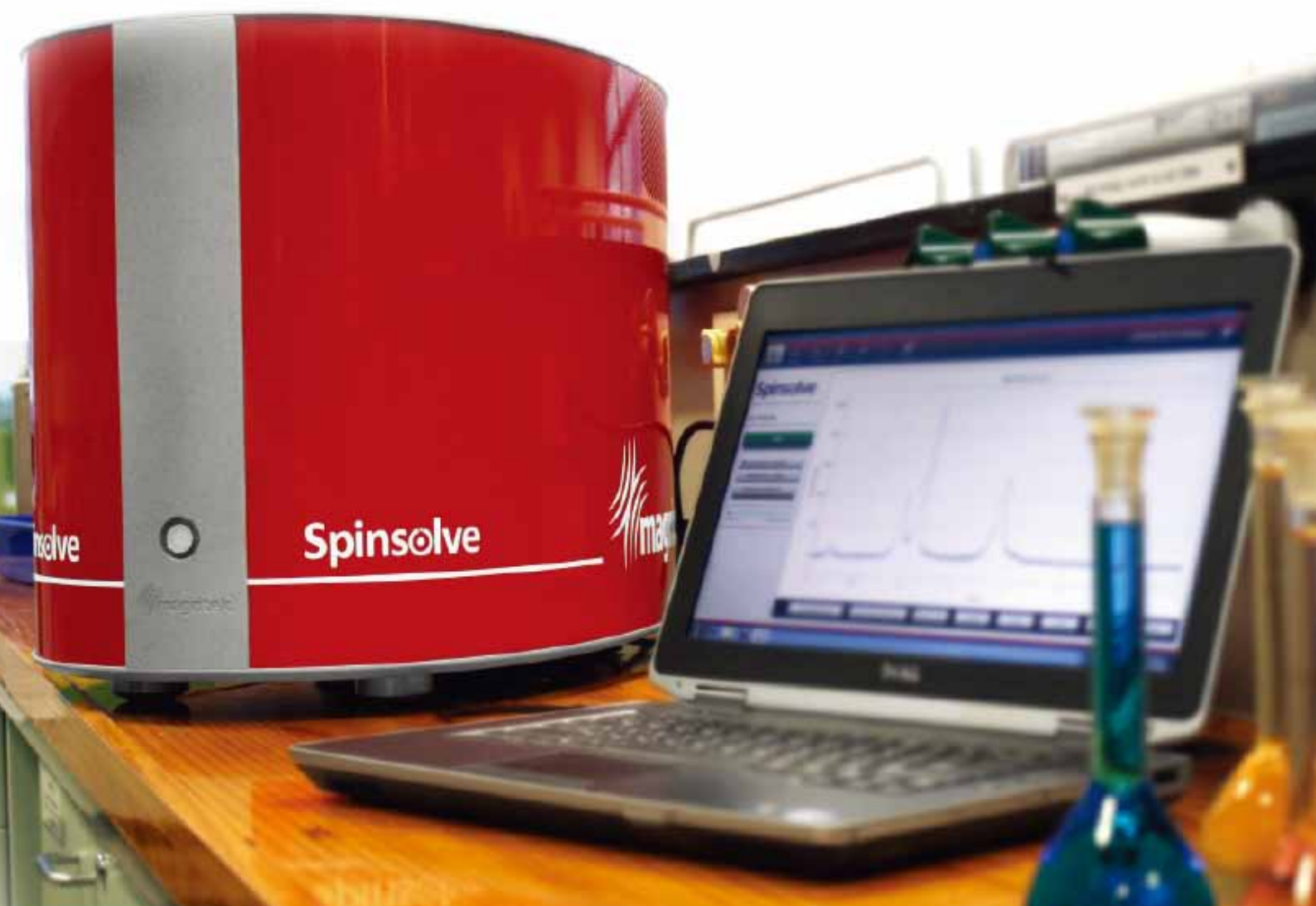


# Spinsolve

 **magritek**  
www.magritek.com

## 大学教育の場における最適なベンチトップNMR



Spinsolveは大学教育において最適なNMRを提供します。速さと有益情報をもつ感度と機能性の高さは忙しい大学研究の場においても活躍し、従来のシステムと比べコスト面でも優しく便利で高パフォーマンスのNMR測定を行うことができます。



