



# 500MHz核磁共振波谱仪

● AVANCE NEO 500M

## 核磁共振 NMR

核磁共振在广泛的应用范围内为完整分子的识别、定量和表征提供了无与伦比的视角。发展至今的布鲁克核磁共振系统更容易理解，使用和维护都更加简便。布鲁克的设计赋予核磁共振以更加尖端的性能和更加可靠的系统，这将增强实验室里使用核磁共振的信心。



# NMR 方法在化学领域的应用

NMR方法所提供的有关化学物质的丰富信息使其成为极好的检测与分析工具,在不同实验室、使用不同型号的仪器,都能获得具有一致性和重复性的结果。

## 1、化学品和石油化学产品

沸石分子筛是重要的多相催化剂,广泛应用于现代化工和石油化工领域。固体NMR方法可以用于表征多相催化剂的结构信息,并提供催化反应相关的分子结构和动力学信息。而液体NMR方法则在化妆品、香水、洗涤剂、杀虫剂等低分子量化学品研究方面发挥重要作用。

另外,液体NMR方法还可以进行高分子液晶的结构与取向性研究、高分子涂料的结构与功能研究等。而固体NMR方法则作为研究固体材料的有力工具,可以用于揭示电池材料、金属有机框架材料、半导体材料、纳米管/线等功能材料的结构与动力学特性。

## 2、材料化学

从聚合物到液晶再到建筑材料,NMR方法已经被用来研究多种材料的结构和分子动力学。NMR方法能够检测聚合物的微结构,包括聚合物立体化学、区域异构、分支和缺陷,还可以从不同时间尺度研究聚合物的链动力学。



# NMR方法在生命科学方面的应用

布鲁克独特的技术系统和分析方法推动生命科学的快速发展与创新

## 生物大分子结构与功能研究

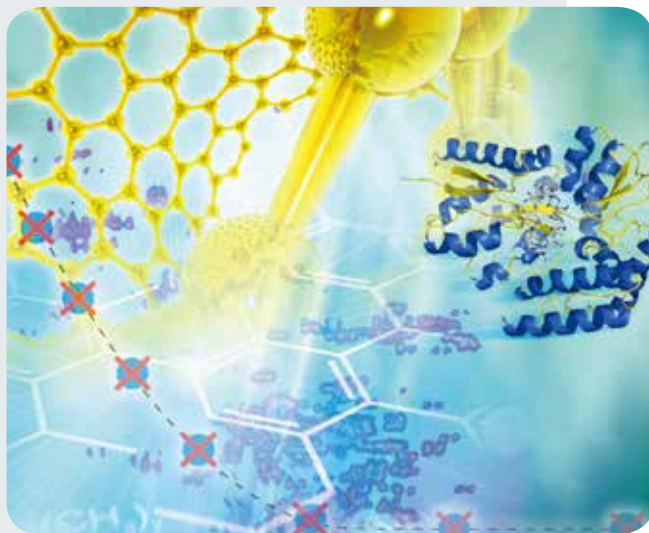
NMR方法可以对蛋白质、核酸、以及蛋白质或核酸复合物进行结构测定与功能研究。这些研究可以揭示各种疾病或正常的生理过程。

生物制药,如单克隆抗体(mAb),可以治疗多种癌症、肿瘤和其他恶性疾病。准确描述这类蛋白质的高阶结构(HOS)是治疗的关键。

布鲁克和Mestrelab联合推出的BiologicsHOS软件为生物制药研究中分析蛋白质的HOS指纹建立了一个有效的工作流程。

同时,NMR方法是鉴别固有无序蛋白(IDP)的最佳方法之一,布鲁克提供的GHz级的超高场NMR谱仪可以用于IDP在生理条件下的结构、功能与动力学研究。

而魔角旋转固体NMR方法无需将蛋白质结晶或溶解,即可进行原子分辨率的三维结构鉴定与动力学研究,以及蛋白质分子与其它分子间的相互作用研究。



## 代谢组学的研究

代谢组学旨在对细胞、组织或有机体中的所有小分子进行全面的定性和定量分析,以研究内在和外在因素的相互作用。

NMR方法能够检测、识别和测量整个代谢组学化学空间的代谢分子,通过一维质子核磁谱图(1D  $^1\text{H}$  NMR)提供独特的化学指纹,反映细胞生理状态的基本功能信息。

