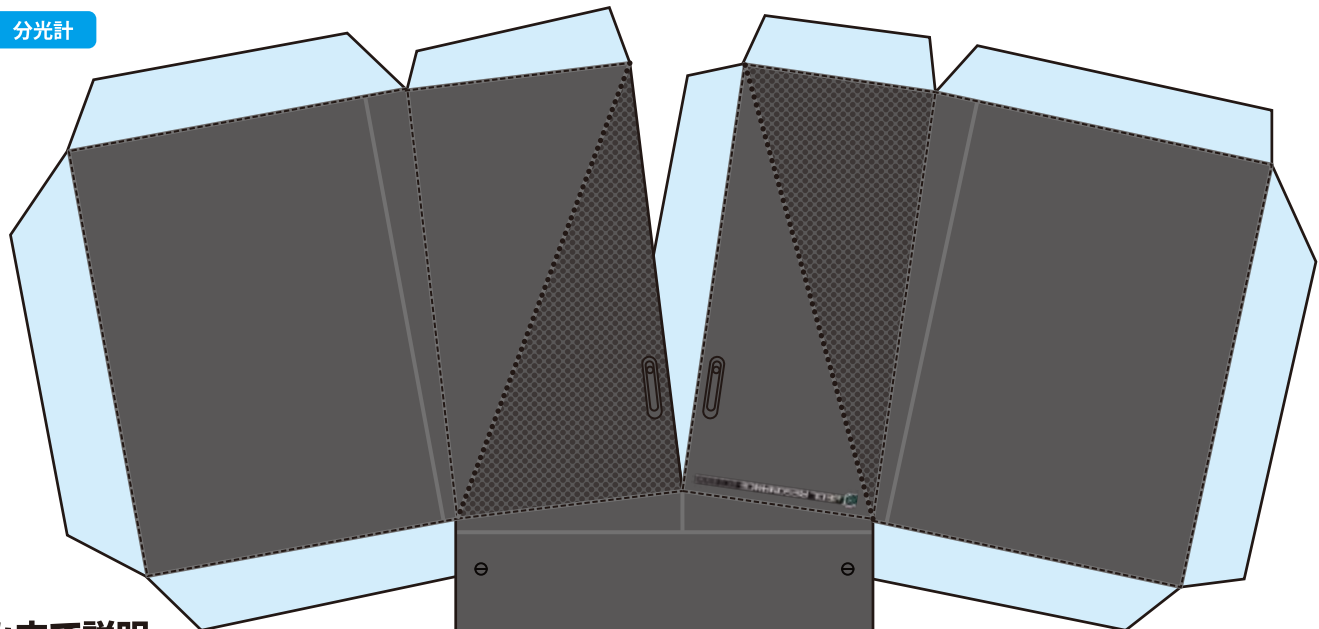


ECZ500R 分光計 & ヘッドアンプシャーシ

■ 用意する道具 ハサミ、カッターナイフ、接着剤（木工用推売）、接着剤をのりしろに塗るための爪楊枝、ピンセット

分光計

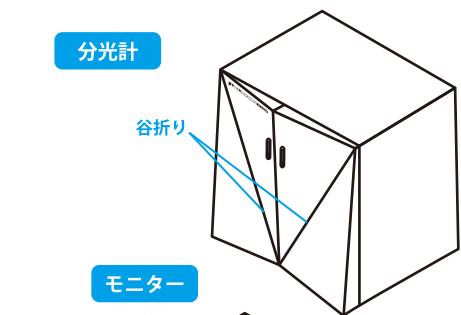


組み立て説明

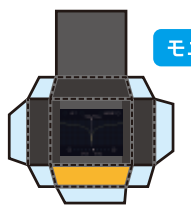
①各パーツ全ての折り目を折り  
前面から順に組み立てていきます

※扉の山折り・谷折りに注意してください

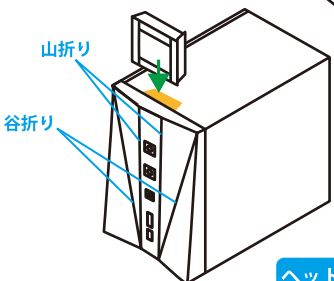
分光計



モニター

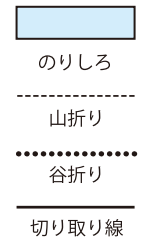


モニター

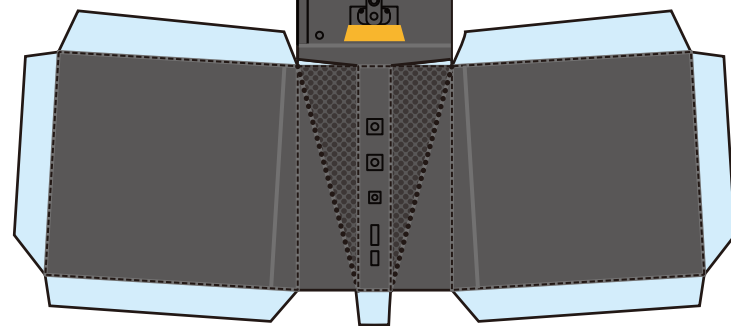


ヘッドアンプシャーシ

②ヘッドアンプシャーシの  
オレンジの印にモニターの  
オレンジ色の底面を合わせるように  
接着してください



ヘッドアンプシャーシ



# キョウメイ



## 新型 NMR 装置 NMR spectrometer ZETA を発売

### Information

NMR（核磁気共鳴装置）講習会スケジュール  
定量 NMR の無料メルマガ配信中

机に飾ろう！ NMR 装置ペーパークラフト「ECZ500R 分光計 & ヘッドアンプシャーシ」

contents

■ アプリケーションノート ■

- 超高速 MAS 固体 NMR と GIPAW 法による <sup>1</sup>H 精密位置解析
- NMR を用いた食品の多変量解析
- 知っていると、ちょっと幸せになれる Delta Tips「コメントを後から変更する」
- Q-バンドマイクロ波ユニット (ES-SQ5) のご紹介

## 新型 NMR 装置 NMR spectrometer ZETA を発売

近年、研究分野における NMR 測定手法は、非常に多岐にわたる発展を続けています。NMR 装置には、対象とする試料特性や応用目的に応じて、より複雑かつ高精度な RF（ラジオ波）制御によるパルスシーケンスの実現が要求されています。一方で、品質管理・簡易分析分野における NMR 測定の需要拡大は目覚ましく、より簡便な装置としての要望も広がっています。

