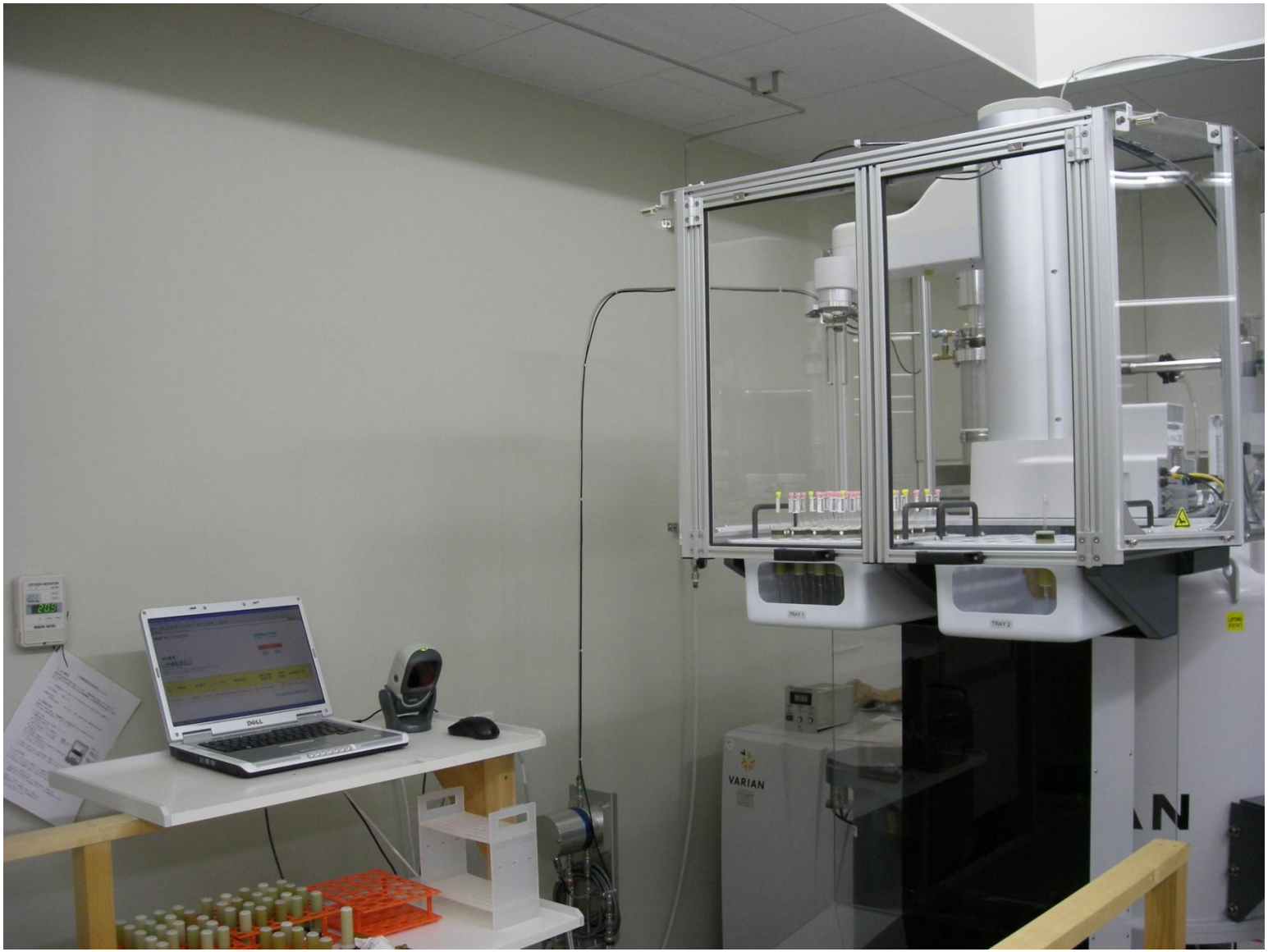
NMR測定自動処理支援/測定データベース構築

株式会社エルエイシステムズ



Varian社製7600-ASオートサンプラと
弊社バーコード入力端末の組み合わせ

弊社が携わったソリューション例

・測定条件の入力
　　・社内データベースから入力用CSVファイル生成
　　・バーコードによる測定データベースからの情報取得

・測定結果の管理
　　・測定マクロのカスタマイズ
　　・印刷をトリガとした測定終了時の自動処理
　　・データベースによるPDFファイル自動管理
　　・メールでの結果送信
　　・ファイル名自動変更・転送・バックアップ
　　・社内実験管理データベースの自動更新

