



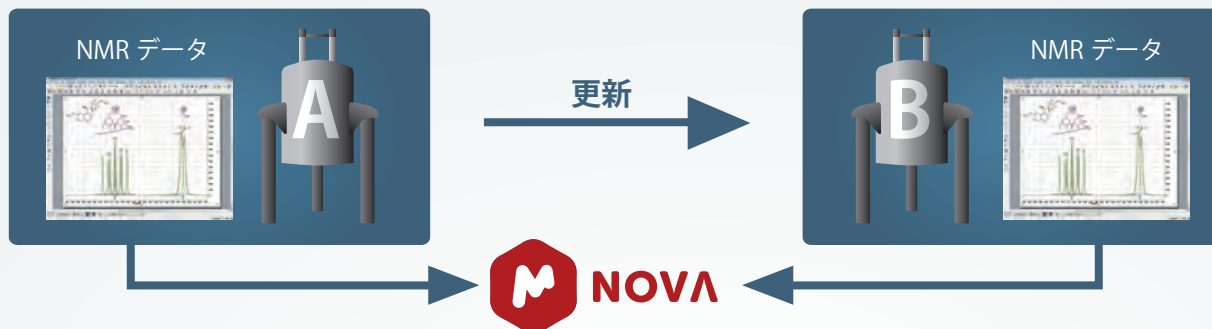
**NOVA**

NMR スペクトル処理ソフトウェア

# **NOVA** で解決！！

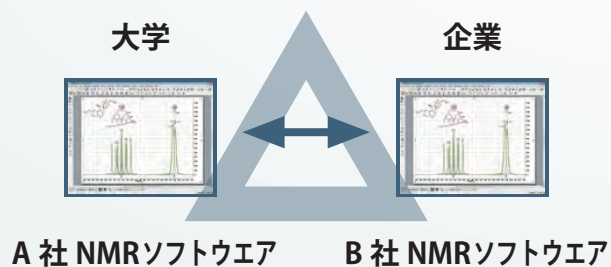
## ■ NMR メーカーに依存することなく、データインポートが可能

例えば、設備の更新の際に ....



将来、NMR を更新せざるを得ず、現在の NMR メーカーと異なる場合があります。  
過去のデータも、現在のデータも、将来のデータも同一操作での処理・解析、同一形式でのデータ管理が可能です。

例えば、産学連携プロジェクトで ....



連携先のデータが読み込めない、1D は読めるが 2D は読めない、連携先で見られないピークが出現等々のトラブルが心配です。

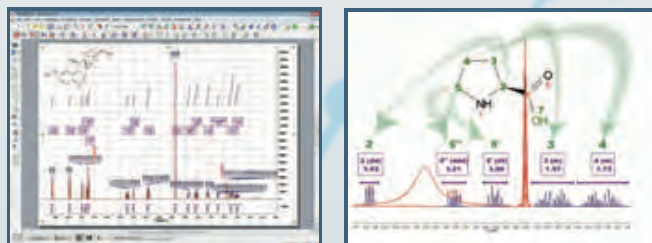


連携先の NMR メーカーを気にすることなく、共通のプラットフォームとして使用可能です。

## ■ 自動アサインメントで帰属時間の大幅短縮さらに学習機能で予測精度向上も可能

Mnova NMR + MnovaNMR Predict の組み合わせで、1 クリックで自動アサインメントが行えると同時に化学シフト値、積分比、分裂様式を瞬時に得られることができます。自動アサインメント後、構造式にカーソルを持っていくと、アサインされたピークがハイライト表示され、アサインメントの最終確認に役立っています。

自動アサインメントで満足できない結果となっても、スペクトル予測精度を向上させる学習機能を備えているので、次回以降の自動アサインメント結果精度を上げることができます。





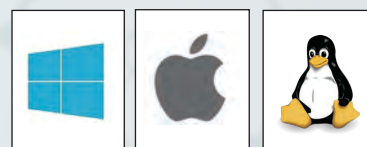
スペイン Mestrelab Research 社の Mnova は、  
欧州・北米を中心とした市場で多大なシェアと高評価を得ている NMR スペクトル解析ソフトウェアです。

Mnova は多種多様な高機能を必要とする専門家にも、ルーチン処理に関して最大の生産性を期待する  
有機合成化学者にも理想的な設計のソフトウェアです。  
発売開始以来バージョンアップを続けており、様々なニーズに応えるべく、現在も進化を続けております。

Mestrelab Research と日本総代理店のリアクトが一つのチームとなり、  
Mnova ユーザの”省力”、”省時間”、”省コスト”に貢献してまいります。

