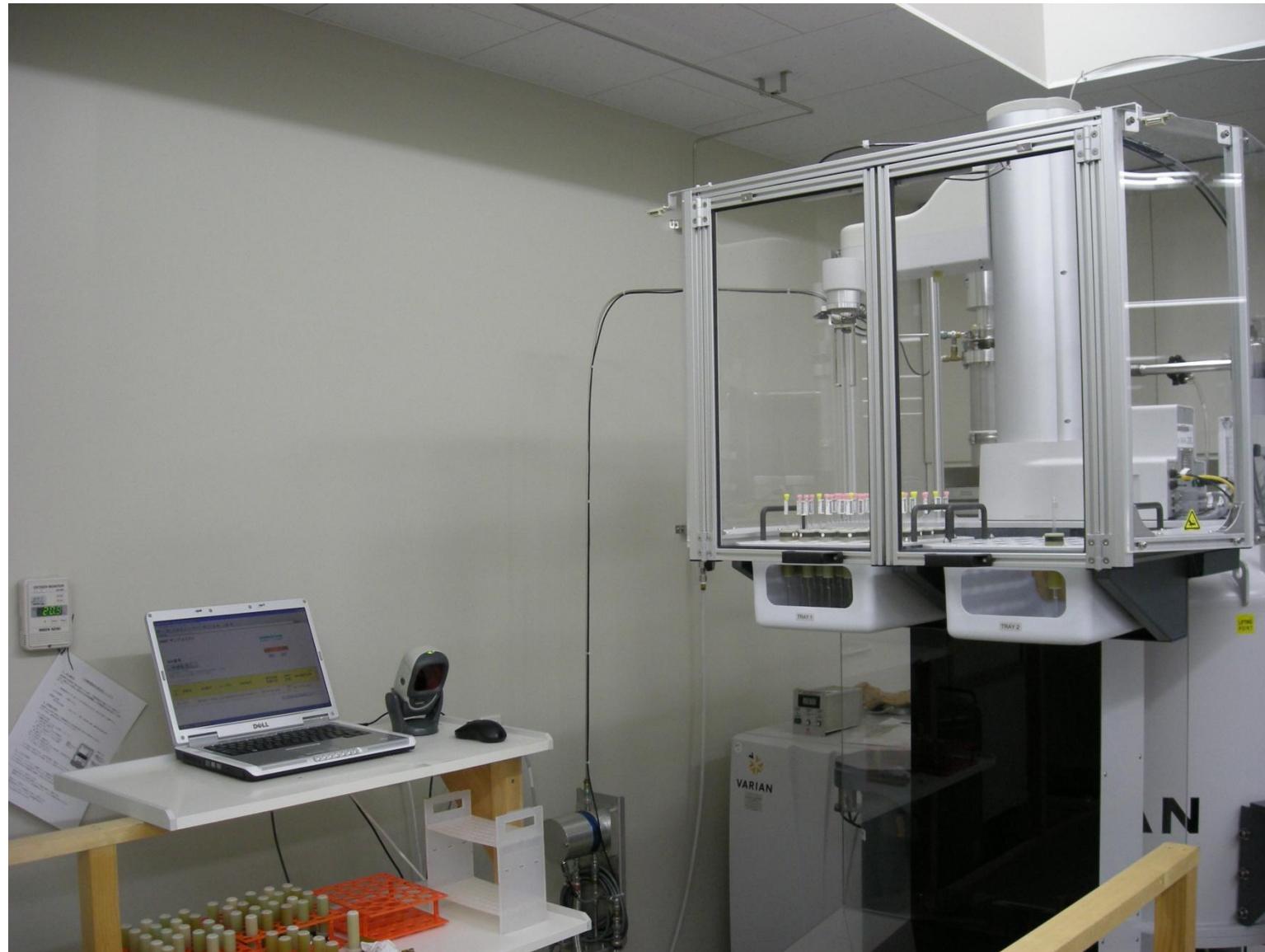


# NMR測定自動処理支援/ 測定データベース構築



株式会社エルエイシステムズ



Varian社製7600-ASオートサンプラーと  
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

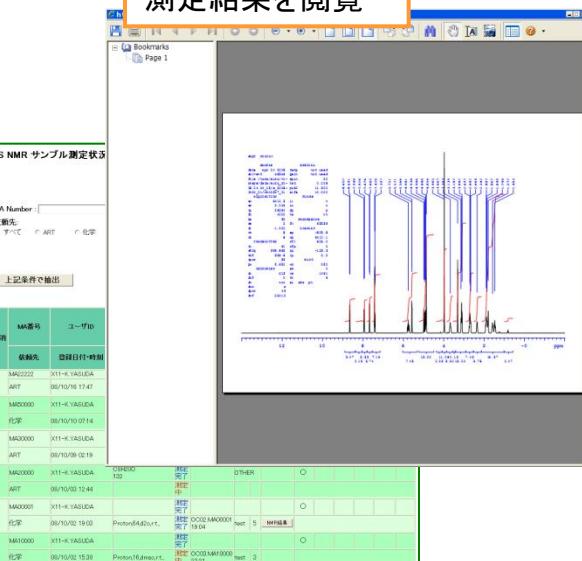
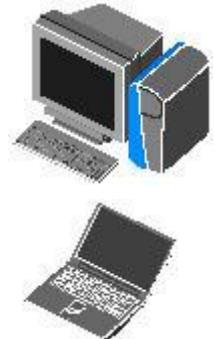
## 測定情報のオンライン化・自動化による業務効率改善

- ・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

## 実験室、居室

Webブラウザで  
入力、閲覧



- ①各研究者が  
端末からWeb経由で  
サンプル名・測定条件入力



データベースサーバ  
(httpサーバ)

データベースで測定管理  
結果をPDF化し自動管理

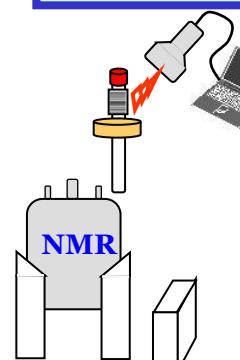
測定機器

CSVファイルや  
バーコードで入力

- ③NMRでは測定終了時マクロで  
DBを更新、結果ファイルを転送

測定結果PDF  
DB自動更新

- ②NMRでは端末PCで  
サンプル管のバーコードを  
読み取り→DBにアクセスして  