・WEBブラウザによる条件登録、結果閲覧

測定情報のオンライン化・自動化による業務効率改善

・オートサンプラーのハンドリングにおける入力ミス低減

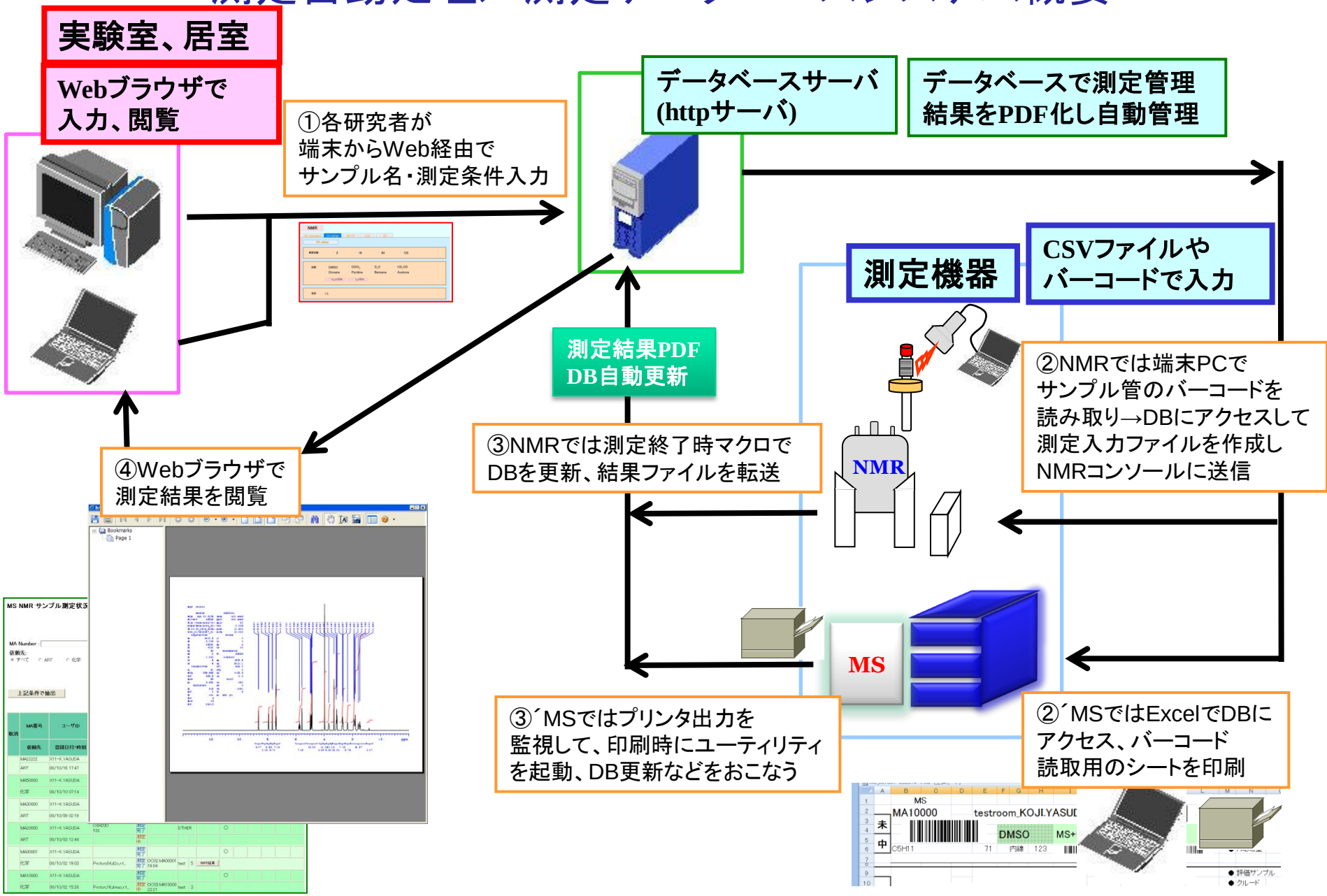
・実験/サンプル情報と、測定後の結果の自動リンク

・複数の依頼者、NMRをはじめ分析装置の測定に
関係する情報を集約して管理

・WEBブラウザと、データベースによる閲覧性、一覧性、
検索性の向上

・各種測定結果のPDF自動管理、保存、ブラウザからの閲覧

測定自動処理／測定データベースシステム概要

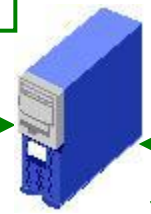


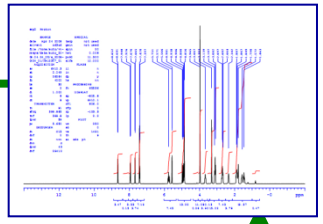
NMR測定自動処理の概要

