

Spinsolve™ 60/80/90 Spinsolveファミリー

The fastest compact NMR spectrometer

Spinsolve“高性能卓上NMR”をあなたの研究室へ

高磁場NMRとの併用によりサンプルの取り回しが改善されます

構造確認・解析

プロセス化学
(インライン測定)

アカデミア
(大学・大学院)

電解液開発
劣化解析(電池)

定量NMR

QA/QC
(品質管理/品質保証)

法医学



Spinsolveの卓越した特長

- 外部環境の影響を受けないシールドされた磁場
- 高い磁場均一性がとれます
- 液体ヘリウム等の冷媒は不要
- 設置環境：18-28℃ / 100-240VAC 50/60Hz
- コンパクトサイズ
- 一般的な研究室で利用可能
- 特別なメンテナンスが不要
- COSY、HSQC-ME、HMBC等の二次元測定が可能
- 標準の5 mm、7インチ長のNMR管
- 最小容量：250μL
- 防爆仕様が可能

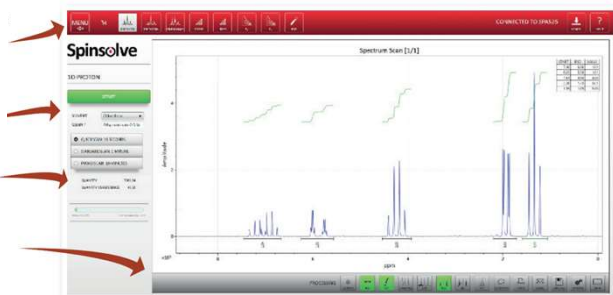
直感的で使いやすいソフトウェア

1. 核を選択

2. 測定方法
を選択

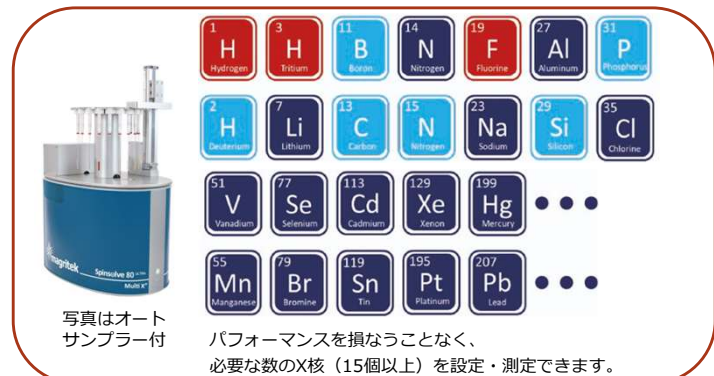
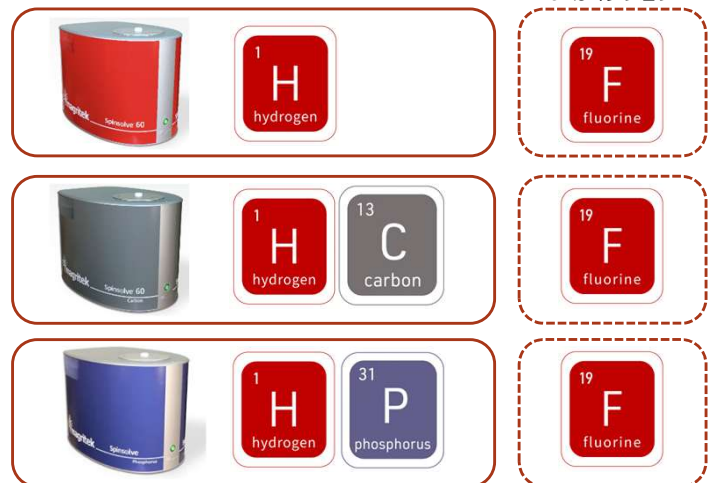
3. スタート
ステータス
を監視

4. プロセス
を追加



Spinsolveで測定可能な核種

19Fはオプション



Spinsolve 60

Spinsolve60の卓越した機能

- ・プロトン周波数：60MHz
- ・ ^1H と ^{19}F はすべてのモデルで利用可能。更にデュアルチャネルで核の追加が可能。

・分解能

Spinsolve60 : $<0.5\text{Hz}(50\%)$ / $<20\text{Hz}(0.55\%)$

Spinsolve60 ULTRA : $<0.2\text{Hz}(50\%)$ / $7\text{Hz}(0.55\%)$ / $<14\text{Hz}(0.11\%)$

