

NMR 解析ソフト (Mnova) ユーザーズミーティング 参加報告

共通機器部門 共通利用機器管理班

中谷 都志美

1. 目的

2017年7月に工学研究科の共通機器室に導入したNMR解析ソフト(Mnova)は多機能であるがゆえに、その性能を存分に使いこなせていない現状がある。

解析ソフトの基本的な操作法の理解と今後の運用に役立つ情報収集を目的とし、参加した。

2. 期間・場所

2018年11月9日(金) TKP品川カンファレンスセンター カンファレンスルーム4B

3. 参加者

大学・企業等研究機関 研究・技術者 約30名

4. 研修内容

- ・ Mnova の使用のコツ, 定量 NMR 自動分析システム”qNMR システム“の紹介
株式会社システムプラス 梅本 伸一氏
- ・ What's new Mnova? Mestrelab Research Dr. Manuel Perez
- ・ 製薬会社での NMR の利用 (溶液・固体・MRI)
塩野義製薬 株式会社 菊池 純子氏
- ・ NMR が拓く複雑系科学の世界
理化学研究所 菊池 淳氏
- ・ Mnova structure Elucidation 使用方法 Mestrelab Research Dr. Manuel Perez

5. 感想

本ソフトウェアの便利な使用方法の一つに、複数人で共有している PC 上でも同一条件で測定、解析できる processing template がある。テンプレート内に一定のパラメータを設定しておくことで、誰が測定、解析を行っても再現性の高いデータが得られる。また、multiplet report 機能では、論文に記載する測定条件を各雑誌の形式にあったものに編集する機能が付いており、一方、論文に記載されている測定条件やケミカルシフト値を貼り付けることで、実際に測定せずともスペクトルを表示できる機能も紹介された。

製薬会社での NMR の利用の講演では溶液、固体 NMR と MRI の組み合わせで薬の開発に取り組まれている実例が紹介された。精製されたサンプルに比べ、混合物や添加物をドープしたサンプルの測定、解析の実例が多く、溶液、固体 NMR の特性をうまく組み合わせ、運用されている点が、本学の NMR 運用にも適用できる部分があると感じた。今回得られた知見を簡易マニュアル化し、運用する予定である。