



工业

带有混合物分析模块的 Fourier 80 ChemLab

应用说明

秉持诚信 不断创新

使用核磁共振技术, 进行化学混合物分析

化工制造通常需要进行大量的测试：从来料到加工，再到成品质量控制。使用各种靶向性的测试技术是一个常用的方法，这需要使用不同的仪器、方法和用户专业的知识水平。对此，核磁共振技术带来了一个综合的工具，可用于鉴定和定量化学混合物中的多种化合物。

质子核磁共振技术的一大优势在于，它是一种完全非选择性的检测技术，可以测量含有质子的任何化合物。核磁共振技术的使用已在世界范围内广为接受，用于分析分子级别的复杂混合物。它能够对已知的和未知的化合物提供靶向性和非靶向性的鉴定和定量，并轻松验证已知的分子结构、阐明新的分子结构。核磁共振技术还可以实现定量分析，无需使用特定化合物的参考样品。

目前，更为广泛地普及核磁共振技术的限制在于，波谱专业知识的欠缺和特定基础设施/资本的投资（例如，特殊的实验室配置和液体制冷剂）。在工业制造场景中，快速地拿到结果是一项重要的需求，但外送样品到指定地点进行分析总是无法满足时间的预期。现在，布鲁克推出了一个易于使用、稳定耐用的核磁共振方法，它可以鉴定和定量非复杂混合物中的成分，以在最需要的地方提供结果：在进货的装载坡台、生产工艺的步骤中或成品质量控制的环节。布鲁克Fourier 80台式NMR系统显著扩展了核磁共振技术的部署能力，并提供了数据库驱动型端到端工作流程，用于常规的化学混合物分析（见图1）。

FOURIER 80 MIXTURE PROFILER: 工作流程



图1: Fourier 80 Mixture Profiler的NMR工作流程概述

全新的端到端自动化解决方案

布鲁克全新带有NMR Mixture Profiler模块的ChemLab在布鲁克Fourier 80 FT-NMR台式平台上运行(见图2)。NMR Mixture Profiler为化工业提供了独具特色的端到端解决方案,可为混合物中的化合物进行鉴定和定量。该解决方案基于80 MHz高性能台式核磁共振系统Fourier 80,它包含一个高通量自动进样器,可容纳最多120份样品。该仪器通过布鲁克工业标准核磁分析软件TopSpin™以及样品跟踪软件IconNMR™操作。此外,它还配备了高度定制化的一键式用户界面“GoScan™”,使得非专业用户也可以轻松操作。这个全自动化的工作流程,涵盖了从样品检测到报告的所有步骤,无需用户交互。这意味着操作人员即便不具备核磁专业知识,也可以运行包括自动数据解析和报告生成在内的高级核磁分析。其数据库是完全定制化的,可为化学加工行业赋予无与伦比的能力,从而针对来料控制、加工方法和成品质量检查中的挑战,量身定制解决方案。

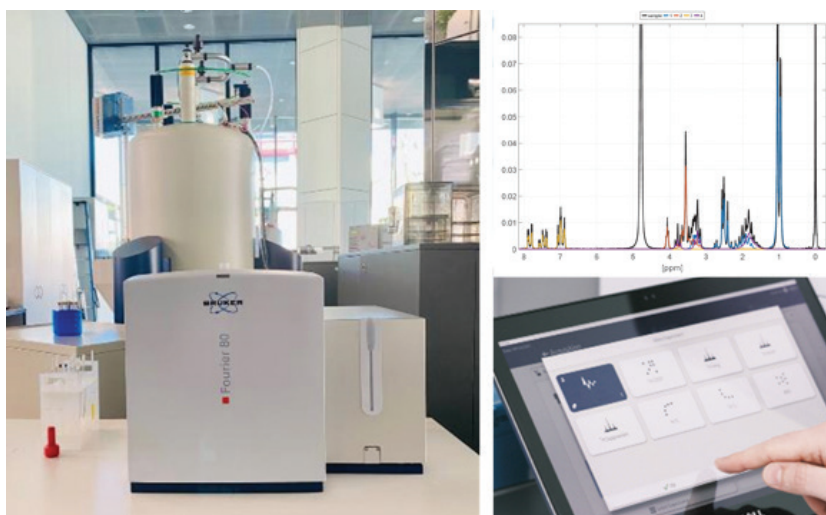


图2: 布鲁克独有: 高场落地式核磁和台式核磁使用同一款操作软件

化工行业的应用示例

- 来料控制
- 工艺创新
- 过程控制
- 出厂产品质量控制

优势

- TopSpin™软件功能强大
- GoScan™工作流程简单
- 从样品到报告, 全自动化
- 一步即可完成化合物鉴定和定量分析
- 完全定制化的谱图数据库
- 初始谱图数据库 (82个谱)
- 约20分钟即可完成混合物分析
- 120个样品的全自动化取放 (可选件)

