

MestreNova(Mnova)

高機能・低価格 NMR レポートソフトウェア

<http://www.mestrec.com/>



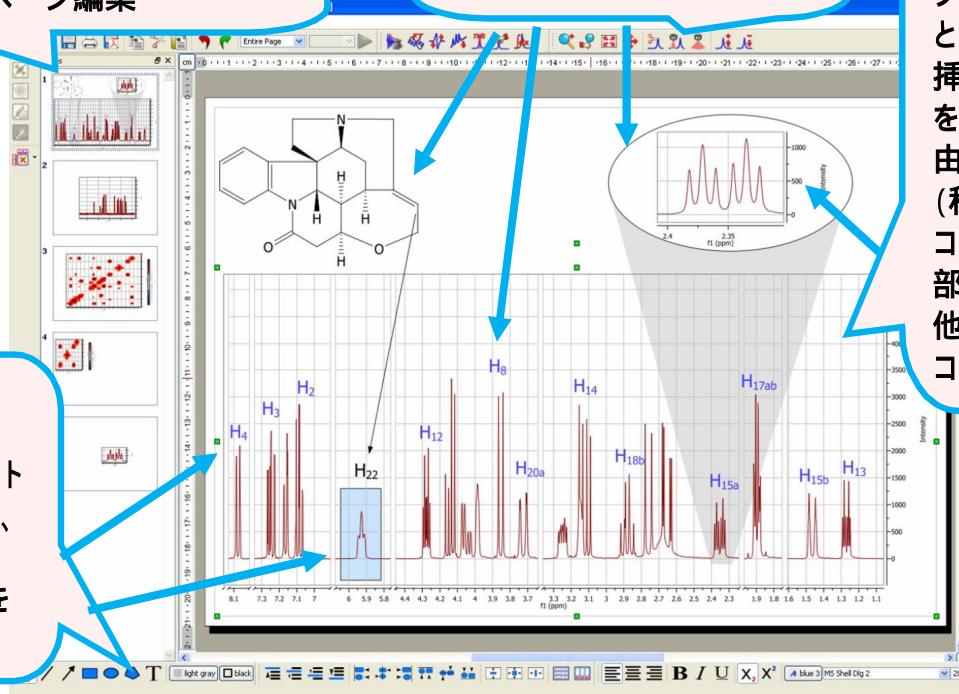
Mnova は強力な表示機能をもつ革新的な NMR プロセス、アナリシス、レポート用のソフトウェアです。Mnova は WYSIWYG でマルチページのグラフィカルユーザインターフェースをもち、マルチプラットフォーム環境(Windows,MacOS X,Linux)で動作し、NMR での多様な研究をサポートします。Mnova はプロセス、アナリシス(積分、ピークピック、テーブル作成)、スペクトル予測を 兼ね備えたレポートツールで、Microsoft Powerpoint に似たインターフェースをもち、データプロセスなどの操作を印刷イメージと同じ画面描画でリアルタイムに操作することができます。

MS PowerPoint のような
ページナビゲータ、
マルチページ編集

NMR スペクトルを見ながら
同画面で直感的に注釈や
装飾が行えます

スペクトルはドローソフトのオブジェクト
として空白ページに
挿入され、プロセス
をおこないながら
自由に編集できます。
(移動、拡大縮小、
コピー & ペースト、
部分拡大など)
他のアプリにも
コピー可能です

