

# NMR

**Pulsar™**

Ядерная магнитно-резонансная спектроскопия на рабочем столе



**OXFORD  
INSTRUMENTS**

*The Business of Science®*



## Ядерный магнитный резонанс для *Вашей* лаборатории

ЯМР-спектрометр Pulsar™ производства компании «Oxford Instruments» обеспечивает доступную высокоэффективную ядерную магнитно-резонансную спектроскопию в лабораторных условиях.

### Настольный прибор ядерного магнитного резонанса в любом удобном для Вас месте

**Pulsar** – настольный ЯМР-спектрометр, не содержащий криогенных жидкостей, отличающийся высокой эффективностью без специальных требований, которые характерны для измерительных устройств на основе сверхпроводящих магнитов. Благодаря компактным размерам ЯМР-спектрометр **Pulsar** подходит практически для любой лаборатории – от лабораторий в учебных заведениях или лабораторий органического синтеза до промышленных производственных участков.



ЯМР-спектрометр Pulsar, установленный в лаборатории



### Невысокие затраты на настройку и эксплуатацию

ЯМР-спектрометр **Pulsar** может использоваться в Вашей лаборатории без необходимости в реализации специальных норм по охране труда и техники безопасности. **Pulsar** не требует применения жидкого гелия, жидкого азота или сжатых газов, нужен только стандартный источник сетевого электропитания. Таким образом, Вы можете сконцентрировать внимание и усилия на анализе, а не на постоянном контроле за Вашим спектрометром.

# PULSAR



## Очень высокая эффективность

ЯМР-спектрометр **Pulsar** обеспечивает Вас первоклассной эффективностью. **Pulsar**, в состав которого входит постоянный магнит из редкоземельных металлов 1,4 Тл (протонный резонанс 60 МГц) с высокой однородностью поля, обеспечивает исключительное спектральное разрешение, и все это в настольной системе.

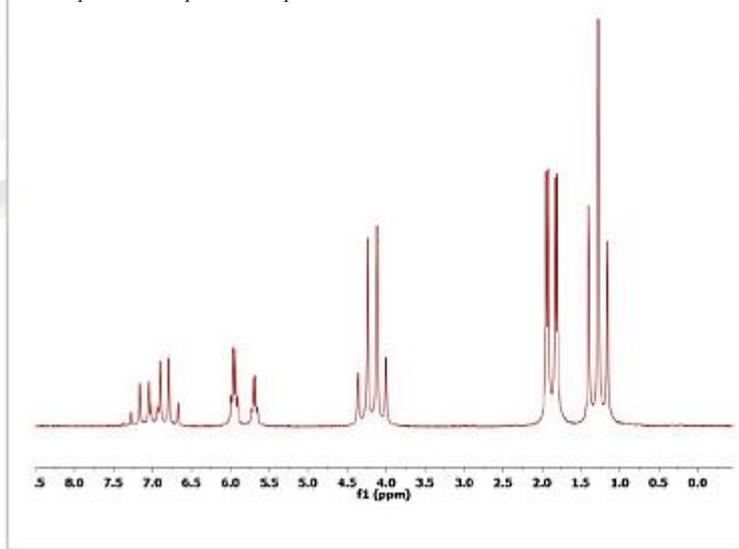
## Инновационное интуитивное интеллектуальное программное обеспечение

Графический интерфейс пользователя программного обеспечения SpinFlow™ позволяет быстро и просто создавать рутинные схемы экспериментов для получения спектров, проведения релаксационных измерений или для расширенного сбора данных. Управление прибором осуществляется посредством интуитивного, комплексного программного пакета с последовательностью операций настройки, сбора и обработки данных. Обработка данных - при помощи мощного, ведущего в этой отрасли программного обеспечения Mnova от компании «Mestrelab», причем с бессрочной лицензией.

Не содержит  
криогенных  
жидкостей

Возможность проведения быстрых измерений с генерированием типовых спектров за считанные секунды делают **Pulsar** идеальным инструментом для мониторинга и изучения реакционных процессов (широчайшие возможности для исследования химических реакций).

