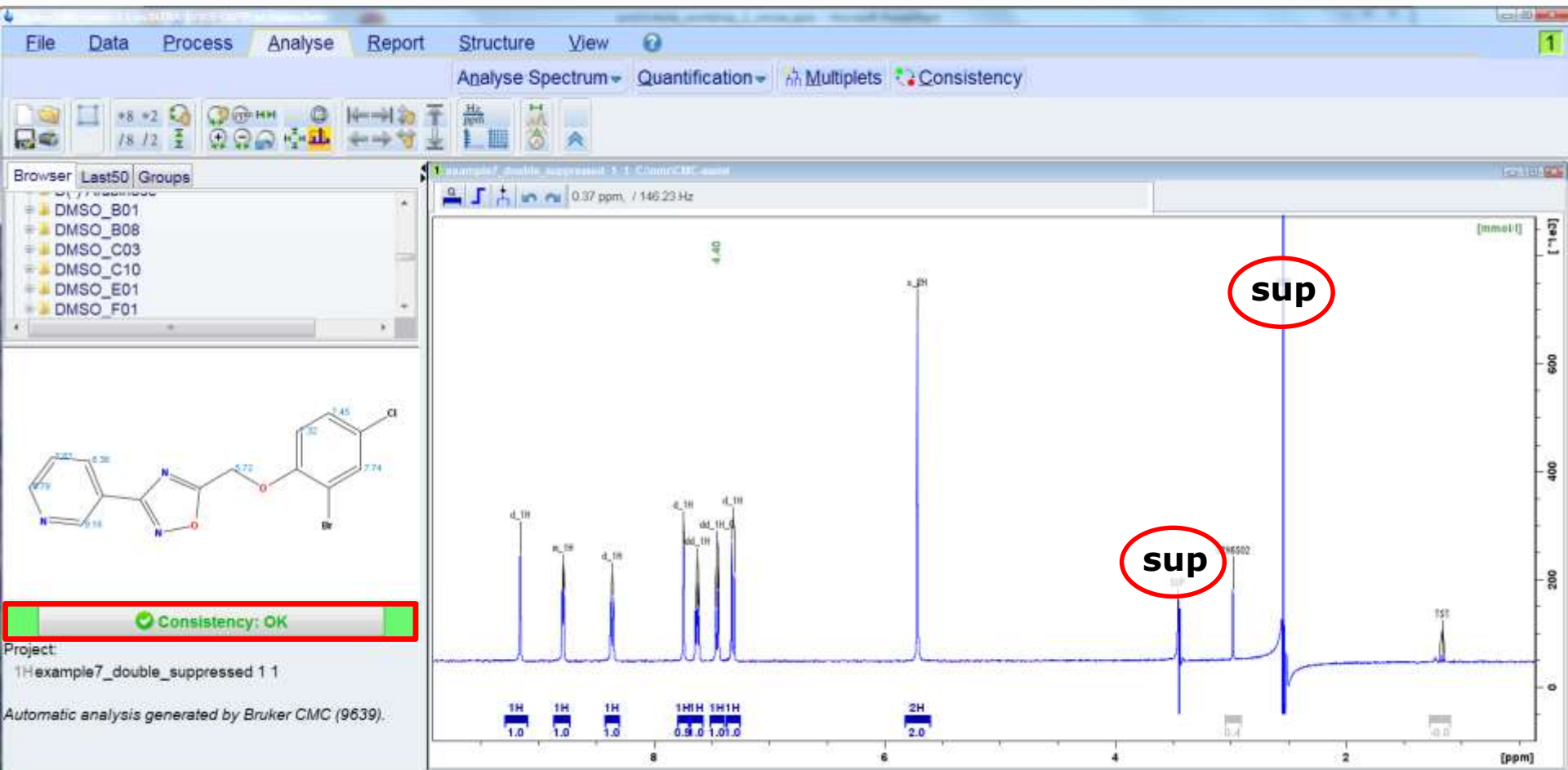
CMC-assist: 解析結果の改善 - Multiplet解析



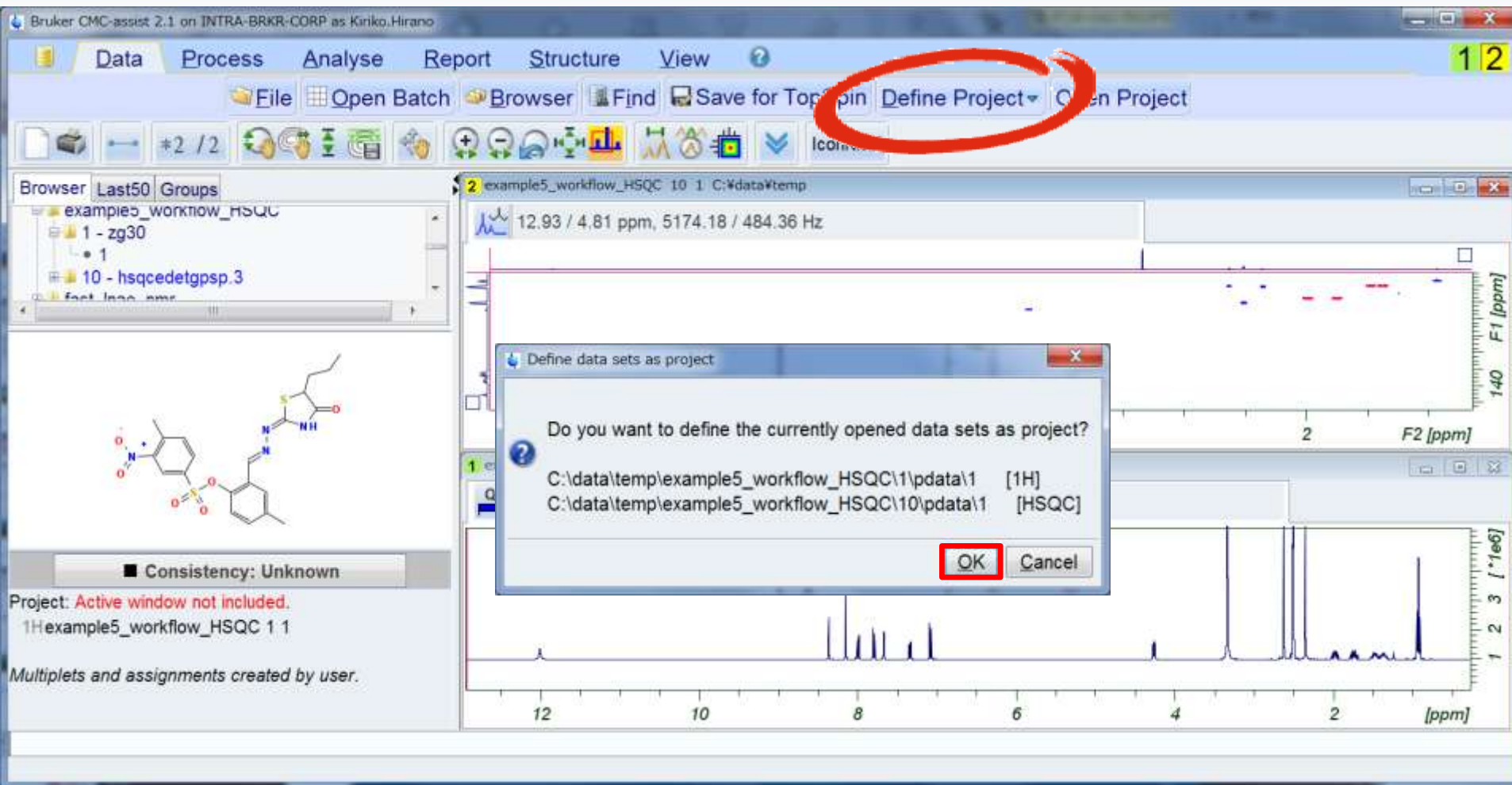
CMC-assist: 溶媒消去したスペクトルの解析