ドローソフトの
一般的な編集
ツール(テキスト
ボックス、図形、
矢印、半透過
重ね合わせ)を
使用できます



特徴

自動プロセスと解析	1D および 2D NMR FID データを読み込むと自動 FT されたスペクトルが表示されます。プロセスは自動フェーズ補正、自動ベースライン補正機能でおこなえ、マニュアルでプロセスすることも可能です。 手動・自動でのピークピック、積分、マルチプレットなどの解析機能もあります。強いカップリング、重なったマルチプレットピーク、アーティファクトをもつマルチプレットも解析できます。
WYSIWYG と マルチページ	WYSIWYG (What You See Is What You Get : 印刷イメージのままでの編集)のインターフェースをもち、複数の実測、予測スペクトルを1ページにまとめ、1つのファイルに複数の解析結果を保存することができます。スペクトルの重ね合わせ、角度を指定したスタックプロット(積み重ね)もできます
スペクトル描画 カスタマイズ	一般的のグラフ描画ソフトのようにグラフ軸の表示有無、グリッド有無、軸スケール、数字フォント、スペクトルの描画線幅、表示色などのカスタマイズが自由におこなえます。
図形描画機能	多角形、線、矢印、書式設定可能なテキストボックスなど標準的なドローオブジェクトと、オブジェクトのパターン設定、半透過色など Powerpoint に準ずる図形描画機能をもち、レポート作成を強力に支援します。
アンチエイリアス	直前操作の取り消し(アンドゥ)、やり直し(リドゥ)を、マルチページにわたりメモリが許す限り無限におこなえます。
マクロ(スクリプト)	定型操作を Javascript 様式のオブジェクト指向言語のマクロ(スクリプト)を組むことで自動実行できます。DOS(Linux)コマンドラインから FID ファイル名とマクロを指定して自動解析することも可能です。別途弊社で NMR コンソールで測定終了後に自動解析し、ファイル転送・メール送付するなどの設定作業も承っています。
マルチプラット フォーム環境	Windows XP, Vista, MacOS X(Mnova5.2.0 から OS10.5 に対応), Linux(FedoraCore 6, RedHat3/4, Debian, openSuse 10.1 など)の主要な OS に対応しています
テーブル作成	測定パラメータ(FID ファイルパラメータ)、ピーク、積分、マルチプレットなどのテーブルを作成、挿入できます。MS Excel などに表形式のまま貼り付けることもできます。
化学構造式表示 ピークテーブル作成	普段使用されている、代表的な化学構造式描画ソフト ACD ChemSketch(フリー版あり、要ユーザ登録)、CambridgeSoft ChemDraw, MDL ISIS/Draw(フリー版あり、要ユーザ登録)などのデータオブジェクトをそのままペーストして表示することができます。またペーストした化学構造式の原子と、Mnova 上のピークピックしたスペクトルをドラッグして結ぶことで、アサインメントされたピークテーブルを作成することができます(本製品には化学構造式描画機能はありません)。

スペクトル予測	別途 NMR Predict プラグインを購入いただくことで、ペーストした化学構造式から 1D ^1H , ^{13}C 予測(Predict)スペクトルを表示することができます。	
対応入力データ形式	Data Format	Vender
	VNMR/VNMRj Gemini	VARIAN
	TopSpin, XWINNMR, Aspect, Win-NMR	Bruker
	Delta, Alice, Lambda, EG/GX	JEOL
	The JCAMP-DX 5.0	IUPAC
	Nuts	Acorn NMR
	SpinSight	Chemagnetics
	NTNMR	Tecmag
	SIEMENS NMR	Siemens
出力形式	<p>代表的な文書ファイルである PDF ファイルにマルチページのレポート形式で出力でき、Mnova のインストールされていない PC に送付する場合でも Adobe Reader などの PDF リーダソフトで閲覧できます。</p> <p>JPEG,BMP,PNG などのピクセル画像、EPS(PostScript ファイル)、EMF(Windows 標準メタファイル)などのベクター画像ファイルでも出力できます。</p> <p>解析後のスペクトルなどを OLE/COM オブジェクトとして Microsoft Office 製品などにコピー & ペーストすることもできます。</p>	
ライセンス	<p>価格についてはお問い合わせください。</p> <p><企業向け></p> <ul style="list-style-type: none"> ・永久ライセンス(購入後 1 年間バージョンアップ可能、以後新規購入の 20% 保守費で 1 年有効のバージョンアップが可能) ・年間ライセンス <p>NMRPredict プラグイン</p> <p><教育・国公立研究機関向け></p> <ul style="list-style-type: none"> ・永久ライセンス(バージョンアップは企業向けと同等) ・年間ライセンス <p>NMRPredict プラグイン</p> <p>価格はいずれも税込価格です。</p> <p>5 ユーザ以上の割引、ネットワークライセンス、企業・大学向けサイトライセンス(ローカルサーバによる認証、各クライアントでは 90 日間有効)もございます。</p> <p>45 日間の無料トライアルも可能です。 詳しくはお問い合わせください。</p>	