## Mnova NMR

Windows, Mac OS, Linux に対応しており、  
異なる OS、PC においても同一の操作を行うことができます。

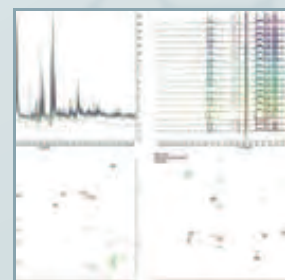
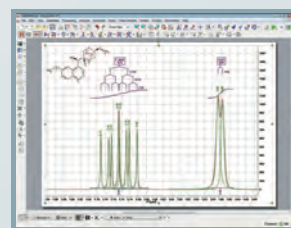
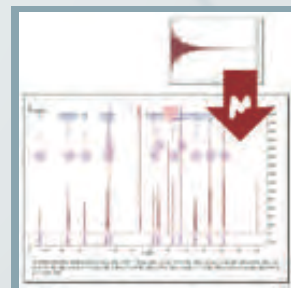


NMR メーカー (JEOL, Bruker, Agilent, Oxford Instruments, PicoSpin, Magritek, Nanalysis 等) に依存することなくデータを全て同じように取り扱うことができ、また操作性の高い GUI も持ち合わせているので、非常に使いやすいソフトウェアとして評価を得ております。

1D、2D NMR のデータ処理 (プロセッシング) と解析を短時間かつ容易に行えます。  
FID から解析までの最短方法を提示し、最小の労力で高品質な結果を提供します。プロセッシングや解析のパラメータが定まっている繰り返し操作を”自動化”することで、大幅な時間短縮を期待することができます。  
テンプレートおよびスクリプトを使用することにより、NMR データをドラッグ & ドロップするだけで、自動プロセッシング・解析を行うことも可能です。  
テンプレートを共有することで、誰が解析しても同じ品質の解析結果が得られます。

Mnova オリジナルの高度なアルゴリズム GSD(Global Spectral Deconvolution) を有しており、重なり合ったピークの分離 (Deconvolution) や、  
全てのピークを、化合物・不純物・溶媒等に自動分類することができます。

1つのドキュメント (ファイル) に複数の異なる 1D, 2D NMR データをインポート・閲覧することができ、さらにその複数のデータを同時に処理・解析を行うことも可能です。





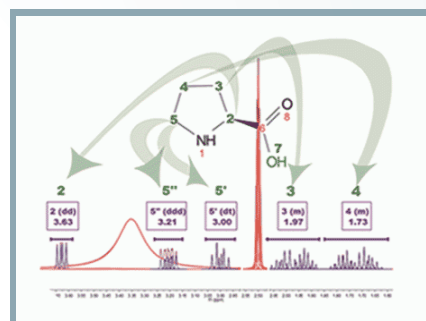
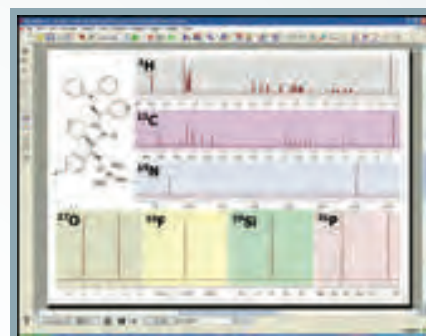
## Mnova NMR Predict

1D NMR( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$ ) と  
2D NMR(HSQC) のスペクトルの予測を行います。

実測スペクトルと予測スペクトルを比較表示することで、  
ユーザのワークフローの一部または独自の知識増加の一助となり、  
より良い意思決定を素速に行うことが可能となります。

予測スペクトルの精度を上げるべく、学習機能が実装されており、  
ローカル PC 内での予測データベースを更新することで、高品質の予測スペクトルを得ることができます。

また、Mnova NMR と組み合わせることで、  
極めてシンプルな手順で自動アサインメントを提供することができます。  
自動アサインメントは、最も時間がかかると言われているスペクトル帰属の  
大幅な時間短縮に貢献できます。



## Mnova MS

迅速・正確に MS(GC/LC) のデータの処理、解析を行うことができます。  
様々なデータ形式をインポートできるため、異なるメーカーのデータに  
対し、Mnova という共通のインターフェースで解析を行います。  
NMR スペクトルと合わせたレポート出力も可能です。

任意の質量範囲または特定の  $m/z$  値からマスクマトグラムを、  
任意の波長から UV トレースを、簡単に生成することができます。

構造確認のための自動分子マッチング機能を実装しています。  
構造式をインポートし、どの構造式が実測データに一致するか、  
簡単な手順で確認を行うことができます。