Одномерный спектр  $^1\text{H}$  этилкетоната

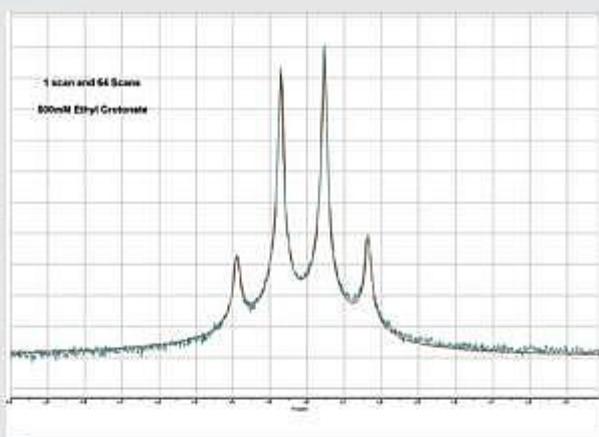


# Использование ЯМР-спектрометра Pulsar

## Простое управление

В ЯМР-спектрометре **Pulsar** используются распространенные стеклянные трубки ЯМР диаметром 5 мм и высокоэффективное автоматическое шиммирование, за счет чего оптимизирована процедура корректировки поля за несколько минут, когда это необходимо.

Для получения простых протонных спектров **Pulsar** оснащен усовершенствованной программной фиксацией резонансной частоты **SoftLock™**, которая гарантирует стабильность спектров без необходимости использования дейтерированных растворителей. **SoftLock** настолько эффективна, что 2000 спектров могут быть наложены друг на друга без детектируемого размывания и смещения.

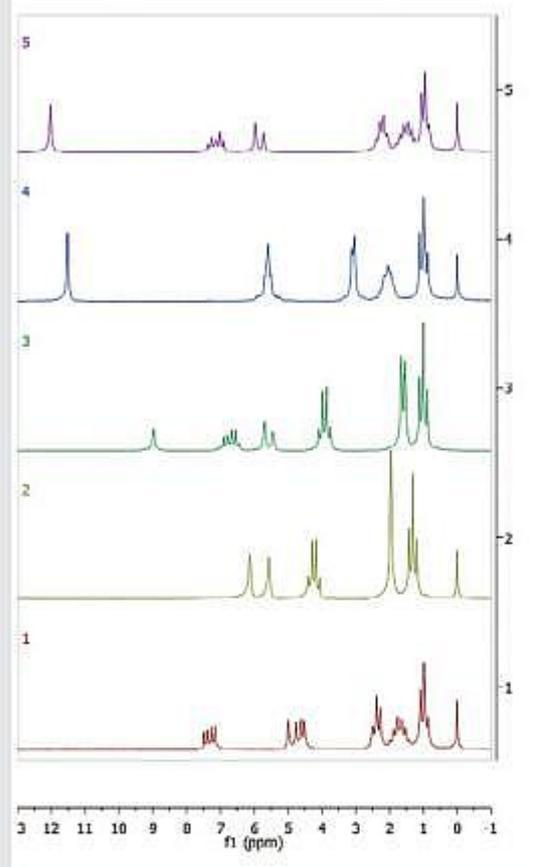


Фиксация SoftLock – отображение наложенных спектров

## Рутинные эксперименты

Ядерная магнитно-резонансная спектроскопия является мощным методом физико-химического анализа. Информация, полученная на основе спектров ЯМР, дополняет данные, полученные с помощью других методов. Во многих случаях метод предоставляет уникальные сведения о материале образца.