布鲁克的AssureNMR系列软件可以准确、高效地评价复杂混合物,例如生物液体、培养基、生物制剂。

靶向指纹识别可以对关键代谢物进行匹配和定量,并通过访问大型公共数据库加强对关键代谢物的鉴定。

另外,布鲁克的InsightMR系列产品,可以用于监控化学和生物过程,提高对反应机制、细胞代谢物形成等过程的理解。

## NMR 方法在制药行业的应用

NMR的定量属性及谱图中包含的详细结构信息,可以用于制药行业、生物技术、仿制药和CRO。布鲁克提供的强大的NMR技术组合,可以为支持制药业的实验室增强信心,加快将产品推向市场的步伐。

### 1、先导物的快速发现

布鲁克先进的NMR方法能够从数以千计的化合物中快速鉴定合适的候选药物,以出色的命中率鉴定先导物。布鲁克基于片段的筛选工具FBS使用配体化合物库对靶点蛋白质进行考察,以确定哪种配体(若有)与此特定蛋白质具有较强的结合力,从而确定先导物。

### 2、完整的分子结构与定量测定方法

NMR方法在药物研发中可以对原材料、活性药物成分(API)、配方产品或生物样品中的新杂质、降解物和代谢物进行识别、表征和验证,从而进行化合物的结构确定、含量分析及杂质鉴定等研究。

固体NMR方法还可以确定API的多晶型现象,并对其进行稳定性研究。NMR方法的定量属性,能够直接定量检测液态和固态样品,为执行质量控制、合成控制或确定合成产量等提供快速的实时量化解决方案。

布鲁克的CMC系列软件可以批量采集数据,自动处理与分析NMR谱图中的海量信息,而嵌合在自动化采样IconNMR软件中的效价测定工具则为药物质量的测定提供理想方案。

### 3、便捷的 GxP 资质认证服务

NMR是一种全世界所有制药公司都采用的成熟的分析方法。随着市场的要求和监管力度的提高,越来越多的NMR仪器需要在GLP和GMP环境中工作。布鲁克提供的“GxP readiness kit”服务,由合格的工程师帮助用户创建和安装资质验证协议,证明设备和系统在合格范围内,用户按照特定流程生产的产品符合其预定的规格和高安全性的质量特征,能够满足生产的有效性和可重复性。



## NMR 方法在环境科学方面的应用

NMR方法是研究复杂系统的灵活工具,可以用于探索各种环境问题,有助于观察污染的影响和补救方法的有效性。如通过检测生活在污染环境下的生物体的代谢物,从而说明环境污染对生物体的影响;评估采用铁氧化剂处理土壤和地下水中的四氯乙烯和三氯乙烯的可行性;检测未经处理的原位试样,确定天然丰度条件下海洋、湖泊和河流的物质,提供有关环境真实状态的缩影;跟踪<sup>13</sup>C标记的种子萌发后,识别出生长过程中的一系列结构和代谢变化等等。

NMR方法可以追踪各种污染物经历一系列不同环境(空气、水、土壤)和相态(液态、凝胶、固态)的过程,这种综合的多相NMR方法甚至可以凭借追踪生物代谢的能力,更深入地了解诸如气候变化等更微妙的应激源所带来的影响。NMR方法在生物体内和原位研究方面的能力使其成为环境科学家不可或缺的工具。



## 更加环保的 ASCEND 磁体

Ascend 磁体采用先进的超导技术,支持设计得更小的磁体线圈,从而显著减小物理尺寸和杂散磁场。因此,Ascend磁体更易于选址安放、运行更安全、运行成本更低。凭借尖端超导线材技术和磁体设计,可实现强大、稳定并且非常紧凑的Ascend 磁体从400 MHz 到 1.2GHz的覆盖。布鲁克对电磁干扰抑制 (EDS) 技术进行了改进,使 Ascend磁体成为颇具挑战性的城市环境和空间受限的实验室的理想选择。



### 1、稳定的主磁场

- 焊接技术确保最低磁场漂移率,从而实现出色的磁场稳定性
- 外部干扰抑制 (EDS) 可以屏蔽掉高达99%的外部磁场干扰
- 最小的杂散磁场

### 2、更低的运行成本

- 液氮消耗 < 13mL/h;
- 在配置了超低温探头时,可选择配置布鲁克智能氮气液化器(BSNL),可以不必再每周补充液氮,可为您节省了5%的正常工作时间,且不用花费额外的维护费用!