2-3回生が行うp-ニトロアセトアニリドを加水分解しp-ニトロアニリンを合成する科学実験では数分間のサンプル生成でSpinsolve NMRスペクトルを得ることができ、比較測定は標準的な300MHz機器で行われた。

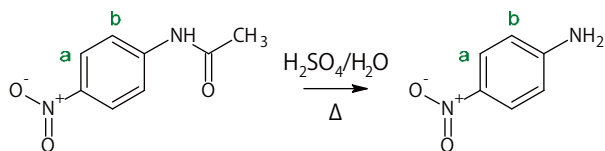
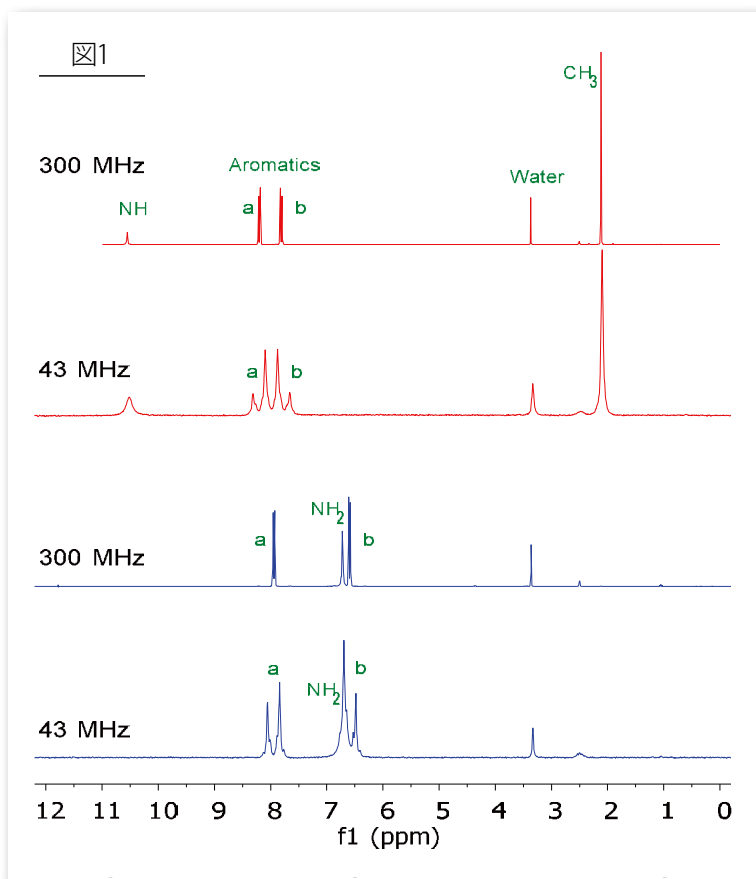


図1では200mM溶液中、DMSO-d<sub>6</sub>/ジメチルスルホキシド-d<sub>6</sub>内の出発物質 (赤) および最終生成物 (青) の<sup>1</sup>H NMRのスペクトルを示している。

メチルピーク (CH<sub>3</sub>) の消失および10.5ppmから6.6ppmでNH<sub>2</sub>へ変化したNHピークは成功的な反応が見られたという証である。結果によると周波数の低いNMRの使用により科学的情報が失われるということにはなかった。



- 速さ：有益な情報をもつスペクトルを数分間のサンプル生成で得ることが可能
- 便利：ラボやベンチトップ等、学生の居るところで使用できる
- 感度が非常に高いため、数十～百のmmol/ミリモル濃度で使用できる
- Spinsolve 43 MHzスペクトルは高磁場での使用時と同等の科学情報の提供が可能





