



JASON

ユーザーガイド

目次

1	はじめに.....	5
1.1	プラグインマネージャー.....	6
2	データの読み込み.....	8
2.1	Windows エクスプローラーからの読み込み.....	8
2.2	メインメニューからの読み込み.....	9
2.3	ファイルブラウザからの読み込み.....	10
2.4	キャンバス上のデータ配置.....	11
3	データ操作の概要：表示、処理、分析.....	14
3.1	コンテキストツールバー.....	14
3.2	コンテキストパネル.....	21
3.3	オブジェクトブラウザ.....	22
3.4	表示パネル.....	24
3.5	処理パネル.....	27
3.6	解析パネル.....	32
3.7	パラメータパネル.....	37
3.8	テーブルツールパネル.....	37
3.9	チャートツールパネル.....	39
4	レポート：テーブルとパラメータ.....	41
4.1	テーブル.....	41
4.1.1	パラメータレポート.....	43
4.1.2	処理テーブル.....	44
4.1.3	ピークテーブル.....	45
4.1.4	積分/マルチプレット解析テーブル.....	46
4.1.5	メジャーテーブル.....	46
4.1.6	マルチプレットレポート（論文書式の選択）.....	47
4.1.7	カスタムテーブル.....	48
4.1.8	フィッティングデータ.....	48
4.2	オブジェクトの印刷.....	49
5	設定メニュー.....	50
5.1	一般設定.....	50
5.1.1	ユーザーインターフェース.....	51

5.1.2	キャンバス (CANVAS)	53
5.1.3	インポート/エクスポート	54
5.2	NMR 設定	54
5.2.1	軸	55
5.2.2	プロット	56
5.2.3	ピーク	57
5.2.4	マルチプレット/積分	59
5.2.5	溶媒	61
5.2.6	Bins (バケット積分)	61
5.3	MS	62
5.3.1	軸	63
5.3.2	プロット	63
5.4	テーブル	64
5.5	チャート	64
6	スタッキングと重ね合わせ	66
6.1	スタックパネル	67
6.2	疑似 2D データ (アレイデータ)	73
7	スピンシミュレーション	74
7.1	シミュレーションダイアログパネル	74
7.2	シミュレーション設定	75
8	3D スペクトルビューワー	76
8.1	サーフェイスビューワー	76
8.2	キューブビューワー	77
8.3	3D スペクトルビューワー共通コントロール	77
8.4	3D スペクトルビューワー専用コントロール	78
9	分子構造の作成	79
9.1	コンテキストバーメニュー	80
9.2	構造式ツール	81
9.3	分子構造ビューワー (3D)	82
10	拡張処理オプション	83
10.1	リニアプレディクション (線形予測)	83
10.2	ウィンドウ関数	84
11	ルール	85

11.1	ルールの管理.....	87
11.2	ルールライブラリ	87
11.3	ルール	88
11.4	処理ルール.....	89
11.5	解析ルール.....	90
11.6	レイアウトルール	90
11.6.1	レイアウトルールの重要な特徴.....	91
11.7	ルールの作成.....	92
11.8	ルール名.....	93
12	質量分析	94
12.1	MS データを開く.....	94
12.2	MS データの閲覧と操作.....	94
12.2.1	ビューパネル	95
12.2.2	パラメータ・パネル	96
12.3	MS データの保存.....	96
13	Appendix.....	97
13.1	Windows ショートカットキー	97
13.2	サポートファイルフォーマット	99

このドキュメントは、JASON の概要を説明し、読者がデータ処理、解析の基本的事項に取り組むことができるようにすることを目的としています。読者は NMR 処理の実用的な知識を持っていること、JASON は Windows OS で動作していることを前提としています。

1 はじめに

参考動画 : <https://youtu.be/BScKj4wMwfE> JASON をはじめるにあたって

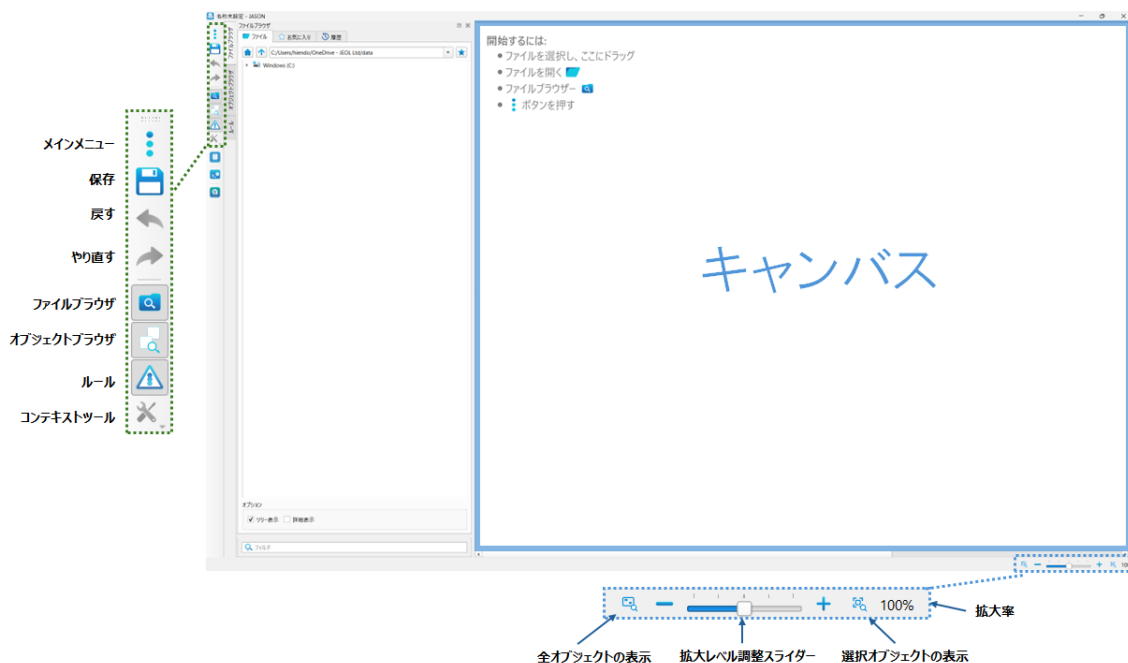


図 1 : JASON を立ち上げた時の画面

デスクトップアイコンをダブルクリックすると JASON が立ち上がり、キャンバスと呼ばれるワークスペースが表示されます (図 1)。データが読み込まれていない場合、キャンバスの左上隅のメニューには次の機能があります。

1. **メインメニュー** : データの読み込み、別名で保存、印刷や、ページ及び各種設定のオプションが含まれています。他に、プラグインマネージャー、JASON ソフトウェア情報の確認ができます。
2. **保存ボタン** : ファイルが保存できます。ファイル名が指定されていない場合、このボタンをクリックすると、ダイアログが開き、保存場所の選択と名前の入力を行うことができます。過去に保存されたファイルは、自動的に上書き (現在の名前で現在の場所) 保存されます。
3. **元に戻す/やり直すボタン** : 直近の操作を元に戻す、やり直すことができます。
4. **ファイルブラウザボタン** : ファイルブラウザの表示/非表示を切り替えます。
5. **オブジェクトブラウザボタン** : オブジェクトブラウザの表示/非表示を切り替えます。
6. **ルールボタン** : ルールパネルを開き、ルールの作成や既存ルールの選択を行います。
7. **コンテキストツールボタン** : データ操作ツールの表示/非表示を切り替えます。選択されているオブジェクトにより選択できるデータ操作ツールが変わります。

キャンバス上で右クリックし、メインメニュー -> 新規 -> テキストボックスを選択すると、キャンバスにテキストを追加できます。

画像は、通常の[貼り付け]コマンドを使用してクリップボードからキャンバスへ貼り付けることができます。また、ファイルブラウザから開くこともできます。画像ビューワーで開いている画像は、コピー & ペースト操作によって JASON のキャンバスへ貼り付けることができます。

文字・図形 (Annotations) は、キャンバス上の項目を右クリックし、メニューから[文字・図形]を選択して表示されるオプションを選択することで追加できます。現在利用可能なオプションは、四角形、線矢印、テキスト、楕円、三角形、曲線です。ポリライン（曲線）を描画するには、コンテキストメニューから[文字・図形] -> [ポリライン（曲線）] を選択します。キャンバス上でクリックしてポリラインの開始位置を設定し、曲線を折り曲げたい位置ごとにクリックして点を追加します。ダブルクリックすると描画が完了します。

JASON の右下には**ズームコントロール**があり、データの表示および操作の説明の中で詳しく説明します（3 章を参照）。

1.1 プラグインマネージャー

プラグインマネージャーは、三点リーダーのメインメニューボタンからアクセスでき、現在開いている JASON インスタンスで利用可能な全てのプラグインを表示します（例として図 2 を参照。利用可能なプラグインの一覧は継続的に増加しているため、図 2 には全てのプラグインが掲載されているわけではありません）。

プラグインマネージャーでは、各プラグインの有効／無効の切り替えや、自動更新の有効化などの設定を行うことができます。

「Plugin Details」セクションには、バージョン番号など、選択したプラグインに関する情報が表示されます。選択したプラグインでアップデートが利用可能な場合は、「Version」セクションでハイライト表示されます。

現在のバージョンでは、以下のプラグインが利用可能です。

- **Affinity Screen** - フラグメントベースのドラッグスクリーニングデータの手動および自動解析を行うための 1D NMR インターフェースを提供
- **Binning** - ビニング解析ツールを提供（「解析」パネル内の「Bin（バケット積分）」セクション）
- **MAGRES** - ファイルフィルター
- **SIMPSON** - ファイルフィルター

- **SMILEQ** - NMR データの定量解析を提供
- **Solid Spin** - 固体 NMR 用の汎用シミュレーションプログラムである SIMPSON を使用した、JASON 上での固体 NMR シミュレーション機能を提供
- **TECMAG** - ファイルフィルター

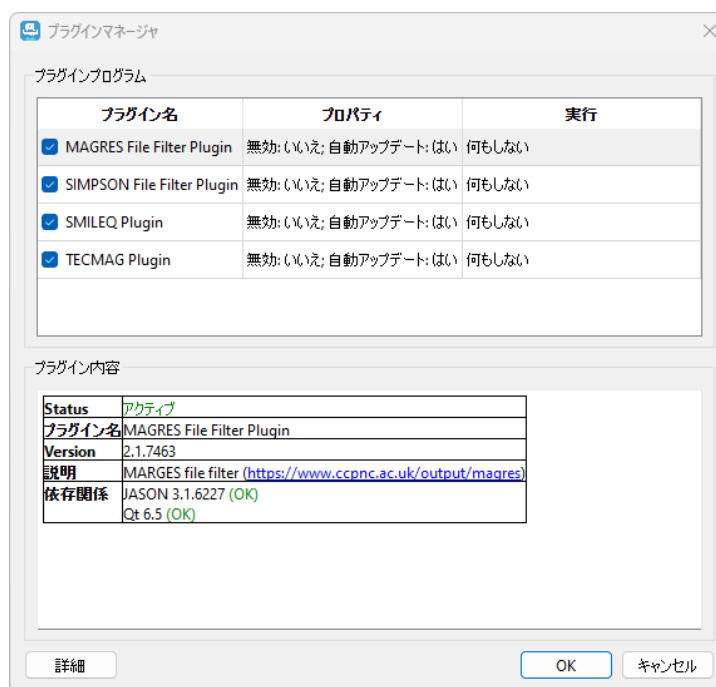


図 2 : プラグインマネージャ

2 データの読み込み

参考動画 : <https://youtu.be/BScKj4wMwfE> JASON をはじめるにあたって

データを読み込む方法は 3 通りあります。

1. Windows エクスプローラーからファイル、フォルダ、または ZIP アーカイブをキャンバスにドラッグ＆ドロップします（図 3 を参照）。
2. メインメニューからの読み込み
3. ファイルブラウザからの読み込み

2.1 Windows エクスプローラーからの読み込み

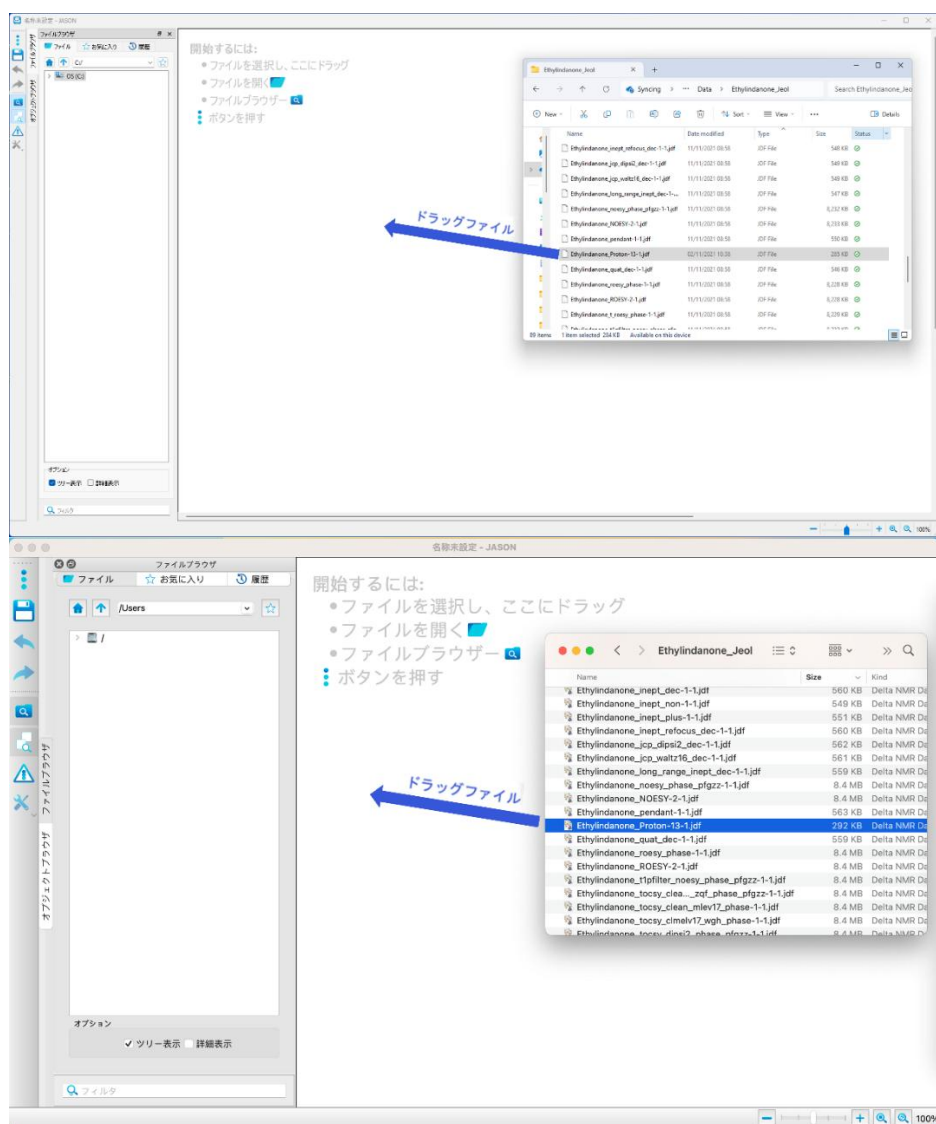


図 3 : Windows エクスプローラーまたは Mac Finder からファイルを読み込む

Windows のエクスプローラーまたは Mac Finder から、適当なデータファイルやフォルダをドラッグ＆ドロップできます。複数のファイルを選択し、一度にそれらを読み込むこともできます。Windows エクスプロ