⑤ 測定終了後は測定結果をDBに自動登録できます。スペクトルをメールで送信したり、ステータス画面にリンクすることもできます。

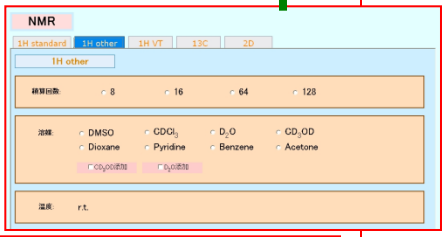
データベースサーバ

LAN経由でデータベースに登録





実験室、居室



① 依頼者PCのブラウザから測定する検体のサンプルIDとNMR測定条件などを入力してデータベースに登録します。

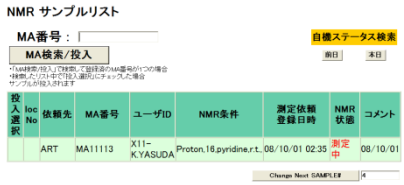
サンプルID

② サンプルIDバーコードを印刷しサンプル管に添付して、測定室に提出します。

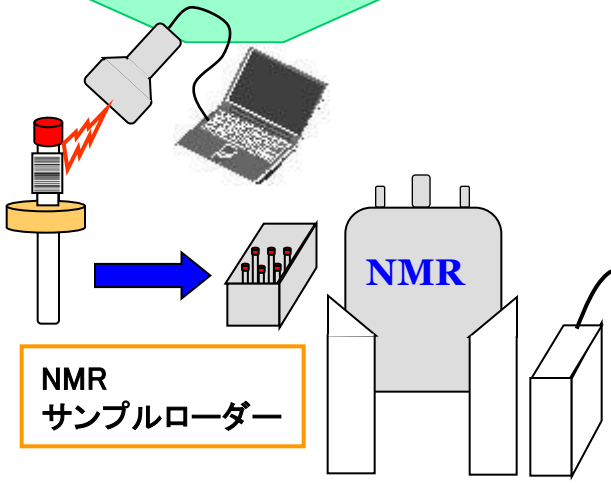
NMR室

サンプルIDでDB検索

NMRホストに測定情報を転送

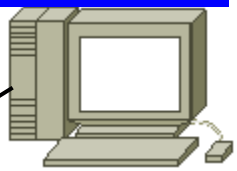