Spinsolveは高磁場NMRよりも安価であると同時に重水素化溶媒を必要としないためコスト削減につながります。

2-3回生が行うセトアニリドを加水分解してp-ニトロアセトアニリドを合成する化学実験

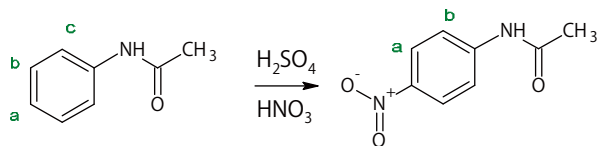
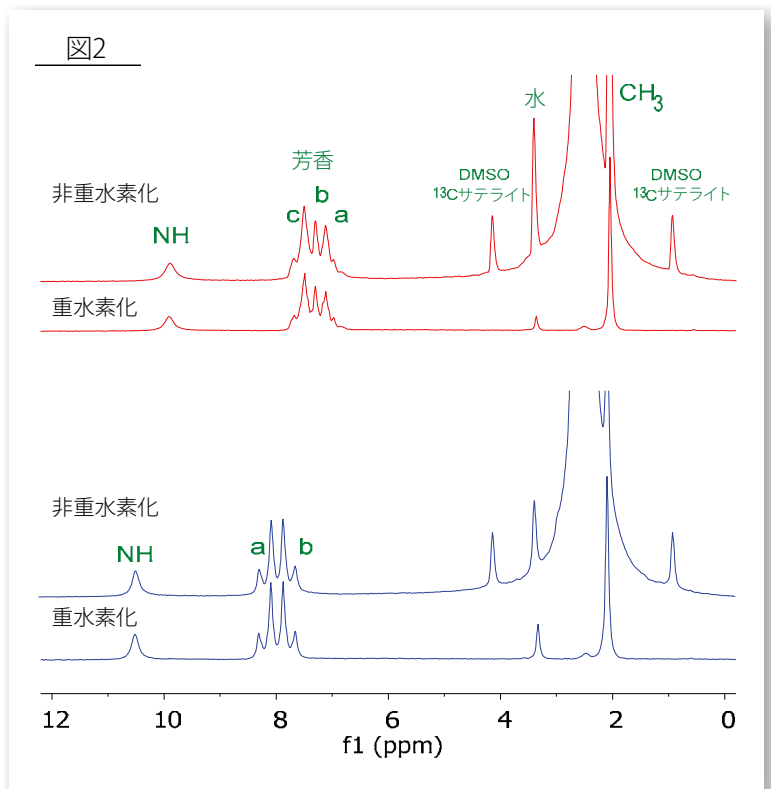
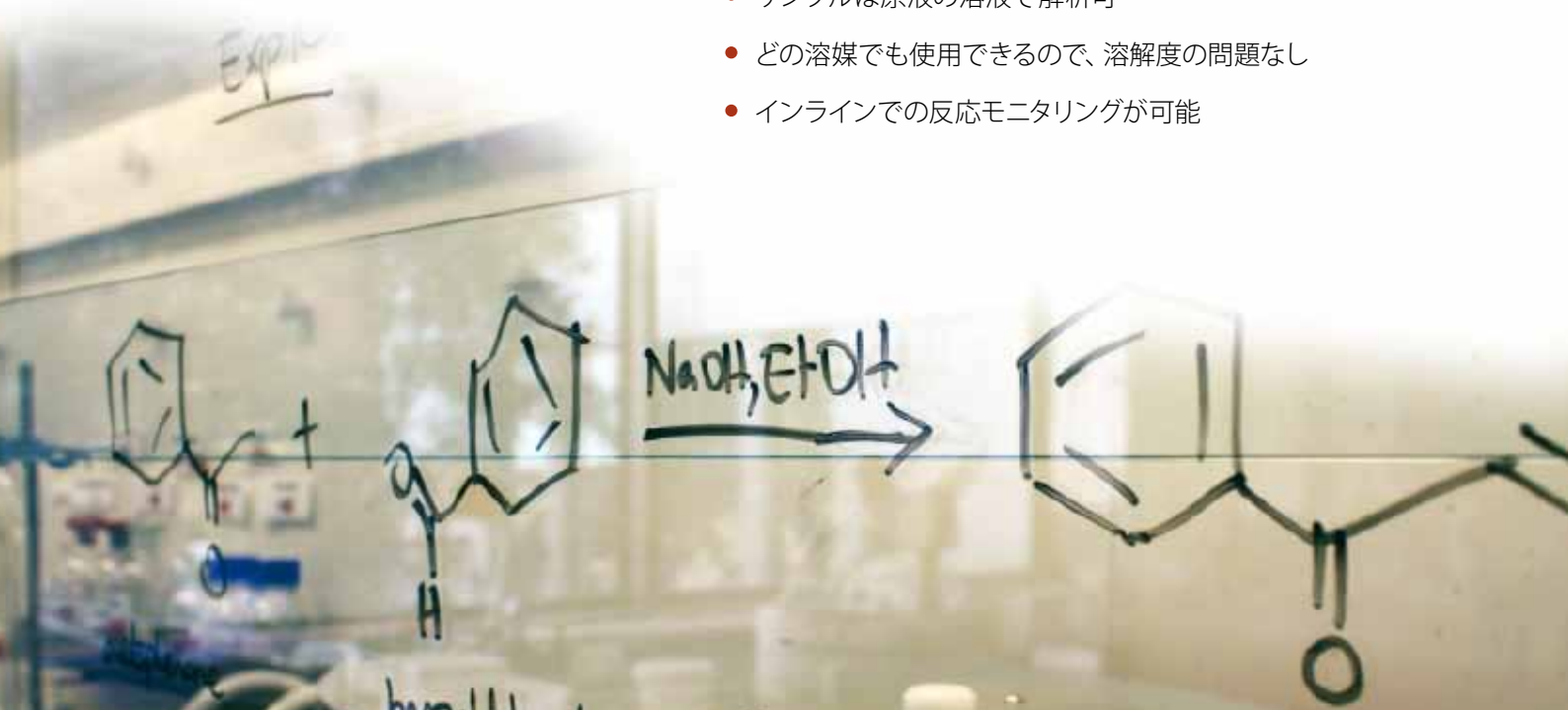