そこで弊社は、JNM-ECAII/ECXII/ECS シリーズのシステムアーキテクチャーの長所を踏襲しつつ、最先端のデジタルテクノロジーを融合することによって、シリーズ後継となる新型 NMR 装置 NMR spectrometer ZETA を開発しました。

### 前モデルを遥かに凌ぐ高精度デジタル RF 性能!

新型 NMR 装置 NMR spectrometer ZETA は、新技術 STS (Smart Transceiver System) を搭載し、ECAII/ECXII/ECS シリーズを遥かに凌ぐ高精度デジタル RF 機能・性能を実現。また、1.2GHz 以上の超高周波数や将来的な応用測定に、高い自由度で対応するための基本性能を備えています。外観は、高質感のある黒を基調に、先端的でシャープなデザインとしました。

NMR spectrometer ZETA は、内蔵された分光計制御コンピューターによって制御され、分光計制御コンピューターは、Ethernet 接続されたホスト PC から制御されます。直接的なユーザーインターフェイスを提供するのはホスト PC ですが、分光計制御コンピューターはスタンドアロンで動作可能です。これにより、ホスト PC との通信に障害等が生じても、測定中断やデータ消失の危険性を回避します。また、ECAII/ECXII/ECS シリーズと比較して、大容量化されたメモリーおよびハードディスクを搭載しており、パルスプログラムや測定データの管理面においても、高い信頼性と堅牢性を誇っています。



JNM-ECZ500R



JNM-ECZ400S

## 2つのZ(ECZR / ECZS シリーズ)

NMR spectrometer ZETA はハイエンドモデルとエントリーモデルの2機種に大別され、それぞれが用途に応じてカスタマイズされた特長があります。

### ECZR シリーズ

ECAII/ECXII シリーズの後継機種であり、様々な NMR 測定に対応するため、より高い自由度の拡張性を追求したハイエンドモデル。ECXII シリーズよりも小型でありながら、ECAII シリーズよりも高い拡張性を備え、圧倒的なパフォーマンスを実現します。

### ECZS シリーズ

ECS シリーズの後継機種であり、ECZR シリーズの基本機能・性能を備えつつ、より小型・汎用性を追求したエントリーモデル。その分光計主筐体の設置面積は、従来機種 ECS と比べ 57% と驚異的なサイズダウンを実現しています。