③ サンプルローダー側の端末でバーコードを読み込むと、DBを検索し、NMRホストPCにNMR測定条件が自動転送されます。



NMRサンプルローダー

NMRコンソール



④ NMRホストPC画面で自動測定マクロ実行ボタンを押すと測定が開始されます

測定結果自動解析

測定完了

1. NMR測定情報の入力

測定依頼者の個人PCのブラウザ（Internet Explorerなど）から特別な設定などをせずサンプルID、NMR測定条件を入力できます

サンプルID、ユーザIDなどは検索することもできますので、ログイン名や既存のデータベースとリンクして自動入力もできます

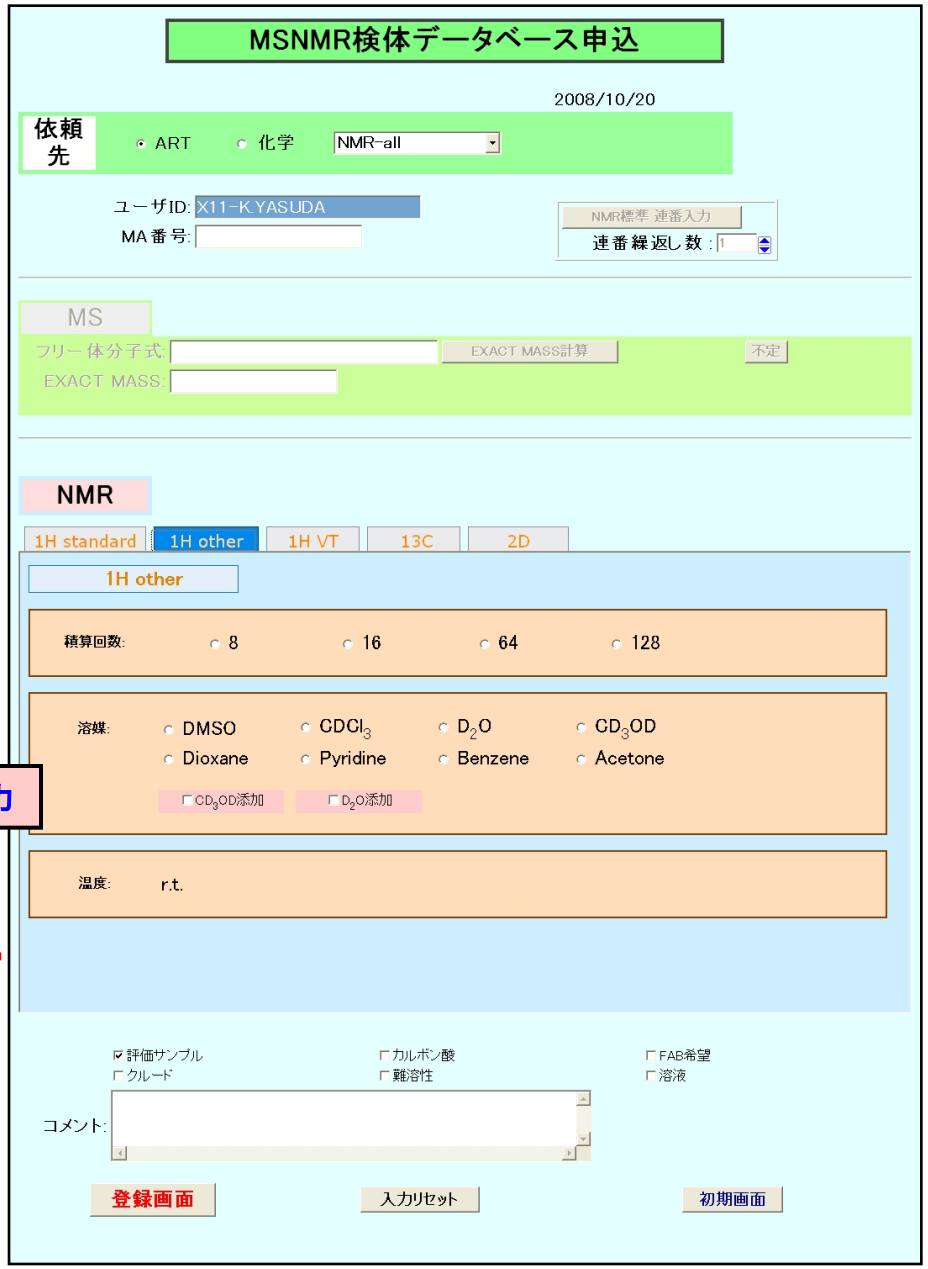
MS、IR、LCなどとのサンプル情報の共有や、入力項目のカスタマイズなども承ります