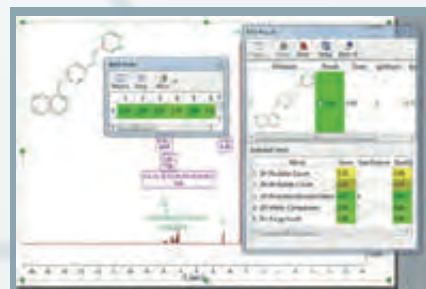


## Mnova Verify

研究者が候補に挙げている化合物構造式に対し、  
取得した NMR スペクトルとの相関性を数値で表し判定、評価します。

簡単な操作で数値結果が得られ、  
分析データの評価および構造解析を判断する一助となります。

$^1\text{H}$ NMR データだけでなく、 $^{13}\text{C}$ 、2D HSQC、MS 等のデータを含めて  
Verify を実行することで、より精度の高い評価結果を導きます。







## Mnova DB

NMRをはじめとした MS/LC/GC の分析データなどを構築することができ、必要なデータを効率的に保存、共有、検索できる機能を備えたデータベースです。

構造式全体、部分構造、特定のピーク位置、マルチプレット等の種々の検索条件で容易に得たいデータへアクセスできます。

検索結果を数種類のフォーマット、ウェルプレート、レコードビューで閲覧することができます。長年、蓄積してきたレガシーデータの取り込みも可能です。

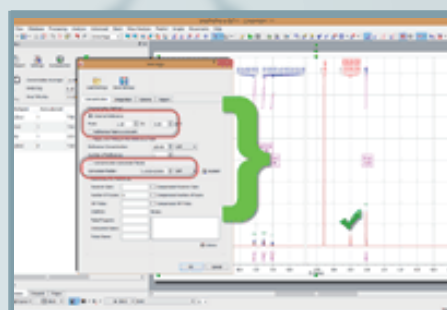


## Mnova qNMR

定量 NMR 分析を行った結果（濃度、純度、感度係数）を簡単・迅速に得ることができます。

豊富な設定パラメータを備えており、最適な解析パラメータをユーザ自身で選択することができます。標準操作手順を設定することで、解析者による結果の違いを無くし、均質良好な解析結果が得られます。

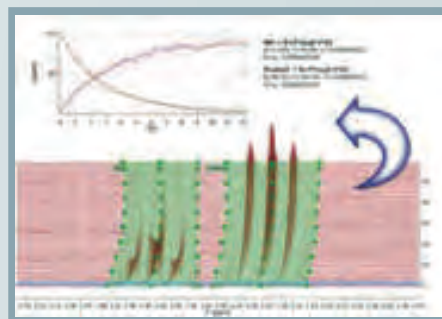
エキスパートが作成した解析パラメータ・解析条件をテンプレートとして保存し共有することで、初心者もエキスパートと同じ品質で解析が可能です。



## Mnova RM

リアルタイムで反応追跡 (Real time Monitoring) が行え、化学反応速度曲線を得ることができます。

NMR データの収集と同時に、反応基質と反応物の濃度結果がプロットされ、カーブフィットで化学反応速度曲線を瞬時に得られます。リアルタイム反応追跡の設定プロセスガイドは、非常にシンプルでエキスパートでなくても時間を要することはありません。



## Mnova Screen

リガンドスクリーニング NMR データのための最先端の自動解析ツールで、WaterLOGSY, STD, T1rho, CPMG などの効率的な分析が可能です。

弱いシグナルであっても、デコンボリューションにより効果的にピークピッキングが行われます。

実装されているパターン認識アルゴリズムは実験データをマッピングし、結果ビューアで迅速かつ効率的にヒット結果を確認することができます。

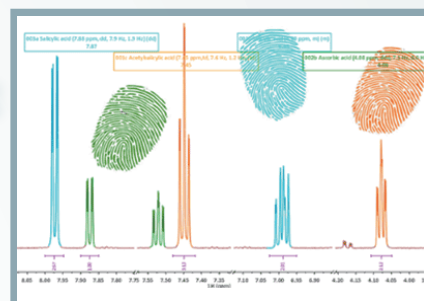
また、良好な解析結果を提供するために、複数のデータセットにおいて自動的にスペクトルの整列・正規化を行います。





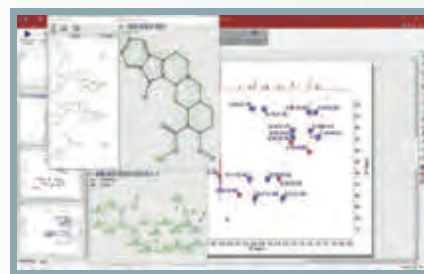
## Mnova SMA

化学シフト範囲積分に基づいて混合物解析 (Simple Mixture Analysis), 混合物成分の定量を行う多用途機能プラグインです。  
 ファインケミカルでの不純物、科学捜査、体液、食物、栄養補助食品、化粧品、食用油、ワイン、強化アルコール飲料、フルーツジュースなどの混合物におけるターゲット化合物の濃度・純度決定を自動化します。  
 解析手法は高い自由度でカスタマイズすることができます。



