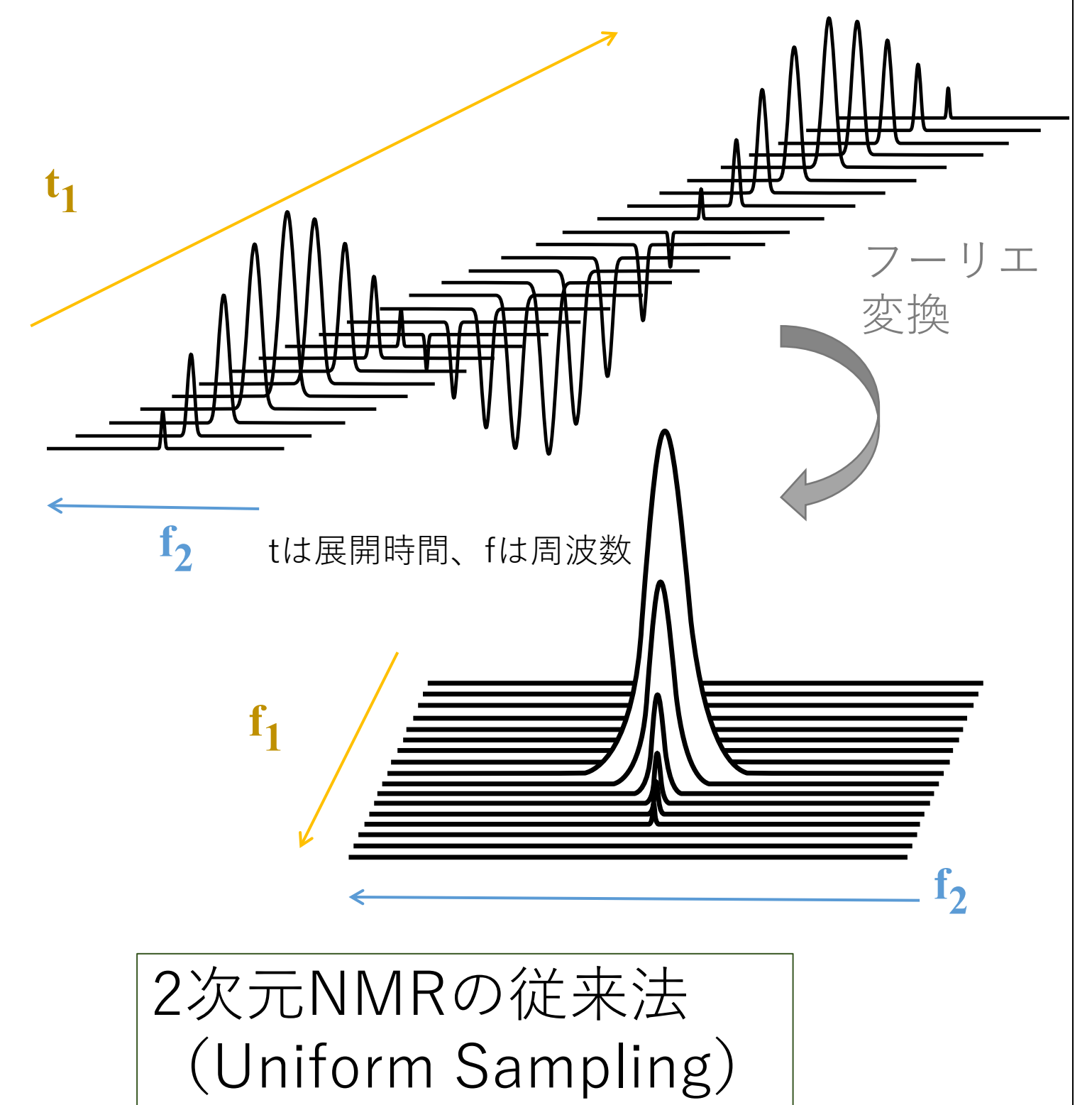




# Non-Uniform Samplingを用いた2次元NMR

NMRは分子中の原子団がどのようにつながっているかを調べることができる装置です。単純な1次元NMRスペクトルでは、得られたピークの数値データだけでそれを確認する必要があります。それに対し、2次元NMRを用いると相関スペクトルという形で視覚的に隣接する原子団を探せるようになるので、データ解析が容易になります。欠点は測定時間であり、2次元NMRの従来法では数100点以上の1次元データを連続的に均一な取得をする必要があります(右図)。点数の削減は、縦軸側のスペクトル分解能の低下やノイズの原因となります。**Non-Uniform Sampling (NUS)**は、サンプリング点数を疎らに間引く代わりに、欠損した点を計算で再構築し、フーリエ変換することで損失の少ないスペクトルを得る手法です。測定時間の短縮や、同じ時間でのスペクトル分解能の向上などの効果が得られる画期的な手法になります。