2014年9月16日 ECZS シリーズ 1号機を出荷

NMR spectrometer ZETA の特長を動画でも紹介しています。詳しくは JEOL RESONANCE のホームページをご覧ください。  
<http://www.j-resonance.com/>



新技術 STS による RF 送受信系の小型化

## STS (Smart Transceiver System)

NMR spectrometer ZETA は、最先端のデジタルテクノロジーによって開発された新技術 STS を搭載。STS は小型ロジックデバイスに集中実装された高速デジタル回路によって、高精度 RF 制御技術の構築を可能にしています。これにより、STS を用いた RF 送受信系は、そのデジタル機能・性能を飛躍的に向上させると共に、従来 NMR 装置の基本機能を1ボードに集約するという劇的な小型化を遂げています。

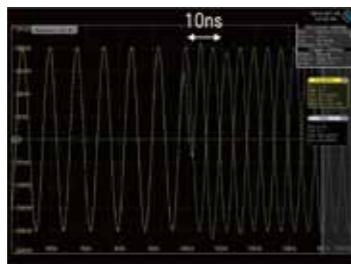
## 高精度デジタル制御

シーケンサーによるデジタル RF の周波数・位相・強度変調の制御時間分解能はわずか 5ns にまで達し、最小 5ns の変調時間幅を制御することが可能です。これは ECAII シリーズ分光計の 10 ~ 20 倍以上の実効性能に相当し、各変調の制御分解能においても、それに準じた性能向上が図られています。

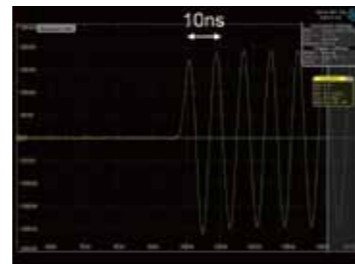
変調制御による RF 波形



周波数変調 (0 ~ 10MHz)



位相変調 (0 ~ 180°)



強度変調 (0 ~ 100%)

これにより、現在多用されている adiabatic pulse 等、位相・強度変調パルスの精度を一段と向上させています。また、近年の固体 NMR に見られる超高速変調を伴う測定に対応するため、ゲート信号や外部入出力トリガー信号の制御においても、同様の制御時間分解能を備えています。

## タッチパネルディスプレイ

ヘッドアンブシャーシには、高磁場を発生させるための超伝導マグネットや、そこに設置される検出器であるプローブに関連する機能が備わっています。ヘッドアンブシャーシ上部には 5 インチの大画面タッチパネルディスプレイを搭載、直観的なユーザーインターフェイスを提供します。プローブチュー

ニング時には反射特性や反射レベル値を、冷媒補充時にはその残量を表示させることが可能です。視覚的のみならずその操作感からも、作業時のユーザビリティを格段に向上させています。



反射特性表示



反射レベル値表示



液体 He 残量表示

弊社 NMR ユーザーズミーティング (東京 12/4・5、大阪 12/11) にて性能のご紹介、実機を展示いたします。

## 核磁気共鳴装置 講習会スケジュール



弊社では製品をご導入いただいたお客様に装置の性能をフルに発揮していただけるよう定期的に講習を行っております。お客様の多様なニーズに合うように豊富なコースが準備されており、効果的に必要な知識・技能を修得していただくことができます。

- 場所：日本電子株式会社 本社・昭島製作所 開発館
- 時間：9：30 ~ 17：00

### 講習会のお申込み

JEOL RESONANCE ホームページ内、NMR 講習会のページからお申込みください。

<https://www.j-resonance.com/support/nmr/schedule/>

### JEOL RESONANCE

#### 販売チーム

TEL 03-6262-3575

Email [jri-training@j-resonance.com](mailto:jri-training@j-resonance.com)



## Information

### ■ 定量 NMR の無料メルマガを配信中

メールマガジン「信頼性確保のためのヒント - ちよと知りたい定量 NMR」の無料配信を 9/1 スタートしました。NMR の基礎から具体例を交えた定量 NMR の解説をはじめ、セミナーやイベント情報、研究や分析業務に役立つ有益な情報をお届けします。バックナンバーの閲覧も可能です。JEOL RESONANCE のトップページから登録できます。  
[www.j-resonance.com/qnmrmall/](http://www.j-resonance.com/qnmrmall/)