株式会社エルエイシステムズ

〒110-0005 東京都台東区上野 1-11-5

時計会館ビル 1F

TEL: 03-5812-5311 FAX: 03-5807-4050

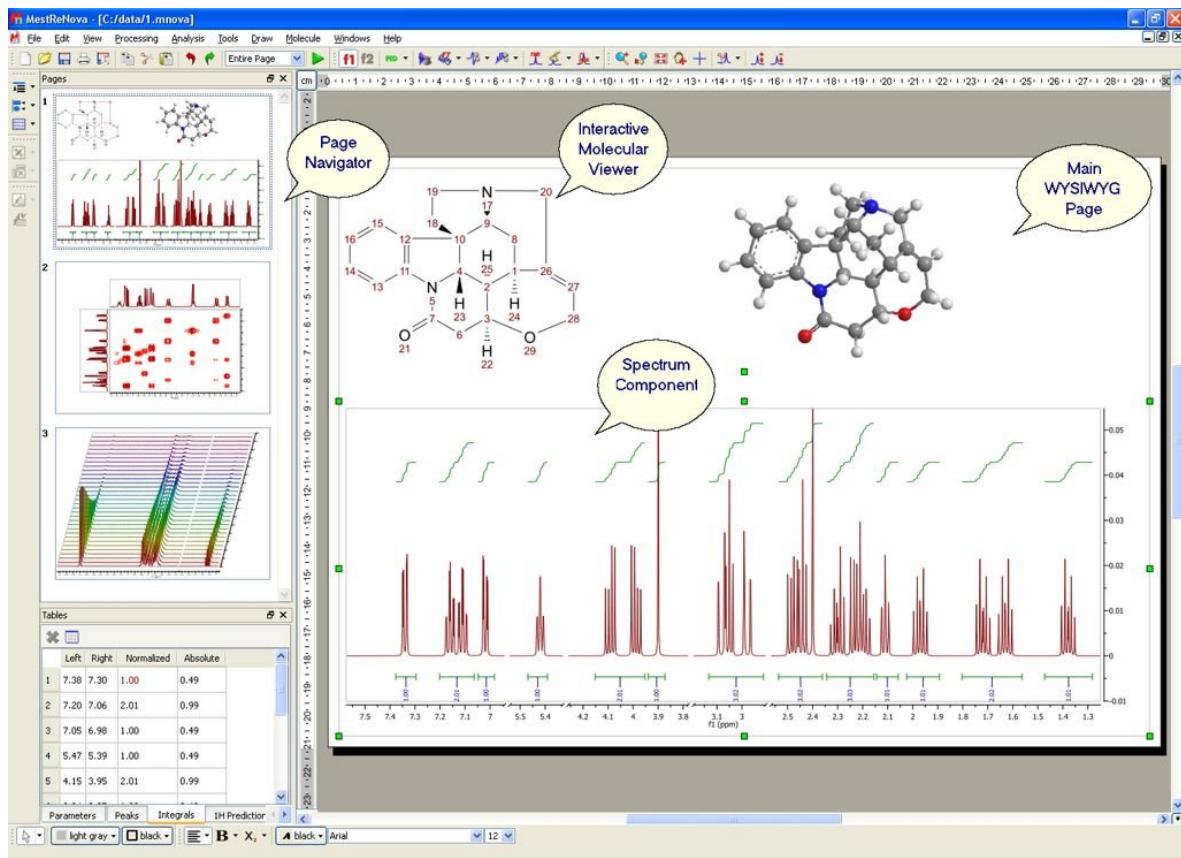
e-mail: support@las.jp URL: http://www.las.jp

