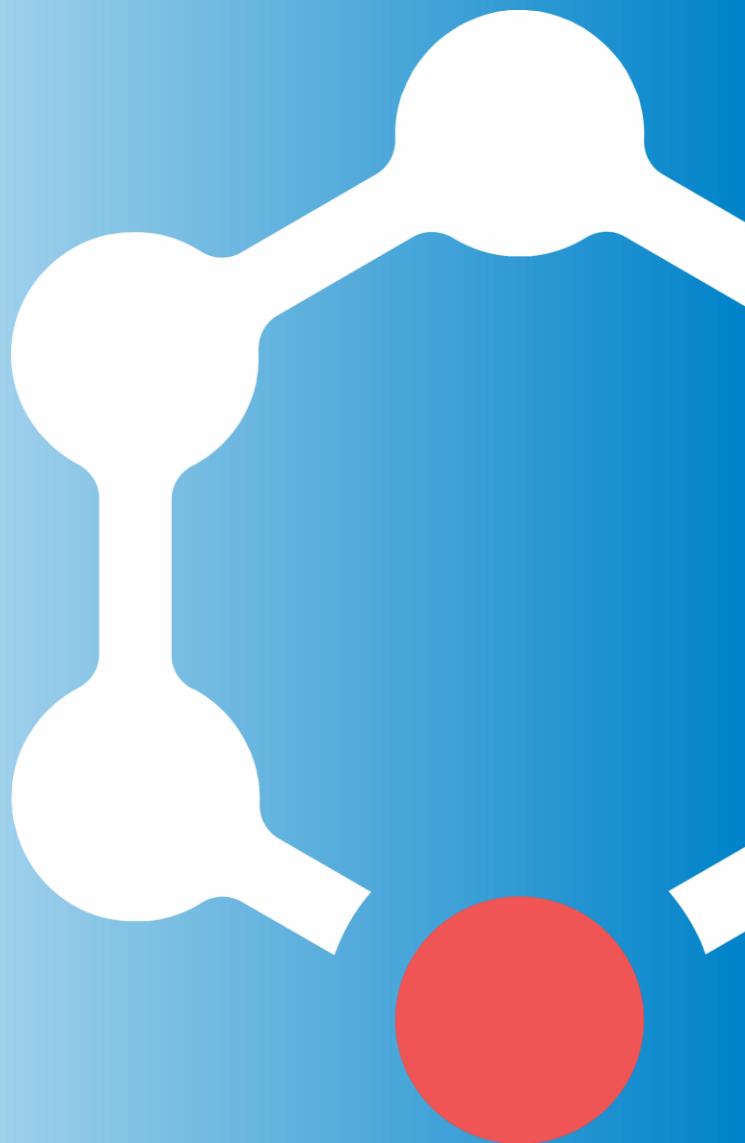




BrightSpec



構造解析と  
定量分析  
シンプルに



# 妥協のない構造的確実性

BrightSpecの分子回転共鳴（MRR）プラットフォームは、クロマトグラフィーや物理的標準物質、間接的な推論を必要とせずに、低分子化合物の構造特異的な同定と定量を直接的に実現します。

MRRは気相回転スペクトルを測定することで、分子固有の3次元フィンガープリントを提供し、化学者が類似した異性体を区別し、立体配置を確認し、揮発性化合物を確実に定量することを可能にします。



## BrightHubで計算を行う

### シミュレーションの標準化

MRRは、参照物質が利用できない場合でも構造同定を可能にします。BrightHubは、3次元分子構造の回転スペクトルをシミュレートし、画期的な構造確認手法を実現します。

BrightSpecが独自に開発したシミュレーションソフトウェア「BrightHub」は、回転スペクトルをシミュレートするためのシンプルで標準化された手法を提供します。専門知識は不要で、BrightHubからの結果をインポートするだけで利用を開始できます。

**Suitability for MRR**

Name	PubChem ID	Molecular Weight	Rotatable bonds	Quadrupolar Nuclei
Limonene (4-)	442917	136.234	1	0

**Submission Queue**

Action	Queue	Compound Name	Level of Theory	Submission Date	Status	Remaining Time
No results available						