## NMR 定期講習 日程のお知らせ

2014年10月~2015年2月

### 初級コース

NMR ビギナーズコース	(1日)	10/2(木)
構造解析初級コース	(1日)	10/3(金)
定量 NMR (qNMR) ビギナーズコース	(半日)	10/9(木)、2/19(木)

### 基本コース

溶液 NMR 基本 1st コース (Delta Ver.4)	(2日間)	10/29(水) ~ 10/30(木) 2/4(水) ~ 2/5(木)
溶液 NMR 基本 1st コース (Delta Ver.5)	(2日間)	11/11(火) ~ 11/12(水) 1/14(水) ~ 1/15(木)
溶液 NMR 基本 2nd コース (Delta Ver.4)	(1日)	10/31(金)、2/6(金)
溶液 NMR 基本 2nd コース (Delta Ver.5)	(1日)	11/13(木)、1/16(金)
固体 NMR 基本 コース (Delta Ver.4)	(2日間)	11/26(水) ~ 11/27(木)
固体 NMR 基本 コース (Delta Ver.5)	(2日間)	11/19(水) ~ 11/20(木)

### 応用コース

TOCSY (1D & 2D) コース (Delta Ver.4 & Ver.5)	(1日)	2/27(金)
NOESY (1D & 2D) コース (Delta Ver.4 & Ver.5)	(1日)	10/22(水)、2/13(金)
qNMR コース (Delta Ver.4 & Ver.5)	(1日)	10/10(金)、2/20(金)
多核 NMR 測定 コース (Delta Ver.4 & Ver.5)	(2日間)	1/22(木) ~ 1/23(金)
拡散係数測定&DOSY コース (Delta Ver.4)	(1日)	12/17(水)
拡散係数測定&DOSY コース (Delta Ver.5)	(1日)	12/2(火)
固体緩和時間測定&ROSY コース (Delta Ver.5)	(1日)	11/21(金)

### メンテナンスコース

メンテナンス コース (Delta Ver.4)	(1日)	12/19(金)
メンテナンス コース (Delta Ver.5)	(1日)	12/9(火)

- \* 初級コースは座学みの講習です。装置に依存しないので、JEOL 以外の装置のユーザの方や装置をお持ちでない方も、ご参加頂けます。
- \* 溶液 NMR 基本 1st コースでは、Delta の使い方の説明と実習を行います。
- \* 溶液 NMR 基本 2nd コース・応用コース・固体コースは、溶液 NMR 基本 1st コースを受講された後のご参加をお勧めします。
- \* コース名に (Delta Ver.4 & Ver.5) とあるものは、Ver.4 と Ver.5 の講習を合同で行います。
- \* 講習内容について詳しくは、別紙の「NMR 定期講習会のご案内」をご参照ください。

## 講習会の感想

溶液 NMR 基本 2nd コース (Delta Ver.5) を受講  
ターゲットの化合物を広げること

NOESY や TOCSY など今回の測定方法は使っていませんでしたが、ここ最近のターゲットとしている化合物のことを考えると使えるようになっておいたほうが良いと思います。参加しました。目的は果たせましたし、満足しています。また、今回の測定方法を活かし、ターゲットの化合物を広げることできたと感じています。

秋田県立大学 野下 浩二様

qNMR コース (Delta Ver.4&5) を受講  
すぐ qNMR が使える

qNMR パラメータの内容が理解できた。  
初めての人でもすぐ qNMR が使えるわかりやすい内容になっていた。

分析会社 A・N様

## Q-バンドマイクロ波ユニット (ES-SQ5) のご紹介

ESR装置 (JES-X320またはJES-X330)をベースに、Q-バンド(34~36 GHz)での測定を行うためのマイクロ波ユニットです。標準のX-バンド(8.8~9.6 GHz)用マイクロ波ユニット/キャビティの代わりにQ-バンド用マイクロ波ユニット/キャビティを用いて測定を行います。

Q-バンド共振器は、X-バンド共振器と同様に円筒形TE011モード(試料管外径:2 mm)を採用しています。またQ-バンドマイクロ波ユニットは、X-バンド用マイクロ波ユニットと同様、サーキュレータを利用したホモダイナミック検波方式を採用し、高出力から低出力まで安定した測定が行えます。