・感度

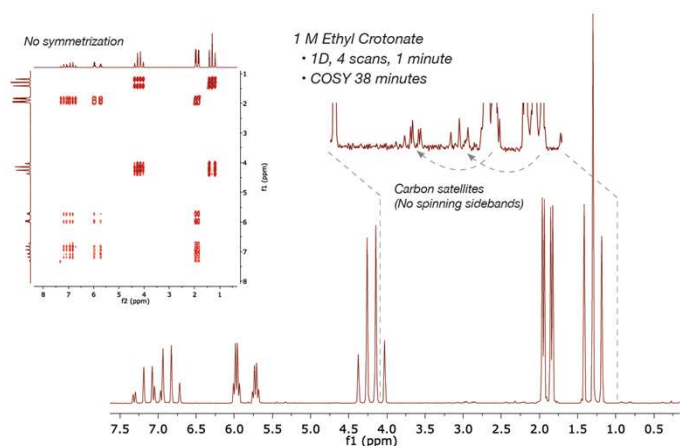
シングルチャネル 200:1(1%エチルベンゼン)

デュアルチャネル 130:1(1%エチルベンゼン)

- ・重水素化溶媒を必要としない外部ハードウェア ロック
- ・オンライン反応モニタリングに最適
- ・オートサンプラーに対応
- ・サイズ：58×43×40cm
- ・重量：60kg
- ・高磁場NMRとの併用によりサンプルの取り回しが改善されます



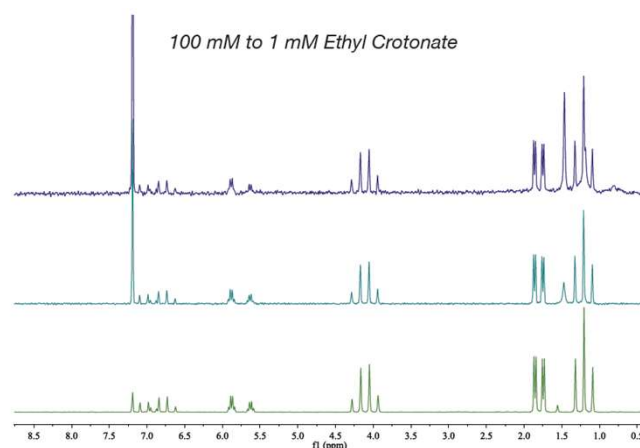
Spinsolve60のスペクトル例



1 mM
1024 scans
4 hours

10 mM
64 scans
16 minutes

100 mM
16 scans
4 minutes



Spinsolve60で利用可能なパルスシーケンス

Proton	Fluorine	Carbon
1D Proton	1D Fluorine	1D Carbon
Paramagnetic	Paramagnetic	DEPT
2D COSY	2D F – COSY	HECTOR
2D TOCSY	2D F – JRES	HSQC
2D JRES	2D FH – COSY	HSQC=ME
T1, T2	Reaction Monitoring	HMQC
Reaction Monitoring		HMBC

Spinsolve 80

Spinsolve80の卓越した機能

- ・プロトン周波数：80MHz
- ・ ^1H と ^{19}F はすべてのモデルで利用可能。更にデュアルチャンネルで核の追加が可能。

・分解能

Spinsolve80 : $<0.4\text{Hz}(50\%)$ / $<15\text{Hz}(0.55\%)$ / $<30\text{Hz}(0.11\%)$

Spinsolve80 ULTRA : $<0.2\text{Hz}(50\%)$ / $<8\text{Hz}(0.55\%)$ / $<16\text{Hz}(0.11\%)$

・感度

シングルチャンネル 280:1(1%エチルベンゼン)

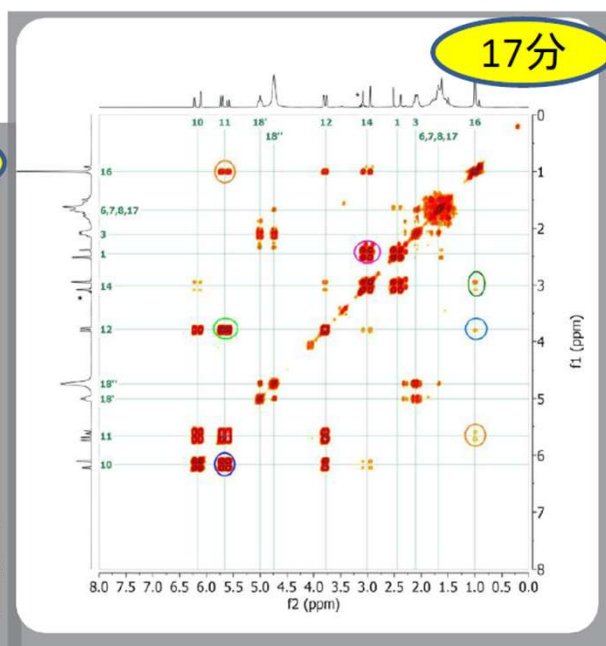
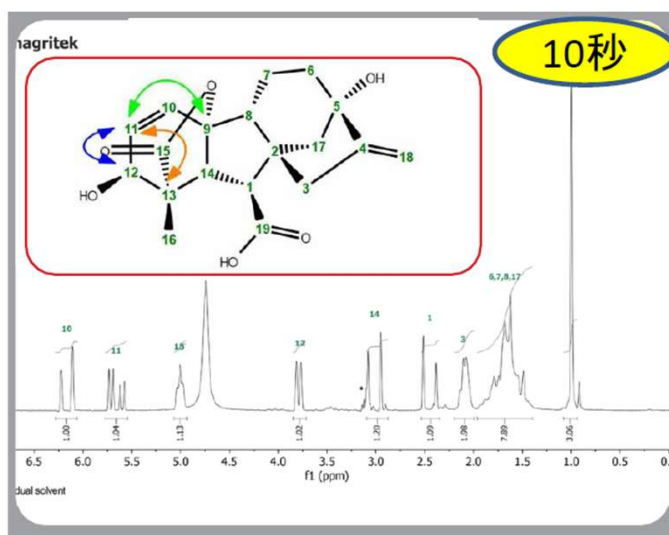
デュアルチャンネル 200:1(1%エチルベンゼン)