CMC-assist: 溶媒消去したスペクトルの解析



CMC-assist - 1D ^1H と2D ^1H - ^{13}C edited HSQCの解析



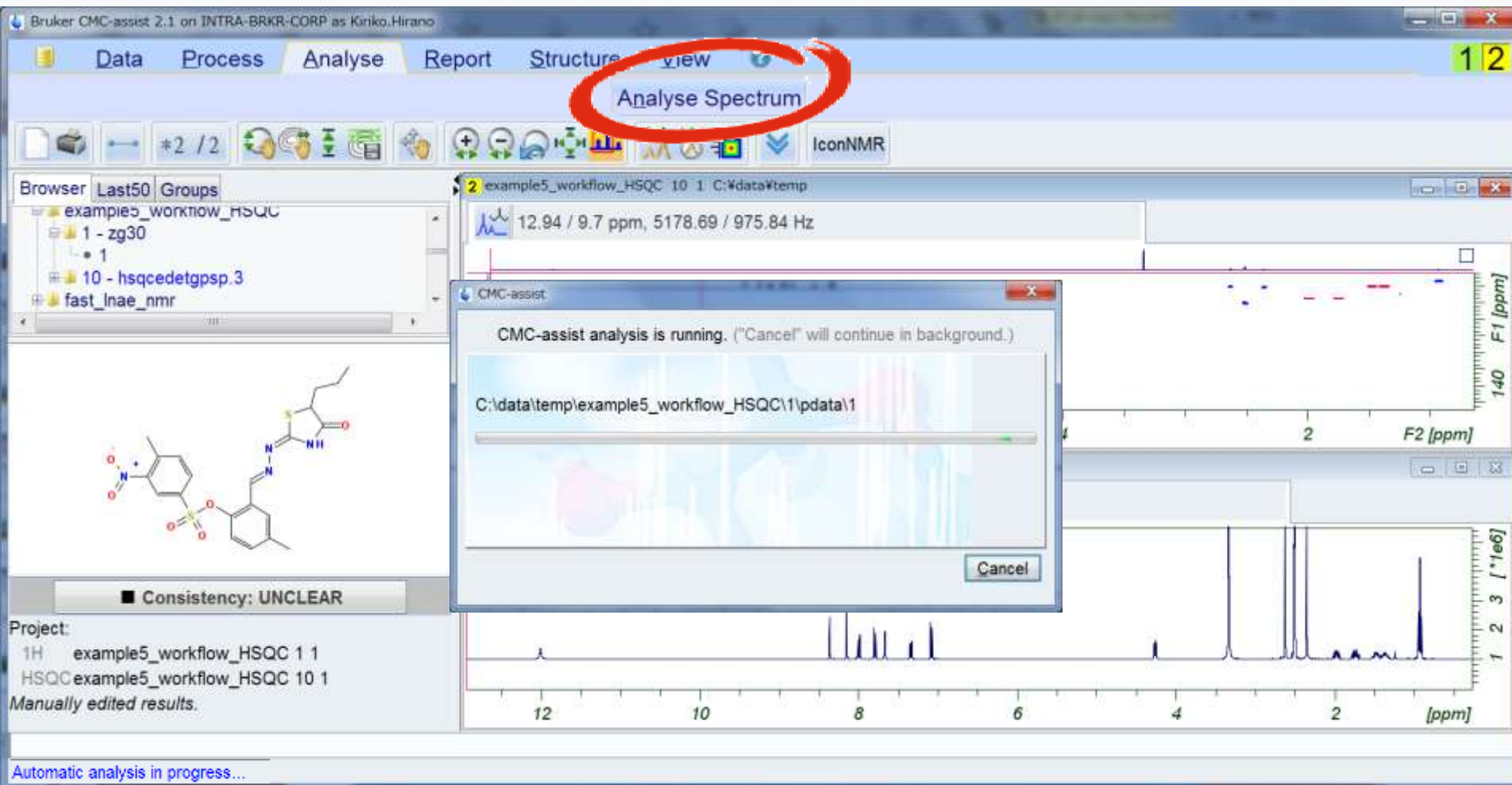
Define data sets as project

Do you want to define the currently opened data sets as project?

C:\data\temp\example5_workflow_HSQC\1\pdata\1 [1H]
C:\data\temp\example5_workflow_HSQC\10\pdata\1 [HSQC]