図1. Q-バンドマイクロ波ユニットの構成  
(左) Q-バンドマイクロ波ユニット本体  
(右) Q-バンドキャビティ

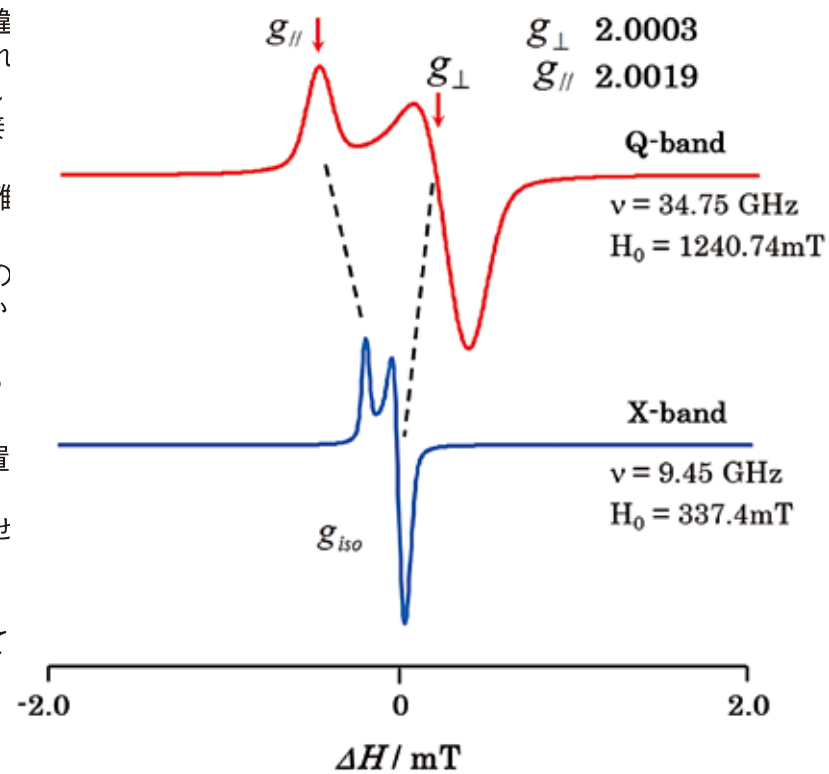
Q-バンドESRは、X-バンドESRに比べ約4倍高い周波数のマイクロ波を利用して高磁場で共鳴信号を観測します。充填率が高いだけでなく、ゼーマン分裂により大きく広がった電子スピン準位間の遷移を観測するため、ごく微量(数 mL)の試料でも高感度な検出が行えます。

Q-バンドでは、わずかなg値の相違が共鳴磁場の差に大きく反映されるためg異方性がより顕著に現れます。これによりX-バンドでは近接した磁場位置に重畳していた複数種のESR信号が、明瞭に分離できる場合があります。