### 3、自动化和兼容性表现俱佳

借助可选配的SampleCase™和Sample-Mail™配件,更换样品的操作现在变得容易得多。

Ascend磁体与近期推出的布鲁克NMR探头、波谱仪、自动化配件和软件兼容,可以组成高性能的集成式 NMR 系统,用于结构生物学、小分子和材料研究等应用领域。

## AVANCE NEO 机柜

AVANCE NEO 是一款真正一体化的 NMR 平台,可以满足从高分辨到固体波谱和微成像的所有应用,绝大多数附加功能都可以轻松添加到 AVANCE NEO 配置中,从而为未来发展提供最佳的灵活性和可能性。您的 AVANCE NEO NMR 波谱仪可用于任何常规或高端 NMR 实验。它完善的性能和能力为未来 NMR 发展提供了很大空间。此外,AVANCE NEO 是一种嵌入式采集服务器和相关客户端服务器软件体系结构 (TopSpin 4 和更高版本) 的新概念。这使波谱仪独立于客户端计算机,从而让用户可以选择不同操作系统和不同位置来控制系统 (例如人们可以通过云来控制系统)。



## 1、多核多通道同时接收

AVANCE NEO NMR采集系统基于完全模块化和高度集成的射频(RF)收发原理。每个NMR通道(TRX1200收发器)都包含一个完全自主的、独立的脉冲编程器、发射器和接收器。这实现了非常稳定和准确的RF脉冲发生以及高动态无假信号NMR探测,进一步扩大了动态范围。设计优良的先进外差接收器与以往的技术相比,噪音减少了近50%。因此,即使在接收器增益极低的情况下,也可达到最高灵敏度。

## 2、观测核与去偶核之间的互不干扰

TRX1200上的接收器将1.852 GHz的高中频(IF)技术用于NMR信号发生和探测。这可以使本机振荡器(LO)窗口不会产生噪声和去偶泄漏方面的问题。利用这种架构,在任意NMR场强下,观测核与去偶核均不存在干扰。

## 3、增强杂核灵敏度

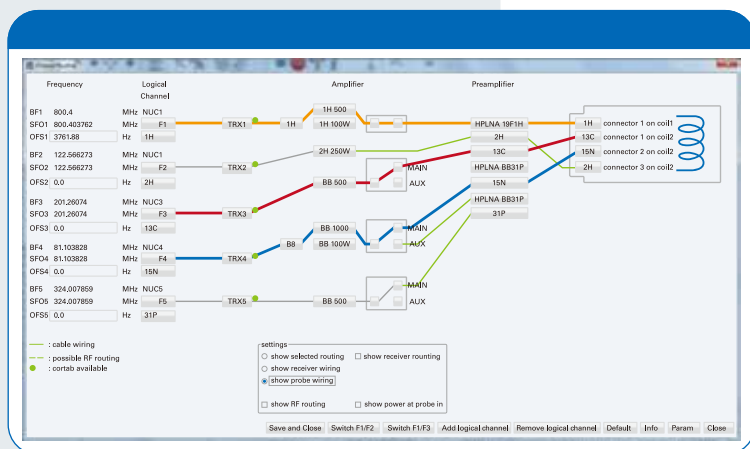
数十年来,GaAs晶体管一直与1H前置放大器配合使用,为1H提供了最佳灵敏度。低 $\gamma$ 核用前置放大器,例如,13C、2H、15N等,现在也开始采用GaAs晶体管技术,通过搭载RT探头它的灵敏度增加了6%-8%。相应地,样品检测通量也提高了15%。得益于2H前置放大器灵敏度的增强,即使在实验时使用少量的氘代溶剂以及实验室暴露于外磁扰动(有轨电车、电梯等)的情况下,依旧可以增强磁场的稳定性。

## 4、能实现任意高低频核组合的射频放大器

新型全宽带RF放大器(BLABB)采用的最新RF功率晶体管技术可提供范围在15MHz-600MHz的高射频功率。结合1H射频放大器,更大的带宽实现了1H/19F或其他低 $\gamma$ 核的任意组合。不仅如此,即使在搭载了宽带探头的两通道系统,1H和19F实验也可在独立的RF通道同步进行。

## 5、先进的温度控制系统

新型SmartCooler是适用于布鲁克NMR探头的布鲁克新型VT气体预处理装置,结合了新型SmartVT,可以非常准确地监测和控制NMR样品温度,使NMR结果不受实验室温度波动影响,如实验室气源和实验室每天的温度波动。



Transceiver architecture design → 1 transmitter + 1 receiver  
1 to 1 relationship between channel, amplifier, preamp and coil and receiver