ブラウザからNMR測定情報入力

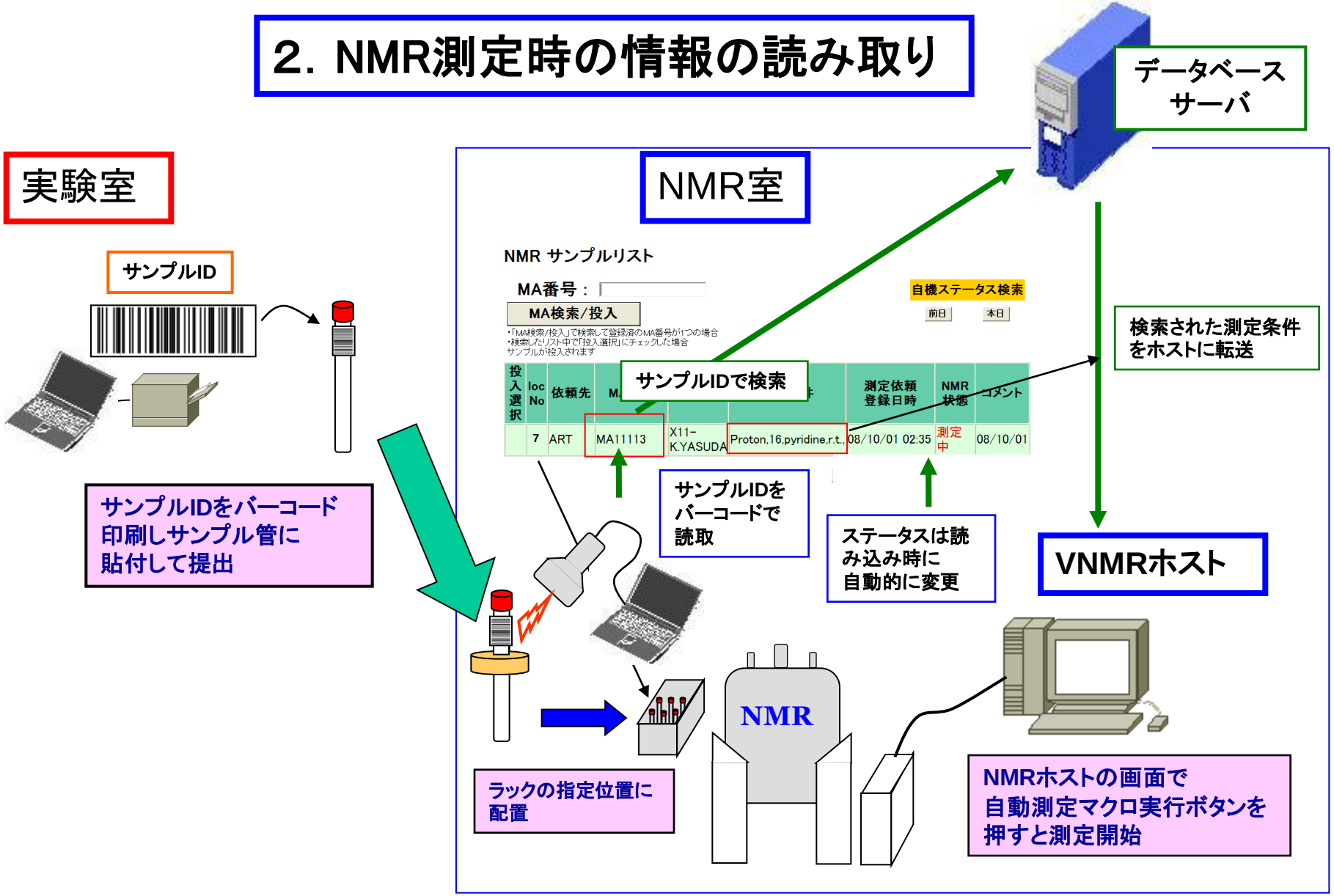
データベースサーバ

自動測定データベースに登録

MySQL
SQLServerなど
DBサーバ



2. NMR測定時の情報の読み取り



3. NMR測定中、測定完了のステータス監視

MS NMR サンプル測定状況

ログインID : yasuda
居室 :
MS状態: すべて
NMR状態: すべて
NMRデバイス:
すべて　ART 400MR　4F 400MR　3F VNS400
登録日 : From　本日
To　本日