OK Cancel

CMC-assist - 1D ^1H と2D ^1H - ^{13}C edited HSQCの解析

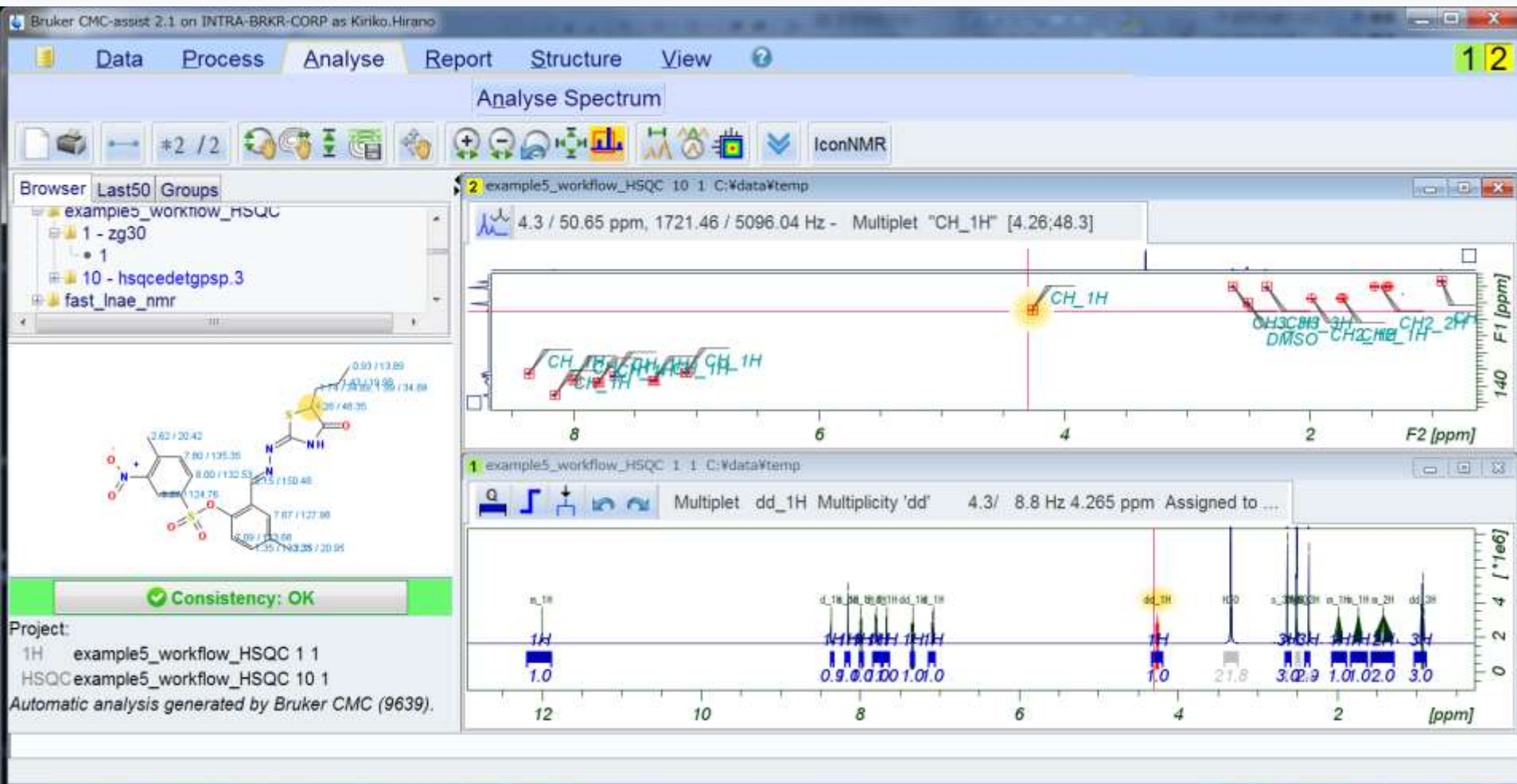


The screenshot displays the Bruker CMC-assist 2.1 software interface. The main window shows a project named "example5_workflow_HSQC" with a file "10 - hsqcedetgsp.3" selected. The "Analyse" menu is highlighted, and the "Analyse Spectrum" option is circled in red. A dialog box titled "CMC-assist" is open, indicating that the analysis is running. The dialog box contains the text "CMC-assist analysis is running. ('Cancel' will continue in background.)" and the file path "C:\data\temp\example5_workflow_HSQC\1\pdata\1". A progress bar is visible, and a "Cancel" button is at the bottom right. The background shows a 2D HSQC NMR spectrum with a 1D ^1H spectrum below it. The 1D spectrum has a scale of 10^6 and a range from 12 to 0 ppm. The 2D spectrum has a horizontal axis (F2) from 12 to 0 ppm and a vertical axis (F1) from 140 to 0 ppm. A chemical structure is shown in the bottom left corner, and the consistency is noted as "UNCLEAR".