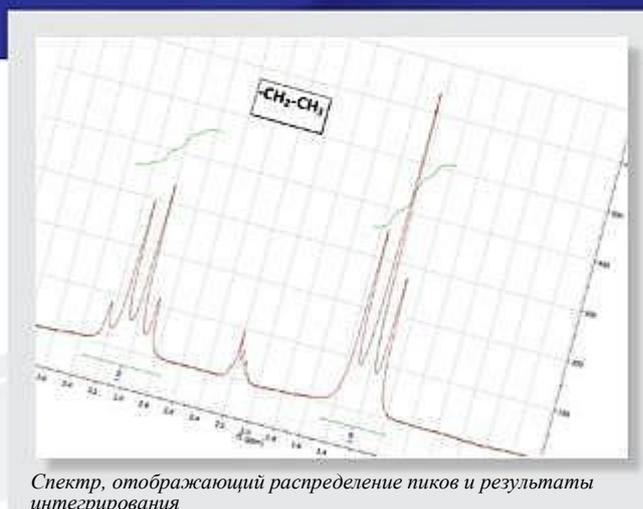
Ядерный магнитный резонанс – отличный метод идентификации веществ и химических групп. Представленные ниже спектры образцов соответствуют соединениям с общей молекулярной формулой,  $C_6H_{10}O_2$ , но с разным химическим строением. Спектры заметно различаются, даже в случае транс-2- и транс-3-гексеновых кислот (пара структурных изомеров, состоящих из идентичных функциональных групп и имеющих одинаковую длину цепочек).



Спектры разных структурных изомеров  $C_6H_{10}O_2$

Спектральные данные, полученные с помощью ЯМР-спектрометра Pulsar, отображают четкое разделение мультиплетов, обычно наблюдаемых в спектрах. В примере справа показаны типичные мультиплеты, генерируемые атомами водорода в группе этильных фрагментов ( $\text{CH}_2\text{CH}_3$ ) в молекуле.

Интегрирование пиков позволяет определять число атомов водорода, входящих в каждую химическую группу. Расстояние между пиками в этих мультиплетах позволяет проводить измерение констант связи.

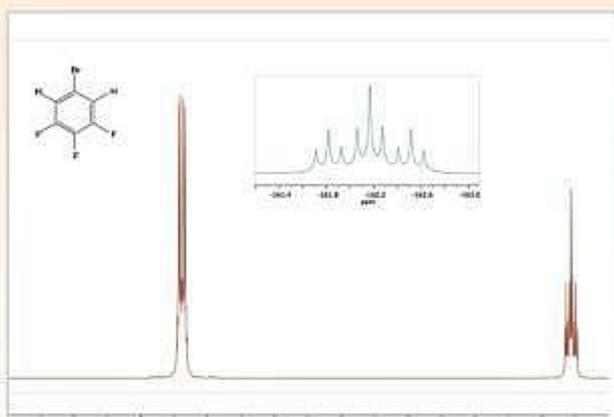


Спектр, отображающий распределение пиков и результаты интегрирования

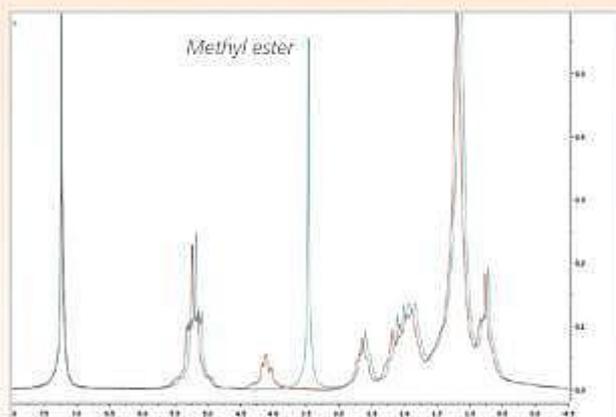
## Дополнительные возможности

Помимо получения типовых спектров ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$ , Pulsar позволяет проводить множество других экспериментов. Каждый ЯМР-спектрометр Pulsar обеспечивает получение спектров на ядрах  $^{19}\text{F}$ , а также на ядрах  $^1\text{H}$  с использованием одного датчика. Пример спектра на ядрах  $^{19}\text{F}$  5-бром-1,2,3-трифторбензола приводится ниже.