GUI

Mnova は直感的かつ現代的なユーザインターフェイスをもち、Microsoft PowerPoint のようなオフィスアプリケーションと同様な操作性を持っています。

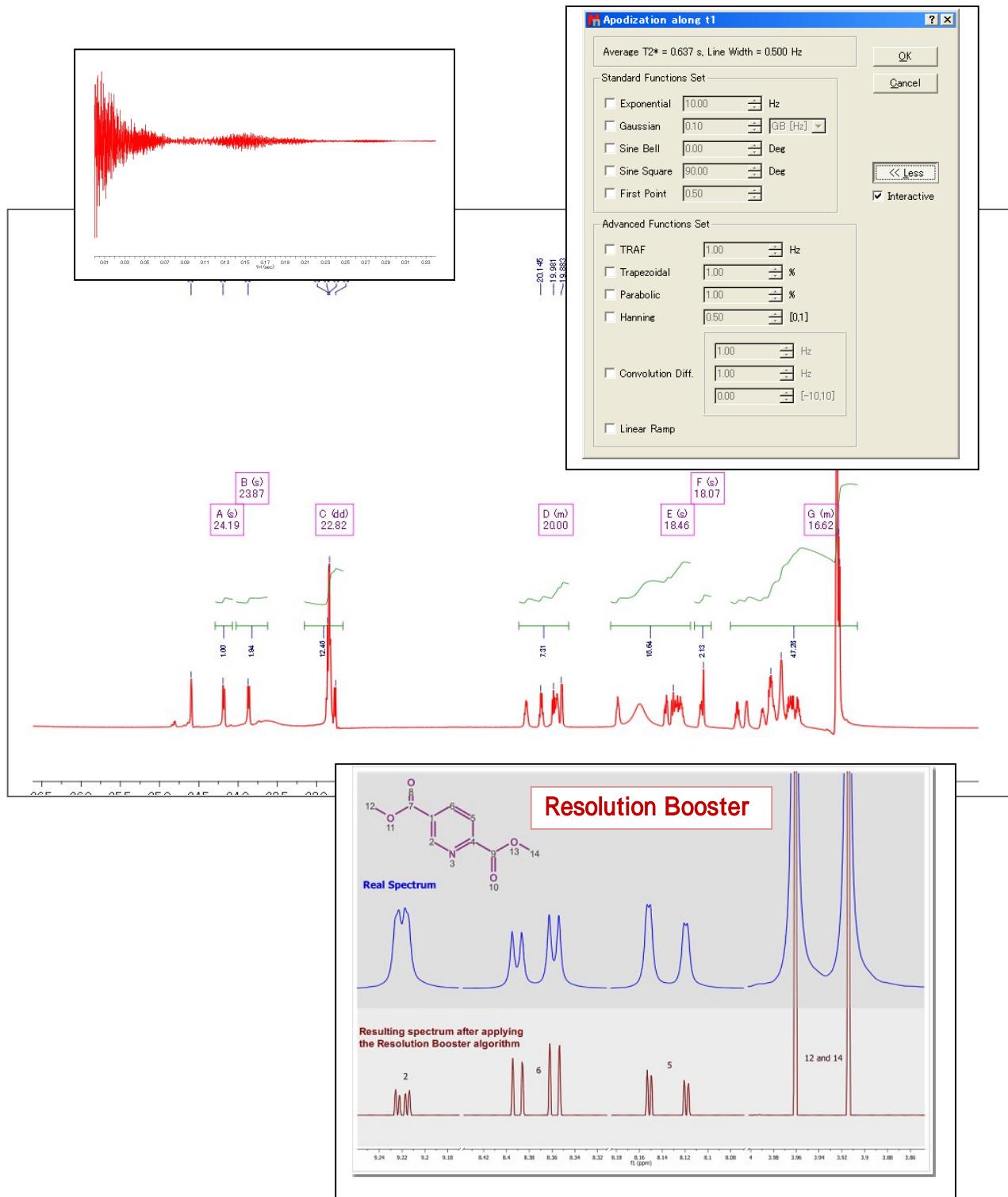
一般的なドローソフトのように、印刷イメージの 1 ページ毎の表示で、描画オブジェクト単位の編集操作ができます、読み込んだ NMR スペクトルも 1 つのオブジェクトとして、データプロセスなどの操作ができます。