**Calculation Results**

Action	Compound Name	Level of Theory	Submission Date	Status	Completion Date
<input type="checkbox"/>	Agilent	Level One	2024-10-29 13:44	Finished	2024-10-29 16:30
<input type="checkbox"/>	2-Chloro-4-hydroxypentanoic acid	Level One	2024-08-07 14:27	Finished	2024-08-07 14:30
<input type="checkbox"/>	Propylene Glycol	Level One	2024-04-16 16:42	Finished	2024-04-16 17:29
<input type="checkbox"/>	Agilent	Level One	2024-04-15 15:07	Finished	2024-04-15 21:38
<input type="checkbox"/>	Butene	Level One	2024-04-04 19:07	Finished	2024-04-09 09:33
<input type="checkbox"/>	Agilent	Level Two	2024-04-04 19:04	Finished	2024-04-04 21:35
<input type="checkbox"/>	Agilent	Level One	2024-01-11 14:32	Finished	2024-02-09 01:20

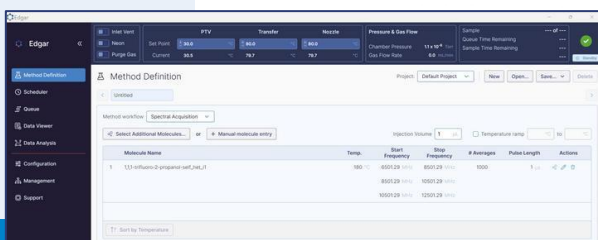
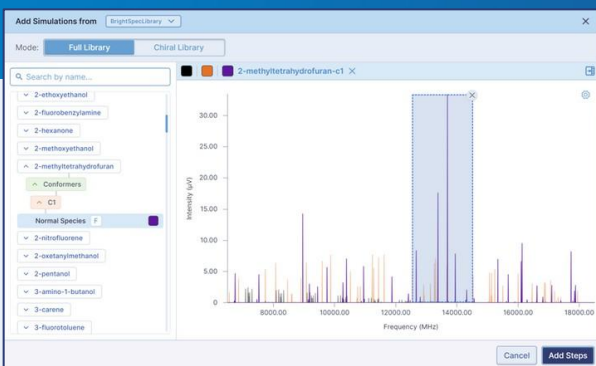


## Edgarで解決

### シミュレーションからスペクトルまで、手軽に

当社の取得・解析ソフトウェア「Edgar」を使えば、わずか数回のクリックでシミュレーションから試料の解析結果へと進むことができます。Edgarは、測定法の開発、試料の解析、スペクトルのフィッティングを自動化するため、MRRは現代の分析化学において真に拡張性の高いソリューションとなっています。

新規構造の同定から、BrightSpec独自のライブラリを用いた解析まで、Edgarはお客様の分析上の課題を解決するための包括的なワークフローを提供します。



# spectraMRRのご紹介

## 包括的な定量分析と確実な構造同定

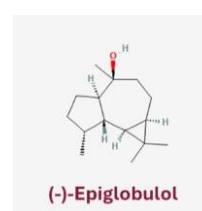
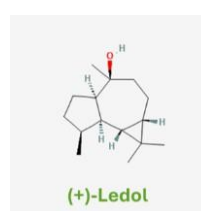
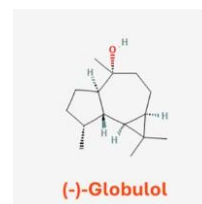
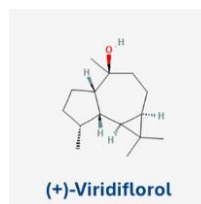
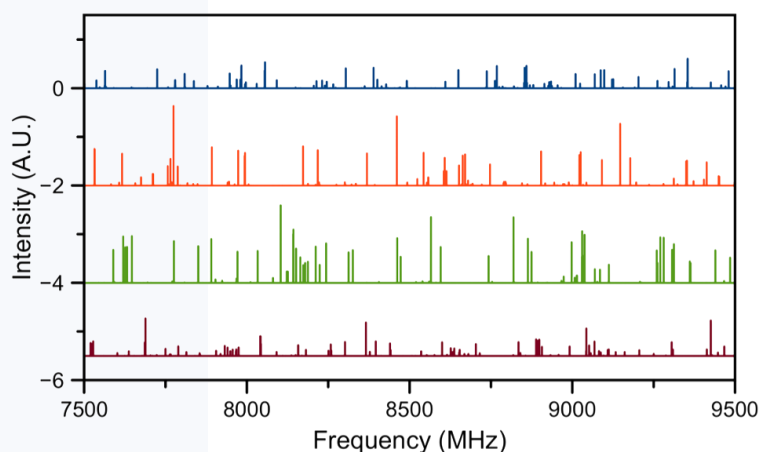
複雑な混合物や未知の物質を扱う科学者たちは、確信を持って構造同定や定量分析を行える、単一でシンプルなワークフローを欠いていることがよくあります。