## サンプルの準備

NUSは少ない点数でも拾えるピーク強度が必要なため、適用するには十分な濃度のサンプルを用意する必要があります。

使用したサンプル： 20mg ストリキニーネ

## 実験方法

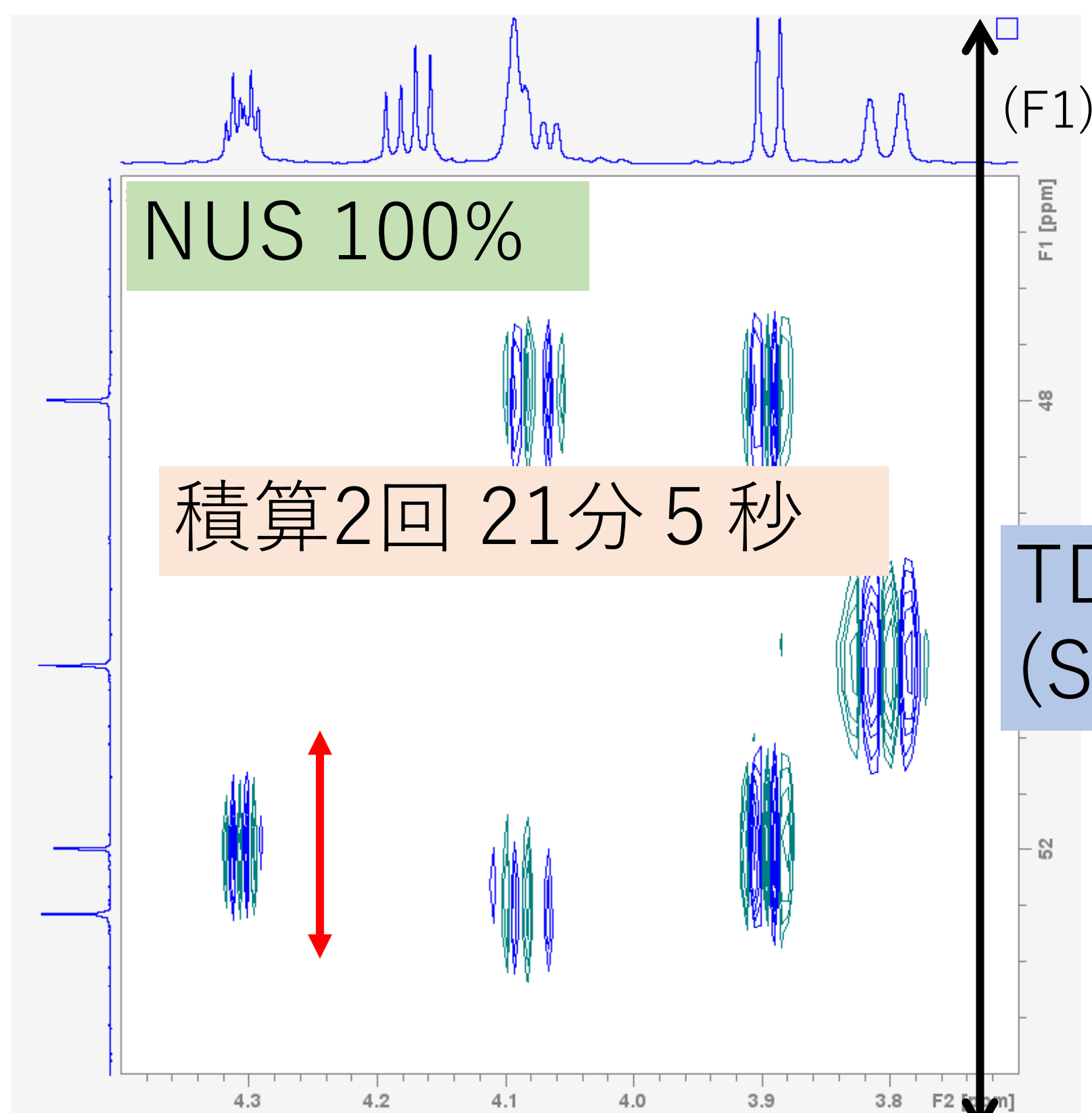
NUSは、F1軸スペクトル点数 (TD) のサンプリング密度 (初期条件からの取得率) で設定できます。密度を減らせば測定時間の減少になります。間引き方法はソフトウェアで自動的に計算されますので、初心者でも簡単に設定できます。