測定入力ファイルを作成し  
NMRコンソールに送信



- ③' MSではプリンタ出力を  
監視して、印刷時にユーティリティ  
を起動、DB更新などをおこなう



- ④Webブラウザで  
測定結果を閲覧

# NMR測定自動処理の概要

実験室、居室



NMR

1H standard 1H other 1H VT 13C 3D

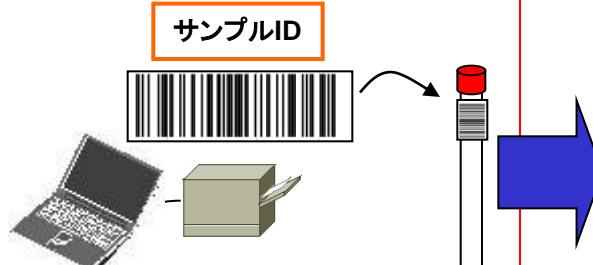
1H other

積算回数: 8 16 64 128

溶媒: DMSO CDCl<sub>3</sub> D<sub>2</sub>O CD<sub>3</sub>OD  
Dioxane Pyridine Benzene Acetone  
cyclohexane cyclohexane

温度: rt

- 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。



- 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。

データベースサーバ

LAN経由でデータベースに登録

NMR室

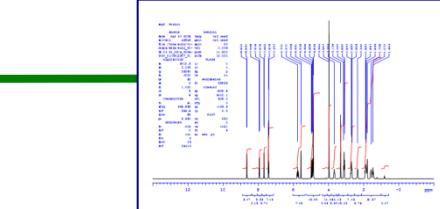
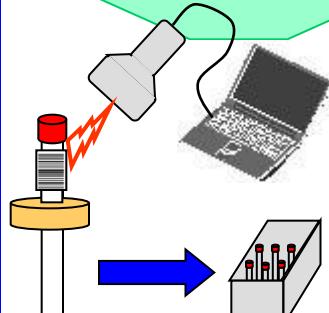
サンプルIDでDB検索