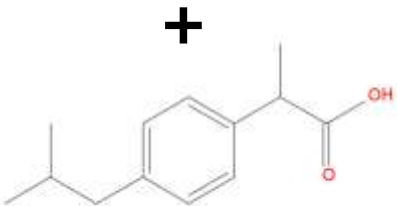
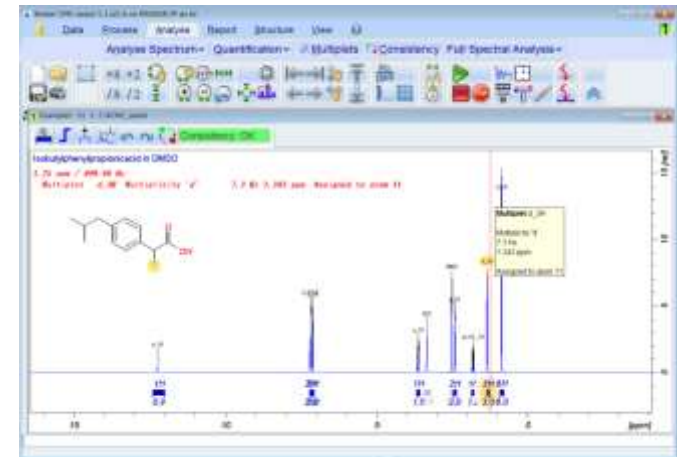
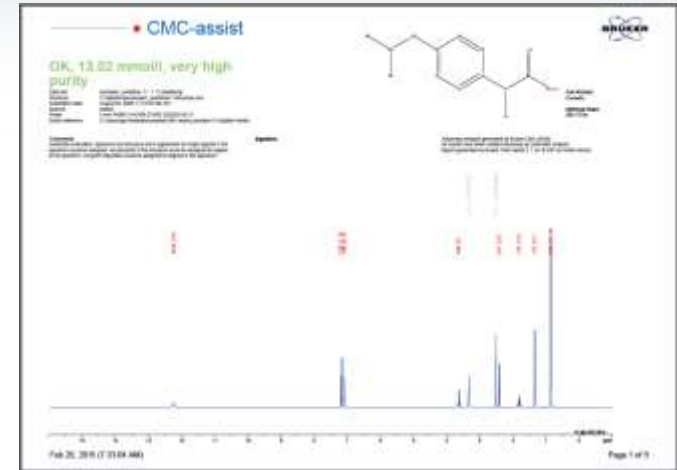
Project:
1H example5_workflow_HSQC 1 1
HSQC example5_workflow_HSQC 10 1
Manually edited results.

Automatic analysis in progress...