## 実際の適用事例

適用した測定法： phase sensitive HMBC (hmbcetgp13nd)

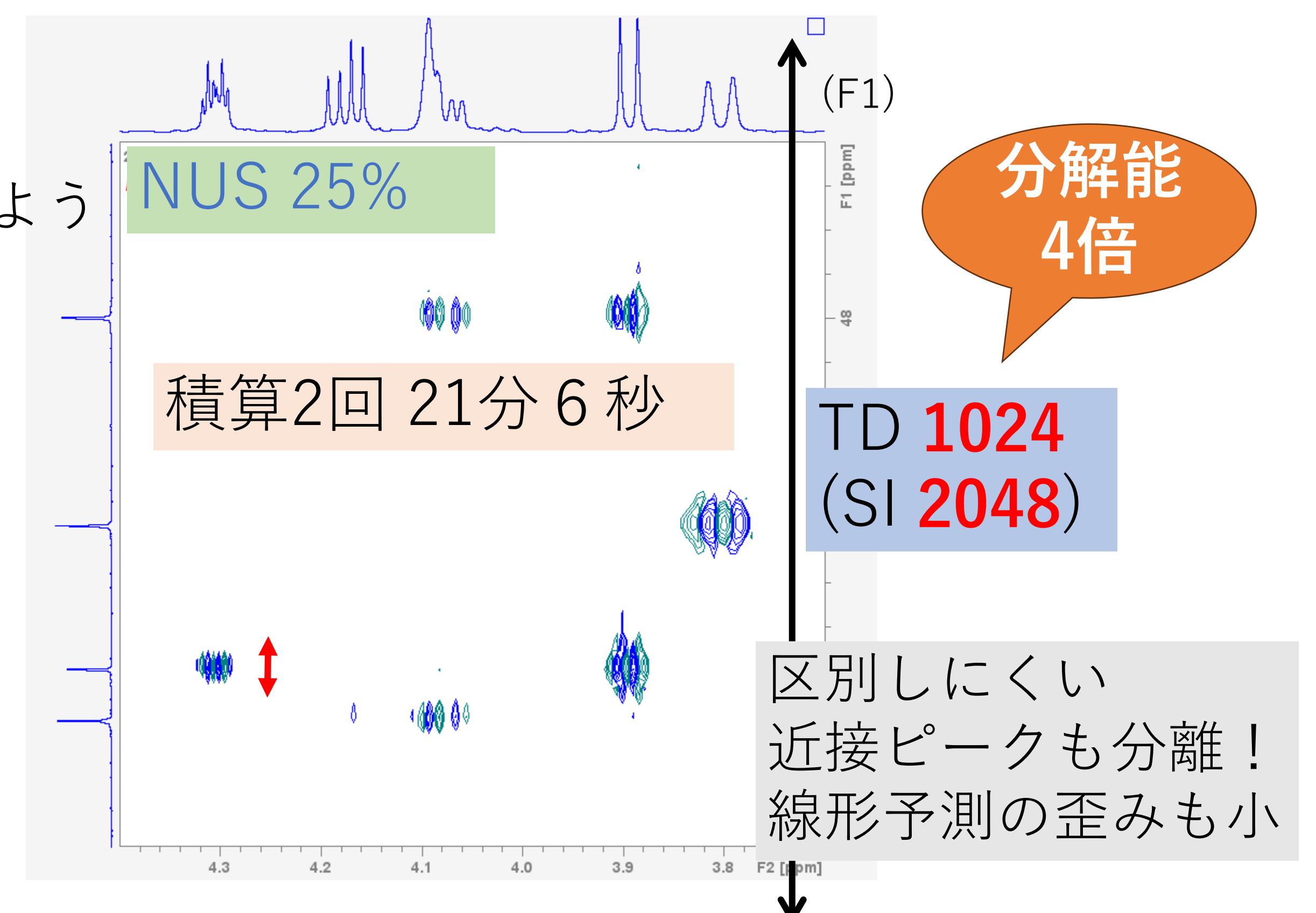
<sup>1</sup>H-<sup>13</sup>Cの位相検波ロングレンジ相関法。位相検波法は分解能の恩恵が際立って得られます。