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。

NMRホストに測定情報を転送

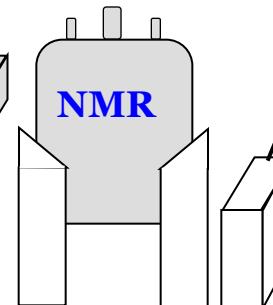
NMR サンプルリスト					
MA番号:	MA検索/投入	自機ステータス検索			
投 入 登 録	依頼先	MA番号	ユーザID	NMR条件	測定依頼登録日時
ART	MA11113	XII-KYASUDA	Proton.16.pyridine.r	08/10/01 02:35	測定中 08/10/01

NMR  
サンプルローダー



- 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  
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

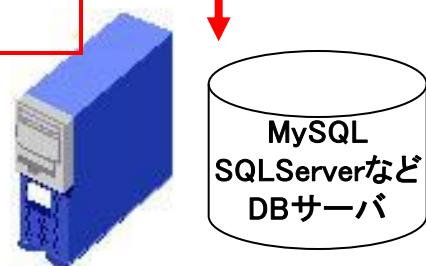
サンプルID、ユーザIDなどは  
検索することもできますので、  
ログイン名や既存のデータベースと  
リンクして自動入力もできます

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



MSNMR検体データベース申込

2008/10/20

依頼先  ART  化学  NMR-all

ユーザID: X11-K.YASUDA

MA番号:  連番繰返し数:

MS

フリー体分子式:  EXACT MASS計算

EXACT MASS:

NMR

1H standard  1H other  1H VT  13C  2D

1H other

積算回数:  8  16  64  128

溶媒:  DMSO  CDCl<sub>3</sub>  D<sub>2</sub>O  CD<sub>3</sub>OD  
 Dioxane  Pyridine  Benzene  Acetone  
 CD<sub>3</sub>OD添加  D<sub>2</sub>O添加

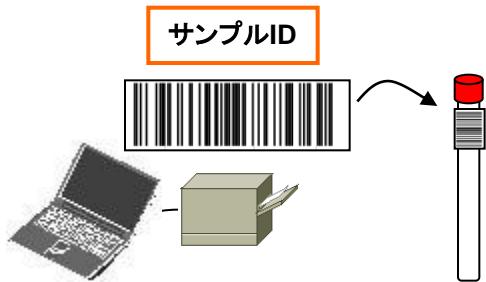
温度: r.t.