- ・重水素化溶媒を必要としない外部ハードウェア ロック
- ・オンライン反応モニタリングに最適
- ・オートサンプラーに対応
- ・サイズ：58×43×40cm
- ・重量：72.5kg
- ・高磁場NMRとの併用によりサンプルの取り回しが改善されます



Spinsolve80のスペクトル例

80 MHz NMR スペクトル (Gibberelic Acid)
 溶媒: MeOH- d_6 濃度: 250mM



Spinsolve80で利用可能なパルスシーケンス

Proton	Fluorine	Carbon
1D Proton	1D Fluorine with ^1H decoupling	1D Carbon with ^1H and ^{19}F decoupling
1D solvent suppression	2D F – COSY	DEPT
1D with ^{19}F and ^{13}C decoupling	2D F – JRES	APT
2D COSY	2D FH – COSY	HECTOR
2D TOCSY	T1, T2	HSQC
2D ROESY	Reaction Monitoring	HSQC=ME
2D JRES		HMQC
T1, T2		HMBC
Reaction Monitoring		

Spinsolve™ 90

Spinsolve90の卓越した機能

- ・プロトン周波数：90MHz
- ・¹Hと¹⁹Fはすべてのモデルで利用可能。更にデュアルチャンネルで核の追加が可能。

- ・分解能

Spinsolve90 : <0.4Hz(50%) / <15Hz(0.55%) / <30Hz(0.11%)

Spinsolve90 ULTRA : <0.2Hz(50%) / <8Hz(0.55%) / <16Hz(0.11%)

- ・感度

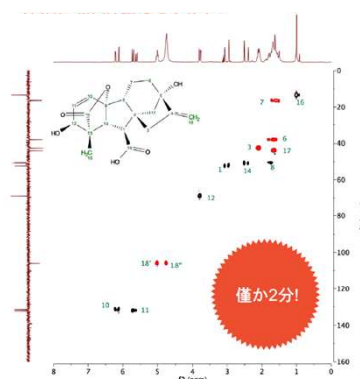
シングルチャンネル 320:1(1%エチルベンゼン)

デュアルチャンネル 240:1(1%エチルベンゼン)

- ・重水素化溶媒を必要としない外部ハードウェア ロック
- ・オンライン反応モニタリングに最適
- ・オートサンプラーに対応
- ・サイズ：66×45×43cm
- ・重量115kg
- ・高磁場NMRとの併用によりサンプルの取り回しが改善されます

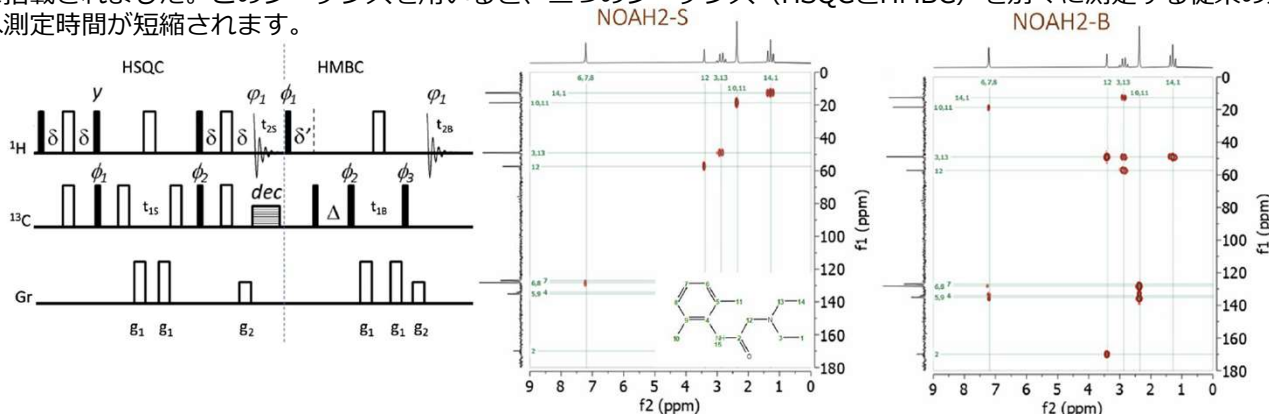


**NUSテクニックにより
250mMのサンプルの
HSQC-MEを2分で取得！**



NOAH (NMR by Ordered Acquisition using 1H-detection)