1 ページに複数のスペクトルを表示して比較、重ね合わせ、部分拡大なども簡単にできます。



Data Processing & Analysis

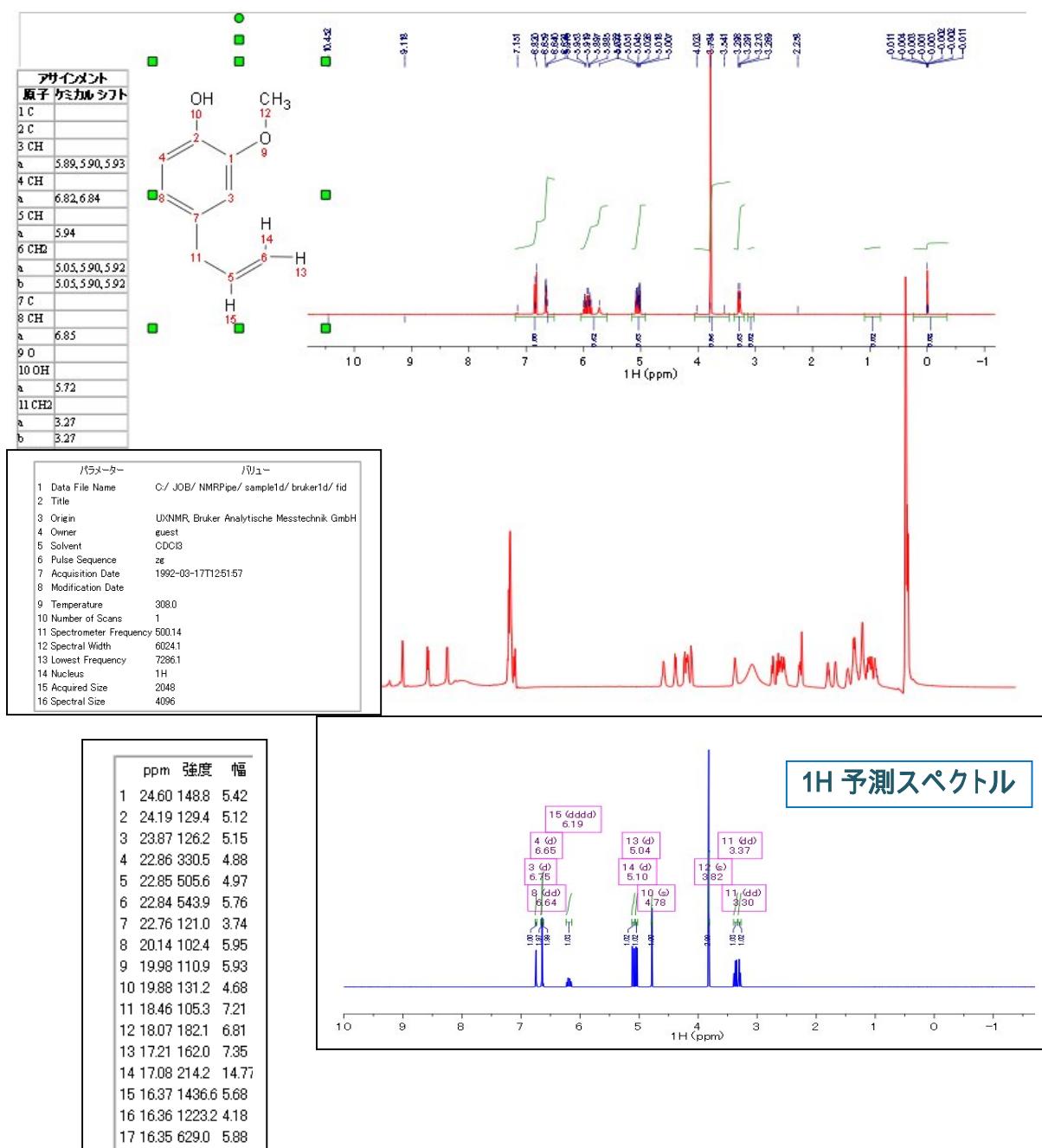
読み込んだ NMR データは自動でフェーズ合わせがおこなわれ、レポート内のオブジェクトとして表示されます。FID に戻すこと、ウィンドウ関数のカスタマイズ(2D の場合、次元毎に)やリニアプレディクション、切り捨てなどの操作もできます。スペクトルに対して、自動またはマニュアル操作でフェーズ合わせ、ピークピック、積分などのプロセス作業をおこなえます。スペクトル描画は、描画線の色、線幅、グリッド有無、軸スケールの表示、スケールの大小、数値のフォントなどを自由にカスタマイズできます。計算処理によるノイズの低減や正規化、実測では重なってしまうピークを計算で分離する Resolution Booster 機能などもあります。