評価サンプル  カルボン酸  FAB希望  
 クロード  鹿溶性  溶液

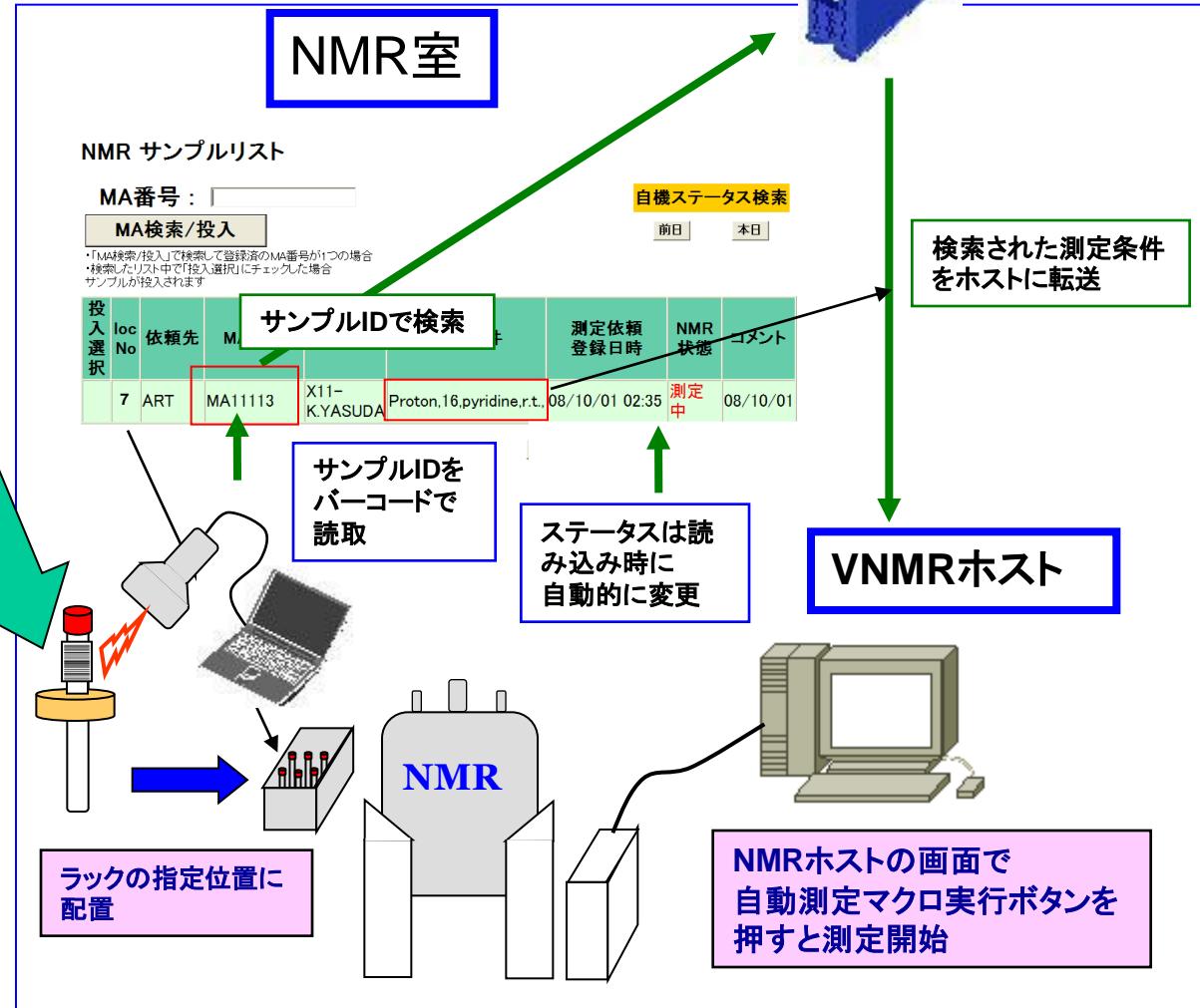
コメント:

## 2. NMR測定時の情報の読み取り

実験室



サンプルIDをバーコード  
印刷しサンプル管に  
貼付して提出



### 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

MA Number : [ ]

依頼先:  
 すべて     ART     化学

上記条件で抽出

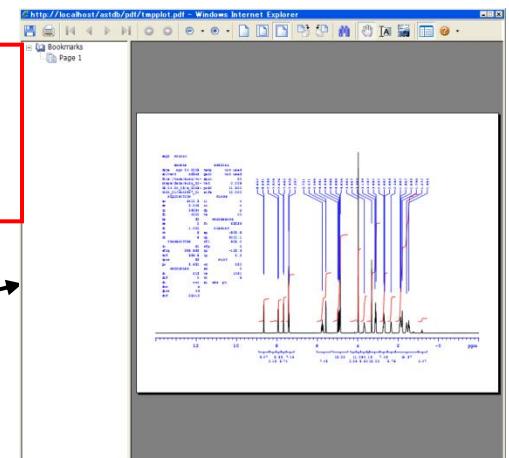
NMRの測定ステータスを  
ブラウザで監視できます。  
ステータス変更は測定開始時、  
完了時に自動変更されます。

取消	MA番号	ユーザID	状態		タイプ	未	評価サンプル	クルド	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		測定中								
	ART	08/10/16 17:47	Proton,2,dmso,r.t.,	測定完了								
	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	C8H20O 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 19:04	OC02.MA00001	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 23:21	OC03.MA10000	test	3					