※ TDには標準的な「ゼロフィル2倍」「線形予測2倍」のポイント補完を適用しています。TD 256点なら実数スペクトル(SI)は512点になります。



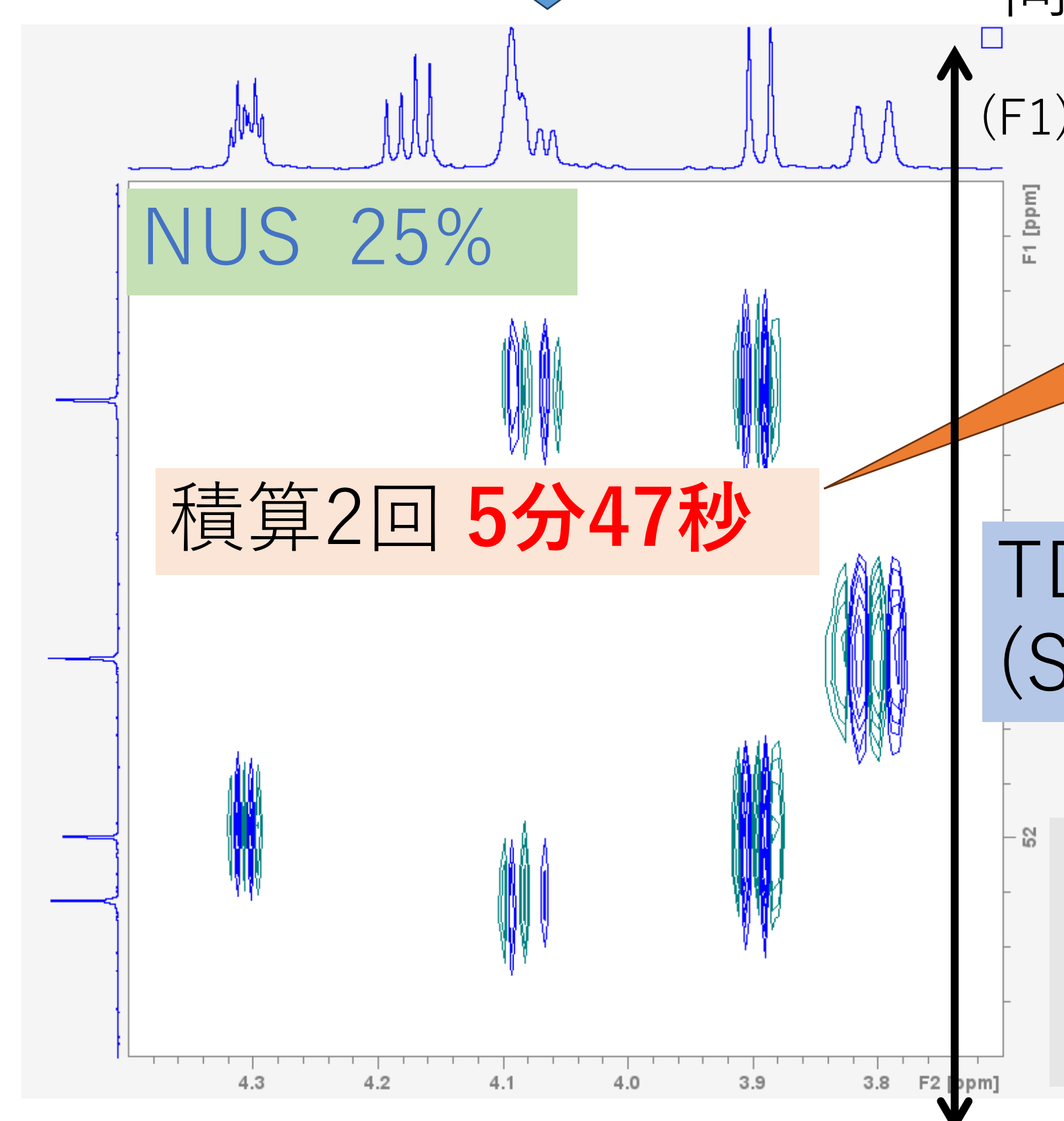
### NUSによる分解能向上

同じ時間になるようTDを変更



### NUSによる時間短縮

同じ分解能で時間を短縮



スペクトルの質はほぼ同じ！HMBCが6分

## 便利機能

NUSは効率を最適化してスペクトルを取り込みますので、仮にNUS 100%設定で測定開始しても途中で止めれば適切に残りが間引かれます。そのため、NUSがなくても設定を入れておけば好きなタイミングで止められる2次元NMRに変わります。

このように、NUSは測定の効率を大幅に上げられる便利な機能です。ほとんどの2次元NMR (多次元NMRも含む) に適用できますので、活用してみてください。

連絡先: 機器分析評価センター

(HP) <https://www.iac.ynu.ac.jp/>

(電話) 045-339-4406 (E-mail) [iac@ynu.ac.jp](mailto:iac@ynu.ac.jp)