一つの測定において複数の二次元NMRを連続して測定できる高度なシーケンス (NOAH) が、Spinsolveのデジタル分光計に搭載されました。このシーケンスを用いると、二つのシーケンス (HSQCとHMBC) を別々に測定する従来の方法に比べ測定時間が短縮されます。

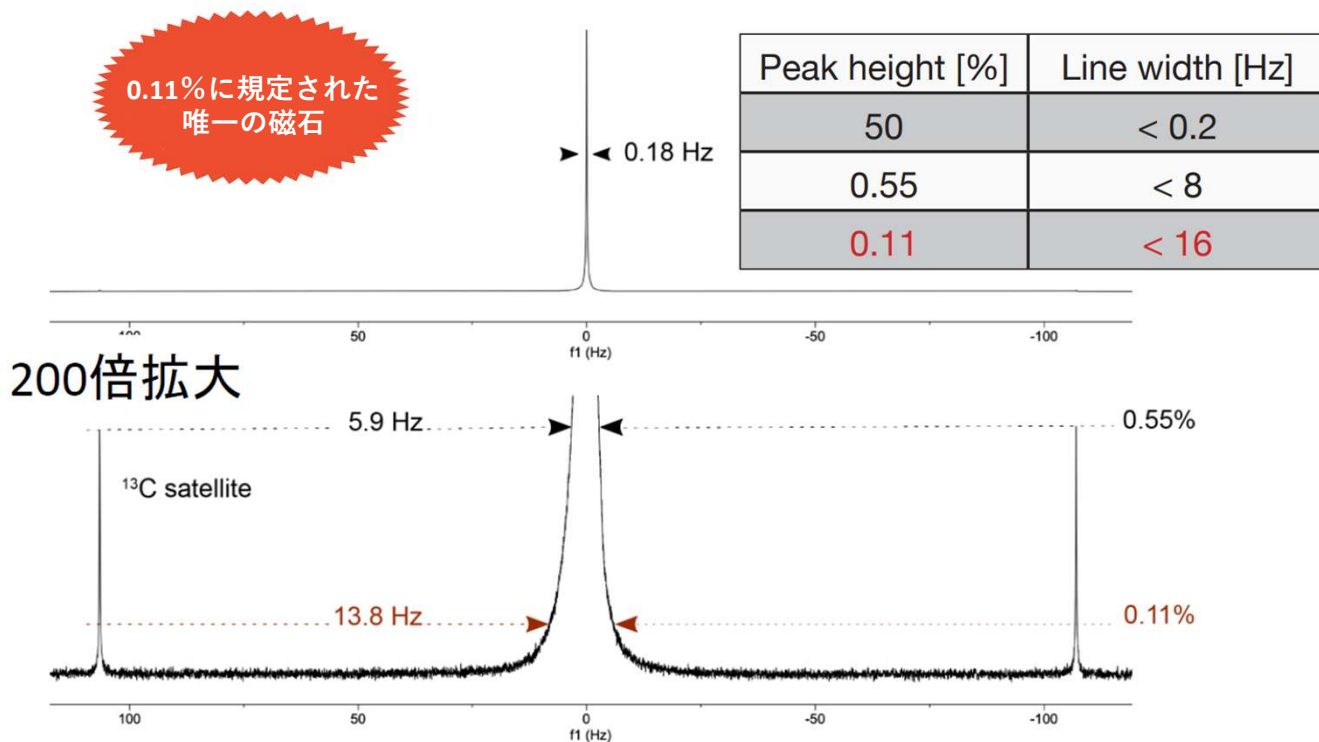


Spinsolve90で利用可能なパルスシーケンス

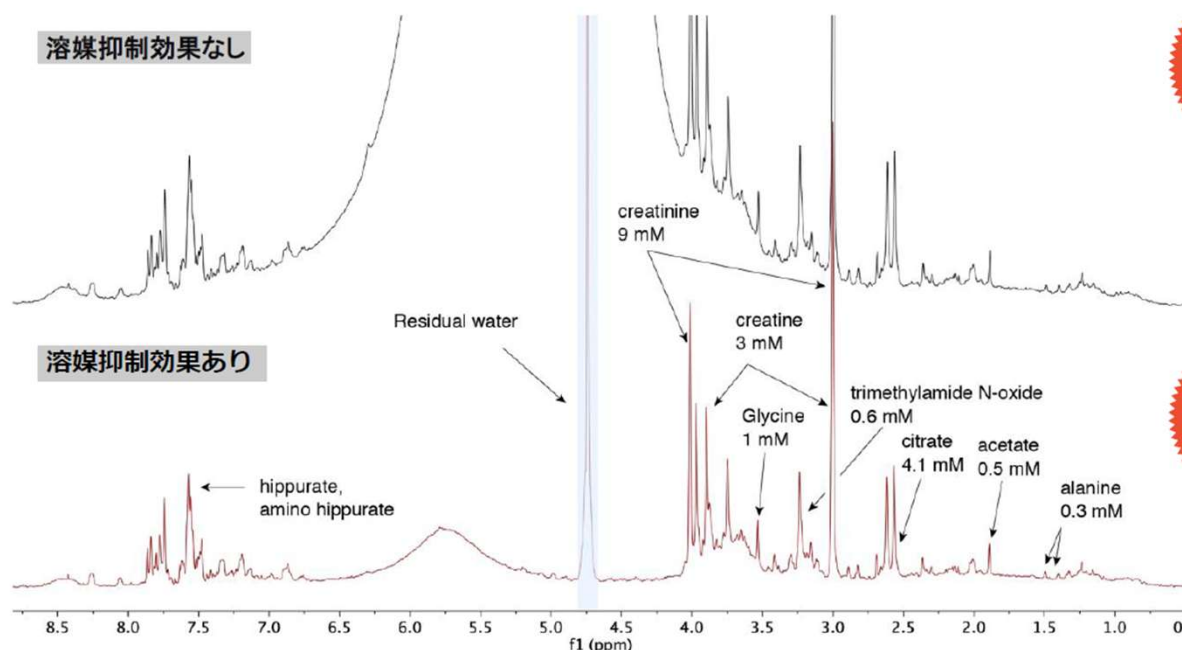
Proton	Fluorine	Carbon
1D Proton 1D PRESAT solvent suppression 1D with ¹⁹ F and ¹³ C decoupling 2D COSY 2D TOCSY 2D ROESY 2D JRES T1, T2 Reaction Monitoring	1D Fluorine with 1H decoupling Paramagnetic 2D F – COSY 2D F – JRES 2D FH – COSY T1 Reaction Monitoring	1D Carbon with 1H and ¹⁹ F decoupling DEPT APT HECTOR HSQC HSQC=ME HMQC HMBC NOAH NUS

Spinsolve^{ULTRA}

Spinsolveのマグネットの超高磁場均一性により、最高の分解能が得られます。



優れた溶媒抑制効果
ミリオーダー濃度の尿中代謝物を数分で解析できます！！



約8分
で解析

2000
倍拡大