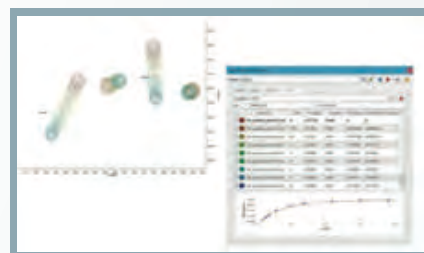
## Mnova Structure Elucidation

実測の 1D,2D NMR スペクトルデータから候補化合物を生成・推定することが可能です。  
 実装されているワークフローに沿って直感的に操作することができ、構造解析のエキスパートでなくても結果にたどり着けます。  
 ピークピッキング情報から構造式を組み立てる構造エンジンは高精度の結果が得られると高い評価をいただいています。



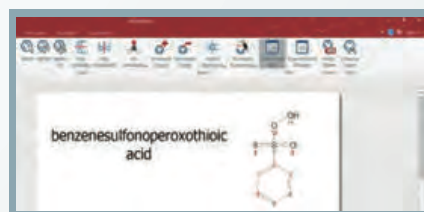
## Mnova Binding

創薬のための化学シフト摂動解析プラグインです。  
 2D HSQC タイプのタンパク質-リガンド滴定スペクトルを自動処理し、ピークの動きを追跡することで複数ピークの Kd を計算する強力なツールです。  
 自動ピーク追跡および化学シフト摂動測定を配位子の濃度に当てはめて Kd を計算します。  
 複数の 2D HSQC スペクトルを処理およびスタックするツールを実装しており、各スペクトルを異なった色で表示し、視覚的に認識しやすくしております。



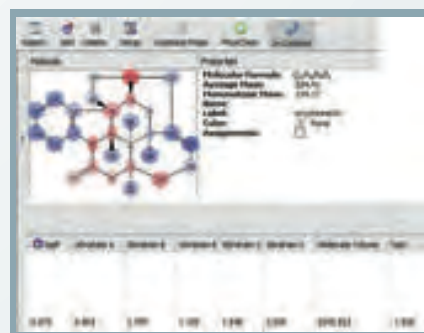
## Mnova IUPAC Name

構造式から IUPAC 名を生成することができ、有機化学者に大変有益なプラグインです。  
 Mnova 内に描画されたあらゆる構造式でも、このプラグインのコマンドを実行するだけで IUPAC 名を生成することができます。



## Mnova PhysChem

構造特性予測を行うことができるプラグインです。  
 構造式を Mnova 内で描画またはインポートし、コマンドを 1 クリックするだけで log P、log S、log D、沸点、融点、蒸気圧 等々の物性値を予測することができます。





## Mnova ELViS

紫外および可視 (UV / Vis)、近赤外および中赤外 (NIR / MIR)、ラマン、蛍光など様々な光学分光データを視覚化、処理、分析、およびレポート出力まで行えます。

プロセッシングテンプレートを使用することで限りなく解析の自動化を行うことができます。

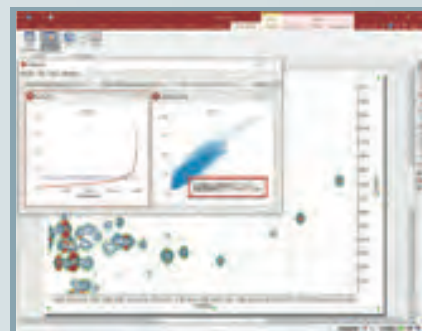


## Mnova BioHOS

モノクローナル抗体などの生物治療薬の NMR 解析用に設計されています。

参照サンプルの 2D NMR スペクトルは、フィンガープリンティングまたはスペクトル類似性の決定を使用して、各テストサンプルのスペクトルと比較されます。PCA(主成分分析), ECHOS(高次構造の比較), CCSD(複合化学シフト差)を用いて解析が実行されます。