当社の最上位機種であるspectraMRRは、混合物対応の定量分析に加え、確実な構造同定を可能にします。分析上の難題の解決であれ、合成結果の検証であれ、spectraMRRはスケールで使いやすいワークフローを通じて、データに対する絶対的な信頼を提供します。



- 構造IDおよびキラル分析
- 完全定量およびライブラリ構築
- BrightHub 量子化学パイプライン

医薬品 • 化学品 • 消費財



化学式が同一の立体異性体の構造特異的MRRスペクトル。三次元構造の違いにより、明確な回転指紋が生じ、分離や参照標準物質を用いずに直接的な識別が可能となります。

# isoMRR のご紹介

## 超精密定量およびキラル分析の効率化

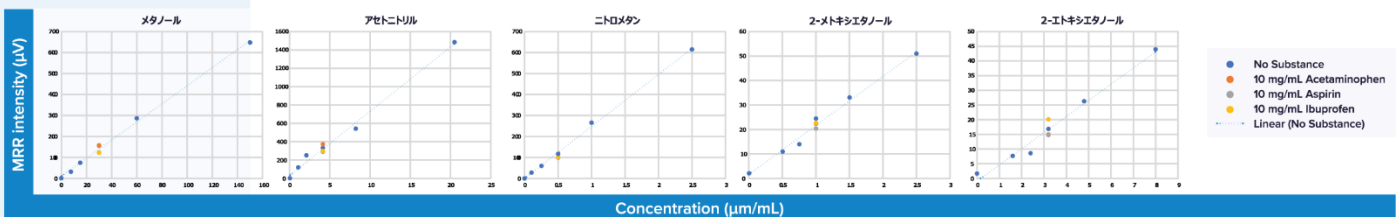
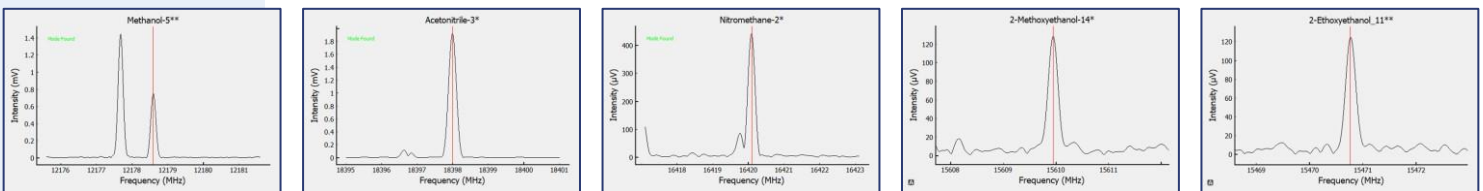
分析ラボでは、迅速かつ正確な化学定量分析やキラル分析を行うことへの圧力が高まっていますが、従来のワークフローの複雑さが作業の遅れを招いています。

isoMRRは、堅牢かつ高感度の化学物質定量を実現します。MRRの簡便性を基盤として、isoMRRプラットフォームは多様な化学物質クラスにわたる高度な定量機能を備えており、品質保証（QA）／品質管理（QC）やプロセス最適化に最適です。多忙な分析ラボにとって、性能と使いやすさの絶妙なバランスを実現しています。