尿中には、純水中に非常に低濃度で溶解している代謝物が多数含まれています。上の図は、溶媒抑制を行った場合（赤）と行っていない場合（黒）のスペクトルを比較したものです。溶媒抑制を行うことで、水の信号（青色）が非常に効率よく減衰していることが分かります。

Spinsolve に装備可能なアドオン

■ オンラインリアクションモニタリングキット

Spinsolveの全モデルには、ドラフト内で直接オンライン分析を行うために開発されたリアクションモニタリングフローキットを搭載することができます。このキットにはガラス製のフローセルが含まれており、インレットからセル中央部まで細いチューブを使用することができます。フローでのデッドボリュームを最小限に抑え、NMRの測定する中央部でチューブの容量を拡張することでNMR感度を最大化させています。フローセルの最適化された設計により、フローモードでの S/N は標準的な 5 mm チューブを使用した場合と同じです。このキットにはペリスタポンプも含まれており、Spinsolve のソフトウェアで制御して連続フローモードと停止モードを設定でき、動作させることができます。フローセルは Spinsolve に簡単に挿入でき、細い PTFE チューブまたはピークチューブでポンプに接続することができます。Spinsolve のソフトには、反応をリアルタイムで追跡するために開発された強力なモニターモジュールが含まれています。ループに含まれる様々なプロトコルの測定値とポンプを同期させ、変換カーブを表示するための高度なデータ処理ツールを提供します。

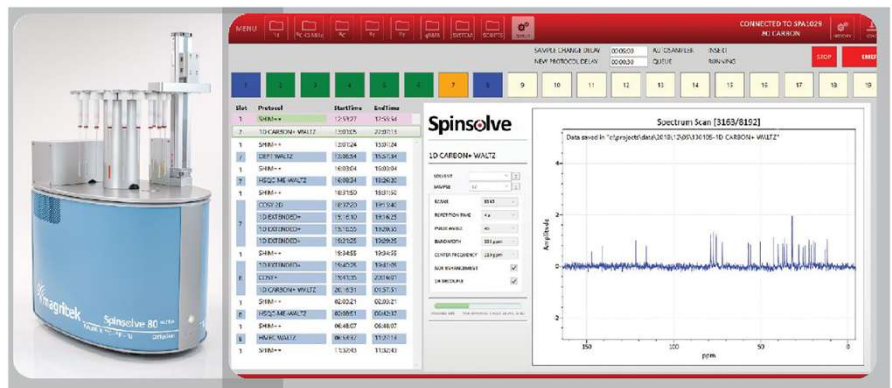
- ・大容量サンプル
- ・高い感度
- ・速い測定
- ・高いSN比
- ・高い分解能、狭いベース幅による正確な要素の積分
- ・長時間の測定と高い安定性
- ・専任の技術者が不要な簡単な操作性