分析结果以便携式文档格式(PDF)和交互式NMR谱图可视化软件的形式显示。其报告包含一个易于阅读的表格(见图3),提供了已鉴定和定量的化合物。报告还针对与数据库相匹配的化合物,提供了图形化反馈,其中包括用于准确性和一致性分析的残差图(见图4和图5)。

如果NMR谱中的信号无法与现有数据库中的化合物相匹配,那么它们就会在报告中突出显示,以便进一步研究。它们可以是已知的化合物,也可以是未知的化合物。这些异常化合物可使用高分辨率NMR技术等其它技术进行进一步的分析。

带有混合物分析模块的Fourier 80 ChemLab是布鲁克独有的分布式实验室拓扑(DLT)概念的一部分,它直接将高分辨率落地式NMR仪器的方法和易于部署的台式装置结合起来。

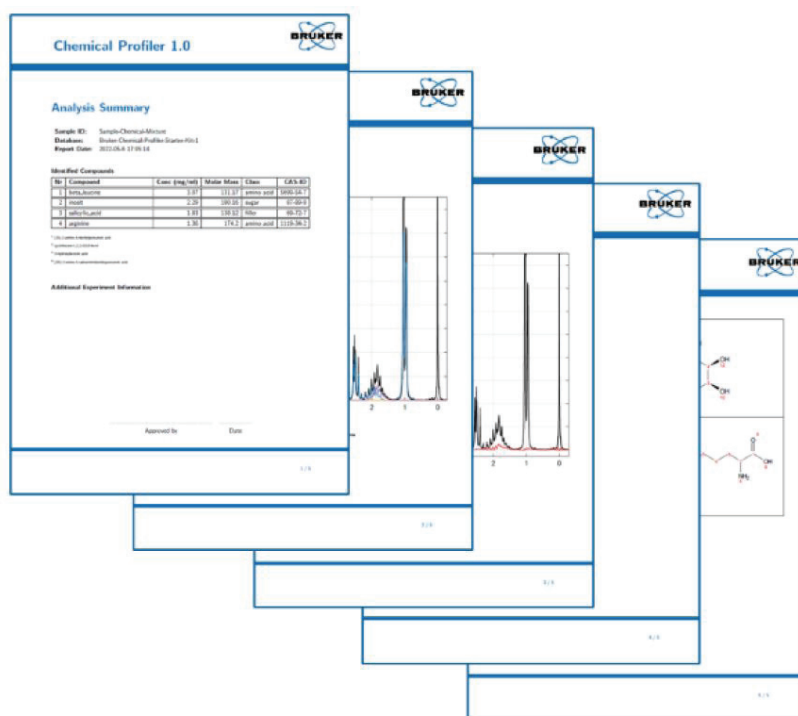


图3: 带有混合物分析模块的Fourier 80 ChemLab的报告

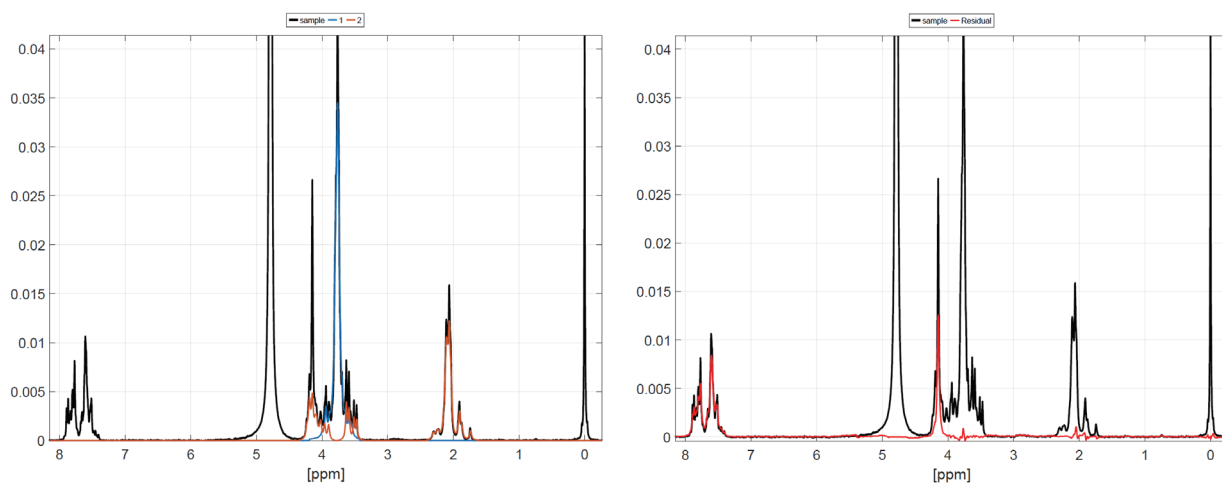


图4:左:彩色编码数据库条目,用于解析当前NMR谱(黑色)。右:当前波谱(黑色)和相匹配的数据库条目的残差图(红色)。有显著波动的红线表示,样品中存在无法与数据库条目相匹配的物质。