2D NMR スペクトルデータを使用した生物製剤の品質評価に最適です。



## Mnova StereoFitter

NMR スペクトルを使用した 3D 立体配座および配置解析のための高度なツールです。

さまざまな形式の NMR 実験データ入力に基づいて、3D 構造配置および / または立体配座の確率を計算します。

最適な 3D 構造候補を得るために、NOE、RDC、J、および化学シフトの 4 つの異なるタイプの入力を用いて計算が実行されます。



## Mbook

化学者による化学者のための電子実験ノート

Mbook が選ばれる理由

1. 科学者によって設計、開発、テスト済み
2. Web ベース - IT インフラは不要
3. データベースに用意された 2500 以上の化合物
4. Mnova の機能を使っでのデータ解析
5. 化合物とサプライヤーの在庫管理
6. 実験の署名と承認のための使いやすいワークフロー
7. Mnova と同等のサポートとイノベーションサービスを提供
8. 他の電子実験ノートからのデータ移行サポート \*
9. サードパーティアプリケーションと容易に統合
10. 化学物質を管理するためのユーザー設定可能なストックルーム
11. 研究部門や製造部門に最適
12. NMR と MS による自動構造検証

\* 詳細はお問い合わせください。





# パッケージ表

個別にプラグインをご購入いただくより、パッケージでのご購入の方がお安くお求めいただけます。

|                       | Suite | Suite Chemist | Suite Expert |
|-----------------------|-------|---------------|--------------|
| NMR                   | ○     | ○             | ○            |
| MS                    | ○     | ○             | ○            |
| EIViS                 | ○     | ○             | ○            |
| NMR Predict           | ○     | ○             | ○            |
| qNMR                  | —     | ○             | ○            |
| Verify                | —     | ○             | ○            |
| IUPAC Name            | —     | ○             | ○            |
| RM                    | —     | —             | ○            |
| MyData                | —     | —             | ○            |
| SMA                   | —     | —             | ○            |
| Structure Elucidation | —     | —             | ○            |

## 仕様

対応 OS (2020.01 現在)      Windows： Windows 8 以上      Mac： Mac OS X 10.8 以上  
Linux： DebianWheezy,OpenSUSE 12.3 and 13.1, Fedora 20, Ubuntu 12.04 and 13.10,  
Red Hat Enterprise 5 or 6Mageia 3.0      ( 詳細はお問い合わせください )

### 対応ファイルフォーマット

NMR:  
Bruker Aspect 2000/3000, Bruker UXNMR/XWIN-NMR, Bruker WinNMR, GE/Nicolet, Galactic(\*.spc), JEOL Alice (.als), JEOL Delta, JEOL EX/GX, JEOL Fastflight (.fft), JEOL Lambda (.nmfid,.nmdata, .nmf, .nmd), Magritek Prosipa (\*1D, \*2D), Old Gemini, SIMPSON, Siemens Magnetom Vision, Tecmag (.tnt), Varian Gemini/VXR from VHelper, Varian VNMR, VARIAN/Chemagnetic Spinsight(data), Philips Achieva, Siemens Syngo.

Other NMR formats:  
ASCII (.txt), Mnova (.mnova), ZIP (.zip), MestReC (.mrc), NUTS Type 1-3, SwaN-MR, JCAMP-DX (.jcamp, .dx, .jdx, .jcm), ACD-Labs (1D), Int 32 WinNMR, LCModel ASCII, Sparky 2D

MS: Windows  
Agilent – ChemStation, MassHunter, Ion Trap      Bruker – Xmass, Compass and Daltonics  
Waters – MassLynx      Thermo Scientific – Xcalibur      mzData and mzXML      JEOL – MSQ 1000, FastFlight  
AB SCIEX – Analyst      AB SCIEX Data Explorer      Shimadzu      NetCDF ANDI-MS

MS: Mac / Linux  
Agilent – ChemStation      Bruker – XMass      FSU – Midas  
mzData and mzXML      Waters – MassLynx (Mac only)

## ライセンス形態

- ユーザ所属先      企業 or 教育機関 / 政府系機関
- ライセンス形式      固定 or フローティング
- ライセンス期間      永久 or 年間

固定ライセンス：  
登録ユーザの PC へ付与される Host ID に対して  
ライセンスファイルを発行  
フローティングライセンス：  
ネットワーク中のライセンスサーバでライセンス  
認証を行い、購入シート数だけ同時使用が可能

上記の組み合わせおよびライセンス数 ( シート数 ) に  
より価格は変動します。( 複数購入割引あり )  
詳細はリアクトまでお問い合わせください。

問い合わせ先

Mnova 日本国内販売元

株式会社 リアクト

〒 224-0032 横浜市都筑区茅ヶ崎中央 13-8 MT ビル 4F  
TEL : 045-567-6633  
URL : <http://www.react-corp.com>

Google

Mnova リアクト

Google 検索

 Mestrelab Research

chemistry software solutions

開発元

取り扱い販売店