■ オートサンプラー

Spinsolveに新しい全自動オートサンプラーの回転台を組み込むことで、サンプル測定の精度を向上させることができます。オートサンプラーは Spinsolve の上部に取り付けられ、移動の際に簡単に追加・取り外しができます。各サンプルに対して実行するプロトコルはわずか数秒で構築でき、データ収集中であってもいつでも編集することが可能です。オートサンプラーによってオーバーナイト測定が可能になり働き方改革に貢献します。

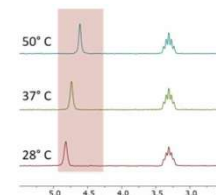
- ・ 5 mm NMR チューブ用の 20 スロット
- ・ Spinsolve ソフトウェアによって完全に制御
- ・ サンプル分析のためのすべてのプロトコルの簡単な設定
- ・ 手頃な価格で堅牢
- ・ 取り付けが簡単
- ・ すべての Spinsolve モデルと互換性があります



■ サンプル温度制御

Spinsolve システムには、追加の窒素や乾燥空気の供給を必要とせずに温度を制御できる独自の温度制御システムを装備できます。これは、サンプル量と感度を低下させるガス流アプローチを使用する代わりに、磁石の温度を調整することによって実現されます。可変温度オプションは、分解能、感度、安定性を損なうことはありません。

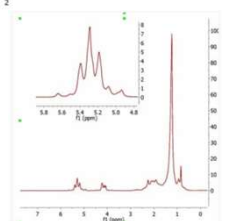
- ・ 磁石の温度を調整できるシステムと磁石の設計
- ・ 静止サンプルおよびオンラインセットアップの正確な温度制御
- ・ 感度を損なうことなく、標準的な 5 mm チューブおよびフローセルで動作します
- ・ 異なる温度で再校正する必要はありません
- ・ 窒素や乾燥空気の供給が不要
- ・ 温度範囲：26.5°C~60°C
- ・ Standard バージョンと Ultra バージョンとして利用可能
- ・ 拡散勾配付きで利用可能



優れたシステム安定性

Spinsolve シリーズの多層温度制御を利用することにより、システムの安定性は温度範囲全体にわたって損なわれません。

グラフ：50°C で 20 時間にわたって取得された100個の植物油スペクトルを重ね合わせたもの。スペクトルは測定間にリシミングを行わずに取得されました。

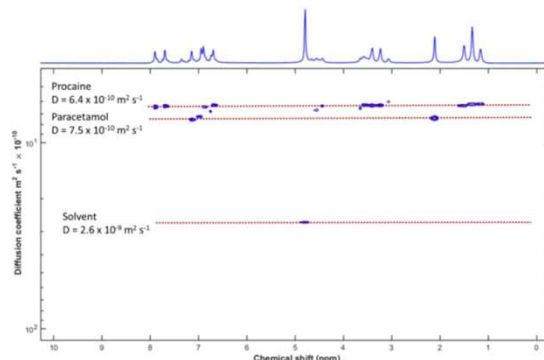
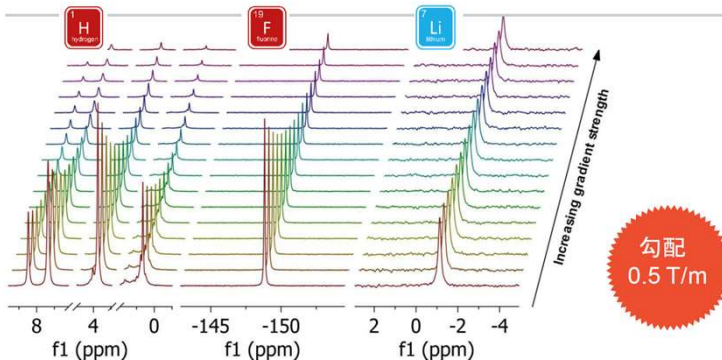


■ DOSY測定に適した拡散勾配

すべての Spinsolve モデルには、強力なパルス磁場勾配を生成する勾配コイルを装備できます。

自己拡散係数を測定して分子の移動度を理解する (PFG 拡散測定)