ーラーの「プログラムから開く」機能を使用して、JASON を選択することもできます。ただし、この方法では既存の JASON インスタンスにデータを読み込むのではなく、新しい JASON インスタンスが起動されます。

ZIP アーカイブも、JASON にドラッグ & ドロップして読み込むことができます。JASON は、読み込み可能なファイルを自動的に展開します。また、ファイルブラウザやデスクトップから、ファイルや画像をキャンバスへコピー & ペーストすることもできます。

テキストファイル（.txt）も JASON へドラッグ & ドロップできるほか、ファイルブラウザから開くこともできます。SMILES 文字列は JASON にコピー & ペーストできます。smi の拡張子を持つテキストファイルは SMILES 文字列として解釈され、JASON へドラッグ & ドロップするとキャンバス上に分子構造が作成されます。分子データと NMR データセットを同時に JASON へドラッグ & ドロップして読み込むと、ルールに従って分子構造が対応する項目に自動的に関連付けられます。NMR ファイルと mol ファイルの組を交互に並べて同時に開いた場合、それぞれの mol ファイルは隣接する NMR データセットに属するものとして扱われます。この動作は、レイアウトテンプレートルールおよびデフォルトレイアウトの両方に適用されます。

2.2 メインメニューからの読み込み

メインメニューを左クリックして「開く」オプションを選択すると、Windows ファイルブラウザが開きます。このブラウザでは、ファイルをダブルクリックするか、キャンバスへドラッグするか、または Windows エクスプローラーの「開く」ボタンをクリックすることでファイルを読み込むことができます。Windows エクスプローラーの通常の複数選択操作を使用して、複数のファイルを一度に読み込むこともできます。

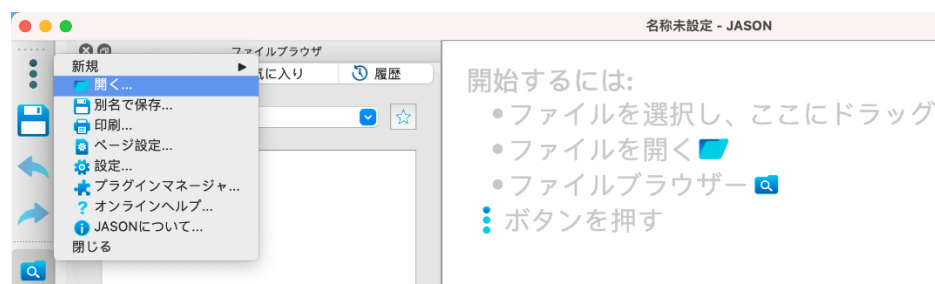


図 4：メインメニューからの読み込み

2.3 ファイルブラウザからの読み込み

「ファイルブラウザ」切替ボタンを使用すると、JASON 上でファイルブラウザの表示/非表示を切り替えることができます。JASON のファイルブラウザは、デフォルトではキャンバスの左端に表示されます。（図 5）

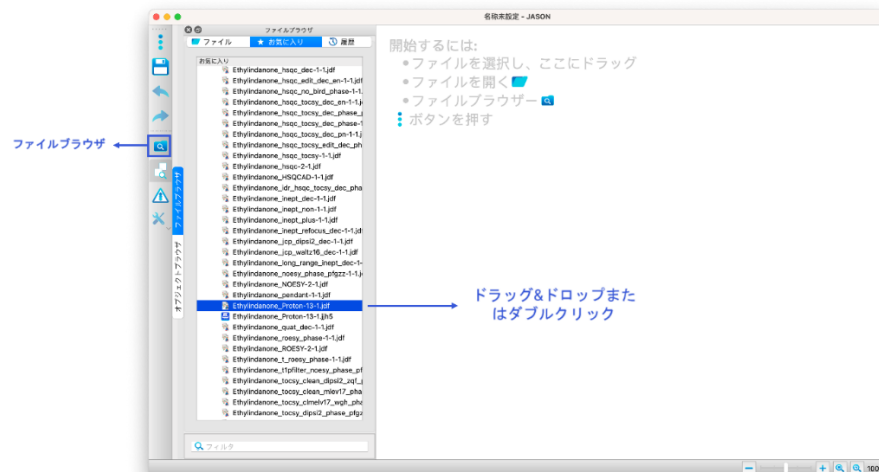


図 5：ファイルブラウザからの読み込み

注意：JASON のレイアウトは変更可能です。ファイルブラウザのフレーム上部の名前（タイトル）バー部分をクリックしてドラッグするだけで、ファイルブラウザを任意の場所に移動または独立したウィンドウにすることができます。

ファイルブラウザ自体は 3 つのパネルで構成されています（図 6）。

1. ファイル - ファイルナビゲーターパネル
2. お気に入り - お気に入りのファイルまたはディレクトリのリスト
3. 履歴 - ファイルの時系列リスト

ファイルブラウザから任意のディレクトリに移動し、目的のファイル（またはフォルダ）をダブルクリックするだけで、ファイルやフォルダを読み込むことができます。

各パネルはタブをクリックすることで開くことが出来ます。複数のファイルを選択するには、Shift キーを押しながら 2 番目のファイルを選択してその間の全てのファイルを選択するか、Ctrl キー（macOS では Cmd キー）を押しながら個々のファイルを選択します（図 6）。選択したファイルをキャンバスにドラッグすると、ファイルを読み込むことができます。

「お気に入り」タブでは、迅速にアクセスしたいディレクトリやファイルを入れておくことができます。追加する場合は、「ファイル」タブで任意のディレクトリやファイルを選択したあと、右クリックのメニューからお気に入りに追加を選択します。「お気に入り」パネル内のフォルダは、右クリックして[エイリアスの編集]を選択することで別名を設定することができます。

「履歴」タブでは、時系列で作業ファイルを確認することができます。任意の項目を右クリックすると、メニューオプションが表示されます。このメニューから、最近のリストの項目を削除したり、リストを消去したり、ファイルを開いたり、ファイルパスをテキスト文字列としてコピーしたりすることができます。

操作性向上のため、JEOL Delta、TopSpin、VNMR および JCAMP-DX 形式のデータでは、JASON は Bruker データのタイトルファイルを解析しその内容をファイルブラウザに表示します。

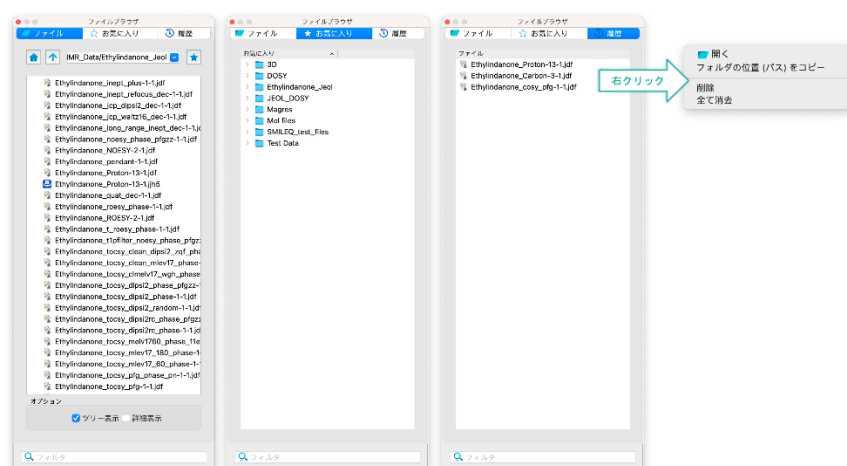


図 6：ファイルブラウザタブ

2.4 キャンバス上のデータ配置

キャンバス上のオブジェクトを選択すると、オブジェクトのエッジの周りに 8 つの小さな円が表示されます(ドラッグポイント)。これらの円が塗りつぶされている場合は、オブジェクトが選択されており、それが現在アクティブな状態であることを示しています。これらの円上にカーソルを置き、ドラッグしてオブジェクトを再スケールリングできます。また、オブジェクトが選択されているとき、各オブジェクトの左上隅に小さな番号のタブ(グラブタブ)が表示されます。これは、オブジェクトをキャンバス上で任意の場所に移動するときに使用します。キャンバス上でオブジェクトのサイズ変更や移動を行う際、オブジェクトはページの端、または同じページ上の他のオブジェクトの端に自動的にスナップします。自由に配置およびサイズ変更を行うには、Ctrl キーを押したまま操作してください。Ctrl+Shift キーを押しながら操作すると、「ミラーサイズ変更」が有効になります。また、Alt キーを押しながらマウスの左ボタンをドラッグすると、キャンバスをパン(移動)操作できます。

キャンバス上のオブジェクトの操作方法については、次の章で詳しく説明します。

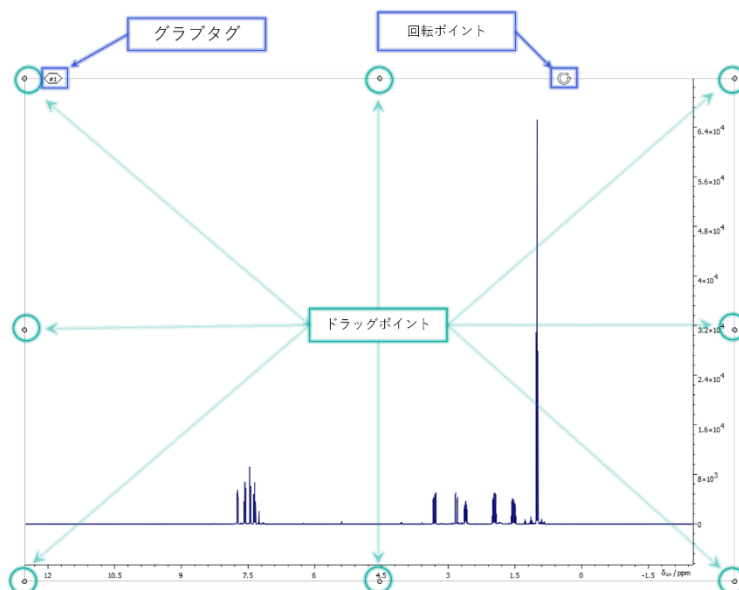


図 7：オブジェクトを移動および再スケーリングするためのタブとドラッグポイント

※オブジェクトとはキャンバス上で表示されたスペクトル、テキスト、図、表などを指します。

オブジェクトを開いたときのキャンバス上での配置方法は、オブジェクトファイルの開き方によって決まります。ファイルをキャンバスの空いている領域にドラッグ＆ドロップした場合、その位置にファイルが開かれます。ファイルをダブルクリックして開いた場合、作成されるオブジェクトは、[設定] メニューの [一般] セクション内にある [Canvas] タブで定義されたパターンに従って、自動的にキャンバス上へ配置されます (図 8)。[設定] メニューは、JASON フレーム左上のメインメニューからアクセスできます。詳細についてはセクション 5 で説明します。

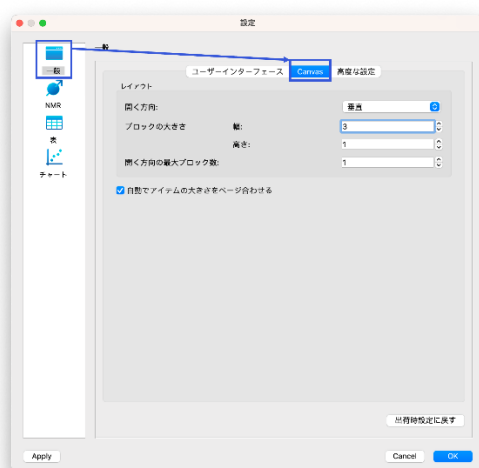


図 8：Canvas レイアウト設定

キャンバス上のオブジェクト、またはキャンバス自体を右クリックするとコンテキストメニューが表示されます。このメニューの [Canvas] サブメニューには、キャンバス上に追加のスペースを作成するためのオプションがあります。[列を挿入] を選択すると、選択したオブジェクトの左側に列が挿入されます。選択したオブジェクトと同じ列にあるオブジェクト、およびその右側の列にあるオブジェクトは、1 列分右へ移動します。[行を挿入] も同様の動作を行い、新しい行は選択したオブジェクトを含む行の上に挿入されます（図 9：コンテキストメニューの [Canvas] サブメニュー）。

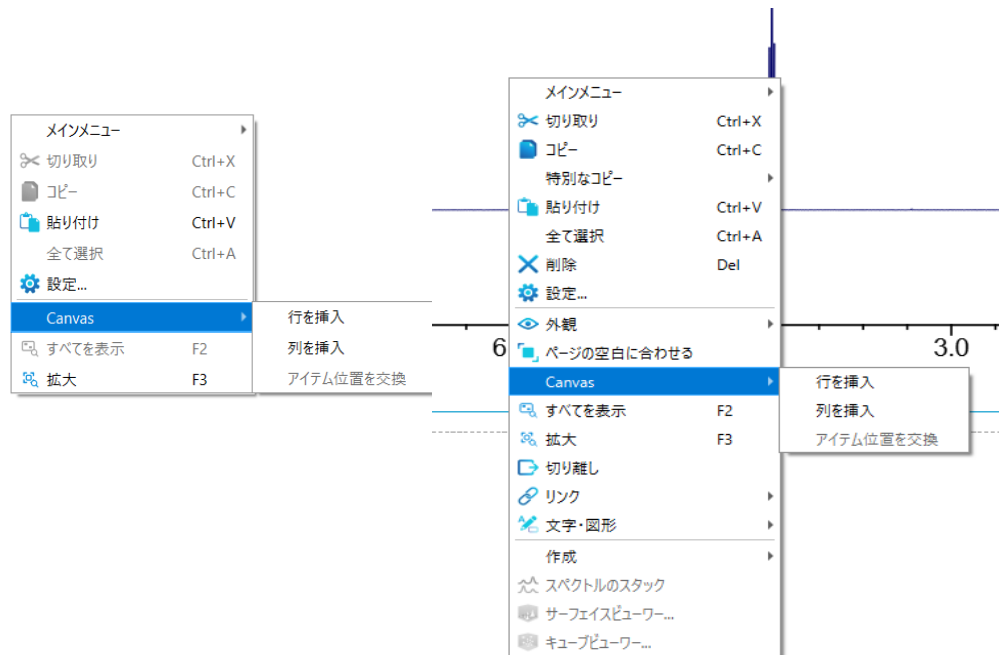


図 9：コンテキストメニューにある Canvas サブメニュー

キャンバス上のオブジェクトの位置を入れ替えることができます。ただし、以下の条件を満たしている必要があります。

- 選択されているオブジェクトが 2 つのみであること。
- 選択されたオブジェクトが異なるページ上にあること。
- 選択されたオブジェクトが親オブジェクトを持たないこと。
- 各ページには、選択されたオブジェクトとその子オブジェクトのみが含まれていること。