MA Number :
依頼先:
すべて　ART　化学

条件全クリア

上記条件で抽出

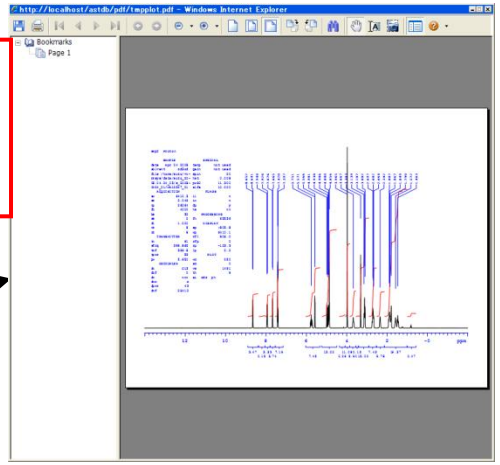
次ページ

取消	MA番号	ユーザID		状態		デバイス		結果	評価サンプル	クルード	カルボン酸	難溶性	FAB希望	溶液
	依頼先	登録日付・時刻	NMR測定条件	NMR状態	NMR測定日時	NMRデバイス	loc No	NMR結果	コメント					
	MA22222	X11-K.YASUDA							○					
	ART	08/10/16 17:47	Proton,2,dmso,r.t.,	測定中										
	MA50000	X11-K.YASUDA	C6H5OH 110	測定完了										
	化学	08/10/10 07:14	Proton,2,dmso,r.t.,	測定中										
	MA30000	X11-K.YASUDA	C11H20N2Cl 215	測定完了		ESI								
	ART	08/10/09 02:19		測定中										
	MA20000	X11-K.YASUDA	C8H2OO 132	測定完了		OTHER			○					
	ART	08/10/03 12:44		測定中										
	MA00001	X11-K.YASUDA		測定完了					○					
	化学	08/10/02 19:03	Proton,64,d2o,r.t.,	測定完了	OC02.MA00001 19:04	test	5	NMR結果						
	MA10000	X11-K.YASUDA		測定完了					○					
	化学	08/10/02 15:38	Proton,16,dmso,r.t.,	測定中	OC03.MA10000 23:21	test	3							

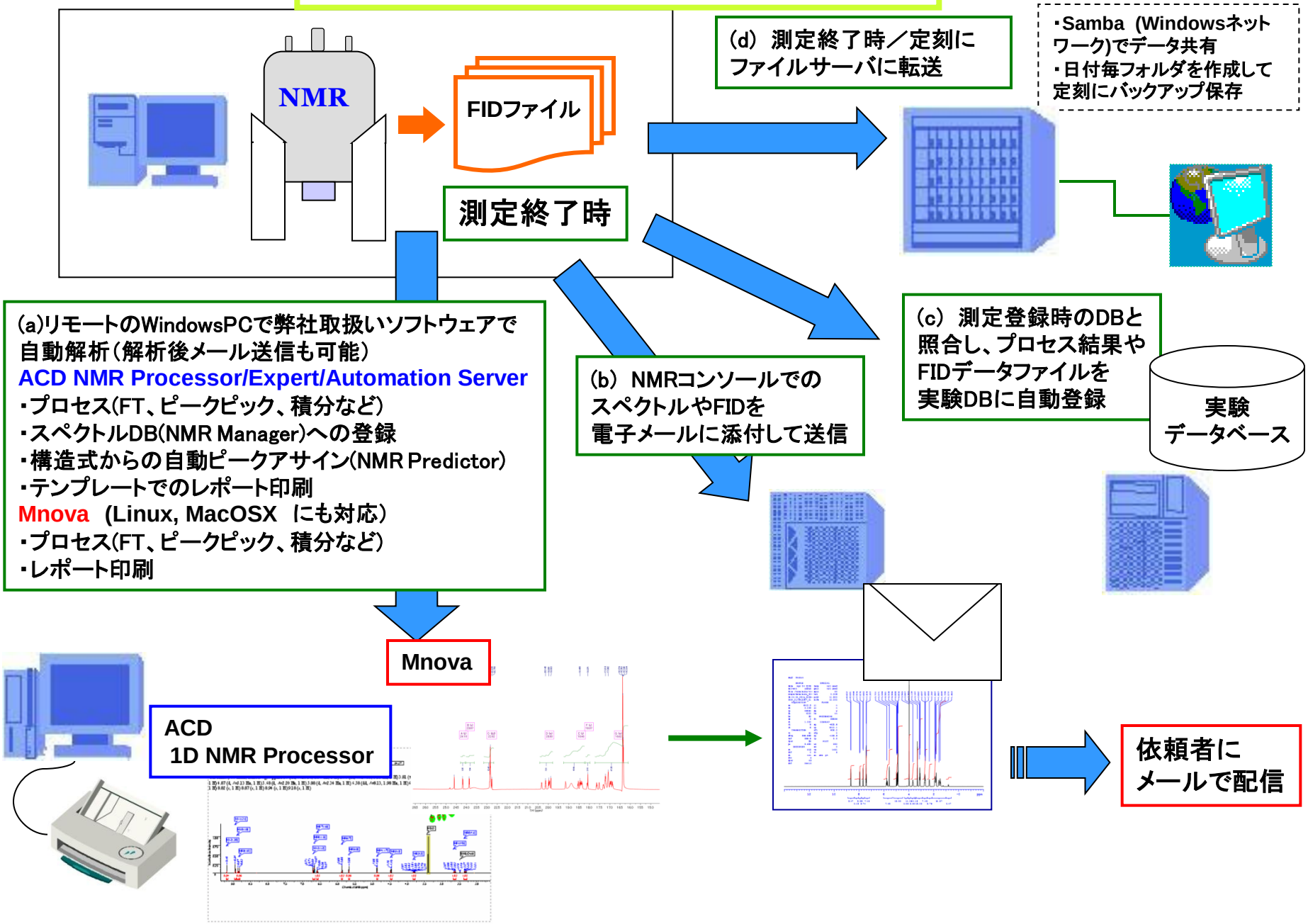
NMRの測定ステータスを
ブラウザで監視できます。
ステータス変更は測定開始時、
完了時に自動変更されます。