# 探头

布鲁克能够对几乎所有应用提供最高性能的室温探头。如您有特殊的实验需求，布鲁克乐意与您保持沟通，并提供定制探头服务。

## iProbe: 新一代的常温探头

拥有市面上同类型探头最高的灵敏度，同时高集成化的探头内部构造使得接口更少，使用过程也更为简便，自动调谐功能可用于所有通道，从而实现全自动化。

## iProbe BBO

这是一款双共振的NMR探头，能够满足绝大多数有机、制药、分析检测等领域的使用需求，iProbe BBO可观察到从 $^{31}\text{P}$ - $^{199}\text{Hg}$ 和 $^{17}\text{O}$ - $^{109}\text{Ag}$ 范围内的任何原子核，可做 $^1\text{H}$ 对 $^{19}\text{F}$ 去偶及 $^{19}\text{F}$ 对 $^1\text{H}$ 去偶的实验。

## iProbe TBO

这是一款三共振宽带NMR探头，专用于制药、聚合物和生物科学中氟化化合物的检测。iProbe TBO可观察到从 $^{31}\text{P}$ 到 $^{15}\text{N}$ 范围内的任何原子核， $^1\text{H}$ 和 $^{19}\text{F}$ 可同时去偶，从而减少探头更换，且无需多个探头。iProbe扩展的 $^{19}\text{F}$ 不会影响异核，质子灵敏度几乎无损失。



iProbe TBO

## 固体探头

固体探头是各种无机以及生物固体样品的理想选择，适用于CP、双CP、MQMAS、REDOR、质子异核去耦及结合等实验。

### 布鲁克提供多样的固体探头选择：

## iProbe CPMAS

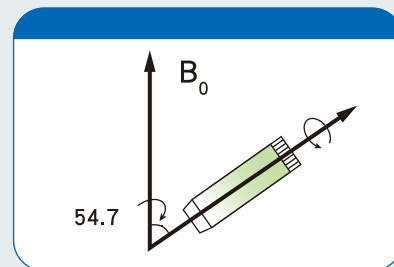
iProbe CPMAS 旨在支持全自动化 workflow，具有以下功能：自动魔角校准、自动调谐、固态魔角自旋 (MAS) 实验以及支持样品更换。iProbe CPMAS 自动提供真实、优化的结果。它可用于400、500和600 MHz 系统的 HX 通道配置。



## iProbe HRMAS

iProbe HRMAS 旨在支持全自动化 workflow，具有以下功能：自动魔角校准、自动调谐、魔角自旋 (MAS) 实验以及支持样品更换。iProbe HRMAS 自动提供真实、优化的结果。它可用于 400、500 和 600 MHz 的标准腔磁体。

- CP-MAS CryoProbe 固体超低温探头
- H/F/X CP-MAS 三共振固体探头
- H/X CP-MAS 双共振固体探头





## 超低温探头 CryoProbe™ 产品——灵敏度的艺术

过去十年内 CryoProbes™ 的发展显著增加了NMR灵敏度。灵敏度的跃升使得科学家对几年前认为样品量太少而无法观测的样品进行测试成为可能。

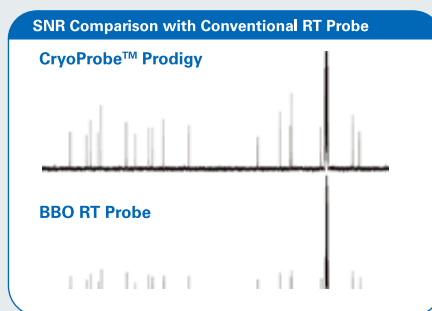
布鲁克提供了两种低温探头产品线:一个基于闭环循环的氦冷却器(CryoProbe), 另外一个为开环的液氮冷却系统(CryoProbe Prodigy)。CryoProbe检测线圈温度更低, 工作原理二者相同:

- 发射/接受线圈和调谐匹配电路维持在极低温度以降低源自导体中的电子随机热运动所致的噪音 (Johnson-Nyquist 噪音)。低温下, 纯金属的电阻进一步下降, 额外降低了噪音。前放、过滤器和发射-接收-转换也被冷却以提升电子器件的噪音指数。