2 つのオブジェクトを入れ替えるには、まずそれらを選択します（Ctrl キーまたは Cmd キーを押しながら選択）。その後、選択したオブジェクトのいずれかを右クリックしてコンテキストメニューを表示し、

[Canvas] セクションの [Swap Item Positions] を選択します。このオプションを選択すると、選択したオブジェクトは、その子オブジェクトとともに、それぞれの位置を入れ替えます。オブジェクトの位置の入れ替えは、元に戻す／やり直す（Undo/Redo）の対象となります。

3 データ操作の概要：表示、処理、分析

参考動画：https://youtu.be/K32_dbH8gmA JASON をはじめよう：パネルについて

参考動画：https://youtu.be/4wJ_y9pEAtg JASON をはじめよう：処理パネルの紹介

このセクションでは、ユーザーがキャンバス上のデータオブジェクトを操作するために使用できるツールの概要を説明します。これら各ツールの詳細については、後のセクションで説明します。データが JASON に読み込まれると、複数のコンテキスト依存パネルが表示されます。例えば、図 10 は 1D NMR スペクトルに対して表示される代表的なパネルを示しています。

3.1 コンテキストツールバー

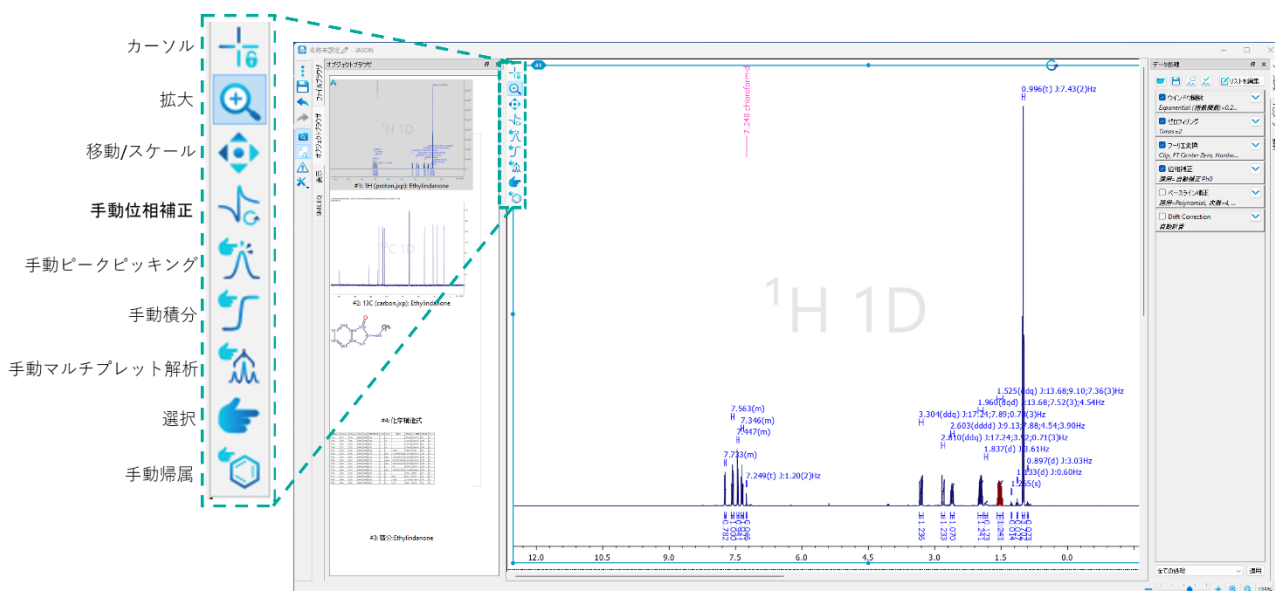


図 10：コンテキストツールバー（オブジェクトが NMR スペクトルの場合）

JASON で 1 つのオブジェクトを選択すると、図 10 に示すようなコンテキストツールバーがスペクトルの左上隅で使えるようになります。これは、現在のオブジェクトの操作、および解析するためのツールです。アイコンを左クリックするか、該当のショートカットキーを使用すると、ツールが選択されます。またショートカットを押し続けることで、特定の機能を一時的にアクティブにすることができます。例えば、スペクトルの位相補正中にスペクトルを拡大する必要がある場合は、「z」キー（ズームのショートカット）を押したまま、マウス操作で領域をズームインします。「z」を離せば、位相補正機能に戻ります。ショートカットキーはモード名の後に括弧内に示されています。ショートカットでは大文字と小文字は区別されません。NMR スペクトルに共通する一般的な機能として、マウスの左ボタンをダブルクリックするとズームレベルがリセットされ、マウスホイールをスクロールするとスペクトルの強度表示を増減できます。

カーソル (C): カーソルモードでは、全てのズームおよびパン機能がロックされます。さらに、同核 2D スペクトル (COSY、TOCSY、NOESY、ROESY) の解析に使用できます。この種のスペクトルの対角線にカーソルを置き、水平または垂直に移動するとボックスが開き、関連するクロスピークを特定できます。カーソルモードでは、INADEQUATE スペクトル上にも二重カーソルが表示されます (図 11)。2 つ目のカーソルは、対角線の反対側にある交差ピークを指します (対角線の表示/非表示オプションは、「表示」パネルの「2D プロット」セクションにあります)。

場合によっては、2D スペクトルにおいて JASON が二重量子/単重量子 (DQ-SQ) 実験を正しく認識できないことがあります。例えば、一部の固体 NMR の DQ-SQ 実験で発生する場合があります。その場合、[Settings -> Plot->2D] で対角線の傾きを 2.0 に設定すると、未認識のデータセットを DQ-SQ 実験として強制的に割り当てることができます。その後は、カーソル機能、対角線表示、およびその他のツールが、その DQ-SQ 実験に対して期待どおりに動作し、間接次元の二重量子周波数値も考慮されるようになります。

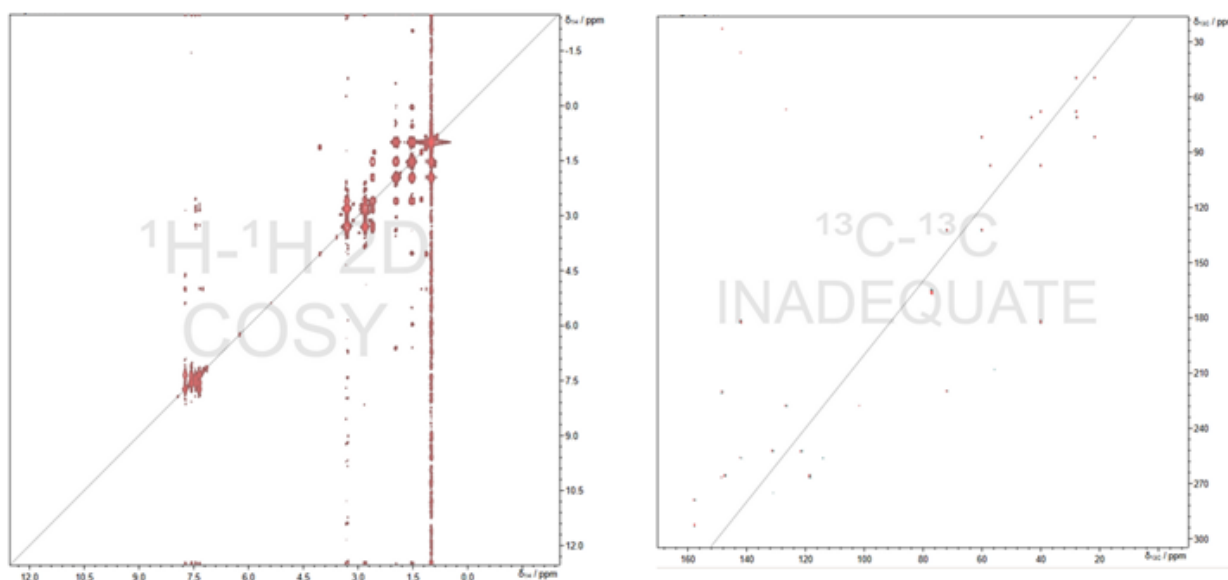


図 11 : 2 次元同核種実験における対角化と INADEQUATE スペクトル

拡大(Z): ズームモードでマウスの左ボタンをクリックしてカーソルをドラッグすると、ズームされる領域が選択されます (紫色で表示)。マウスボタンを離すと、オブジェクトには選択された領域が表示されます。

移動/スケール (P) : パンモードで左クリックしてドラッグすると、スペクトルの位置が移動します

手動位相補正 (F) : 位相補正モードでは、スペクトルの位相をインタラクティブに変更できます。

1D NMR データでは位相モードを選択すると、自動的にピボットポイントがスペクトルの最大ピークに設定されます。(図 12 緑色の線)

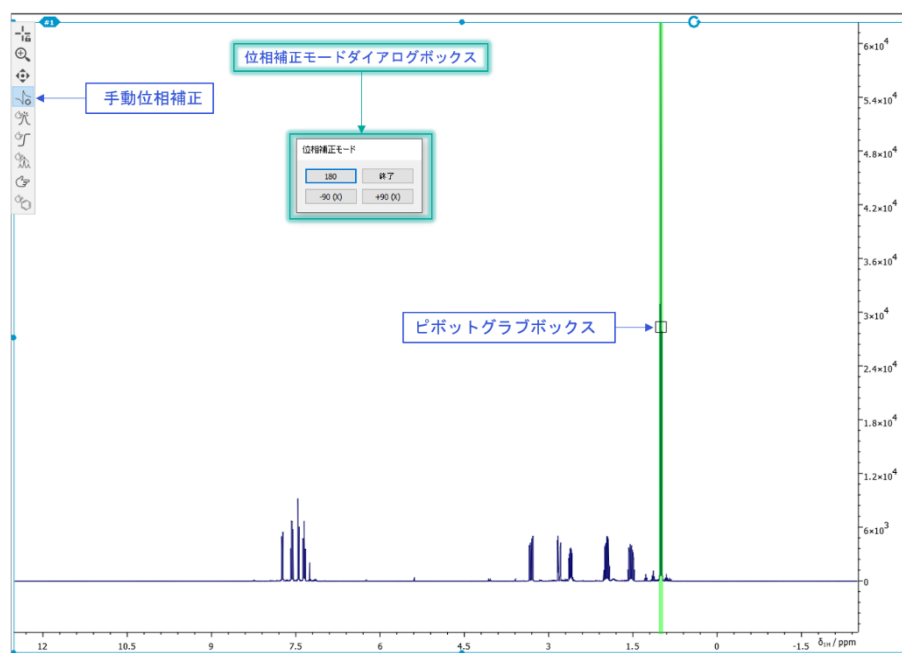


図 12：手動位相補正モード

ピボットポイントは、緑色のピボットライン上にあるグラフボックスを左クリックしてドラッグすることで移動できます。ゼロ次位相補正（P0）は、マウスの左ボタンを押したままマウスを移動することで実行します。マウスは任意の方向へ移動できるため、ユーザーは普段慣れている方法で操作できます。一次位相補正（P1）は、同様にマウスの右ボタンを押したまま実行します。スペクトルの位相補正が完了したら、[位相補正モード] ダイアログボックスの [OK] ボタン をクリックして位相補正モードを終了します。

[位相補正モード] ダイアログボックスには複数のボタンがあります。[180°] ボタンをクリックするとスペクトルの位相が 180° 反転します。[OK] ボタンは変更内容を適用してダイアログを閉じます。[キャンセル] ボタンは変更内容を破棄してダイアログを閉じ、位相補正モードを終了します。[リセット] ボタンは変更前の値に戻しますが、ダイアログは開いたまま維持されます。



図 13：1Dと2DNMRの位相モードダイアログ

2D NMR データの位相補正も同様の方法で行います（図 14 参照）。位相補正モードを選択すると、スペクトル中で最も強度の高い正のピークがピボットポイントとして自動的に選択されます。位相補正モードダイアログボックスで「スライスの表示」チェックボックスをオンにすると、ピボットポイントを通る X トレースおよび Y トレース（緑色の線）がスペクトルの適切な端に表示され、位相補正作業を支援します。ピボットポイントは、ピボットグラブボックスを左クリックしてドラッグすることで移動できます。

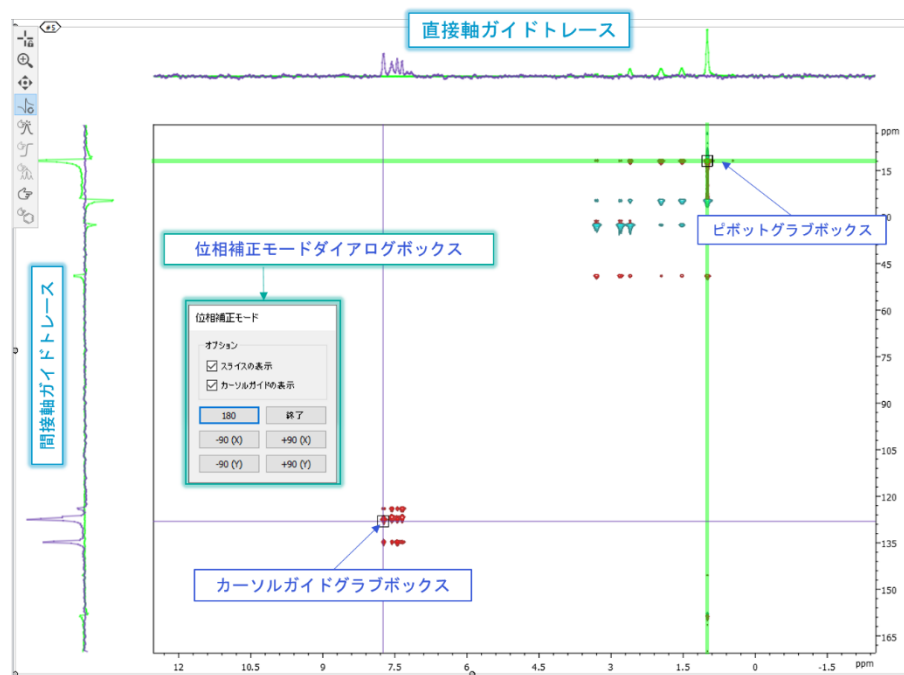


図 14：手動 2D 位相補正

〔位相補正モード〕ダイアログボックスには、「180°」ボタンと「OK」ボタンの 2 つがあります。「180°」ボタンをクリックすると、スペクトルの位相が 180°反転します。「OK」ボタンをクリックすると、位相補正モードを終了します。〔スライスの表示〕チェックボックスがオンになっている場合は、〔カーソルガイドの表示〕チェックボックスが表示されます。