図2は、シリカガラス中のE'中心のESR信号を示しています。わずかなg異方性による分裂が、Q-バンドESRではより明瞭に現れていることがわかります。

ES-13060DVT5温度可変装置にES-UTQ3型温度可変アダプタを装着することで、温度変化させることも可能です。

ESRスペクトルの詳細な解析に、Q-バンドESRをご検討いただければいかがでしょうか。

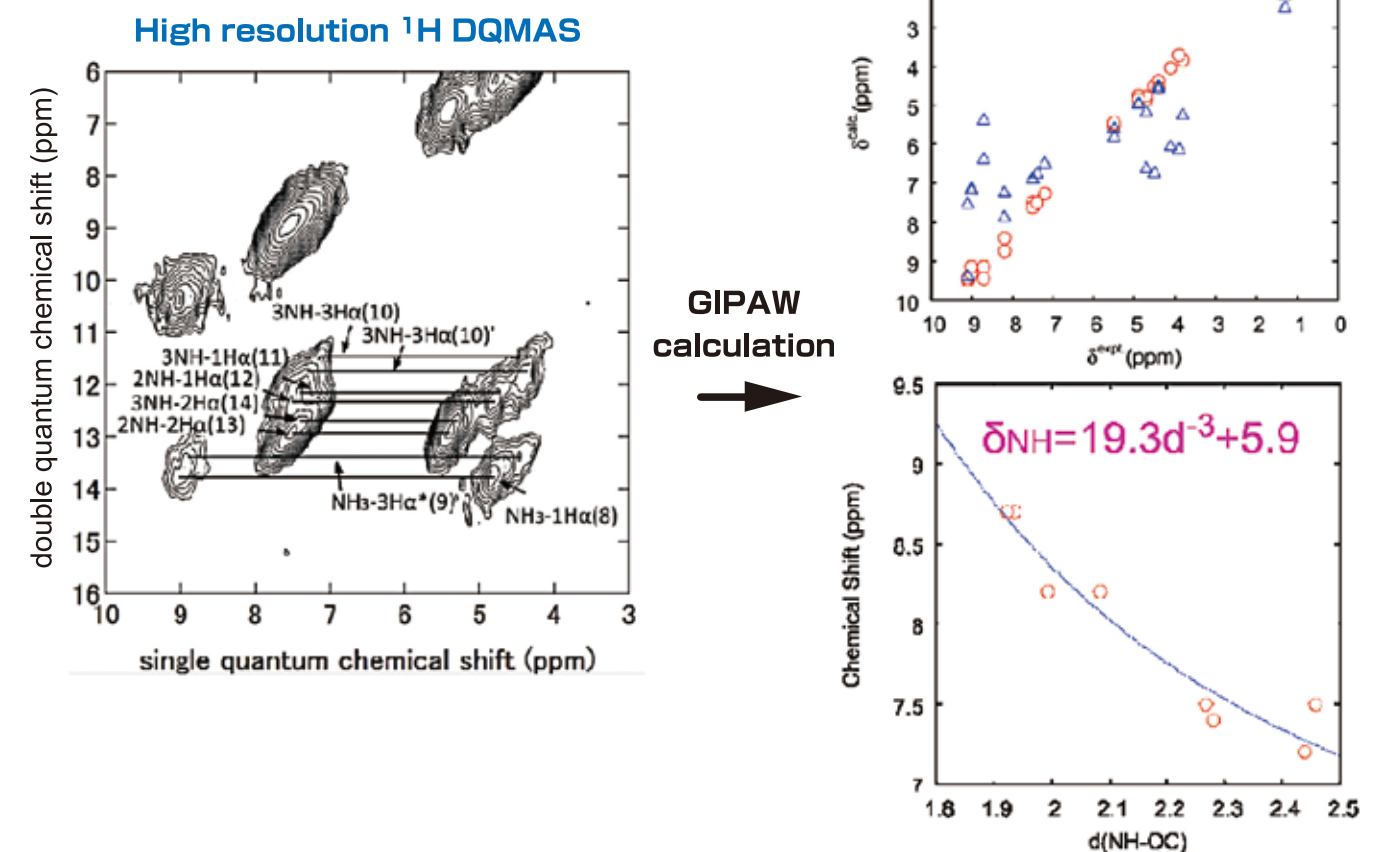


## 超高速MAS固体NMRとGIPAW法による<sup>1</sup>H精密位置解析

<sup>1</sup>H核は天然存在比ほぼ100%で感度が非常に高く、また分子表面に存在するため、分子間近接に敏感です。ペプチドやタンパク質の溶液NMR構造解析において、アミドプロトンの化学シフト値は、水素結合間距離と密接に関わることから構造研究に広く利用されてきましたが、固体中では<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H核間の強い双極子相互作用によってスペクトルが広幅化するため、これまで構造解析にはほとんど利用されてきませんでした。

1 mm超高速MASプローブを用いれば<sup>1</sup>H固体スペクトルが大幅に尖鋭化するため、<sup>1</sup>H-<sup>1</sup>H近接情報が得られる<sup>1</sup>H DQMAS法によって化学シフトを容易に得ることが出来ます。アラニン3量体の単結晶X線構造と、X線構造から<sup>1</sup>Hの位置のみを構造最適化させた2種についてGIPAW (Gauge Including Projector Augmented Wave)法による化学シフト計算を行ったところ、後者が<sup>1</sup>H DQMAS法で得られた実験値と良い相関を示しました。すなわち<sup>1</sup>H NMR測定と化学シフト計算によって、X線解析ではアクセスできない正確な<sup>1</sup>Hの位置を決定出来ることがわかります。さらに結晶形成に重要な分子間水素結合に関わるアミドプロトンの化学シフト( $\delta_{\text{NH}}$ )と水素結合距離( $d$ )は $\delta_{\text{NH}} = 19.3d^{-3} + 5.9$ の関係で表されることがわかりました。