Spinsolveは1台で複数の核種を測定できるため、異なる核種を含む種の拡散定数を再チューニングすることなく自動的に測定することが可能です。以下に、1 butyl 3 methylimidazolium tetrafluoroborate (BMIM BF₄)と lithium tetrafluoroborate (LiBF₄)の混合物を測定する例を示します。拡散係数は、特定の核ごとに刺激 エコーシーケンスを実行して測定された。左から右へ、BMIM BF₄ 中の 50 mg/mL LiBF₄ のプロトン、フッ素、リチウムに対する PGSTE 実験を見ることができます。(下左図)



混合物中のさまざまな成分のスペクトルを分子サイズごとに分離します (DOSY タイプの実験) (右図)

DOSYは、グラデーションの振幅の関数として一連のスペクトルを取得することにより、2次元のプロットを作成します。横軸にケミカルシフトをとり、縦軸に自己拡散係数をとります。この2次元スペクトルでは、ピークは水平線に沿って並んでいます。これらの線はそれぞれ異なる自己拡散係数に対応し、混合物の異なる成分に対応します。拡散係数が10倍異なるだけで、溶媒のピークと他の2つの成分を即座に分離することができるのです。このように、DOSYはNMRにおいて、拡散係数が異なる成分の混合物分析に非常に有効なツールです。(右上図)

■ qIDSolve

ベンチトップ NMR による自動識別と定量のためのデータ収集、調査・報告、解説ソフトウェアです。

qIDSolve ソフトウェア パッケージは、広範なベンチトップ NMR スペクトル データベースによってサポートされる完全に追跡可能な環境に組み込まれた、自動データ取得、同定、定量化、およびレポート作成のためのツールを組み合わせています。



dbNMR

- ・ 包括的なスペクトルを収録
- ・ 拡張が簡単
- ・ ワークステーション間で共有可能

dbNMR データベース パッケージは、高い S/N 比で注意深く測定された 1,200 を超える物質のスペクトルの広範なリストを備えた、柔軟で使いやすいソリューションです。

idNMR

- ・ 自動識別
- ・ 効率的な検索アルゴリズム
- ・ 外部データベースへの接続

未知のサンプルに含まれる成分を自動識別するためのソリューションを提供します。データベースに対して未知の物質を自動的に識別するために開発された強力な相互相関アルゴリズムが含まれています。

qNMR

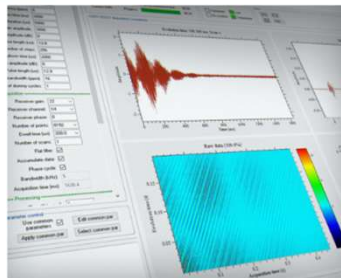
- ・ 自動定量化
- ・ 内部および外部標準の使用
- ・ グラフィカルなメソッド開発
- ・ 自動レポート

さまざまな種類のアプリケーションに対応する柔軟な処理機能を提供しながら、定量化メソッドを迅速かつ簡単にセットアップできるように設計されています。

Audit

- ・ グループ管理者とユーザー管理
- ・ 柔軟なデータ保存オプション
- ・ システムと測定の監査証跡
- ・ オートサンプラーとの完全な互換性

データの整合性とトレーサビリティがシステムの適用性の鍵となる規制環境で使用するために開発されました。



■ Spinsolve エキスパートソフトウェア

Spinsolve エキスパートソフトウェアは、実験の実行と表示を最適化するように設計されています。実験はプロジェクトにグループ化され、現在のプロジェクト内のすべての実験がユーザーインターフェイスに表示されます。各実験をクリックすると、以前に収集されたデータと使用されたすべてのパラメータが表示されます。

パルス プログラムは、高レベルの実験制御スクリプト、デフォルトパラメータ、およびユーザーインターフェイスからのパラメータとともに入力できます。熟練したユーザーは、表示インターフェイスと後処理コントロールを構成できるだけでなく、実験を詳細に制御することができます。パルス プログラムエディターとコンパイラを使用して、新しい実験を簡単に追加できます。

Spinsolve Expert の機能

セットアップとモニタリング

- 手動および自動シミング
- 自動ロック検索
- 温度モニター
- Proton と Lock プローブのマッチングチェック

データ表示

- 各実験には最適化されたプロット レイアウトがあります (ユーザー制御)
- 1D および 2D プロットをメインインターフェイスに一緒に表示できます。
- 3D プロットを別のウィンドウに表示可能

実験制御

- すべての実験パラメータが表示され、変更可能
- 同じ実験の複数のバージョンを同じプロジェクトで実行できます。
- スクリプト言語を使用して実験を制御可能
- ループとユーザー定義の処理を含む

- 実験はバッチ処理可能
- データはファイル システムに保存され、簡単にエクスポートできます。

パルスプログラム生成

- 新しいパルスプログラムを作成して分光計を完全に制御できる

後処理

- 実験ごとに特定の後処理を定義できます。 利用可能なコマンドは次のとおりです。
- 事前定義およびユーザー定義可能なさまざまなアポダイゼーションフィルター
- フーリエ変換
- 手動および自動位相補正
- ベースライン補正
- 1D および 2D 逆ラプラス (2D 逆変換には特別なライセンスが必要です)