〔カーソルガイドの表示〕チェックボックスをオンにすると、2 組目のトレースを表示できます。このトレースは青色で表示され、2 組目のトレース用グラブボックスを使用して移動できます。ガイドトレースはスペクトルの端にも表示されます。

2D スペクトルのゼロ次位相補正（P0）は、マウスの左ボタンを押したまま行います。このとき、マウスの移動方向が位相補正する方向に対応します。マウスを垂直方向に移動すると、F1 または Y 軸とも呼ばれる間接次元の位相が変化します。マウスを水平方向に移動すると、F2 または X 軸とも呼ばれる直接次元の位相が変化します。マウスを斜め方向に移動すると、両方の位相が同時に変化します。

一次位相補正（P1）はゼロ次位相補正（P0）と同様に行いますが、左ボタンの代わりに右ボタンを押したまま操作します。位相補正中に Ctrl キーまたは Cmd キーを押しながら操作すると、位相変化をより細かく調整できます。

手動ピークピッキング (K) : 手動ピークピッキングモードでは、ユーザーはピークを示すラベルを手動で配置できます。これは、目的の位置へマウスを移動して左クリックすることで行います (図 15)。デフォルトでは、カーソルは候補となるピークへ自動的にスナップしますが、Ctrl キーまたは Cmd キーを押したまま操作すると、ピークラベルを任意の位置に配置できます。

2D スペクトルの場合も同様に、キーを押していなければ任意の位置でピークを選択できますが、ピーク付近ではカーソルがそのピークへスナップします。自由にピークを選択するには Ctrl キーを押します (グリッドラインへのスナップを無効化)。Shift キーを押すと、カーソルは最も近いグリッドラインへスナップします。HSQC では交点または水平グリッドラインへスナップし、HMBC では交点または水平・垂直グリッドラインへスナップします。

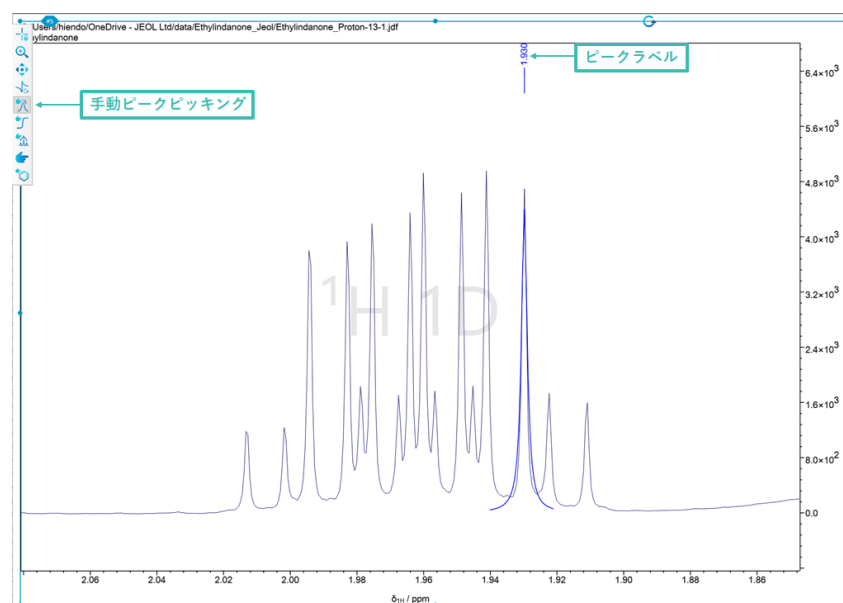


図 15 : 手動ピークピッキングモード

【ピークプロパティ】ダイアログにある【テキストラベル】オプションを使用すると、ピークラベルを編集ができます。ラベルを右クリックし、コンテキストメニューから【ピークプロパティ】を選択すると、このダイアログを開くことができます。

ピークテーブルは、スペクトルを右クリックし、メニューから【作成】→【ピークテーブル】を選択することで作成できます。テーブルについては、「テーブル」の章で詳しく説明します。

また、表をクリックし、メニューから【チャートの作成】を選択することで、データをチャートとして表示することもできます。チャートについては、「チャート」の章で詳しく説明します。

ピークは、選択モードを使用して選択し、その後 Delete キーを押すことで削除できます。選択ツールについては、次のセクションで説明します。

手動積分 (I) : 手動積分モードでは、信号の積分を手動で行うことができます。マウスの左ボタンを押したままカーソルを水平方向にドラッグして積分領域を選択すると、積分が実行されます (図 16)。積分の範囲はベースライン下の積分バーとして、結果は積分曲線として表示されます。

積分バーをダブルクリックすると、積分プロパティダイアログが開きます。ここでは、面積値の正規化、積分範囲の調整、ラベルを変更できます。複数の積分がある場合は、ダイアログボックスの上部にある矢印を使用してそれらの間を移動することができます。一つの積分値の正規化すると、スペクトル内の全ての積分値に対してそれが反映されます。

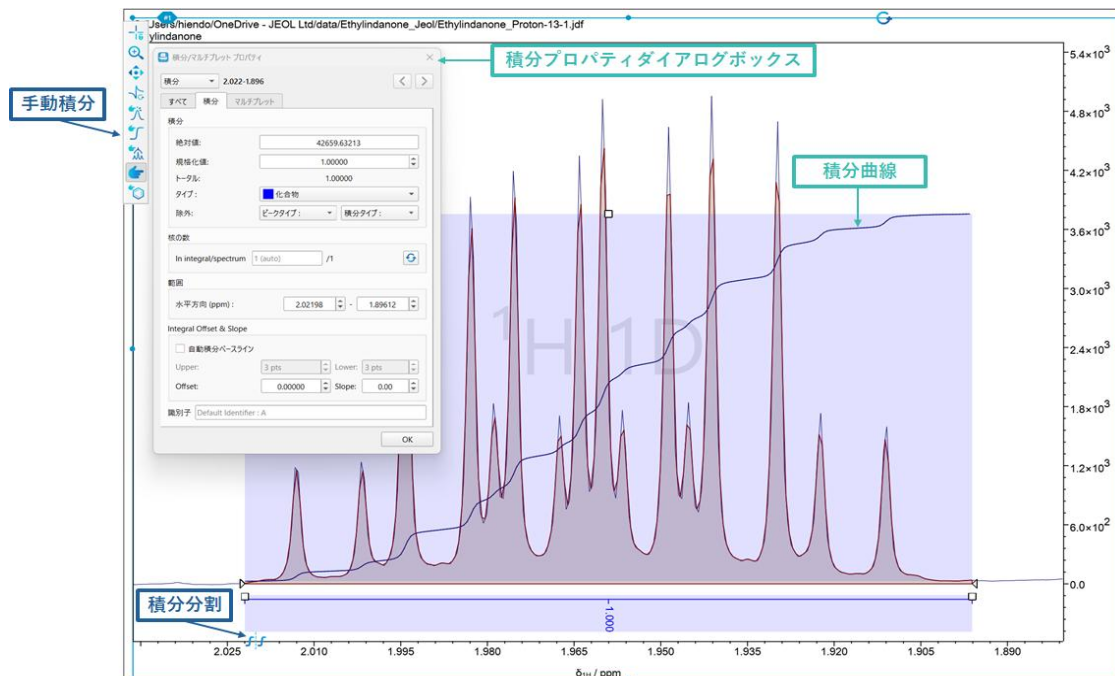


図 16：手動積分モード

手動マルチプレット解析 (M)：手動マルチプレット解析モードを選択すると、スペクトル上で選択した領域で 1 次マルチプレット解析を実行できます (図 17)。マウスの左ボタンを押しながらドラッグすることで、解析領域を指定します。

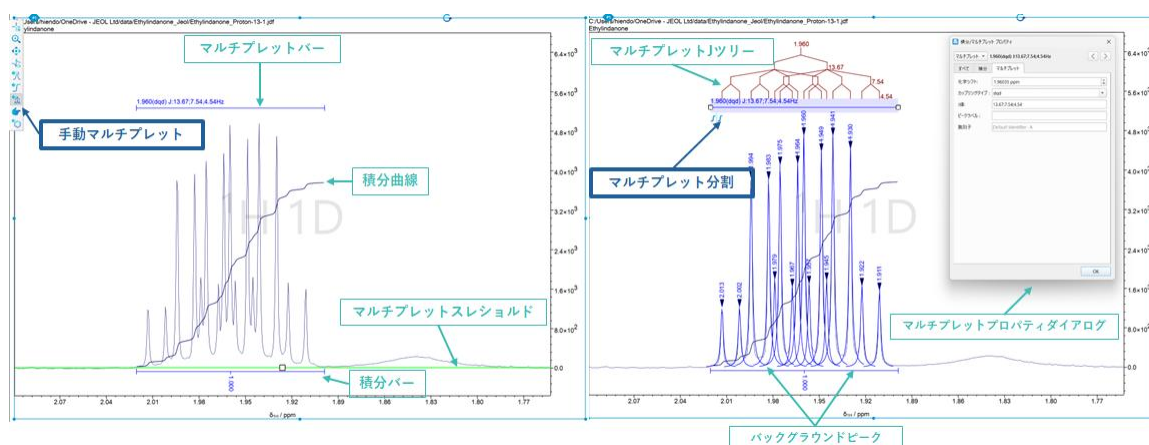


図 17：手動マルチプレット解析モード

対象領域は、積分領域を選択する場合と同様に、マウスの左ボタンを押したままドラッグすることで選択します。マルチプレットモードを最初に選択すると、しきい値ラインが表示されます。しきい値より上にあるピークはマルチプレット解析に使用され、しきい値より下にあるピークは無視されます。その領域ですでにピ

ークピックアップされているピークがある場合は、それらがマルチプレット解析に使用されます。ピークが選択されていない場合は、JASON がマルチプレット解析を行う前に自動的にピークピックアップを実行します。マルチプレットに関する情報は、ピークの上に表示されるマルチプレットバー上にも表示されます。さらに、その領域の積分値も表示され、積分バーおよび積分曲線が表示されます。マルチプレットバーが強調表示されると、そのマルチプレットに属するピークは青色の三角形ラベルで示されます。マルチプレットが解析されると、J 結合ツリー図が表示されます。積分モードと同様に、マルチプレットバーをダブルクリックすると、[積分/マルチプレット プロパティ] ダイアログボックスが表示されます。

選択 (S) : 選択ツールは汎用ツールであり、キャンバスオブジェクト上の個々のアイテムを選択するために使用されます。例えば、積分バーやピークラベルなどです。単一のピークラベルからマルチプレット全体など、選択できます。このツールは、文字・図形の選択にも使用できます。

手動帰属ツール (A) : 手動帰属ツールは分子構造と組み合わせて使用し、スペクトル上のマルチプレットまたはピークを選択し、構造内の原子に帰属します。これは、ピークまたはマルチプレットのラベルを左クリックし、分子構造上の原子にドラッグすることで行います。原子は、マルチプレットの中心化学シフトまたは個々のピークの位置に割り当てられます。

3.2 コンテキストパネル

データが JASON に読み込まれると、表示の編集やデータ処理等の機能を行ういくつかのパネル（コンテキストパネル）が追加で表示されます。利用可能になる特定のパネルは、現在のアクティブなオブジェクトに依存します。各パネルの表示/非表示の切り替えは、前セクションで説明したコンテキストツールのトグルメニューで行うことができます。

NMR スペクトルに使用できるパネルを図 18 に示します。パネルは自由に配置でき、名前バーの横にあるパネルを任意の場所にドラッグするだけで、好みに応じて再配置できます。パネルは、図 18 のように互いに積み重ねることも、図 19 のように垂直に積み重ねることもできます。

