

核磁気共鳴装置 一式

仕様書

令和1年9月
富山県立大学

仕様書概要説明

1. 調達の背景及び目的

2. 調達物品名及び構成内容

(調達物品名) 核磁気共鳴装置 一式
(内訳)

1 400MHz 核磁気共鳴装置

| | | |
|------|---------------------------------|----|
| 1-1. | 超伝導磁石 | 1台 |
| 1-2. | 分光計 | 1台 |
| 1-3. | 溶液用2重共鳴、3重共鳴切り換え型オートチューン5mmプローブ | 1台 |
| 1-4. | 固体NMRプローブ | 1台 |
| 1-5. | NMRデータシステム | 1台 |
| 1-6. | 液体窒素蒸発抑制装置 | 1台 |
| 1-7. | エアコンプレッサ | 1台 |

(搬入、据付、配管、配線、調整、耐震対策一式を含む。)

1. 400MHz 核磁気共鳴装置

1-1. 超伝導磁石 (400MHz)

- 1) 基準磁場強度は9.39テスラ以上であること。
- 2) 漏洩磁場が少ない磁気シールド機能を有すること。
- 3) 液体ヘリウム保持時間：365日以上であること。
- 4) 液体窒素保持時間：14日以上であること。
- 5) 漏洩磁場(SCM中心より0.5mT位置)垂直方向：1.0m以下であること。
- 6) 漏洩磁場(SCM中心より0.5mT位置)水平方向：0.5m以下であること。
- 7) 冷媒を入れた状態での運搬、輸送、据え付けが可能であること。
- 8) 試料管24本が搭載可能な固体・溶液共用の自動サンプル交換機構が付属されていること。

1-2. 分光計

- 1) プロトン共鳴周波数は400MHz以上であること。
- 2) 観測核種として ^1H 核、 ^{19}F 核、 ^{31}P 核~ ^{15}N 核、 ^{39}K 、 ^{109}Ag 核を測定できること。
- 3) X核の共鳴周波数範囲は20MHz~410MHzを含む範囲以上であること。
- 4) オフセットの周波数設定精度は0.001Hzステップ以下であること。

- 5) 切り替え時間は 20 ナノ秒以下であり、切り替え間隔は 5 ナノ秒以下であること。
- 6) 位相可変範囲は $0^{\circ} \sim 360^{\circ}$ で 0.005° ステップ以下であること。
- 7) 切り替え時間は 20 ナノ秒以下であり、切り替え間隔は 5 ナノ秒以下であること。
- 8) パルス出力 LF ($^{15}\text{N} \sim ^{31}\text{P}$) : 300W 及び HF (^1H 、 ^{19}F) : 100W 以上の出力が可能であること。
- 9) RF チャンネルは最低 8 チャンネル以上の RF ソース内蔵で最大 32 チャンネル以上の拡張ができること。
- 10) パルサーはマルチパルサー制御方式で各 RF チャンネルごとに専用パルサーを装備していること。
- 11) 室温制御シムが自動制御可能であること。
- 12) フィルターはデジタルフィルターであること。
- 13) 観測スペクトル幅は 10MHz 以上可能であること。
- 14) ホストコンピュータのハングアップ及びネットワーク障害時のデータ消失対策として、分光計内蔵コンピュータが装備されておりハードディスク物理容量が 320GB 以上であること。
- 15) 温度可変装置の温度可変範囲は $-170^{\circ}\text{C} \sim +250^{\circ}\text{C}$ であり、 $+80^{\circ}\text{C}$ 以上の測定でも窒素を使わずに圧縮空気が使用出来ること。

1-3. 溶液用 2 重共鳴、3 重共鳴切り換え型オートチューン 5mm プローブ

- 1) 試料管径 : 5mm であること。
- 2) 観測核 : ^1H 、 ^{19}F 、 $^{15}\text{N} \sim ^{31}\text{P}$ 、 ^{109}Ag 、 ^{39}K 核が可能であること。
- 3) 照射核 : ^{13}C 観測 ^1H 、 ^{19}F 同時照射可能であること。また ^1H 観測多核種照射及び多核観測 : ^{19}F 照射可能であること。
- 4) 2 重共鳴、3 重共鳴モードが自動で切り替え可能であること。
- 5) NMR ロック核 : ^2H 核であること。
- 6) スピニングサイドバンド : 1% (^1H 核) 以下であること。
- 7) 感度 (S/N) ^1H 核 : 500 (0.1% エチルベンゼン、1 スキャン) 以上であること。HFX モード : 250 以上であること。
- 8) 感度 (S/N) ^{19}F 核 : 550 (0.05% TFT、w/o デカップリング 1 スキャン) 以上であること。HFX モード : 380 以上であること。
- 9) 感度 (S/N) ^{13}C 核 : 210 (10% エチルベンゼン、1 スキャン) 以上であること。
- 10) 温度可変範囲 : $-100^{\circ}\text{C} \sim +150^{\circ}\text{C}$ 以上であること。
- 11) 磁場勾配強度 : 10A 磁場勾配電源で 30G/cm 以上であること。
- 12) オートチューン機構 : ^1H 核、 ^{19}F 核及び $^{15}\text{N} \sim ^{31}\text{P}$ 核の自動チューニングマッチ