- キラル比
- 完全定量およびライブラリ構築
- BrightHub 量子化学パイプライン

## 医薬品 • 化学品 • 消費財



構造特異的な回転スペクトルにより個々の残留溶媒を区別できる一方、濃度に対する信号応答が一定であることから、isoMRRを用いた分離不要の正確な定量が可能となります。

# nanoMRRのご紹介

## 高精度分子分析のためのコンパクトなソリューション

ホルムアルデヒドのような、分子量が小さく揮発性の高い分子の測定は、分析上困難を伴います。従来の方法は、多くの場合、誘導体化、間接検出、あるいは複雑な試料前処理に依存しており、それによって不確実性、時間的負担、および操作上の負担が生じます。

nanoMRRは、MRRの中核となる性能を、特定の用途向けに設計されたコンパクトで使いやすいプラットフォームに凝縮しています。構造特異的な回転シグナルを直接測定することで、nanoMRRは、クロマトグラフィーや標準試料を用いることなく、複雑なマトリックス中の微量で揮発性の高い分子を確実に検出・定量することを可能にします。

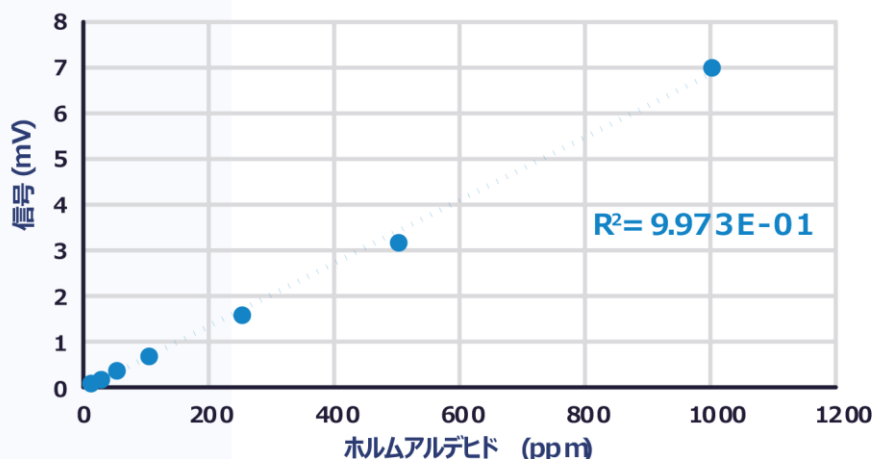
nanoMRRはあらかじめ構築されたライブラリを活用しており、動作にBrightHubを必要としません。



### • 主要分析対象物質の定量

医薬品 • 化学品 • 消費財

ホルムアルデヒドの投与量反応

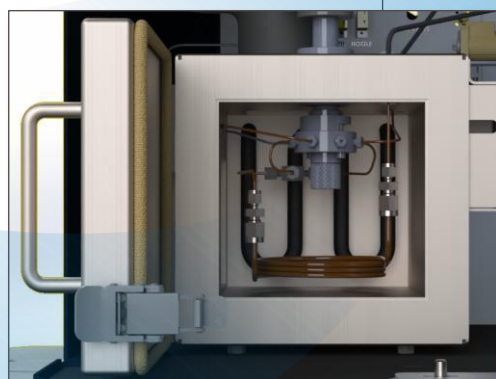


nanoMRRは、ホルムアルデヒド検出のための強力かつ柔軟なソリューションを提供します。直接試料注入により15 ppmから1000 ppmの範囲で直線的な応答を示し、ワークフローを効率化し、操作の複雑さを最小限に抑えます。nanoMRRは、ホルムアルデヒドの定量手法に新たな基準を打ち立てます。

# なぜ「SpectrAline™」なのか

SpectrAline™ カートリッジは、分子回転共鳴（MRR）分光法のパイオニアである BrightSpecと、カラム技術の世界的リーダーであるRestekとの戦略的技術提携を通じて開発された、精密に設計された消耗品の新たな製品群です。

spectraMRR™ および isoMRR™ プラットフォーム向けに特別に設計されたSpectrAline カートリッジは、MRRにおける試料導入の概念を一新し、揮発性化合物の捕捉、濃縮、および測定領域への制御された移送を向上させます