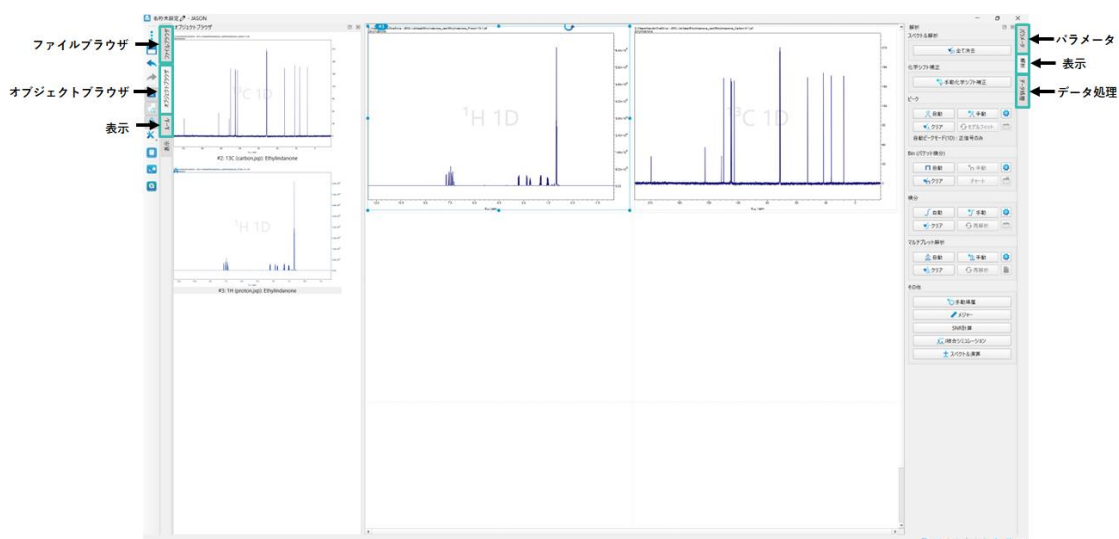


図 18 : NMR スペクトルのコンテキストツールパネル

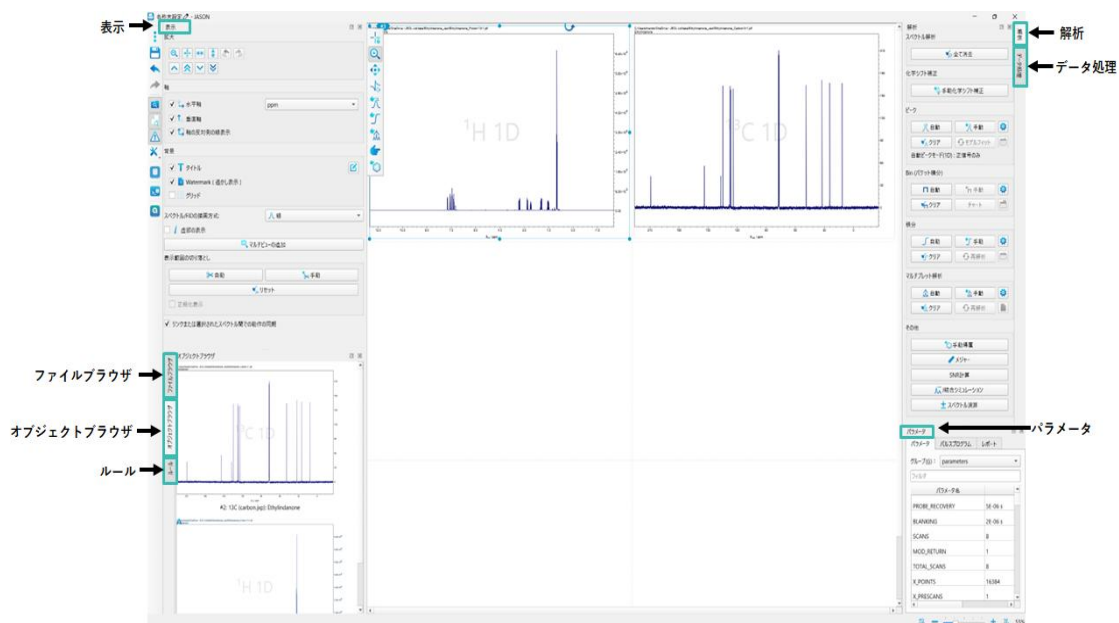


図 19 : NMR スペクトルのコンテキストツールパネル

NMR スペクトルにはそれを表示・処理するための 6 つの主要なパネル（オブジェクトブラウザ、ファイルブラウザ、表示、処理、解析、パラメータ）があります。オブジェクトブラウザ、表示パネル、処理パネル、解析パネル、パラメータパネルについて以下説明します。

3.3 オブジェクトブラウザ



図 20 : オブジェクトブラウザ

オブジェクトブラウザは、キャンバス上の全てのオブジェクトの視覚的なリストになります。（図 20）

オブジェクトブラウザ内のアイテムを左クリックすると、そのアイテムがアクティブな選択対象になります。アクティブな選択対象は、オブジェクトブラウザ内で A のマークが左上に表示され、キャンバス上ではオブジェクト周囲のリサイズ用ドラッグポイントが塗りつぶし表示されることで識別できます。図 20 では、左上のプロトンスペクトルが現在のアクティブな選択対象です。

オブジェクトをダブルクリックすると、そのオブジェクトがアクティブな選択対象となり、キャンバス表示がそのオブジェクトへズームします。

オブジェクトブラウザ内のアイテムを右クリックすると、2 つのオプションが表示されます。1 つ目の

「Delete」は、キャンバス（およびオブジェクトブラウザ）からオブジェクトを削除します。なお、この操作はアイテムを選択した状態で Delete キー を押すことでも実行できます。

2 つ目の「Links」は「Object Linking」ダイアログを開きます（図 20）。このダイアログは 2 つのパネルで構成されています。左側のパネルには現在アクティブな選択対象が表示され、右側のパネルにはその選択対象にリンク可能なターゲットが表示されます。リンク先パネルの項目は、名前の横にあるチェックボックスをオンにすることで選択できます。「OK」をクリックするとオブジェクト間のリンクが作成され、必要に応じてリンクされたスペクトルの軸およびズームレベルが同期されます。

ピークテーブル、積分テーブル、またはマルチプレットテーブルを作成した場合は、対応するスペクトルからそのテーブルへのリンクが自動的に作成されます。

オブジェクト間のリンクは、オブジェクトブラウザ表示領域の右側に青色の接続線として表示されます。

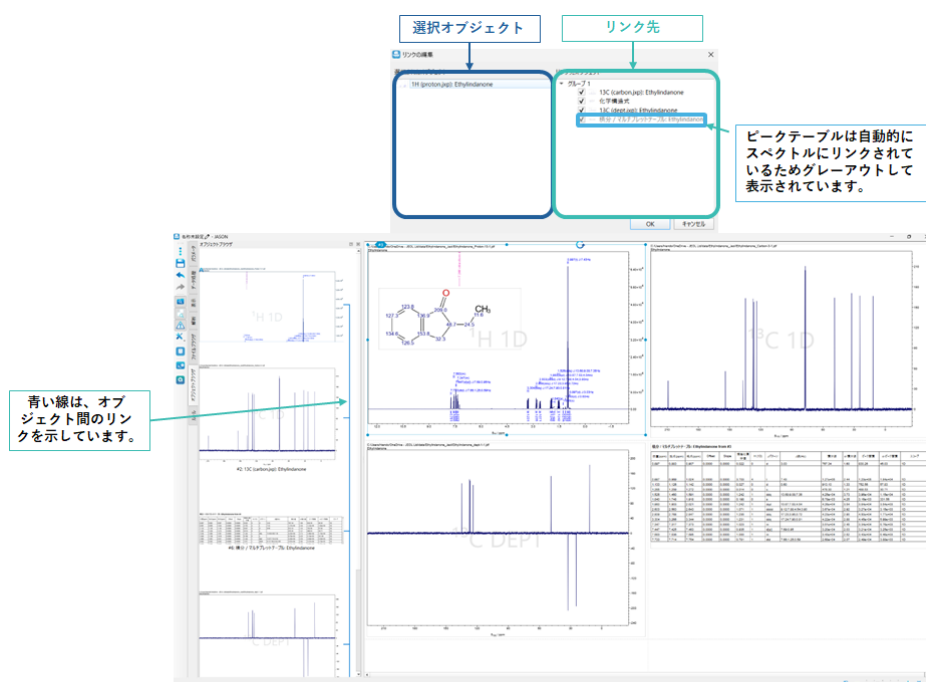


図 21 : オブジェクトリンクのブラウザ

3.4 表示パネル

表示パネルには、キャンバス上のオブジェクトの表示に関するオプションが含まれています。表示パネルはコンテキストに応じて内容が変化し、本節ではスペクトルの「表示」パネルについて説明します。1D スペクトルの表示オプションを図 22 に示します。

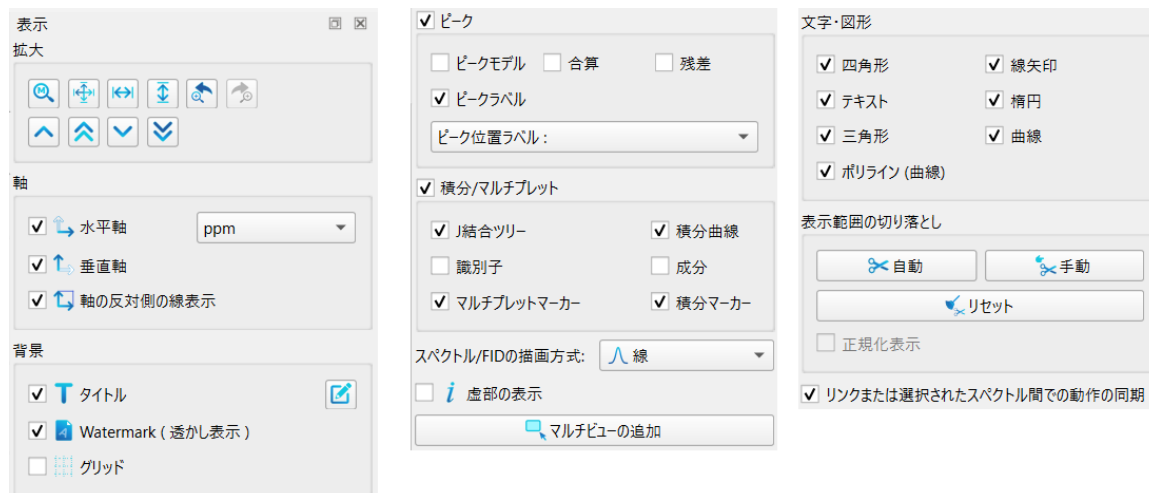


図 22：表示パネル

拡大： 拡大ツールは、マウスのズームコントロールで十分な感度が得られない場合に、拡大レベルをより正確に制御できるようにするための手動ズームコントロールです。これには、ズームステップを元に戻したり、やり直したりするための、前と次のズームボタンが含まれています。2D データでは、手動ズームツールを使って、水平・垂直ズームなどのレベル設定の入力が可能です。等高線リセットズームボタンは、デフォルトのズームレベル設定にリセットします。

なお、スペクトル上でマウスの左ボタンをダブルクリックすると、ズームレベルがフルビューにリセットされ、マウスをスペクトル上でスクロールするとスペクトルの Y 軸を拡大・縮小できます。

軸： 軸の表示の切り替えや単位の変更ができます。また、軸の反対側の線を表示/非表示することもできます。

背景： スペクトルの背景に表示する情報を設定します。現在選択できる項目はタイトル、ウォーターマーク（透かし表示）、グリッドです。スペクトルタイトルの表示設定は、背景セッションの右上にある「タイトルの編集」ダイアログから変更できます。

ピーク： マルチプレット解析を実行している場合に表示されます。ピークピッキングは二段階のプロセスで実行されます。最初の段階で潜在的なピークを特定し、続いて 2 番目の段階ではそれらのピークのパラメータをデータに適合させます。ピークフィッティング表示オプションにより、個々のモデルピーク、モデルピークの合計（モデルスペクトル）、実測スペクトルとモデルスペクトルの差（残差）との間で表示を切り替えることができます。

積分/マルチプレット：マルチプレット解析の実行後、J 結合ツリー、マルチプレットラベルおよび積分ラベルの表示/非表示を切り替えることができます。

描画方式：描画方式オプションは、スペクトルや FID の線（プロット）のスタイルを変更することができます。オプションは、1)線では、スペクトルは単にデータポイントを結ぶ連続線として描かれます。2) スティックでは、各ポイントはデータポイントの周波数に位置する垂直線として描かれ、X 軸からデータポイントの振幅に走ります。3) 線とデータポイントでは、データはオプション 1 のように連続線として示されますが、データポイントも表示されます。

マルチビュー追加：スペクトルの領域を指定して、親スペクトルの上に挿入として表示することができます。この機能を使用するには、マルチビューの追加ボタンを押し、マウス左クリックのドラッグにより挿入する領域を選択します。挿入スペクトルと親スペクトルはリンクされていますが、親スペクトルのズームとパンに関しては独立しています。

表示範囲の切り落とし：

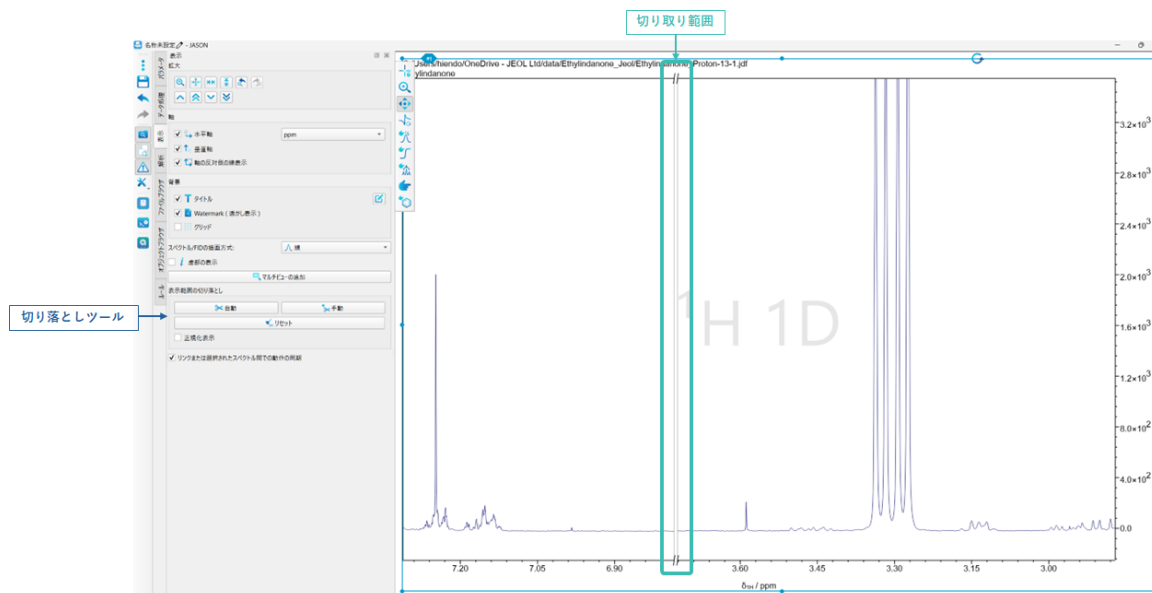


図 23：1D スペクトルの切り落とし例

この手動切り落としモードを選択すると、必要のないスペクトルの領域を切り出すことができます。1 次元のスペクトルでは、マウスの左ボタンを押しながら水平方向にドラッグして、切り取る領域を選択します。選択された領域は、マウスの左ボタンを離すと画面から削除されます。カットされた領域は、図 23 に示すように、スペクトルと軸上の不連続点として表示されます。2 次元のデータセットの場合は、カット領域は、マウスの左ボタンを押しながら、まず一つの次元に、続いてもう一つの次元の方向にマウスをドラッグすることで長方形のカット領域を指定します。カット領域は軸の不連続点として表示されます（図 24）。