CMC-assist - 1D ^1H と2D ^1H - ^{13}C edited HSQCの解析



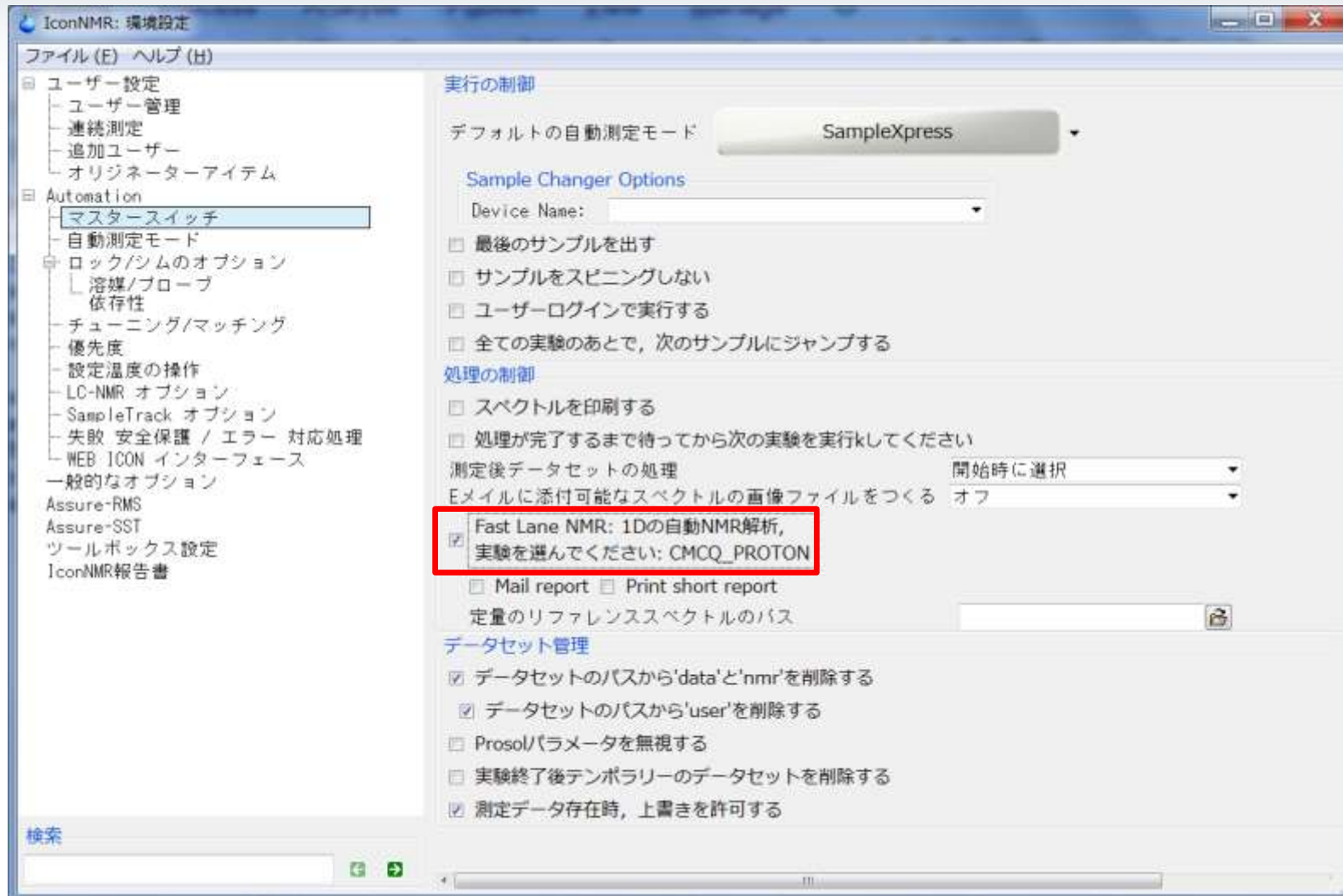
CMC-assist – IconNMRとの連動操作



構造式

帰属, レポート

CMC-assist – IconNMRとの連動操作



IconNMR: 環境設定

ファイル (E) ヘルプ (H)

- ユーザー設定
 - ユーザー管理
 - 連続測定
 - 追加ユーザー
 - オリジネーターアイテム
- Automation
 - マスタースイッチ
 - 自動測定モード
 - ロック/シムのオプション
 - 溶媒/プローブ
 - 依存性
 - チューニング/マッチング
 - 優先度
 - 設定温度の操作
 - LC-NMR オプション
 - SampleTrack オプション
 - 失敗 安全保護 / エラー 対応処理
 - WEB ICON インターフェース
 - 一般的なオプション
 - Assure-RMS
 - Assure-SST
 - ツールボックス設定
 - IconNMR報告書

実行の制御

デフォルトの自動測定モード: SampleXpress

Sample Changer Options

Device Name: []

- 最後のサンプルを出す
- サンプルをスピニングしない
- ユーザーログインで実行する
- 全ての実験のあとで、次のサンプルにジャンプする

処理の制御

- スペクトルを印刷する
- 処理が完了するまで待ってから次の実験を実行してください

測定後データセットの処理: 開始時に選択

Eメールに添付可能なスペクトルの画像ファイルをつくる: オフ

- Fast Lane NMR: 1Dの自動NMR解析, 実験を選んでください: CMCQ_PROTON
- Mail report
- Print short report