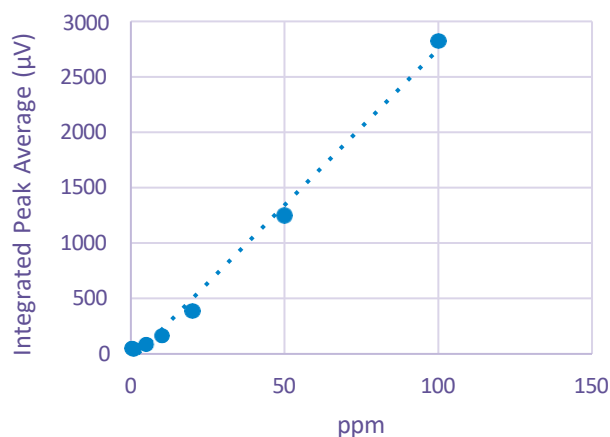


Restekの揮発性物質の選択的捕捉に関する専門知識と、BrightSpecの構造特異的（MRR）検出技術を組み合わせたSpectrAline™カートリッジにより、以下のことが可能になります：

- **重要な箇所を高感度を実現**
- **マトリックスとの互換性の拡大**
- **ワークフローの簡素化**

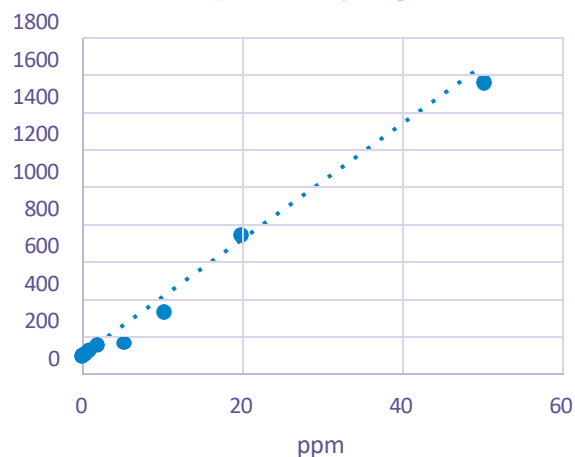
# アプリケーション

## エチレングリコール



Linear Range: 5-100 ppm  
Linearity: >0.99  
LOQ: 5 ppm

## エチレンオキシド



Linear Range: 0.5-50 ppm  
Linearity: >0.999  
LOQ: 500 ppb

## 定量と分子同定が簡素化されました

TM

MRRの独自の分子特異性とSpectrAline<sup>TM</sup> カートリッジを組み合わせることで、複雑なマトリックス中でも分析が困難な対象物質を定量することが可能となり、誘導体化の必要もなく、曖昧な結果も生じません。



食と信頼性



揮発性有機化合物



不純物分析



構造の同定

当社のBrightSpec MRR製品ファミリーは、それぞれ異なる特長と対象用途を持つ3つの装置で構成されています。学術機関、製薬会社、化学メーカー、消費財メーカーの化学者たちは、BrightSpec MRRを活用することで、従来のワークフローに比べてわずかな時間で、複雑な混合物中の分子を同定・定量を可能にしています。

仕様	nanoMRR	isoMRR	spectraMRR
質量範囲	<150 AMU	50 to 300 AMU	50 to 300 AMU
サンプリング	リキッド	リキッド、ヘッドスペース	リキッド、ヘッドスペース
キャリアガス	なし	ネオン	ネオン
パージガス	なし	窒素	窒素
参考ライブラリ	限定的	フル	フル
キラル分析	なし	あり	あり
構造解析	なし	なし	あり
SpectrAline互換	なし	あり	あり



**MRRが化学の分野でどのように役立つかをご覧ください**



輸入販売元

株式会社 朝日ラボ交易

〒650-0046 兵庫県神戸市中央区港島中町4丁目1-1

TEL: 078-335-8613 FAX: 078-335-8614

info@asahilab.co.jp <https://www.asahilab.co.jp/>

販売