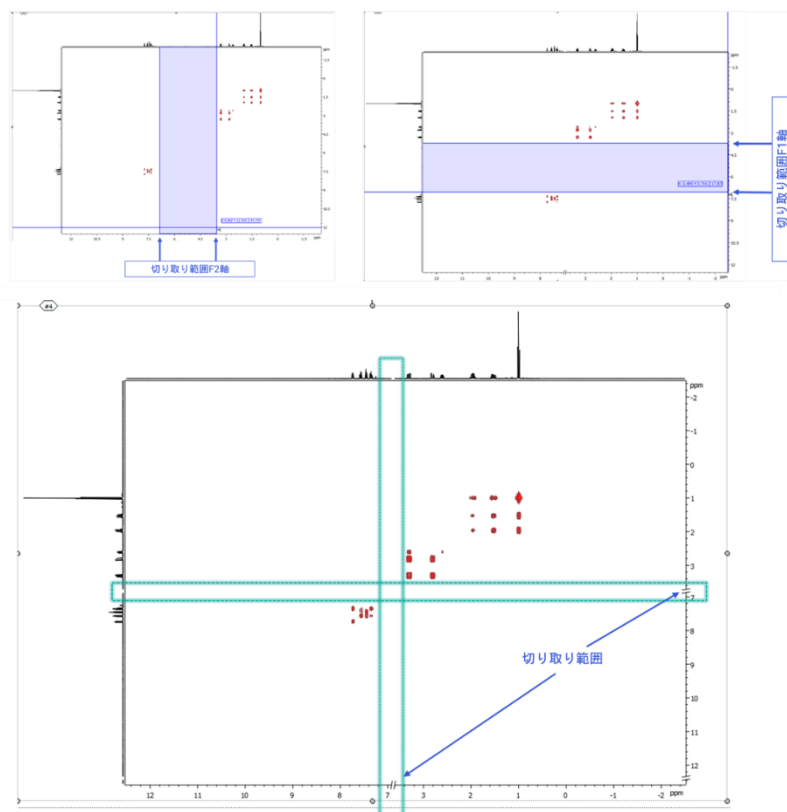


図 24 : 2D スペクトルの切り落とし例

図 24 のように 1 次元の投影スペクトルを表示させたとき、カット領域は、やはり投影スペクトルにも反映され、不連続点として表示されます。カットされた領域をクリアするには、“リセット”オプションを選択します。“自動”ボタンはプロットのカット領域を自動的に設定します。ピーク領域を自動検出し、関連するピークが検出されなかった不要なプロット領域を切り落とします。

リンクまたは選択されたスペクトル間での動作同期：このオプション（チェックボックス）で、リンクされたスペクトル間のズーム・パンの動作を同期させるかどうかを決めることができます。2D スペクトルの表示オプションを図 25 に示します。2D スペクトルでは、1 D スペクトルで説明したオプションに加えて、以下の追加オプションがあります。

ノーマライズ表示：1D スペクトルのみ、show normalized チェックボックスオプションが表示されます。このチェックボックスをオンにすると、可視の各セクションが正規化されます。正規化係数はプロット上に表示されます。Show normalized は、メイン・スペクトルとスペクトルのインセットの両方で機能します。

2D 表示オプション：2D 表示オプションでは、データをどのようにプロットするかを選択することができます。2D スペクトルおよび擬似 2D スペクトルでは、等高線プロット、ラスタープロット、オーバーレイプロット

ト、スタックプロットの 4 つの表示モードを使用できます。positive/negative オプションは、正または負の値のみ、あるいはその両方をプロットすることを可能にします。

2D NMR データは通常、直接次元と間接次元のデータをそれぞれ水平軸と垂直軸に表示します。処理項目の「Transpose」機能を使用すると、例えば HMBC スペクトルで ^{13}C 軸を水平方向、 ^1H 軸を垂直方向に表示するように軸を入れ替えることができます。nD 処理では既存の次元から 2 つを選択して入れ替えることができます。

Side views には、プルダウンメニューの形で追加オプションがあります。このオプションは、2D スペクトルの端に何がプロットされるかを決定します（しばしば投影と呼ばれます）。オプションは、1) 合算（軸によって、行または列の全てのポイントの合計）、2) 投影（各行または列の最大値）、3) 高分解能 1D（キャンバスから高分解能 1D スペクトルを選択）、4) スライス（十字カーソルを使用して、2D スペクトルから特定のスライスをプロットできるようになります。1 つの軸に複数のスライスをプロットすることができます）。

Side views は、マウスホイールで拡大・縮小でき、Shift キーを押しながらマウスホイールを操作することで上下に移動できます。

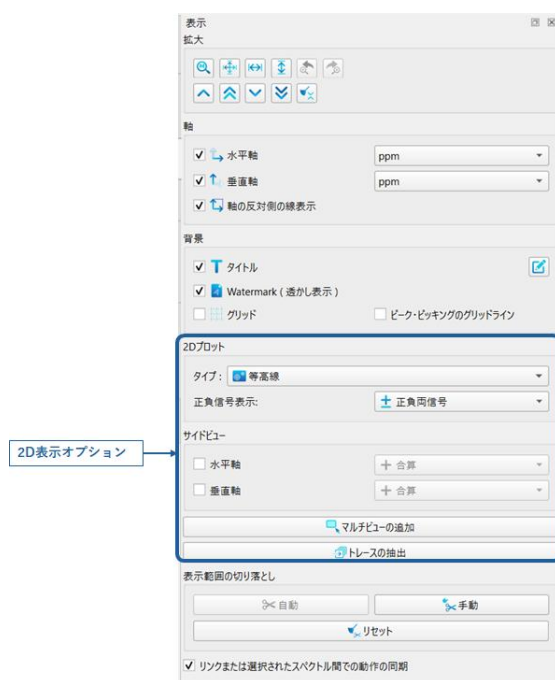


図 25：表示パネルの 2D スペクトル用オプション

3.5 処理パネル

処理パネルには、生データを NMR スペクトルに変換するために使用される全ての処理のステップが含まれています。図 26 に、1D スペクトルの一般的なプロセスリストを示します。本節では、ユーザーが一般的な NMR 処理について理解していることを前提とします。

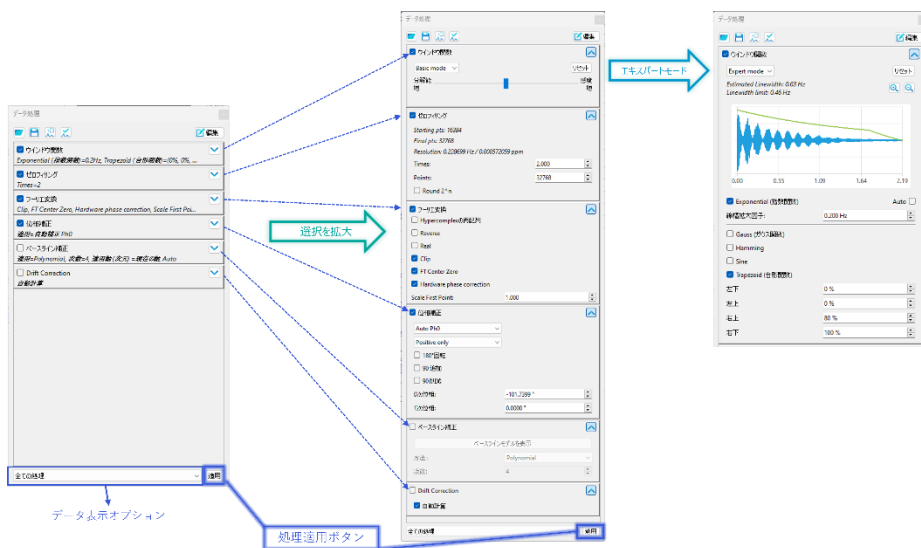


図 26：処理パネル

処理リストに加えられた変更は、処理リストの下部にある「適用」ボタンを押すことで適用されます。処理リストの全ての項目には、名前の左側にチェックボックス、右側に開閉トグル矢印があります。チェックボックスは、その処理ステップをオンまたはオフにすることができます。ステップをオフにするには、チェックボックスのチェックを外し、「適用」ボタンを押します。名前の右側のトグル矢印を展開すると、処理ステップに関連するパラメータやオプションを確認、変更することができます。いくつかの処理ステップには、基本モードとエキスパートモードという拡張されたモードがあります。

処理」パネルの上部には、実験認識システムによって判別された実験タイプが表示されます。その左側には、処理リストの読み込みおよび保存を行うためのボタンがあります。現在の処理リストは .jlp

（JSON Processing List）形式または .cip（コンパクト形式）で保存でき、後で「処理リストを開いて適用」ボタンまたはファイルのドラッグ＆ドロップにより適用できます。また、「処理リストの編集」ボタンをクリックするとダイアログが開きます。この機能については「処理ステップの追加」の節で詳しく説明します。

ウィンドウ関数：ウィンドウ関数のオプションとパラメータが表示されます。Basic モードと Expert モードの両方が利用できます。利用可能なアポダイゼーション関数に加えて、「分解能 増」と「感度 増」が利用できます。また、「インタラクティブを開く」ボタンを押すと、FID とアポダイゼーションエンベロープが表示されるインタラクティブモードに切り替わります。

ゼロフィリング : ゼロフィリングに使用できるオプションが表示されます。ゼロフィリングは、元のデータポイント数の 10 倍未満の係数、または最終ポイント数を与えることでそれを定義します。

フーリエ変換：フーリエ変換の全てのオプションが表示されます。その中のいくつかのオプションは、2D スペクトルの間接観測軸の処理にのみ有効なものです。

位相補正：位相補正のオプションが表示されます。手動ボタンは、コンテキストツールバーの手動位相補正モードに相当します。手動モードに加えて、次の選択肢があります。

- 1) Auto：このモードでは、位相補正は自動的に実行されます。
 - 2) Custom：このモードでは、下のダイアログボックスに値を入力することにより、位相補正を手動で変更できます。
 - 3) Absolute：スペクトルは絶対値で表示されます。
 - 4) Auto Ph0：0 次位相は自動的に補正され、1 次位相補正は 0 に設定されます。
- 2)Custom と 4)AutoPh0 を選択すると、Ph0 位相と Ph1 位相には、現在の 0 次および 1 次の位相補正が表示されます。Custom モードでは、手動で位相を変更するために使用できます。Invert 180" チェックボックスは、現在の位相に 180 度の 0 次位相補正を適用します。位相の揃ったスペクトルの場合、これは実質的に全てのピークを反転させることになります。

除外領域：位相補正およびベースライン補正のセッションではスペクトルの一部の領域を除外領域として設定できます。これらの領域は自動ピークピッキング、自動積分、ベースライン補正などの NMR の処理で除外されます。除外領域は既存の積分領域を利用して以下の手順で作成できます。

1. 除外する領域を示す積分領域を設定する。
2. 対象となる処理ステップ（ベースライン補正または位相補正）のパネルを展開し、除外領域のセッション内の「積分から取得」ボタンを押します。作成された無視領域の数に応じて「除外領域：N」（N は除外領域数）に変わります。
3. この時点で積分領域は削除できます。無視領域は対応する処理ステップのパラメータとして保存され、処理テンプレートの一部となります。サポートされている各処理ステップごとに異なる無視領域を設定できます
4. 「適用」をクリックすると、設定した除外領域を使用して処理が実施されます。
5. 「除外領域」のセッション内にある「クリア」ボタンを押すと、保存されている除外領域が削除されます。
6. 「除外領域」セッション内の「目」のボタンを押すと、保存されている除外領域が NMR プロット上にグレー表示されます。除外領域は 2D の積分領域が楕円形であっても常に四角形に作成・表示されます。

ベースライン補正：ベースライン補正には、Polynomial、Cubic Spline、Linear Spline、Whittaker、Bernstein、Akima Spline の各オプションがあります。各オプションのパラメータはこのセクション内で変更できます。「ベースラインモデルを表示する」ボタンを使用すると、結果をプレビューでき、ベースラインポイントを操作するためのインタラクティブツールを利用できます。必要に応じてポイントの位置、点数、ベースライン上の位置を決める平均化点数を調整し、結果を確認します。終了を選択することで手動モードは終了します。各ボタンやコントロールにカーソルを合わせると、その機能の簡単な説明を示すツールチップが表示されます。

データ表示オプション：処理のステップ毎にデータを表示できます。オプションは次のとおりです。

- 1) 生データの表示：時間領域データ（FID）を表示します。
- 2) タイムドメインの処理のみ：F2 時間領域処理。処理後、フーリエ変換前の時間領域信号を表示します。
- 3) フーリエ変換の後：フーリエ変換直後の周波数領域データを表示します。
- 4) 全ての処理：全ての処理の適用後のデータを表示します。

リストを編集：新しいデータセットが開かれたとき、JASON はデータに保存された処理リストを読み、解釈し、自動でそれを適用しようとします。ユーザーの任意の処理手順を実行する場合、処理パネルの右上隅にある「処理の編集」ボタンを使用して、処理の追加や変更ができます（図 27）。処理の編集ダイアログでは、左側のパネルに利用可能な処理項目のリストが表示されます。右側のパネルには、現在の処理リストが表示されます。新しい処理項目（ステップ）は、左側のパネルからドラッグして右側のパネルにドロップすることで、リストに追加されます。デフォルトモードでは、JASON は自動的に処理項目をリスト内の最も適切な位置に配置します。処理項目を削除するときは、右側のリストで項目を選択し、delete キーを押すことでその処理を削除することができます。一度選択したものは、OK ボタンを押すと処理リストが更新されます。

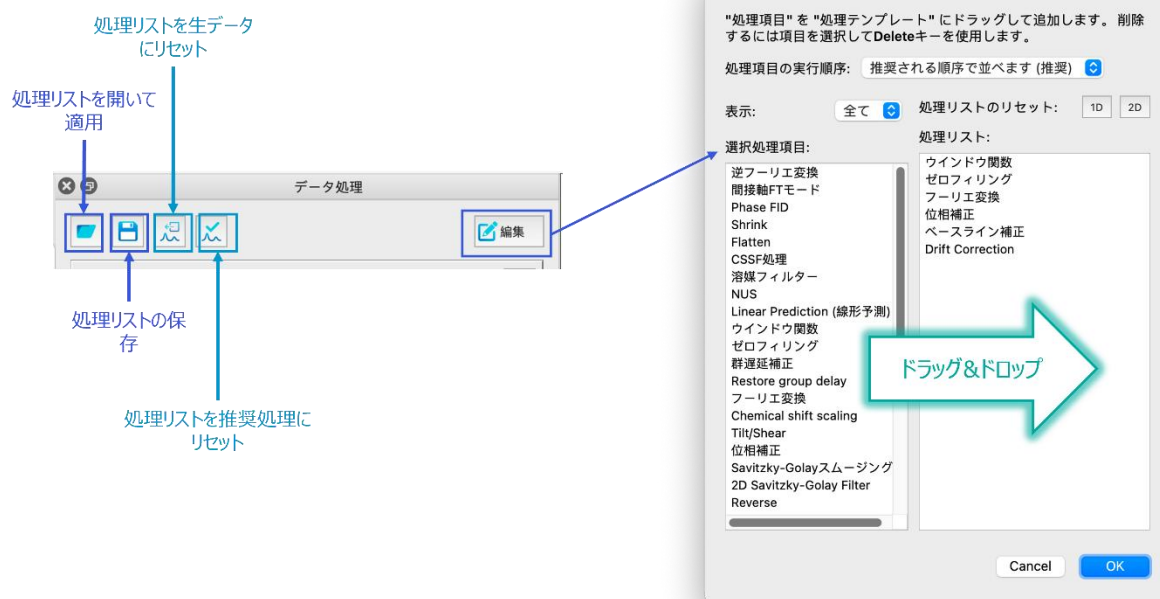


図 27 : 処理テンプレートの編集

リストの編集-設定 : デフォルトでは、JASON は各処理項目を最も適切な順序で自動的に配置します。処理の順序を変更したい場合は、処理テンプレートの編集ダイアログの右上隅にある設定ボタン（歯車）を押すことで行うことができます（図 27）。編集モードのドロップダウンリストが表示され、以下の3つのモードを選択出来ます。1）推奨される順序で並べます。（推奨）、2）問題のある順序を警告します、3）自由に並べます。（熟練者向け）。2）と3）のモードで、処理項目の追加、並び替えが出来ます。ただし、3）を選択した場合は、たとえ処理リストに不適切な箇所があっても警告はなされません。