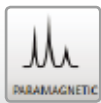
図2は重水素化および非重水素化DMSO中のスターティング物質 (赤) および最終生成物 (青) のNMRスペクトルを示している。

非重水素化溶媒に大きなピークが見られたが、ピーク



- 重水素化溶媒を使用しないためコスト削減につながる
- 低価格のNMRチューブ使用可
- サンプルは原液の溶液で解析可
- どの溶媒でも使用できるので、溶解度の問題なし
- インラインでの反応モニタリングが可能





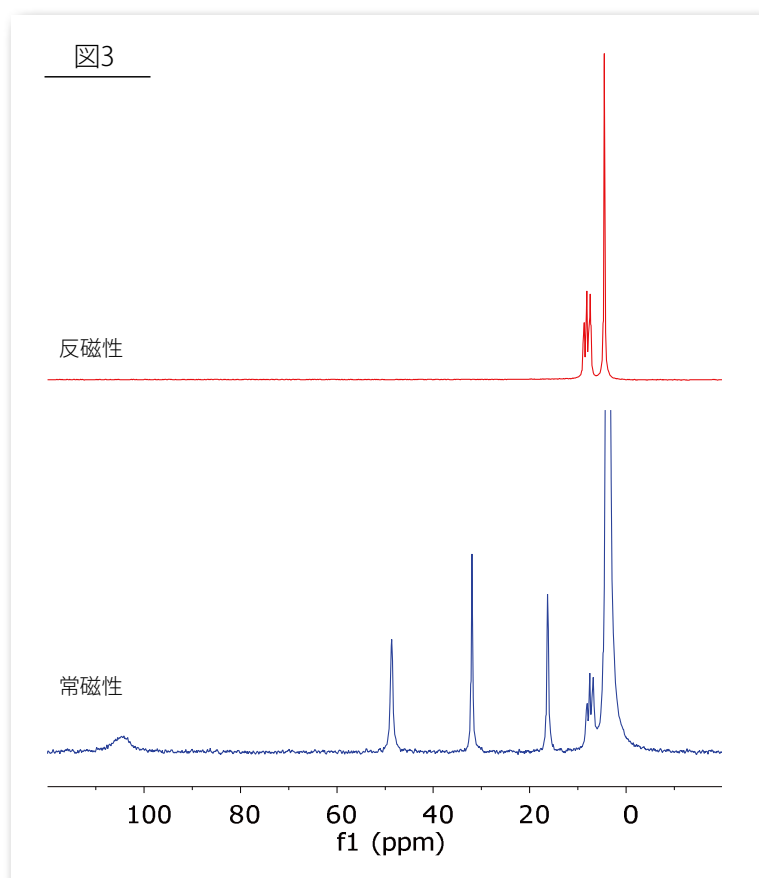
NMRを初めて使用する人にとって、異なるNMR測定法を使用した実験は難しいかもしれません。

Spinsolve はシンプルで簡単な操作で作動が可能。

常磁性イオンである無機錯体はプロトンスペクトルのケミカルシフト範囲を何百ものppm値まで伸ばします。Spinsolveソフトウェアのパラマグネティックプロトコルは特にこのようなサンプルのスキャン向けにデザインされているため使用が簡単。

