

NMR測定情報のネットワーク化・自動処理

測定終了時

実験室、居室

測定室

バーコードをサンプル管に添付

自動解析
レポート作成

メール添付配送

LAN経由でNMR端末に
入力またはファイル転送

CSVファイル

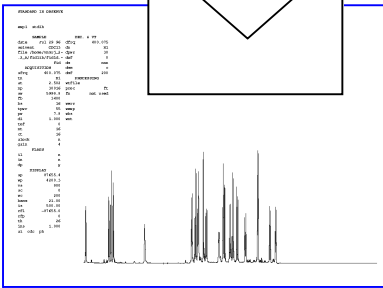
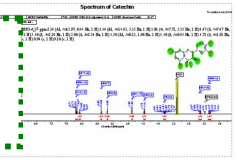
ブラウザで測定状況を確認

LAN経由で
データベースに
登録

・DBサーバ
・ファイルサーバ

測定結果の
自動登録・共有・
バックアップ

実験
データベース

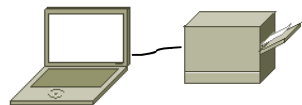


SAM#	SAMPLENAME	USER	TIME	EXPLIST	SOLV	TEXT	STATUS
1	testsample	username1	1 min	Proton	dms0	EX4625801	Active
21	testsample	username1	3 min	Carbon	dms0	EX4625801	Queued
22	testsample	username2	10 min	Gcosy	cdt3	EX4879801	Queued

1. NMR測定情報の入力 (a) ~ (d) 4例

実験室、居室

(a) 2次元バーコードプリンタでラベル印刷、NMRサンプル管に測定情報添付

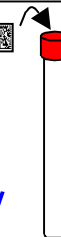


実験室で測定情報入力
2次元バーコード発行



LASauto
EXP01231421
1H 16 CDCl3 r.t.

サンプル管に貼付し
て測定室へ



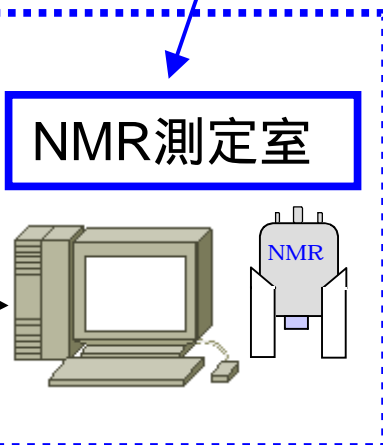
(b) 端末PCや社内実験DBシステムからCSVファイルを作成

Excelマクロなどで測定情報CSVを作成

ID	日付・時刻	ABC-00001	LAS	1H	THF	16 expl 23参照
2	2008/9/10 12:00:00	ABC-00002	LAS	13C	DMSO	64 expl 23参照
4	2008/9/10 12:00:00	ABC-00003	LAS	HSQC	CD3OD	8 expl 23参照
5						
6						

LAN経由でNMR端末へ

(c) CSVファイルに出力



(c),(d) 端末PCのブラウザなどから測定情報を入力

VNMR DATA INPUT - Microsoft Internet Explorer

DATA INPUT for VNMR AUTOMATION from Barcode Re

Sample:

OperatorID:

Condition: Proton Carbon gcossy noesy hr

Number of Scans: 1 4 16 64 256 10

Solvent: CDCl₃ D₂O CD₃OD DMSO

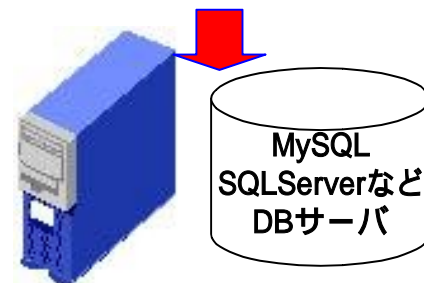
Dioxane Pyridine Benzene Acetone

Temperature: r.t. 30 40 50 60 70 8

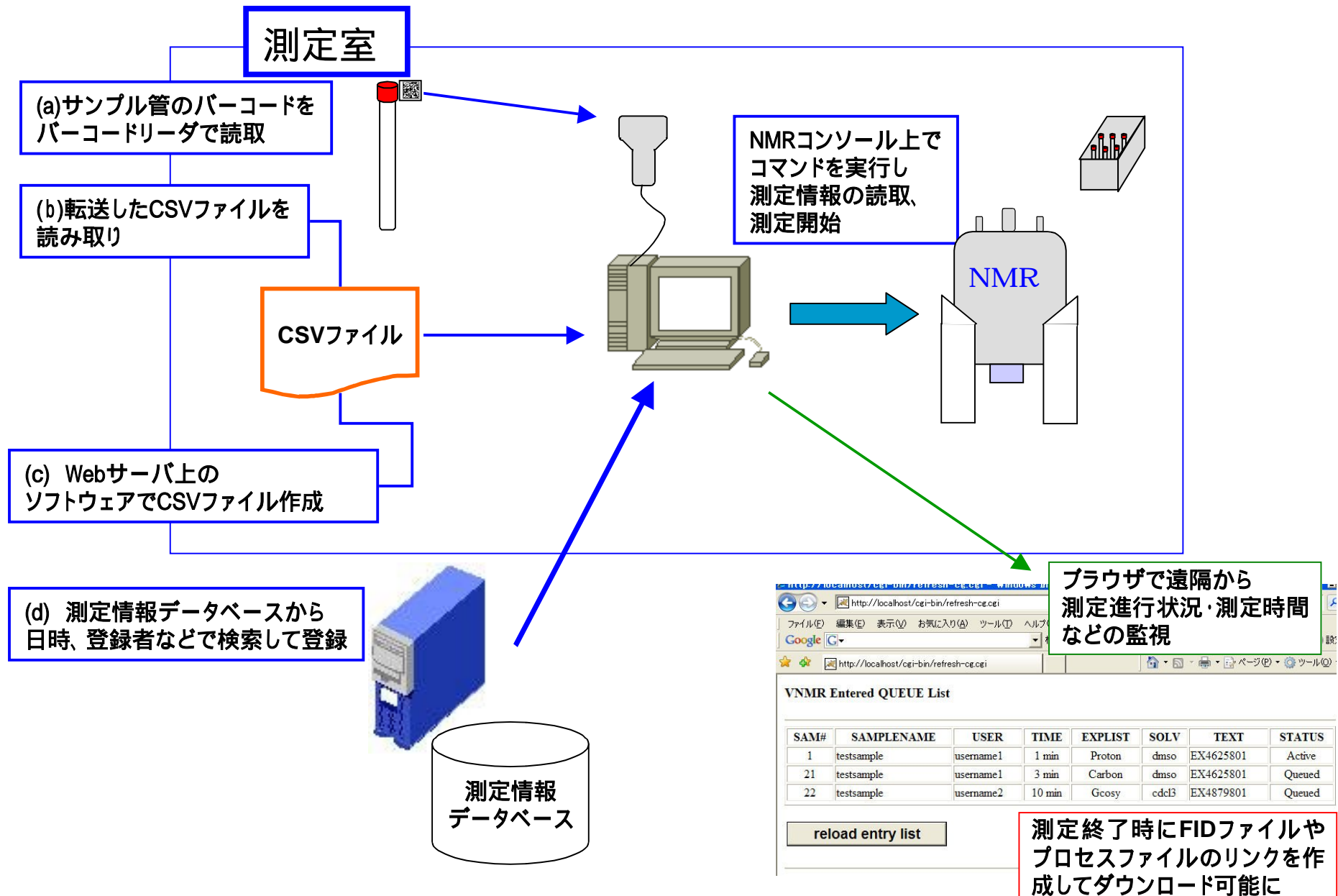
Input Repetition:

ブラウザ・Excel・Accessなど
から測定情報を入力

(d) 測定情報データベース
に登録



2. NMR測定時の情報の読み取り (a) ~ (d) 4例



3. NMR測定終了時の自動処理