ЯМР-спектрометр Pulsar также идеально подходит для проведения серий экспериментов. Последовательный сбор данных в ходе химической реакции позволяет отслеживать изменения в определенных функциональных группах в ходе реакции. Визуальное сравнение спектров на разных этапах реакции выполняется очень просто. Далее приводится пример переэтерификации триглицерида.



Спектр, полученный на ядрах  $^{19}\text{F}$  5-бром-1,2,3-трифторбензола



Наложенные спектры реагента и конечного продукта

## Двумерная гомоядерная ЯМР-спектроскопия

Помимо программной фиксации **SoftLock**, для образцов ЯМР, в которых исследуемые химические вещества растворяются дейтерированными растворителями, ЯМР-спектрометр **Pulsar** также оснащен стандартной аппаратной фиксацией.

Дополнительная стабилизация частоты за счет фиксации на ядрах дейтерия обеспечивает расширенные функциональные возможности и позволяет проводить двумерные гомоядерные эксперименты:

**COSY** – классическая двумерная корреляционная спектроскопия, предоставляющая информацию о взаимосвязанных ядрах и о соседних атомах.

**J-разрешенная спектроскопия** – получение информации о химических сдвигах при J-взаимодействии, позволяющее разделить перекрывающиеся мультиплеты.

**TOCSY** – предоставляет информацию о взаимосвязи ядер в одной цепи через J-взаимодействие, что позволяет получить информацию о строении основной цепи органических молекул.

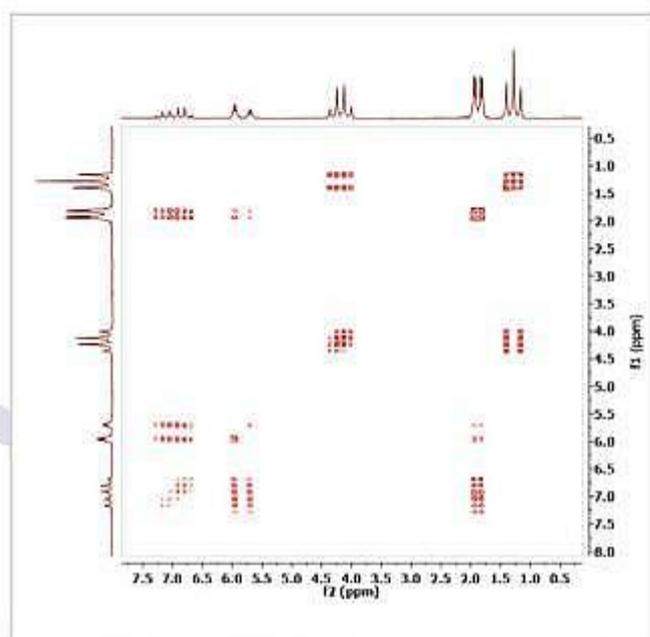


Рисунок 1: Данные корреляционной спектроскопии (COSY) для этилкротона

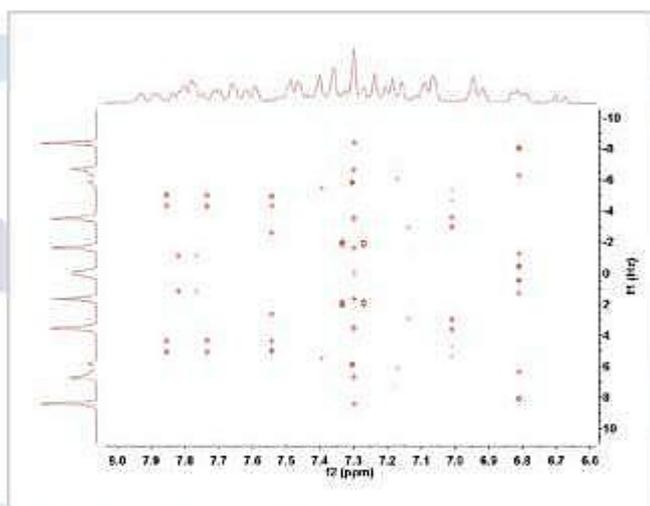


Рисунок 2: J-разрешенная спектроскопия ароматического участка 2-(2-гидроксифенил) бензотриазола