ング調整、核種切換え、2重共鳴、3重共鳴切り替え等、合計6個以上のコントロール機構を有すること。

1-4. 固体 NMR プローブ

- 1) 観測核種は ^1H , ^{19}F , ^{31}P , ^7Li , ^{11}B , ^{23}Na , ^{27}Al , ^{13}C , ^{79}Br , ^{207}Pb , ^{29}Si , ^6Li , ^{15}N 核が測定できること。
- 2) 感度： ^{13}C 核 S/N 120 以上であること (HMB ^{13}C 8 scans で規定)。
- 3) 試料回転数は 22KHz 以上であり、ホストコンピュータからの制御で任意の回転数設定が可能なこと。
- 4) 温度可変範囲は -60°C ~ $+150^\circ\text{C}$ の範囲でコンピュータ制御にて自動可変できること。
- 5) 固体・溶液共用オートサンプルチェンジャーを用いてサンプル交換可能なこと。
- 6) 混合試料解析法である ROSY が搭載されていること。
- 7) 溶液と共通のオートチューニングが可能なこと。

1-5. NMR データシステム

1-5-1 分光計内蔵制御コンピュータ

- 1) CPU は(米)Intel 社製 E3-1220 3.10GHz 相当以上の処理速度を有すること。
- 2) メモリーは 2GB 以上、ハードディスク物理容量は 320GB 以上を有していること。

1-5-2 NMR ホストコンピュータ

- 1) CPU は Intel® Xeon® W-2102 プロセッサー (2.9GHz) 相当以上の処理速度を有すること。
- 2) メモリーは 8GB 以上、ハードディスク物理容量は 500GB 以上を有していること。
- 3) OS は Microsoft 社製 Windows10 相当以上の性能・機能を有すること。
- 4) AD 変換器は分解能 16 ビット以上であること。
- 5) カラー液晶モニターは対角 23 インチ以上で、JIS 規格準拠キーボード、光学式マウスを有していること。

1-5-3 NMR データ処理ソフト

- 1) 各種 1 次元、2 次元 NMR データ処理機能を有していること。
- 2) 日本語マニュアルが NMR ホストコンピュータからオンライン参照出来ること。
- 3) 軽溶媒のまま全自動で分解能調整、軽溶媒消去、化学シフト補正が出来る機能を有すること。

- 4) 固体混合物分離測定：固体混合物の分離を緩和時間の違いを用い、逆ラプラス変換法により固体混合サンプルのスペクトル分離ができること。
- 5) 固体自動分解能調整：固体 NMR 測定時に Z3, Y, X2 軸の FG SHIMMING が自動で可能であり、分解能調整が数分で行える機能を有していること。
- 6) 解析用ソフトウェア：本体と同じ機能の解析用ソフトウェアが無償にてダウンロード可能なこと。また、無償にてバージョンアップも可能なこと。

1-6. 液体窒素蒸発抑制装置

- 1) 1日の窒素蒸発抑制能力が 8.5L/日以上であること。

1-7. エアコンプレッサ

- 1) 吐出し圧力：0.65–0.8 Mpa 以上のこと。
- 2) 流量：425L/分以上の能力を有すること

(性能、機能以外に関する要件)

1. 設置条件等

(1) 設置場所

本装置は、本学の指定する場所に設置すること。

(2) 搬入、据付、配管、配線、調整、耐震対策

装置の搬入、据付、配管、配線、調整、耐震対策については、本学の研究に支障をきたさないよう、本学の職員と協議の上その指示に従うこと。また、搬入の際には供給者が立ち会い、本研究所の施設に損傷を与えないよう十分な注意を払うように努め、必要があれば納入経路に養生等を施すこと。また、万一、本学の建物・設備等に損傷を与えた場合は、供給者の責任において、原状に復するものとする。

(3) 本装置に必要な耐震対策を実施すること。

2. 保守体制等

(1) 保守体制

通常の使用で発生した故障の修理及び保守点検を実施できる体制であること。

(2) 保証期間

納入検査確認後 1 年間は、通常の使用により故障した場合の無償修理に応じること。

3. 障害支援体制

障害時において復旧のため通報を受けてから 8 時間以内に電話等により障害へ

の対応ができる体制であり、48 時間以内に技術者を障害復旧のために派遣できること。(ただし、土曜・日曜・祝日に関する法律第 3 条に規定する休日、本学の指定する日及び年末年始(12 月 29 日～1 月 3 日)は除く。)

4. その他

教育体制

導入時教育訓練：本学の担当教員及び研究機器使用者に対する導入時教育訓練は 4 日間を 1 回、本学係員と協議のうえ行うこと。

ソフトウェア教育：ソフトウェアに対する教育は必要に応じて行うこと。

応用サポート体制

本学の担当教員及び研究機器使用者に対する最新技術の支援を本学係員と協議のうえ行うこと。