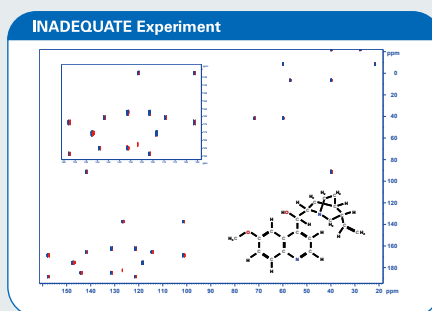
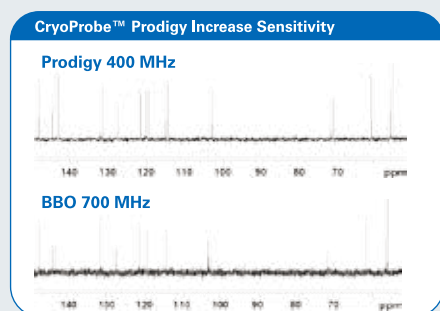
- 探头和电子降低的噪音增强了信噪比, 与常规室温探头相比, CryoProbe探头信噪比最多增加了5倍, CryoProbe Prodigy 增加了2到3倍。这很容易转化生产率的一个数量级提升。

对于两个平台, 自动降温、升温和定时由CryoPlatform系统一键操作。计时器使得执行这些功能可以在任意设定时间来进行, 不管用户是否在场。

尽管离低温探头的冷却区域只有1毫米, 样品依然能够在用户定义的温度下稳定。根据探头不同, 温度范围在-40°C到135°C之间。



Comparison of the <sup>13</sup>C-sensitivity of a standard BBO probe with the Cryoprobe Prodigy at 400 MHz. Sample: 50 mM quinine, 32 scans each.



INADEQUATE of 32 mg (100 mM) quinine in a standard 5 mm tube. Experiment time 16h.

### 布鲁克提供丰富的低温探头选择:

- 1H灵敏(反向)探头
- 三共振探头 (TCI)
- 带磷的四共振探头 (QCI-P)
- 带氟的四共振探头 (QCI-F)
- 1.7 毫米微量低温探头 TCI
- 三共振 Prodigy 探头 (TCI-prodigy)
- 杂核灵敏(正向)探头
- 固定频率双共振探头 (DCH, DUX)
- 用于高分子研究的双共振探头 (10 mm DUL)
- 双共振宽带探头 (BBFO, BBO)
- 三共振探头 (TXO)
- 双共振宽带Prodigy探头 (BBO Prodigy)

## 自动进样器

SampleCase™ 是一系列NMR自动化解决方案,让用户轻松、安全且方便地使用功能全面的NMR自动化系统。确保简单的随机存取自动化,无需台阶或梯子,只需简单地按一下按钮,即可手动插入和退出样品。此易于使用的系统几乎可装配到任何布鲁克NMR磁体。

其完全兼容于TopSpin™和IconNMR™软件,可添加到配有AVII或AVIII及以上机柜的任何现代化NMR仪器。SampleCase系列产品也可直接访问BST,因而兼容于MAS或CryoFit附件。



SampleCase可容纳24个样品

SampleCase可容纳24个样品。不仅确保在常规 NMR 系统上安全和方便地使用样品,而且是高场科研仪器的绝佳选择。

### SampleCase heated

SampleCase heated 版专用于聚合物研究,能够在高达 125°C 的温度下进行实验,从而使聚合物保持液态可供测量。

### SampleCase cooled

SampleCase cooled 版提供冰箱式样品储存平台,可储存对温度敏感的样品,比如,蛋白质、RNA或生物流体溶液,以供后续的自动化运行。

### SampleCase Plus

可容纳60个样品,提高了实验室吞吐率。

### SampleJet

SampleJet 采用了样品布局的现代行业标准——96孔板阵列,可为多孔板大小的NMR试管架提供5个位置。从而可容纳最多含480根样品管的批次。适用于不同尺寸的NMR样品管。其所用的样品管、盖子和架子都符合商业实验室环境及工具的要求(液体处理器、高压灭菌锅、冰箱等)。

## 样品在线监测附件



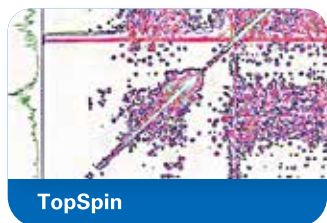
InsightMR 是专为通过 NMR 分析化学过程而设计的,是研究或优化反应的工业和学术科学家的理想解决方案。InsightMR的两个组件,流量管和专用软件,可在实际过程条件下实时在线监测化学反应。