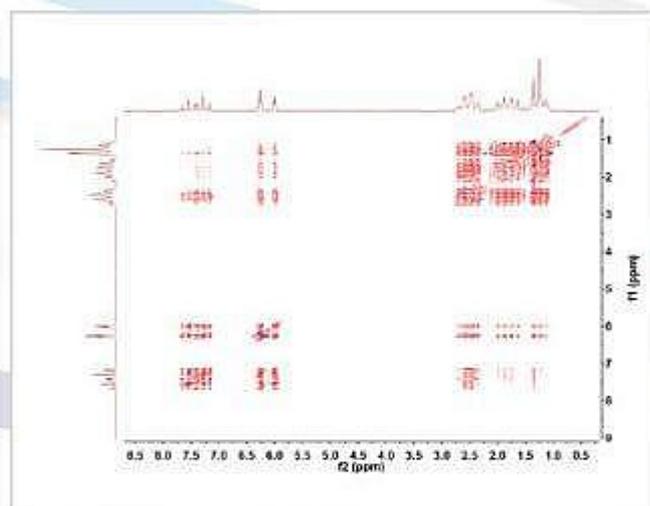


Рисунок 3: Данные полной корреляционной спектроскопии (TOCSY) 2-гексеновой кислоты

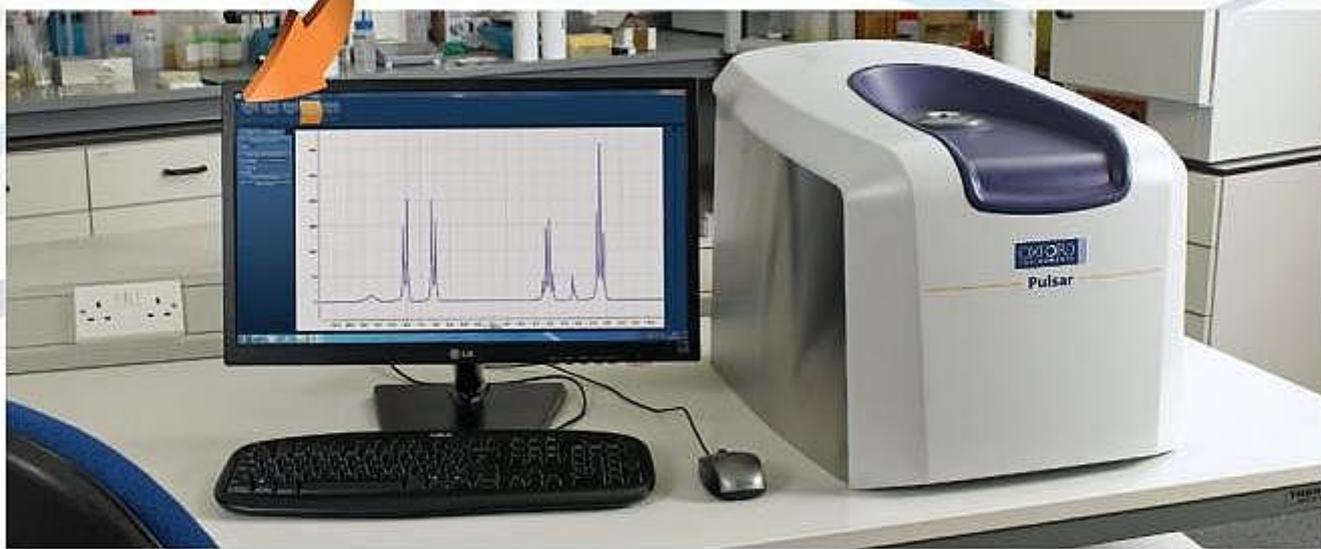
Высочайшая  
эффективность

## Функциональные возможности программного обеспечения

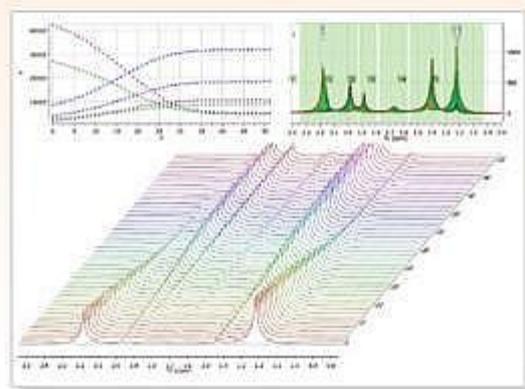
Программное обеспечение управления ЯМР-спектрометром Pulsar SpinFlow имеет интуитивно понятный интерфейс пользователя. Это позволяет начинающим операторам осуществлять работу и измерение спектров образцов без особенной подготовки, а опытным пользователям – еще и редактировать параметры экспериментов. Автоматизированные операции настройки дают возможность оптимизации прибора для достижения максимальной эффективности всеми пользователями, независимо от уровня их подготовки.

Процесс измерения образца очень прост – просто выберите эксперимент и щелкните мышью по кнопке «Acquire» («Сбор данных») для запуска сбора спектральных данных. Отчет о выполненном анализе генерируется последовательностью операций, представленной далее.

Последовательность операций повышает производительность



По завершении сбора данных спектр доступен для включения в отчет или для дальнейшей обработки данных. В комплект поставки **Pulsar** входит бессрочная лицензия на мощное программное обеспечение от компании «Mestrelab». Эта программа содержит полный набор подпрограмм для обработки и анализа данных ЯМР и различные опции отображения спектров, включая двухмерную и трехмерную стековую визуализацию. Особое значение это имеет для мониторинга химических реакций.



Стековое отображение позволяет проводить анализ экспериментов по определению зависимости от времени