NMRの測定ステータスを
リアルタイムに取得する事も
できます（残り時間、状態）

測定完了時にスペクトルへの
Webリンクが追加されます。
結果をメールに添付して
送信することもできます。



4. NMR測定完了時の自動処理



5. MSなど他の分析装置との連携

MS、IR、LCなどとサンプル情報を共有し、
測定ステータスをサンプルIDで照合し
データベース上で一括して管理できます。

MS 測定状況変更

MA 番号 : MA10000

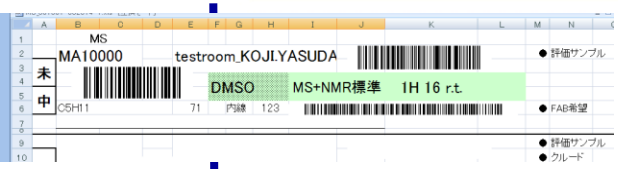
上記MAで抽出　MA全クリア　初期画面

登録日MSサンプル検索

7日間　前日　本日

MA番号	ユーザID	登録日付・時刻	MS測定	MSデバイス	MS状態	MS測定日時	評価サンプル	クルード	カルボン酸	難溶性	FAB希望	溶液	コメント
	YASUDA	08/09/24 00:15	C5H11 71		測定完了	08/10/01 03:28	○				○		

測定情報の
バーコードリストへの印刷



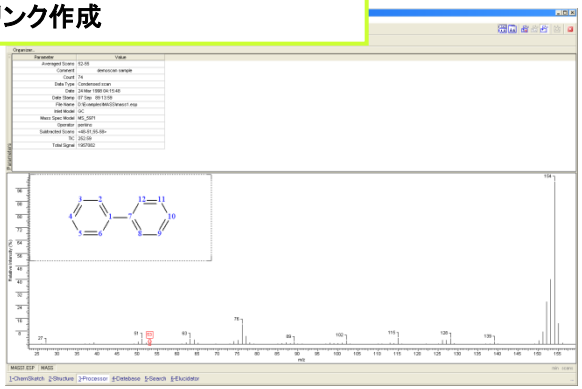
その他完了

・サンプルIDと照合してデータベースの状態更新
・サンプルリストにPDFリンク作成

バーコードでの
入力

測定機器
MS
IR
LC
など

結果印刷

・印刷ユーティリティ
・テキスト検索スクリプト
・ID抽出、ファイル名変更

・PDF化
・データベースへの自動登録