このように固体状態での<sup>1</sup>Hの化学シフトを用いた精密構造解析は生体分子や超分子の新規固体構造解析法として、大変期待されます。

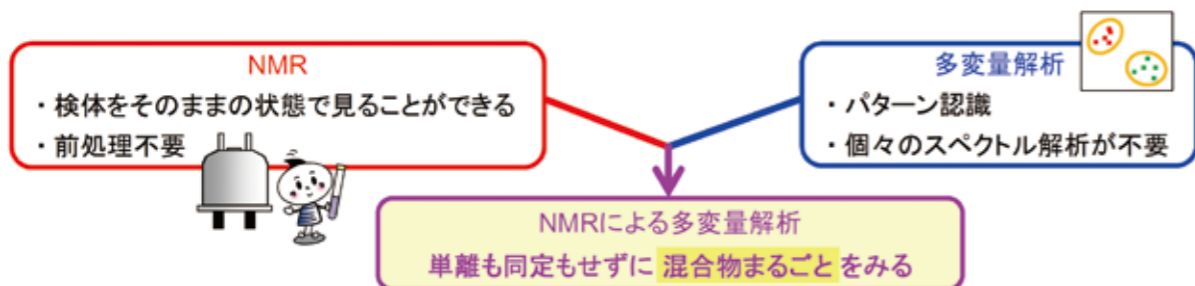


K. Yazawa, F. Suzuki, Y. Nishiyama, T. Ohata, A. Aoki, K. Nishimura, H. Kaji, T. Shimizu, and T. Asakura, Chem. Commun., 48, 11199-11201 (2012)

## NMRを用いた食品の多変量解析

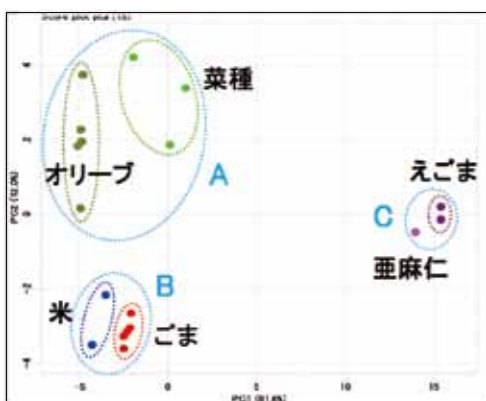
### NMRによる多変量解析の利点

食品などの混合物の分析に時間がかかる原因として、クロマトグラフィでは複雑な前処理が必要なこと、NMRではスペクトルの詳細な解析によってピークを同定すること、などが挙げられます。その解決策となるのがNMRによる多変量解析です。NMRの利点と多変量解析の利点を活かし、単離も同定もせずに混合物まるごとをみます。

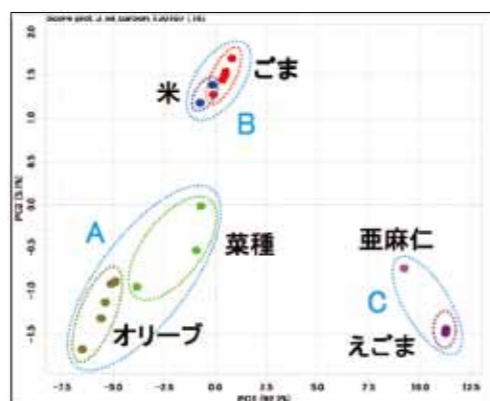


### 多変量解析例：食用油

<sup>1</sup>H-NMR データの主成分分析による食用油の分類



<sup>13</sup>C-NMR データの主成分分析による食用油の分類



サンプル：

- オリーブ油 5種類
- 菜種油 3種類
- ごま油 5種類
- 米油 2種類
- えごま油 2種類
- 亜麻仁油 1種類

サンプルは、オリーブ油、菜種油、ごま油、米油、亜麻仁油です。<sup>1</sup>H-NMRと<sup>13</sup>C-NMRのデータを主成分分析すると、どちらも種類毎に6グループに分かれました。

上図を見ると、この6グループは大きく3群に分類できます。A群はオレイン酸を特に多く含有し、菜種油は6~7割、オリーブ油は7~8割がオレイン酸です。B群の米油とごま油は、どちらもリノール酸とオレイン酸を約4割ずつ含んでいます。C群のえごま油と亜麻仁油は、他の食品にはあまり含まれていないα-リノレン酸に富んでおり、約6割の含有量です。