テンプレートの保存と読込 : 処理パネル左上隅のボタンにより、処理テンプレートの読み込み、また編集したリストの保存が出来ます。

3.6 解析パネル

解析パネルには、解析ツールのリストが含まれています。図 28 には、1D スペクトルに適用されるパネルが示されています。

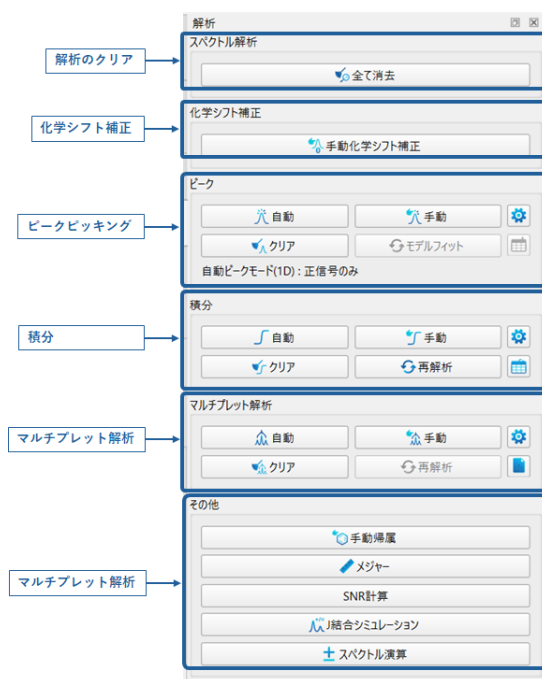


図 28：解析パネル

全て消去: 実行されている全ての解析をクリアします。

化学シフト補正(R): リファレンスモードでは、スペクトル上のピークまたは位置を選択し、化学シフトを任意の値に設定することができます。選択するには、マウスでカーソルを希望の位置まで移動させ、左クリックでリファレンスダイアログを表示させます。デフォルトモードでは、カーソルは最も近いピークに設定されることに注意してください。自由に選択するためには、Ctrl キーまたは Cmd キーを押したままにしてください。

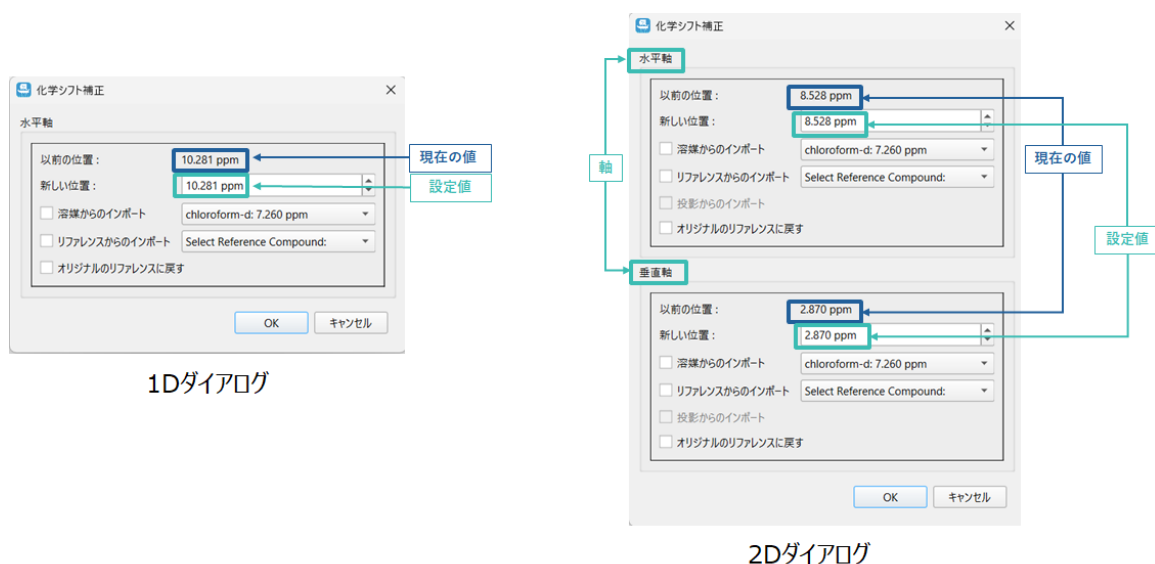


図 29 : リファレンスダイアログ

リファレンスダイアログを図 29 に示します。選択したピークの現在の化学シフト値が表示されるので、そのテキストボックスに新しい値を入力します。2 次元スペクトルの場合、ダイアログボックスにはスペクトルの各次元に対応する行が含まれます。

ピーク：ピークピッキングには 2 つのモードがあります。手動ピークピックは、コンテキストツールバーのピークピッキングモードと同じです。

自動ピークピッキングでは、ピーク強度のしきい値が求められます。ユーザーは画面に現れるしきい値のラインをマウスで設定し、OK を押すとピークピックがなされます。このときのしきい値は、拾われるピーク自体を変更するものではありません。ピークピックはしきい値に関わりなくスペクトル全体の全てのピークに対して行われますが、ピークラベルはしきい値より大きいピークにだけ振られます。

自動ピークピッキングの追加オプションについては、「NMR の設定」の「ピーク」セクションで詳しく説明します。

“モデルフィット”ボタンは、既存のピークに対してフィッティングを実行します。ピークの追加・削除やピークテーブルのパラメータ変更などを行った後に、フィッティング済みピークモデルを得るための便利なツールです。これは現在のモデルに対して追加のフィッティング反復を強制的に実行することと同等です。

ピークピッキング後の個々のピークの操作については、コンテキストツールバーの「ピークピッキング」セクションの説明と同じです。“クリア”ボタンにより、ピックした全てのピークを消去することが出来ます。右側にある設定ボタン（歯車）は、NMR 設定ウィンドウのピークタブのページを開きます。この内容については、NMR の設定のセクションで説明しています。

積分：積分には2つのモードがあります。手動による積分はコンテキストツールバーの積分モードと同じです。自動積分は、単一のマルチプレットに属する可能性が高いピーク群のグループを含む積分領域にスペクトルを分離しようとします。積分モードは1D、2D および疑似2D スペクトルで使用できます。積分領域とラベルの操作は、クリアボタンは、スペクトル全体の全ての積分をクリアします。積分領域およびラベルの操作については、コンテキストツールバーの「積分」モードの説明と同じです

積分ベースラインは、以下の[○]でハイライトされたコントロールポイントを使用して調整することができます。いずれかのコントロールポイントにマウスカーソルを置くと、そのコントロールポイントが何をするのかを説明するポップアップヘルプが表示されます。

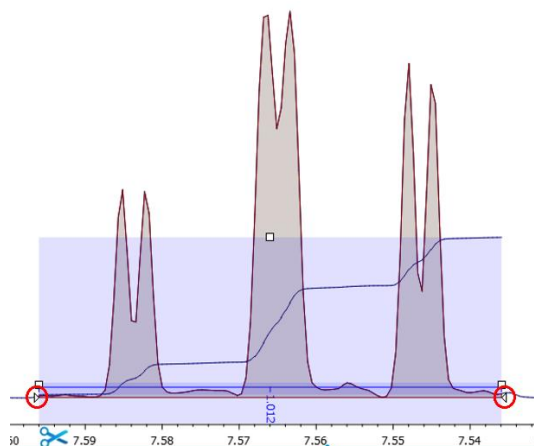


図 30：積分ベースラインのコントロール位置

“クリア”ボタンを押すことで、スペクトルにある全ての積分を消去します。

マルチプレット解析：マルチプレット解析には2つのモードがあります。手動モードはコンテキストツールバーのセクションで説明したマルチプレットモードと同じです。自動モードではピークピッキングを実行し単一のマルチプレットに属すると考えられるピークをグループまたは領域に分類します。これは、ピークピッキングおよび積分解析の処理で行われるものと同様です。事前にピークピッキングが実施されている場合は、その結果を利用して各領域および領域内のピークに対するマルチプレット解析を実施します。マルチプレット解析モードは1D および2D スペクトルの両方で利用できます。

それぞれのマルチプレットは範囲の拡張、ピークの追加、またはマルチプレットからのピークの除去によって編集できます。変更内容に問題がなければ「再解析」ボタンを押して再実行できます。「クリア」ボタンを押すと全てのマルチプレットが削除されます。

手動帰属 (A)：分子構造と組み合わせて使用し、スペクトル上のマルチプレットまたはピークを構造内の原子に帰属することができます。これは、ピークまたはマルチプレットのラベルを左クリックで選択し、そのまま分子構造上の原子にドラッグすることで行います。選択された原子は、マルチプレット場合はその中心の化学シフトが、単一のピークの場合はピーク位置が割り当てられます。

測定ツール (D) : 「Measure」ツールは、スペクトル上の 2 点間を正確に測定することができるツールです。詳細は後述します。

SNR 計算 : 信号領域およびノイズ領域を選択するためのツールです。詳細は後述します。

J 結合シミュレーション : JEOL J-結合シミュレーターパネルが表示され、シミュレーションスペクトルを作成することができます。

スペクトル演算 : 演算パネルを開き、スペクトルの加算や減算を行うことができます

メジャー(D) : 「メジャー」ツールは、スペクトル上の 2 点間で正確な測定を行うことができます。解析パネルにある「メジャー」モードを選択すると、2 つのタブを含むダイアログが開きます。そのうちの 1 つには「計測」のオプションがあります。

- 単一オプション：単一の測定を行いこのモードでは新しい測定を行うと前の測定は削除されます。
- 複数オプション：ユーザが作成した各測定を保持します。

計測を行うには、マウスでスペクトル上の最初の点を選択し、左クリックしたまま終了点までドラッグします。「ピークにスナップする」オプションを選択すると、カーソルは最も近いピークの頂点にスナップします。選択しない場合は、開始点と終了点を自由に選択できます。測定が完了すると、開始点に座標を示すラベルが作成され、終了点にもラベルが作成されます。終了点のラベルには終了点の座標と、開始点との座標差が表示されます（図 31 参照）。

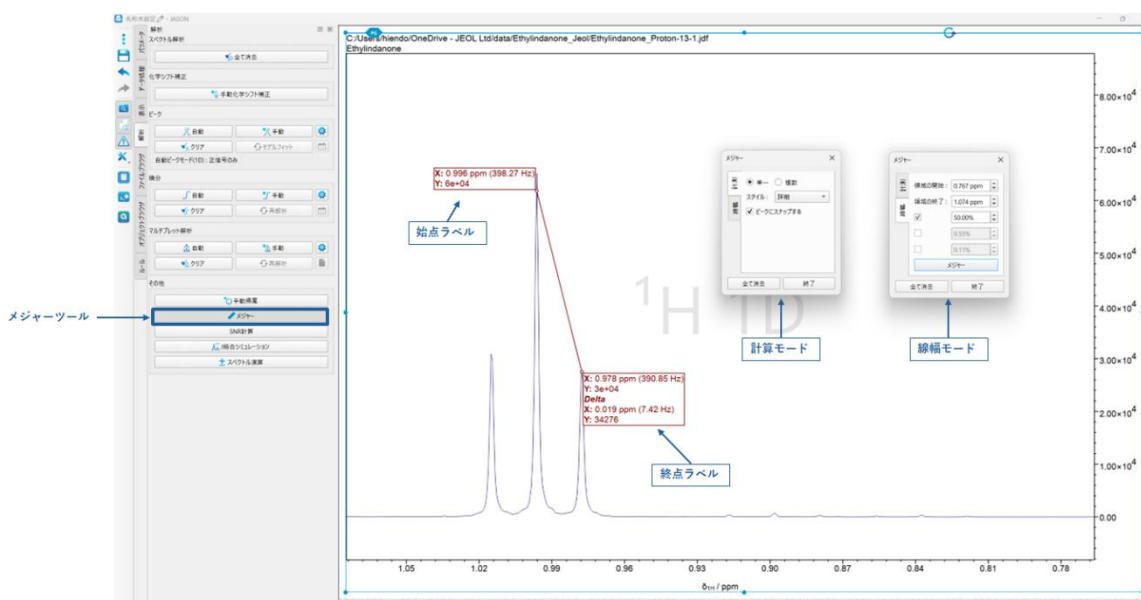


図 31：メジャーツール

「全て消去」ボタンは現在の全ての測定を削除します。特定の測定は、測定線にカーソルを合わせると表示される赤いバツ印をクリックすることで削除できます。

「終了」ボタンをクリックすると、「メジャー」ダイアログが閉じ、モードを終了します。「表示」パネルには、メジャーモード外で測定の表示を切り替えるチェックボックスがあります。

線幅ツールは「メジャー」ダイアログの 2 つ目のタブで、「メジャー」ツールの一部です。（図 31 では、説明のために「計算」と「線幅ツール」を並べて表示しています。）測定対象の NMR スペクトルでは、ピーク範囲は現在の表示範囲から取得されます。このルーチンは範囲内の最大強度点を検索し、両側に降下して幅を測定します。同時に 1～3 つの測定を作成できます。追加測定のチェックボックスを切り替え、測定点の強度を入力します（デフォルトは 50%、0.55%、0.11%）。「メジャー」をクリックするとプロット上に測定が作成され、問題が検出された場合は「警告」ポップアップで報告されます。測定は「Delta Hz」スタイルの標準 JASON 測定です。測定テーブルなどに報告できます。「全て消去」ボタンは現在の全ての測定を削除します。この操作は元に戻すことができます。