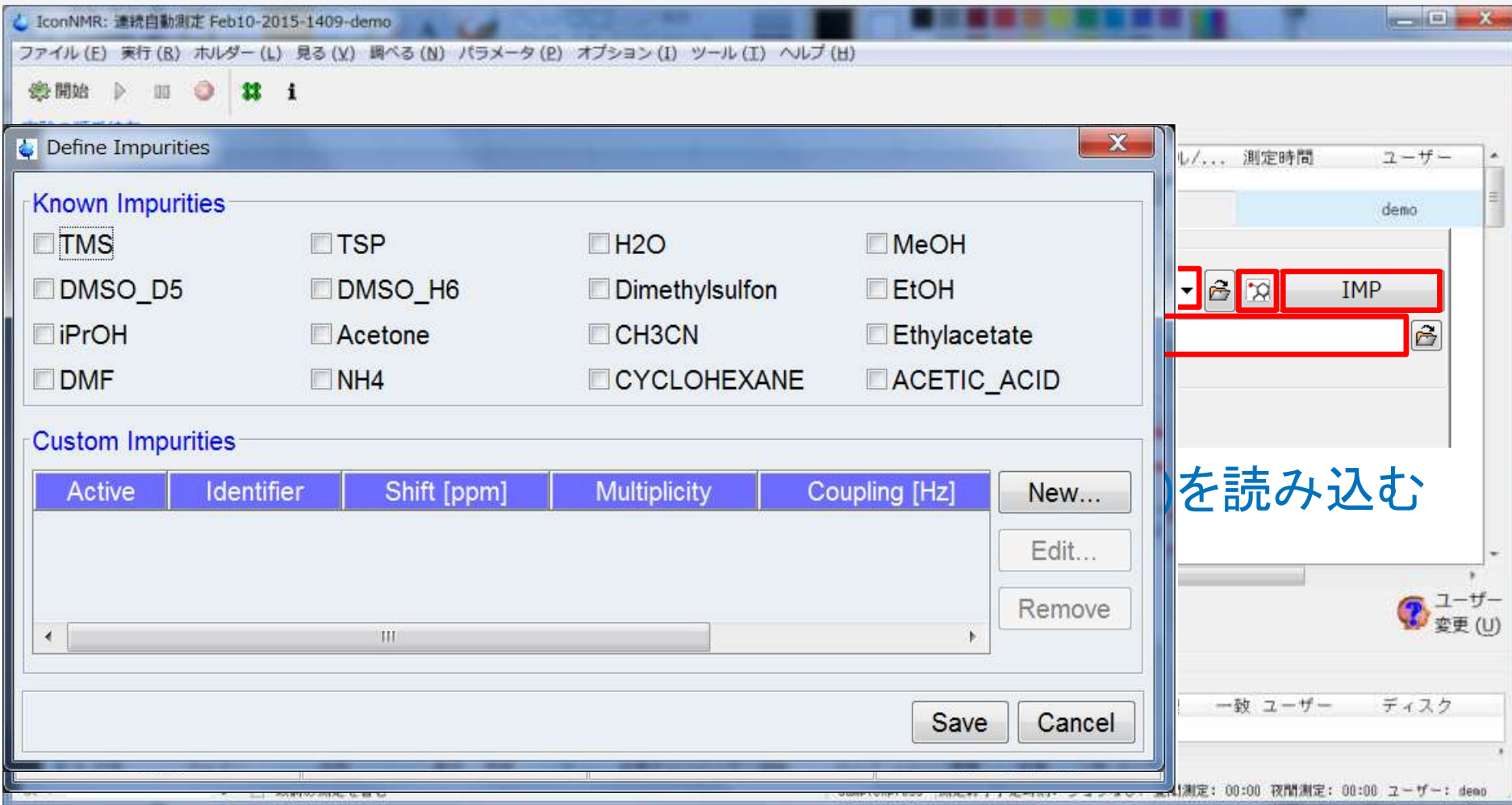
定量のリファレンススペクトルのパス: []

データセット管理

- データセットのパスから'data'と'nmr'を削除する
 - データセットのパスから'user'を削除する
- Prosolパラメータを無視する
- 実験終了後テンポラリーのデータセットを削除する
- 測定データ存在時、上書きを許可する

検索

CMC-assist – IconNMRとの連動操作



The screenshot shows the IconNMR software interface. The main window is titled "IconNMR: 連続自動測定 Feb10-2015-1409-demo". The menu bar includes "ファイル (E)", "実行 (B)", "ホルダー (L)", "見る (V)", "調べる (N)", "パラメータ (P)", "オプション (I)", "ツール (T)", and "ヘルプ (H)".

The "Define Impurities" dialog box is open, showing a list of "Known Impurities" with checkboxes:

- TMS
- DMSO_D5
- iPrOH
- DMF
- TSP
- DMSO_H6
- Acetone
- NH4
- H2O
- Dimethylsulfon
- CH3CN
- CYCLOHEXANE
- MeOH
- EtOH
- Ethylacetate
- ACETIC_ACID