三回生の化学実験で行われるこの例では、常磁性  $[\text{Co}(\text{phen})_3]^{2+}$  から反磁性  $[\text{Co}(\text{phen})_3]^{3+}$  錯体へ転換することにより統合リガンドの反応を示す。

図3は常磁性および反磁性コバルト錯体間のケミカルシフト範囲の著しい差異を示している。



- シンプルな操作方法で学生も難度の高い実験を行うことができる
- 常磁性サンプルの解析を簡単に行うことができる
- 進化した2次元NMR測定法で操作が簡単
- ボタン一つで $^{19}\text{F}$ スペクトルの測定が可能





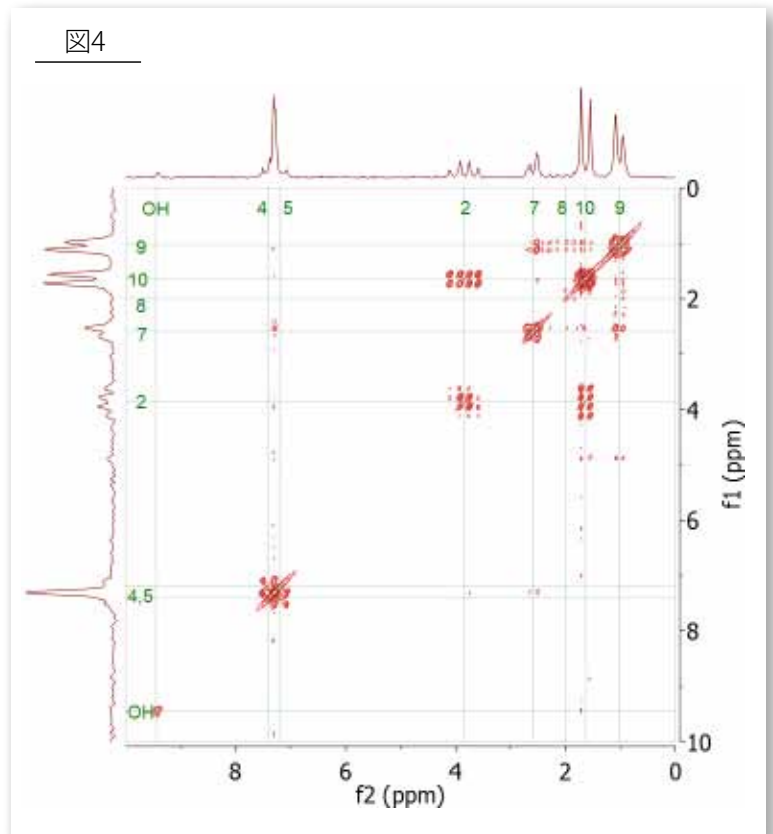
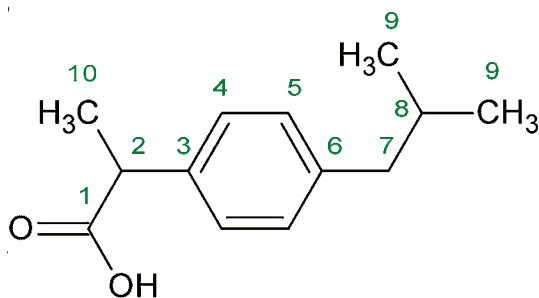