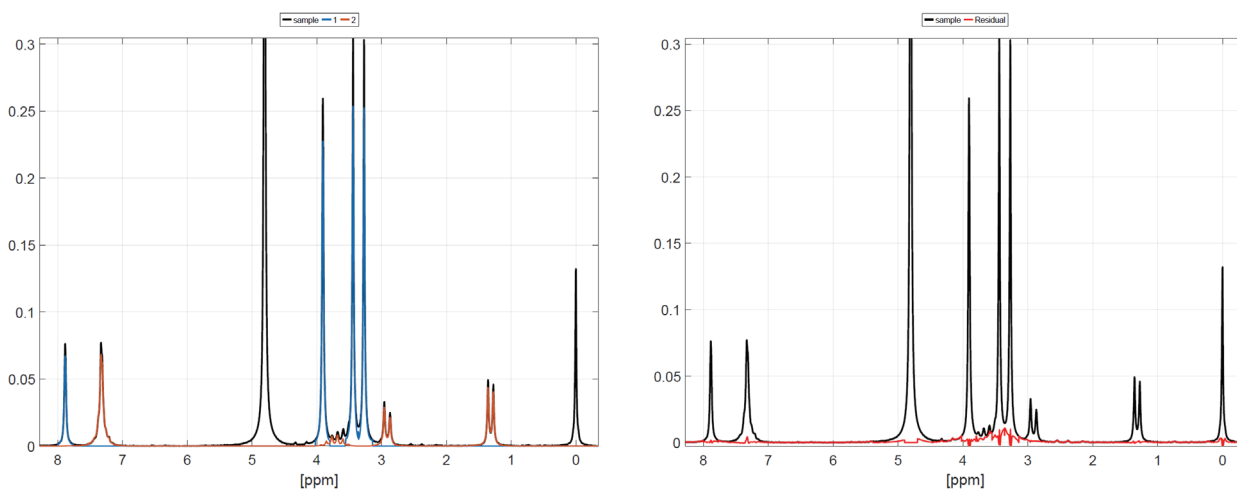


图5:左:彩色编码数据库条目,用于解析当前NMR谱(黑色)。右:当前波谱(黑色)和相匹配的数据库条目的残差图(红色)。平坦的红线表示,所有信号以及混合物中的所有化合物都已成功鉴定。



布鲁克磁共振微信公众号

● 布鲁克(北京)科技有限公司

网址: www.bruker.com
E-mail: sales.bb.io.cn@bruker.com
布鲁克应用技术咨询:
400-898-5858
布鲁克售后技术支持:
400-898-1088

布鲁克(北京)科技有限公司
北京市海淀区西小口路66号
中关村东升科技园B-6号楼C座8层
邮编: 100192
电话: (010) 58333000
传真: (010) 58333299

上海办公室
上海市闵行区合川路
2570号1号楼9楼
邮编: 200233
电话: (021) 51720800
传真: (021) 51720810

广州办公室
广州市海珠区新港东路
618号南丰汇6楼A12单元
电话: (020) 22365885/
(020) 22365886