Insightcell 基于现有的InsightMR技术,最初用于在线监测化学反应。流动单元和软件现在可以用于监测活细胞。

InsightXpress采用了新型的流动泵,是Insight产品线中速度最快的产品,是快速反应优化和反应监测的理想选择。

## 软件

随着核磁共振系统性能不断提升,获取大量且复杂的核磁数据的速度也变得越来越快。为了优化科研成果,准确而有效地获取并分析所有的数据是非常重要的。因此,复杂的核磁共振分析技术必须有足够强大的软件作为支撑。布鲁克致力于为用户提供最具创新性的核磁共振技术,其中就包括用于采集和分析核磁共振数据的最全面的软件解决方案组合。布鲁克所有的软件设计都是为了完善布鲁克提供的全系列核磁共振技术,从而产出精准、全面并可以解析的结果。



TopSpin

用于谱仪控制与核磁数据采集、处理和分析的软件。可以在谱仪工作站上连机使用,也可以在独立的工作站上使用 TopSpin 处理版,进行数据的处理与分析。



IconNMR

全自动采样和处理软件,配合自动进样器使用,可以进行高通量样本的数据采集与处理。



AssureSST

定期检测谱仪性能,用户可自定义检测样品和检测标准。



AutoCalibrate

全自动定期校准仪器的重要参数,包括90度脉宽、温度、匀场和定量实验参数,以获取高质量谱图。



SmartDriveNMR

智能采样工具,可以选择、设置和运行最合适的实验类型,并为小分子 NMR 确定最佳的实验设置。



CMC-assist

帮助进行常规的 NMR 数据分析,以进行谱图指认、结构验证、浓度测定和纯度评估。

<b>CMC-q</b>	批量采集和分析数据,以确定化合物的质量和浓度。
<b>CMC-se</b>	对许多不同的 NMR 谱图进行自动分析,与据此预测未知化合物的结构。
<b>TopSolids</b>	嵌合在 IconNMR 中的交互式用户界面,用以设置和运行固体 NMR 实验。
<b>bioTop</b>	嵌合在 IconNMR 中的生物核磁采样设置界面,用以提供实验指导和自动化设置。
<b>PotencyMR</b>	效价评定工具,可以用内标法自动化地测定化合物纯度。
<b>AssureNMR</b>	利用统计模型对混合物中的化合物进行交互式自动识别和定量。
<b>InsightMR</b>	在线监测化学反应和生物过程的实时采样和分析软件。
<b>FBS</b>	建立并运行基于片段的筛选实验,并提供一个易于手动分析数据的平台。
<b>Amix</b>	用于 NMR 和 LC-MS 数据的代谢组学分析,可以进行光谱基础管理。
<b>Dynamics Center</b>	动力学数据自动分析软件,可提供最终报告。

## 关于布鲁克 (Nasdaq: Bruker BRKR)

未来的发明基于当下的科学发现，布鲁克的使命在于通过革命性的技术和创新来支持科学界，从而推动科学研究向前发展。从高性能磁体、高效配件到新颖且精简的软件，布鲁克致力于投资新的解决方案来实现这些科学发现。

布鲁克的产品帮助科学家不断取得突破性进展，并开发出能够提高人类生活质量的全新应用。其高性能科学仪器以及极具价值的分析诊断解决方案，使科学家能够在分子、细胞和微观层面上对生命和物质进行探索。

通过与客户的密切合作，布鲁克致力于帮助实现创新、生产力提升以及客户成功，领域涉及生命科学分子研究、应用材料与制药行业应用、显微技术、纳米级分析、工业应用，以及细胞生物学、临床前成像、临床表型组学与蛋白质组学研究、微生物学和分子诊断。

更多信息，请访问：[www.bruker.com](http://www.bruker.com)



布鲁克 NMR 微信公众号

### 布鲁克（北京）科技有限公司

网址：[www.bruker.com](http://www.bruker.com)

E-mail:

[sales.bbio.cn@bruker.com](mailto:sales.bbio.cn@bruker.com)

布鲁克应用技术咨询:

400-898-5858

布鲁克售后技术支持:

400-898-1088

布鲁克(北京)科技有限公司

北京市海淀区西小口路66号中关村东升科技园B-6号楼C座8层

邮编:100192

电话:(010) 58333000

传真:(010) 58333299

上海办公室

上海市闵行区合川路2570号1号楼9楼

邮编:200233

电话:(021) 51720800

传真:(021) 51720810

广州办公室

广州市海珠区新港东路618号南丰汇6楼A12单元

电话:(020) 22365885/

(020) 22365886