Analysis & Table

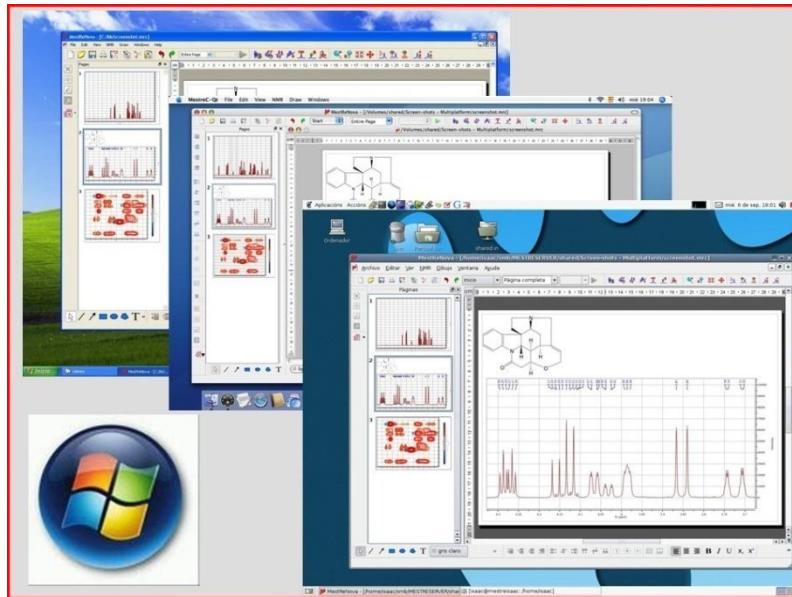
1ページに複数のスペクトルを表示し、数値入力でスペクトルの座標、スケールなどを合わせて比較表示、重ね合わせをすることができます。挿入した化学構造式内の原子とピークピック後のスペクトルをドラッグすることで、アサインメントされたピークテーブルを作成することができます。測定パラメータ、ピークテーブルなどをテーブルのままExcelにコピーすることができます。