付属のパルスプログラム

Proton (1H)

1Pulse
1PulseAmplitudeSweep
1PulseDurationSweep
cosy2D-gs
Findf0
jres2D
MonitorNoise
T1IR
T1IRT2
T2CPMG
T2CPMG_bulk
Watergate

Fluorine (19F)

1PulseDispFluorine
1PulseDurationSweepF
luorine
Fcosy2D-gs

FHcosy2D-gs

Fjres2D
HFcosy2D-gs
jres2DFluorine
T1IRFluorine
T2CPMGFluorine

Phosphorus (31P)

1PulsePhosphorus
1PulsePhosphorusMLE
V
1PulsePhosphorusWAL
TZ
HMBC_Phosphorus
T1IR_Phosphorus_WA
LTZ
T2CPMG_Phosphorus_WALTZ

Carbon (13C)

1PulseDispCarbon
1PulseDispCarbonMLE
V4
1PulseDispCarbonMLE
V4_CA
1PulseDispCarbonMLE
V4_HF
1PulseDispCarbonWAL
TZ16_CA
1PulseDispCarbonWAL
TZ16_HF
1PulseDispProtonMLEV
4
1PulseDispProtonMLEV
4_CA
1PulseDispProtonWALT
Z16_CA
DeptMLEV4
DeptQMLEV4
DeptWALTZ16_CA
HetcorMLEV4
HetcorWALTZ16_CA
HMBC-gs
HMBC-gs-CA
HMBC-gs-CA-P
HMBC-gs-F
HMBC-gs-CA
HSQC-gs
HSQC-gs-CA
HSQC-gs-F
MonitorNoiseCarbon



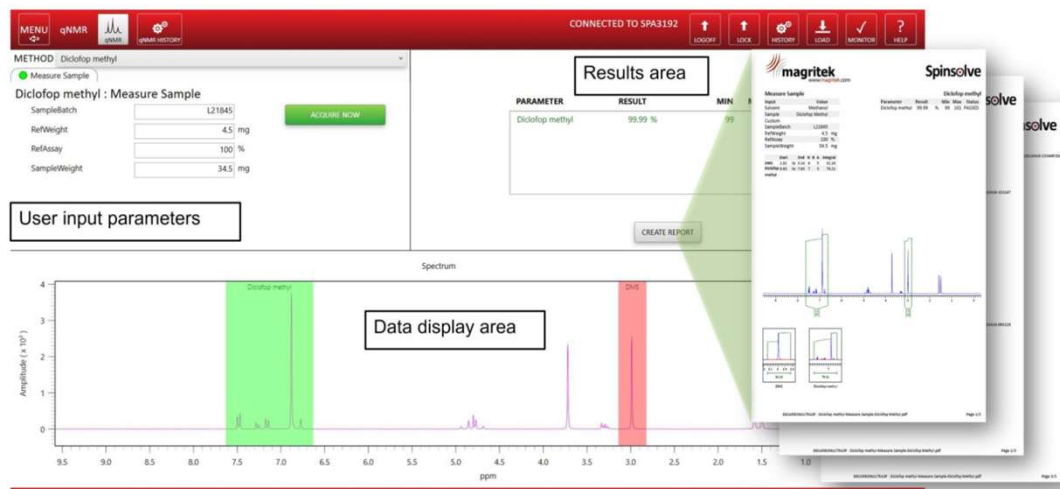
■ qNMR Spinsolve ソフトウェアモジュール

Spinsolve qNMR ソフトウェア モジュールは、さまざまな種類のアプリケーションに対応する柔軟な処理機能を提供しながら、qNMR法を迅速かつ簡単にセットアップできるように設計されています。内部標準または外部標準を使用する方法は、さまざまなグラフィカル・データの視覚化および統計ツールが利用可能なユーザーインターフェイスを通じて生成することができます。さらに、qNMRプラグインは Spinsolve 監査モジュールと完全に統合されており、ユーザー管理とすべての測定および処理ステップの完全なトレーサビリティを提供します。この機能は、GxP 規制環境では特に必要です。

qNMR モジュールは、外部標準校正剤に基づいて定量化するように設定できます。これは、サンプル前処理を必要とせず、プロセスから直接得られる液体サンプルの分析に非常に有用であることが証明されています。



メソッドでは、混合物中のさまざまな分析物の定量化を可能にするため、または多点キャリブレーションのために、いくつかの外部標準を基準として使用できます。



輸入発売元

株式会社朝日ラボ交易

販売店



〒650-0046 神戸市中央区港島中町4-1-1

TEL 078-335-8613

FAX 078-335-8614

URL <https://www.asahilab.co.jp>

Email: info@asahilab.co.jp