## 進化したNMR



NMRを始めて使用する多くの学生はシステムの理解およびケミカルシフトと結合の区別が難しいと感じています。2次元NMR測定法では2次元性に更に多くの情報を加えより効果的にNMRスペクトルの解析を行います。

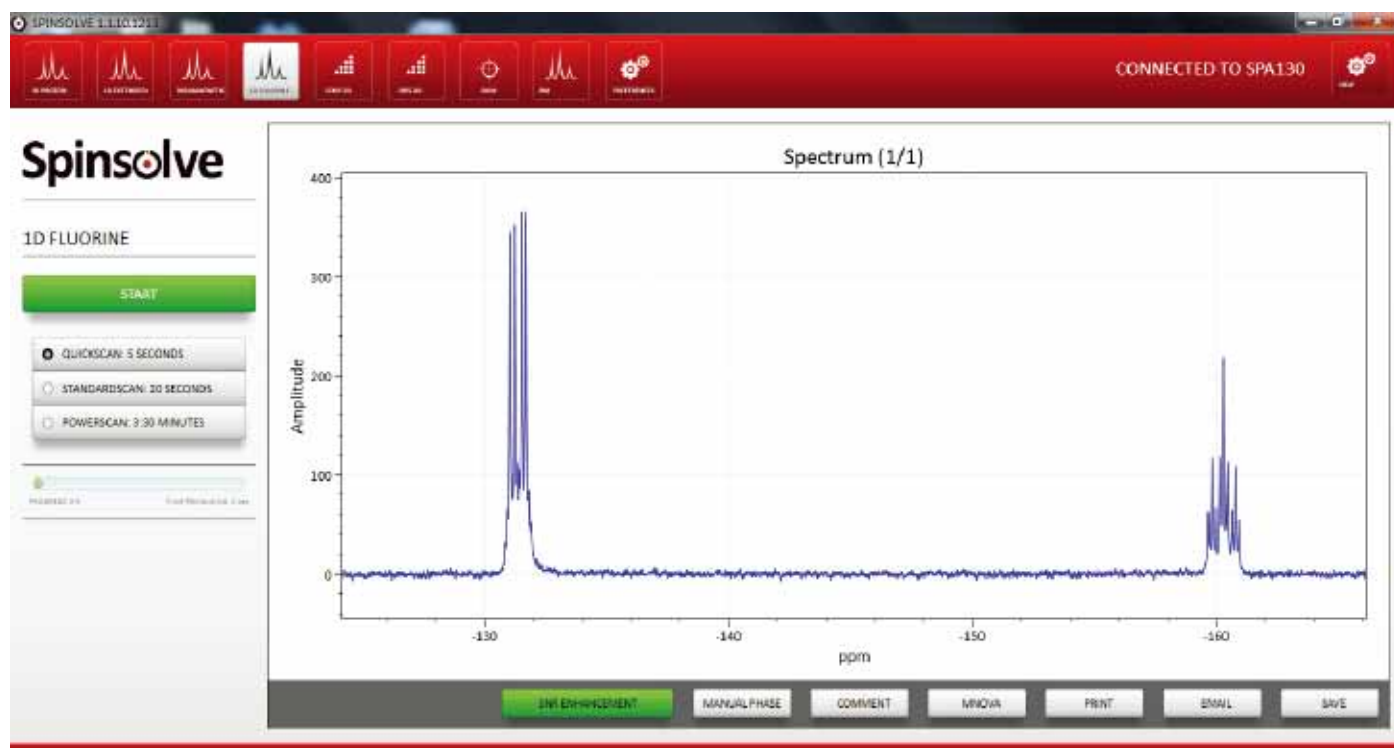
CDCl<sub>3</sub>で溶解するイブプロフェンのスペクトルを<sup>1</sup>H NMRとした場合、COSY法は陽子共鳴を引き起こすために用いられる。2次元スペクトルでのクロスピークはスルーボンドカップリングを示す。イブプロフェンのCOSYスペクトルは図4を参照。クロスピークでは2つのスピンス系が見られた：  
CH-2/CH<sub>3</sub>-10およびCH<sub>2</sub>-7/CH<sub>3</sub>-9