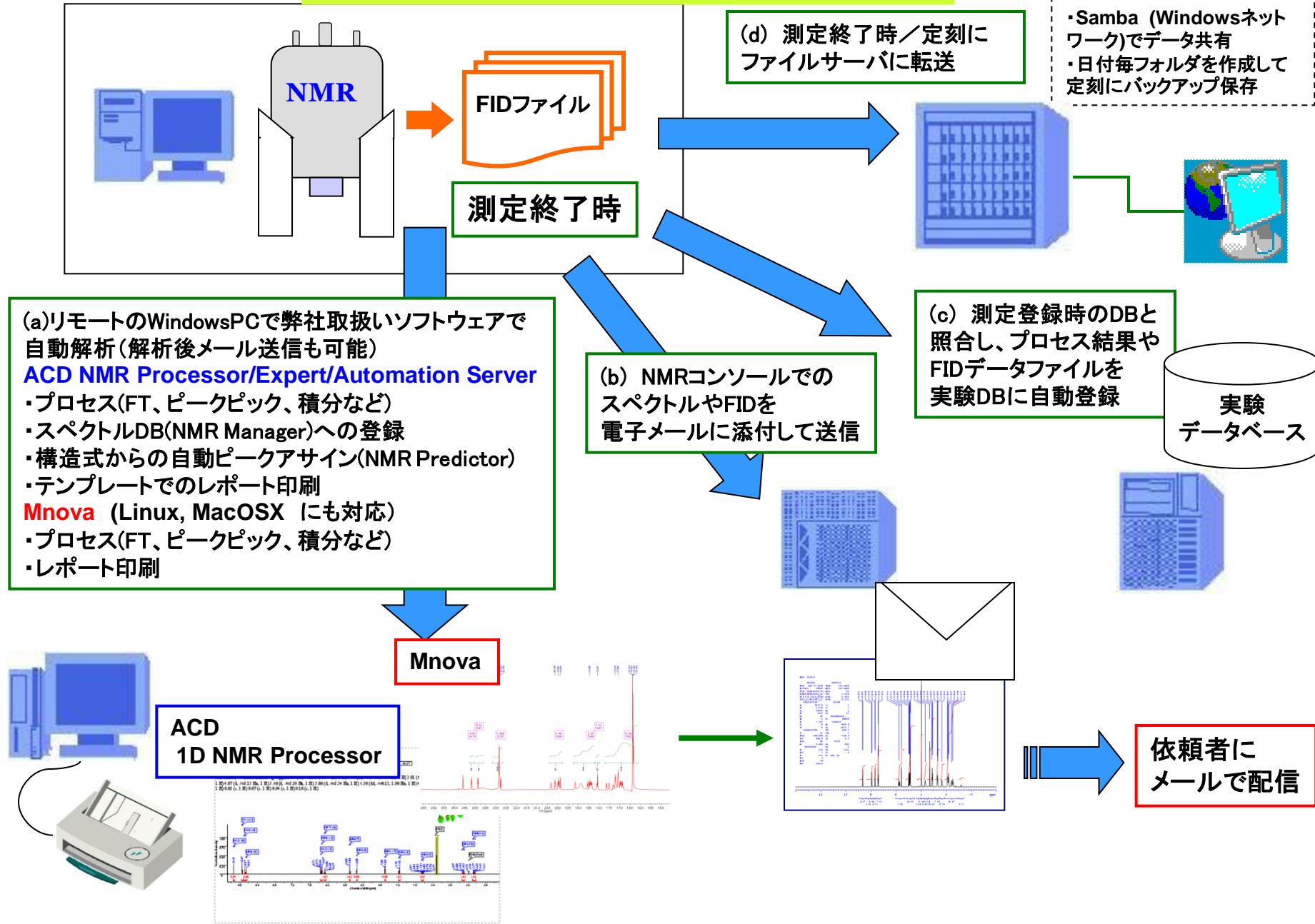


NAME	USER	TIME	EXPLIST	SOLV	TEXT	STATUS
username1		1 min	Proton	dmso	EX4625801	Active
username1		3 min	Carbon	dmso	EX4625801	Queued
username2		10 min	Gcosy	cdcl3	EX4879801	Queued

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)



## 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 測定状況変更

MA 番号 : MA10000

: MA10000

---

---

---

---

---

---

---

---

---

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。

登録日MSサンプル  
検索

7日間 | 前日 | 本日

### 上記MAで抽出

MA全クリア

初期画面

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
テストへの印刷	KYASUDA	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



## 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

- ・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