このように、複雑なサンプルの前処理やスペクトルの解析を一切行わずに、脂肪酸含有量によって食用油のグループ分けができています。

知っている、ちょっと幸せになれる

## Delta Tips

NMDT\_0004

### コメントを後から変更する

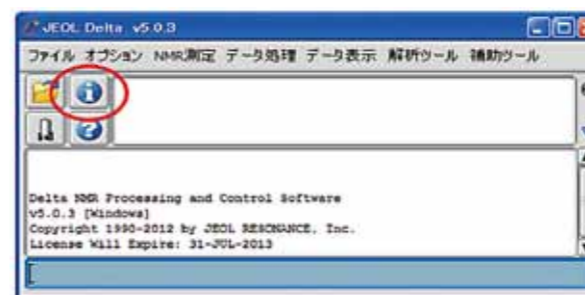
NMR data processing software



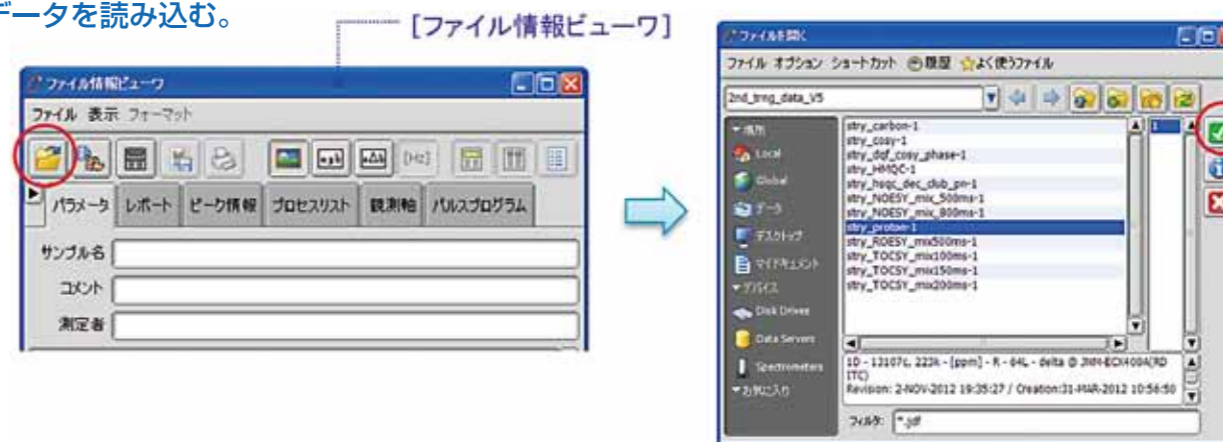
140121-1

#### < 測定データファイルのコメントを変更する方法 >

① Delta ウィンドウで [ファイル情報ビュー] を開く。



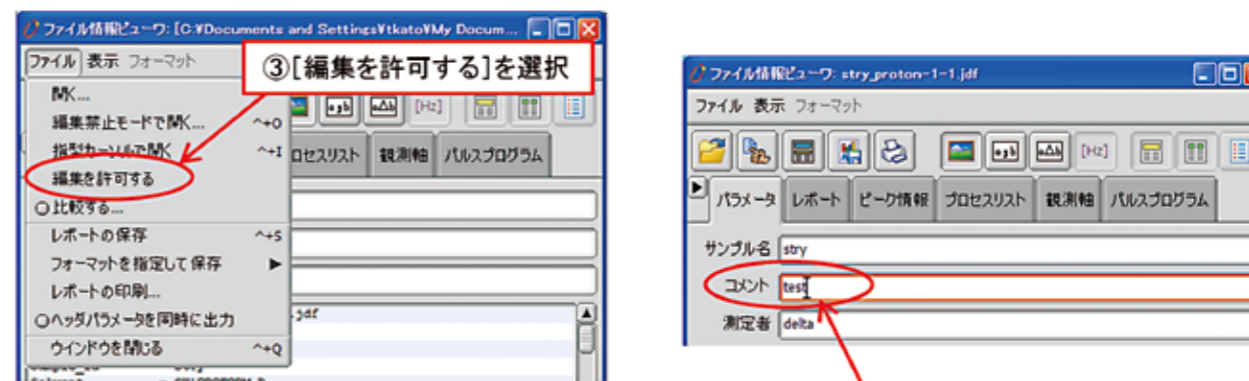
② データを読み込む。



③ [ファイル] - [編集を許可する] を選択する。

④ コメントを変更して [ファイル情報ビュー] を閉じる。

⇒ コメントが変更されます。



④ コメントの変更