- COSY法は磁氣的に連結した化学基から発せられるプロトンシグナルを識別
- 2次元COSY法は最も使用されている2次元NMR測定法の一つ
- 約10分で解析可能な教育現場に最適なシステム



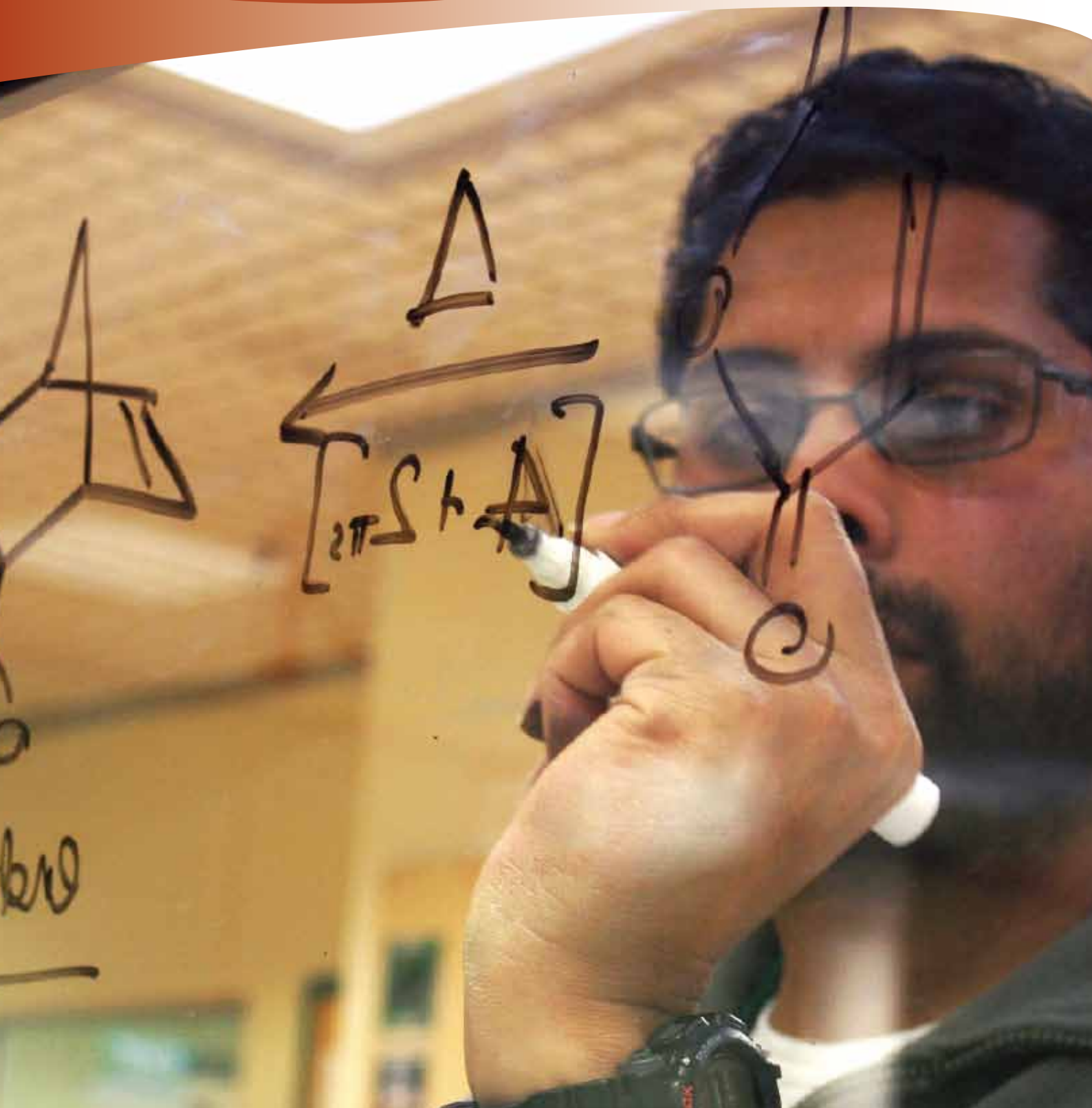
美しくシンプルで分かりやすいソフトウェア



Spinsolveソフトウェアはシンプルで美しく、研究ラボで簡単に使用できる手間の少ないデザインです。ほとんどの解析はボタン一つで行うことが可能。解析中の切り替えもボタン一つで行うことができます。使い方を覚える手間を省きまた処理能力を更に速めます。

上記の図はSpinsolveソフトウェア最新版に搭載された<sup>19</sup>F解析機能使用時のスクリーンショット





「生成した化合物の解析だけでなくNMR測定も可能に。  
学生実験をリサーチや進路設定において有益なものにし、また化学に対する意欲を高めます」

メルボルン大学 化学学部 学部長、フランセス・セパロヴィック教授

# Spinsolve



Spinsolve™ ベンチトップNMRスペクトロメータは  
ラボや教育現場での実験を向上させます。



## Spinsolve™ が教育現場で必要とされる理由



### コスト削減

- 高磁場の製品と比べ安価
- 重水素化溶媒不要
- 消費電力が少ない
- 比較的安価なNMRチューブ使用可能



### 時間の節約

- ベンチトップでの使用に最適
- スタンダードな5mmNMRチューブで素早いサンプル交換が可能
- 手間がかからない
- シンプルで使いやすいソフトウェア
- 漏洩磁場を防ぐ安全仕様



### 有益な情報提供

- NMR測定を使用する教育現場で先導的な役割を果たす
- 約10秒で高解析のNMRデータが取得可能
- 最新の2次元バージョンではマルチパルス (2DJR、COSY) および<sup>19</sup>Fフッ素の解析が可能
- 学生や教育スタッフがNMR測定法を直に経験できる



お見積り、デモ使用または試料測定をご希望の方はお気軽にご連絡ください。

製造元

Magritek Limited [www.magritek.com](http://www.magritek.com)

国内代理店

株式会社朝日ラボ交易



〒650-0044 神戸市中央区東川崎町1-8-4  
Tel 078-335-8613  
Fax 078-335-8614  
Website <http://www.asahilab.co.jp>

お問合せは [info@asahilab.co.jp](mailto:info@asahilab.co.jp) にご連絡願います