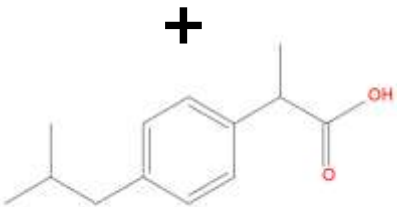
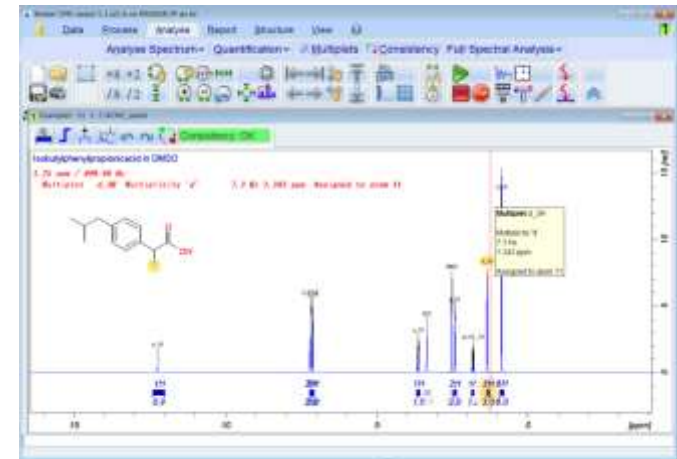
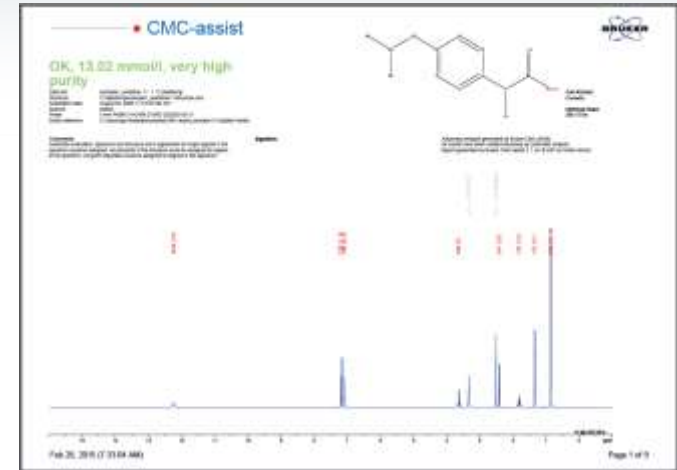
Below the list is a "Custom Impurities" section with a table:

Active	Identifier	Shift [ppm]	Multiplicity	Coupling [Hz]

Buttons for "New...", "Edit...", "Remove", "Save", and "Cancel" are present.

In the background, a window titled "demo" is visible. A red box highlights a button labeled "IMP" in the "demo" window. A blue arrow points to this button with the text "を読み込む" (Load).

CMC-assist – IconNMRとの連動操作



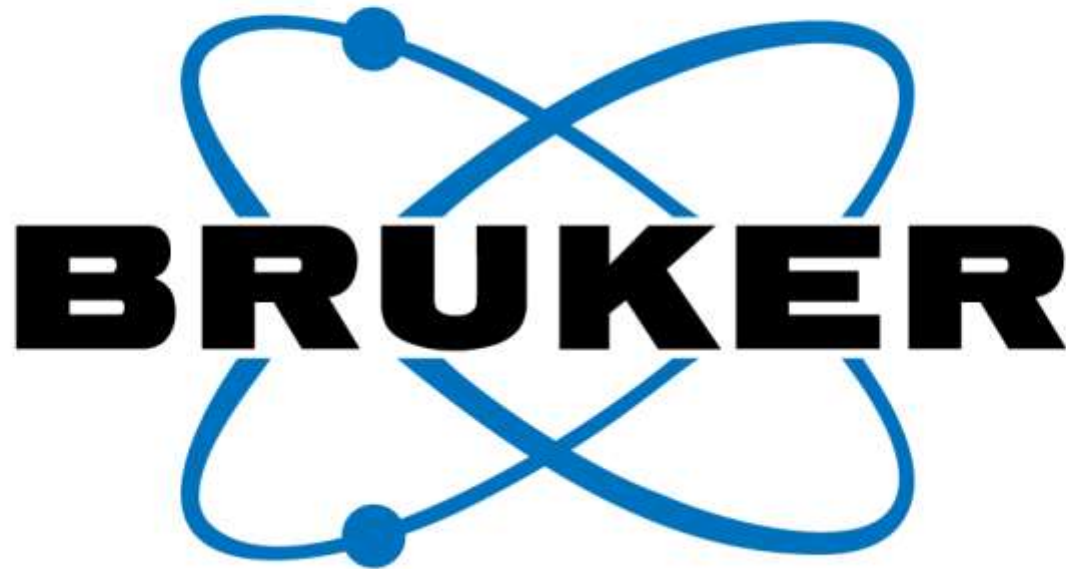
構造式

帰属, レポート

おわりに

- 弊社はNMRのハードウェア(分光計, 磁石, 検出器), 自動測定ソフトウェア, および, スペクトルの解析ソフトウェアを提供します.
- 下記のWebサイトにて, 各ソフトウェアをオンラインサイト経由でも購入できます.
<https://store.bruker-biospin.com/shop/00/category/48/>
- お試しデモライセンス(3か月間無償)は, 弊社営業担当にお問い合わせください.

ご清聴ありがとうございました!



www.bruker-biospin.com

Would you like to learn more? Contact a customer service representative.