別途 NMRPredict Desktop Plugin を購入すると、化学構造式から、¹H、¹³CNMR スペクトルを計算予測することができます。



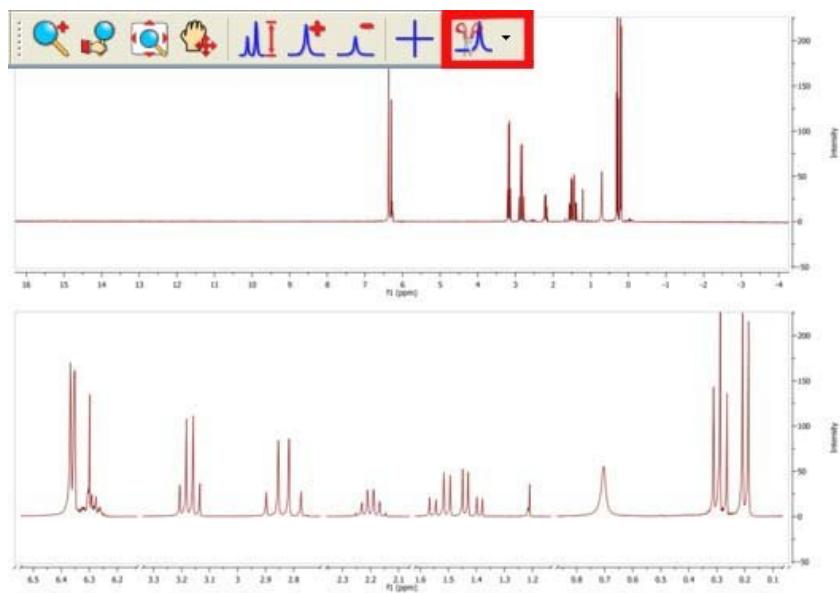
Multiplatform

研究室で使用されている代表的な OS である Windows XP Vista, MacOS X(Mnova5.2.0 から OS10.5 に対応), Linux (FedoraCore 6, RedHat3/4, Debian, openSuse 10.1 など)用の各ディストリビューションがあり、OS が異なっても同一の NMR プロセス作業がおこなえ、NMR データを共有できます。



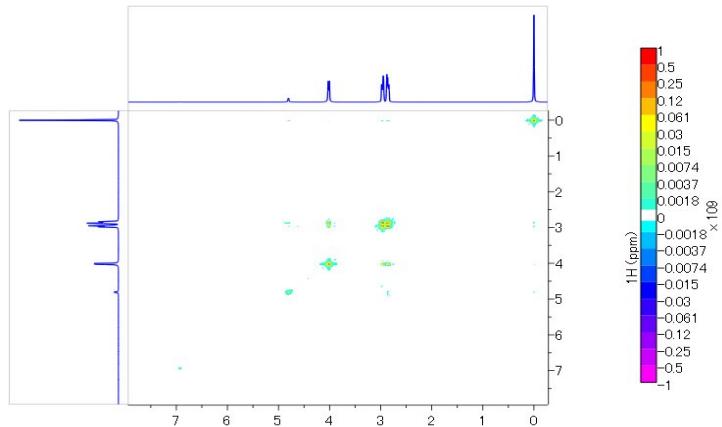
Cutting Tool

カッティングツールはスペクトルの平坦な不要部分を削除し、重要なピーク領域だけのコンパクトな表示にするツールです。カッティング毎の拡大の操作を行うことなしに、自動的に残りの領域が拡大され、簡単な操作で元に戻すこともできます。



Plotting & Colormap

2D スペクトルであればトレース(1D 断面)を表示するプロットもできます。トレースのみを別の1D スペクトルに抜き出すこともできます。スペクトル強度は等高線、カラー・マップなどで表示をカスタマイズできます。



複数のプロットを積み重ねるスタックプロットや、強度毎にカラー・マップで表示する強度カラープロットに対応しています。

プレゼン時の視認性や好みに合わせて、レポートページのバックグラウンドの色をカスタマイズすることや、プロットの等高線カラー・マップなどを自由にカスタマイズできます。

