

NMR 測定データ解析ソフトの新規導入

大石 智博

国立大学法人熊本大学 工学部技術部

1. はじめに

熊本大学工学部技術部では、JNM-EX400 装置 (JEOL) および UNITY INOVA 400 型 (Agilent Technology (旧 Varian inc.)) の 2 台の NMR 装置を管理し、様々な測定を実施している。

NMR (Nuclear Magnetic Resonance : 核磁気共鳴) 分光法では試料は溶液だけでなく固体・ゲル・エマルジョン試料なども測定対象となる。また、測定核種は ^1H や ^{13}C が日常的にはほとんどだが、原理的には NMR 現象を示す大部分の元素について測定が可能である。特に ^1H , ^{13}C に関してはこれらの結合状態をみるための多くの測定法が開発されており、それらの測定により化合物の分子構造などについて多くの知見を得られるため、特に有機化合物の化学構造解析には必須の分析手法となっている。

本学の装置では一般的な液体試料の測定だけでなく、それぞれ専用のプローブを用いて、極微量試料・懸濁溶液の測定や、固体試料の測定を行っている。これらの測定法を合わせると ^{11}B , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P に関する測定実績があり、多くのユーザーが NMR 装置を利用している。

2. 解析ソフトの新規導入について

2.1 導入の背景

かねてより、JNM-EX400 装置での測定データの解析は有料の解析ソフトを購入する以外には NMR 装置制御用 PC 内の制御兼解析ソフトでしか行えなかったため、測定を終えた者が解析のためにそのまま PC を使用し続け、次の測定希望者が測定できない等の不都合が生じていた。また、利用者から NMR 解析ソフトに関する質問を受けていたため、新たな NMR データ解析ソフトの導入を検討した。

2.2 NMR データ解析ソフトの検討

まず、候補として JNM-EX400 装置のメーカーである日本電子株式会社が提供するソフト『Delta NMR Software』について検討した。このソフトはライセンス登録を行えば無料で入手でき、Windows OS・Mac OS いずれにも対応しているので、学生が各自の PC に解析ソフトを導入できるようになる。これにより測定希望者と解析希望者のバッティングの回避や、解析のみを行うために測定室に足を運ばなくて済むようになるなど上記の問題の解決が期待できた。また、JNM-EX400 装置の他、UNITY INOVA 400 型 (Agilent Technology (旧 Varian inc.)) で測定されたデータに関しても大部分解析が可能であることがわかった。そこで NMR 測定室の解析用 PC への Delta の導入を決定し、JEOL RESONANCE 社の講師を招き、全学に向け NMR データ解析ソフトに関する講習会を開催することにした。

2.3 講習会の開催

全学に向けて講習会の開催を周知したところ、事前申し込み・当日参加を合わせて複数の学部から教職員・学生 60 名以上の参加があった。講習会の内容は、ソフトのダウンロードから使用開始までの流れ、 ^1H -NMR および ^{13}C -NMR 測定データの基本的な解析手順が主だった。

2.4 操作講習

上記の講習会は事前申し込みを参考に 60 名程度収容の講義室で行ったが、当日参加者が予想以上に多く、講義室のスペースや説明に使う資料の不足のため講習会に参加できない者も多数出てしまった。また、講習会の中で講師による解析の実演も行われたが、それだけではカバーできなかった部分や、各自が実際に解析する段階で生じる疑問点や不具合等に関する問い合わせが多数寄せられている。そのため、希望者に対しては簡単な操作講習等を随時行い対応している。

3. まとめ

講習会の開催後、各自の研究における NMR 測定データの解析の際に問い合わせを受けたり、研究室単位で解析ソフトを Delta に統一した研究室も出てきている。講習会の開催やその後の希望者への操作講習等により、解析ソフトを新たに導入するきっかけとなった問題の解決や、学生各自の PC への解析ソフトの導入等、今回の解析ソフトの新規導入は一定の成果を得られたと考えられる。