# PULSAR

Оказывая широкий спектр услуг, мы обеспечиваем Вам полное спокойствие за результаты измерений

## Компания «Oxford Instruments» Поддержка и обслуживание по всему миру

Мы очень гордимся тесным сотрудничеством с нашими клиентами. Наша цель – обеспечить всестороннюю техническую поддержку в течение всего срока службы продукта.

Выбирая работу с компанией «Oxford Instruments», Вы защищаете свои знания, накапливаемые и поддерживаемые нашими квалифицированными разработчиками и инженерами. Мы предлагаем различные пакеты технического сопровождения, обеспечивающие Вас необходимым уровнем услуг.

Наша цель – предоставить нашим клиентам безупречное сервисное и быстрое экспертное техническое обслуживание наших продуктов, гарантирующее им работу с высочайшей эффективностью.

Сервисный центр производителя в РФ и СНГ – АО «АВРОРА» имеет штат обученных специалистов для проведения технического обслуживания на протяжении всей эксплуатации Вашего прибора.



### Имеются также приборы для промышленного анализа:

Настольные ЯМР-анализаторы MQC для быстрых и простых измерений жиров, масел и влаги.



АВТОРИЗОВАННЫЙ ДИЛЕР НА ТЕРРИТОРИИ РФ И СНГ:

**АВРОРА**  
ТЕХНОЛОГИИ ИЗМЕРЕНИЙ

АО «АВРОРА»

Почт. адрес: 119071, Россия, Москва, а/я 33

Тел.: (495) 258-83-05/-06/-07,

Факс: (495) 958-29-40

Internet: [www.avrora-lab.ru](http://www.avrora-lab.ru)

E-mail: [sales@avrora-lab.com](mailto:sales@avrora-lab.com) (коммерческий отдел)

[service@avrora-lab.com](mailto:service@avrora-lab.com) (сервисный отдел)

**OXFORD**  
INSTRUMENTS

*The Business of Science®*