SNR 計算ツール

SNR 計算ダイアログでは、スペクトル上の領域インジケータのコントロールポイントを使用して、シグナル領域およびノイズ領域を設定できます（図 32）。追加のシグナル領域は、ダイアログ内の「+」アイコンを使用して追加できます。新しいシグナル領域を追加すると、その領域はスペクトルの右端に表示され、「始点」および「終点」欄に数値を入力して編集できます。シグナル領域は「ゴミ箱」アイコンを使用して現在編集中のシグナル領域を削除します。ただし、シグナル領域が 1 つしか残っていない場合は使用できません。矢印ボタンを使用すると複数のシグナル領域を切り替えることができます。シグナル領域の順序はプロット上の位置ではなく、作成された順序に基づきます。SNR ラベルの表示/非表示は、「表示」パネルの「SNR の表示」チェックボックスで制御できます。

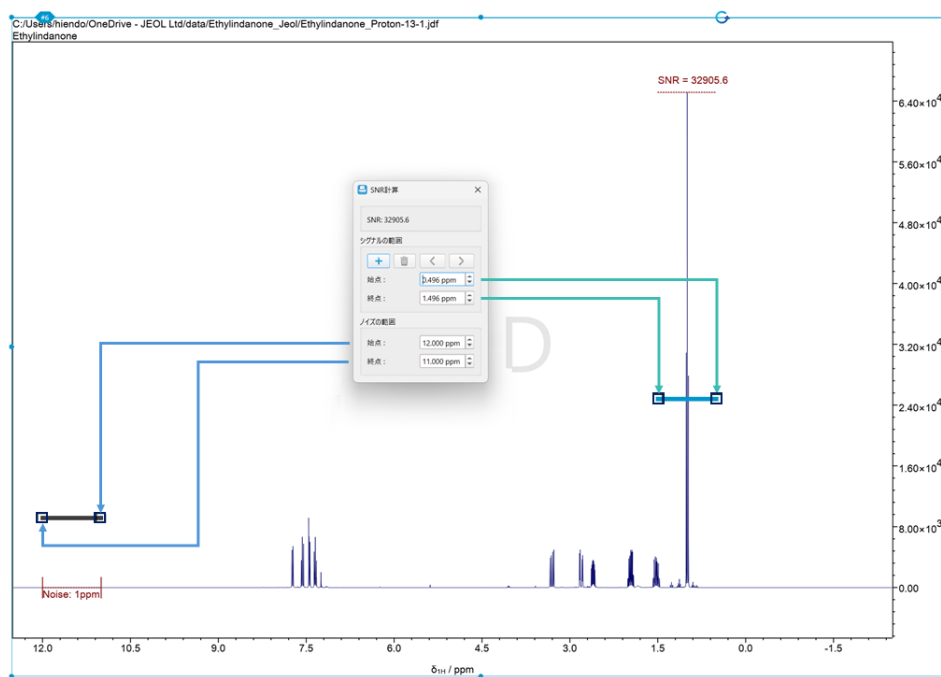


図 32 : SNR 計算ツール

3.7 パラメータパネル

パラメータパネルは 2 つのタブで構成されており、パラメータタブは選択されたデータで利用可能な全てのパラメータのリスト、レポートタブはパラメータテーブルが作成されている場合に表示される全てのパラメータのリストです。図 33 は典型的な 1D NMR スペクトルのパラメータパネルの 2 つのタブを示しています。

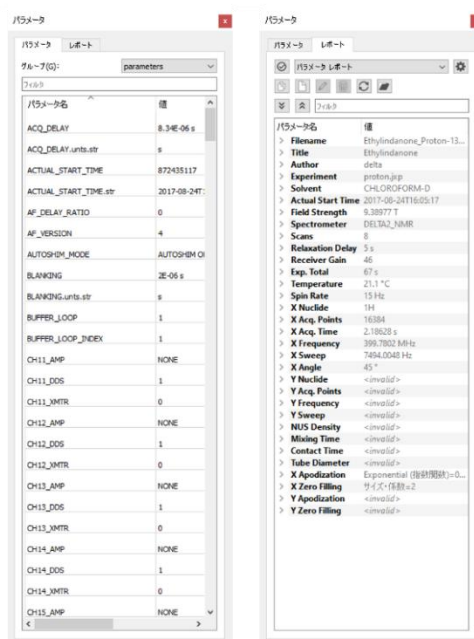


図 33 : パラメータパネル

3.8 テーブルツールパネル

テーブルが作成され、かつアクティブ項目として選択されている場合、テーブルツールパネルが表示されます。テーブルツールパネルでは、テーブルの表示をカスタマイズすることができます。テーブルの設定は、"出荷時設定に戻す" ボタンをクリックして工場出荷時の設定に戻すか、"デフォルト値として設定" ボタンをクリックして新しい設定をデフォルト設定として保存することが可能です。

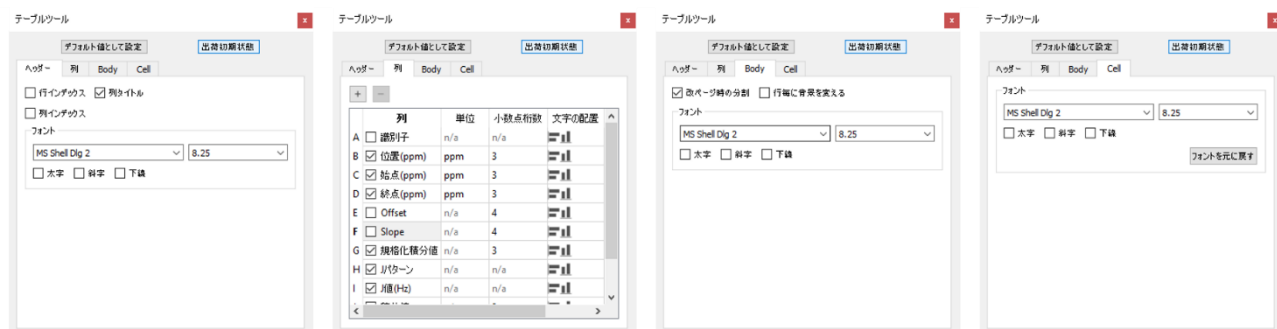


図 34 : テーブルツールパネル

ヘッダー タブには、テーブルのヘッダーに関する設定が含まれています。行インデックスと列インデックスチェックボックスは、行と列のインデックスを表示します。これは、テーブルのカスタム列で式を使用する場合に特に便利です（図 34）。

列 タブでは、カスタム列（「+」、プラス、または「-」、マイナス、ボタン）の追加や削除、単位の設定、小数点以下の桁数の調整、列全体のフォントのカスタマイズ、列エントリの整列の設定、値のフィルタリングを行うことができます。個々のフォントのセル設定は、列の設定よりも優先されることに注意してください。カスタム列の追加は、より多くの情報を手動で表に追加する場合に便利です。カスタム列のセルに数字、文字列、エクセルのような数式を追加することが可能です。

Body タブには、表本体のフォントに関する一般的な設定が含まれています。

Cell タブでは、選択したセルに対してフォントを設定することができます。

3.9 チャートツールパネル

チャートは、表の項目を選択し、右クリックで表示されるメニューから「チャートの作成」オプションを選択することで作成できます。チャートが作成され、アクティブな項目として選択されると、チャートツールパネルが表示されます。チャートツールパネルでは、チャートの表示方法をカスタマイズすることができます。標準のキーボードショートカットを使います：Ctrl + U (Cmd + U)でズームの取り消し、Ctrl + I (Cmd + I)でチャートのズームのやり直し。

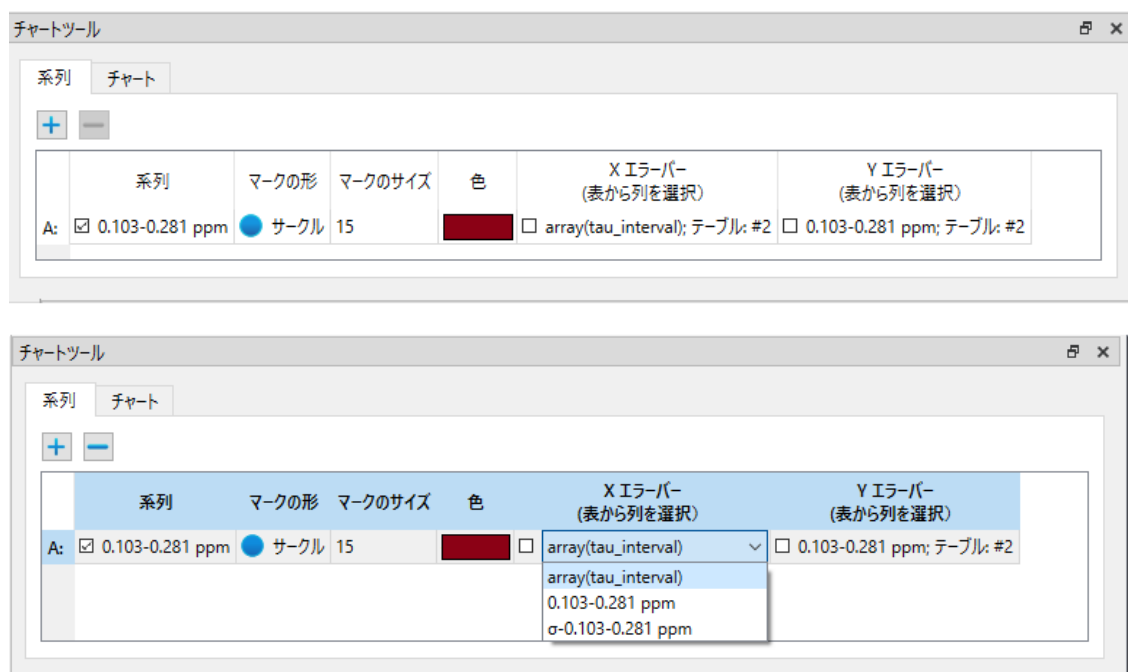


図 35 : チャートツールパネル、シリーズタブ

系列タブには、さまざまな系列にわたってデータを視覚的に表示するための設定が含まれています。系列チェックボックスは、表のどの列のデータを表示するかを選択することを可能にし、データ・ユニット・マーカー設定（マークの形、サイズ、色）は、データの精度表現（XとYのエラーバー）とともに、このデータがチャート上でどのように視覚的に表示されるかを決定します（図 35）。

表のどの列をエラーバーの描画に使用するかを選択することで、データ精度の視覚表現（エラーバー）パラメータを設定できます。これは、「系列」タブの「チャートツール」で「X エラーバー」または「Y エラーバー」カラムを編集する際に表示されるドロップダウンメニューからカラムを選択することで実現できます。ピークテーブルから系列を作成する場合、エラーバーの描画を担当する列は、X および Y データポイントの両方に対応するエラー列として自動的に選択されます。エラーバーに加えられた全ての変更は、Redo/Undo によってサポートされ、保存することができます。

注：エラーバー機能は、表から取得したデータに対してのみ有効であり、「Fit Data」（ベストフィットの折れ線シリーズ）からは使用できません。

チャートタブでは、チャートのパラメータを調整でき、凡例と軸に関する設定が含まれます。軸の表示/非表示の切り替えや、軸範囲の変更は元に戻す/やり直すに対応しています。対応するボタンは「軸の範囲」セクションにあり、Ctrl + U (Cmd + U) で元に戻し、Ctrl + I (Cmd + I) でやり直すことができます。デフォルトでは、チャートの水平軸は左が最小値、右が最大値、垂直軸は下が最小値、上が最大値となります。ただし、軸方向を反転して表示することもできます（水平軸：右が最小値、左が最大値、垂直軸：上が最小値、下が最大値）。例えば、化学シフトを横軸に表示する場合、スペクトル表示と一致するように水平軸を反転表示すると便利です。「向きを反転（最大→最小）」オプションは、「軸の範囲」セクション内の各軸ごとに用意されています

軸のプロパティをデフォルトに設定するための制御は、「軸のプロパティ」セクションにあります。これらは、JASON のグローバルな元に戻す/やり直しに対応されています。チャートツールの描画の水平軸および垂直軸の設定は変更内容を反映してリアルタイムに更新されます。

チャート設定は、「工場出荷時の設定に戻す」ボタンで工場出荷時の設定に戻すことができ、「チャート」タブの「デフォルトに設定」ボタンを押して現在の設定を新しいデフォルト設定として保存することができます。歯車'ボタンをクリックすると'グローバル設定'ダイアログが開きます（図 36）。



図 36 : チャートツールパネル、チャートタブ

チャート表示パラメータに関する追加設定は「設定」ダイアログの「チャート」タブで行えます。これらの設定は、「表」タブの場合と同様に、デフォルト設定のみに適用され、現在アクティブなチャートには影響しません。

4 レポート：テーブルとパラメータ

ピークピッキング、積分、または一連のマルチプレットを作成した後は、レポート作成のためにそれらのデータを表形式で表示すると便利です。また、表だけでなく、[Save As] を使用してテキスト項目を .txt ファイルとして保存することもできます。この場合、プレーンテキストの内容が保存されます

4.1 テーブル

JASON でテーブルを作成するには、オブジェクトを右クリックしてコンテキストメニューを表示します。メニューの下部には「Create」オプションがあり、その中に 5 つのオプションを含むメニューがあります。これらのオプションは、対応する解析が実行されている場合にのみ選択できます。テーブルをコピー/ペーストするには、テーブルをアクティブ項目として選択し、Ctrl+C (Cmd+C) でコピー、Ctrl+V (Cmd+V) で貼り付けます。行またはセルが選択されている場合（青色でハイライト表示される）、選択された項目のみがコピーされます。Ctrl を押しながら列ヘッダーをクリックすると、列全体を選択できます。

「切り取り」および「削除」操作はコンテキストメニューから利用できます（選択されたセルのうち少なくとも 1 つの内容が編集可能な場合）。ただし、「パラメータ」テーブルでは例外的に、選択された項目が編集可能かどうかに関係なく、「削除」と「切り取り」が有効です。「切り取り」操作は JASON の元に戻す/やり直しに対応しています。

テーブルタイトルには、既定では作成元を表す名前が設定されます。例えば、キャンバス上の項目 #3 のスペクトルから作成されたピークテーブルには、「Peak Table from #3」というタイトルが付けられます。テーブルタイトルは、スペクトルタイトルと同様に、タイトルをダブルクリックすることで編集できます。テーブルタイトル編集ダイアログには、テーブルタイトルや親タグ用のプレースホルダを挿入するためのツールボタンがあります。

以下のプレースホルダを使用可能：

`${object_title}` - テーブルのタイトルに置き換えられます。

`${tag}` - テーブルの作成元となった親オブジェクトのタグに置き換えられます。

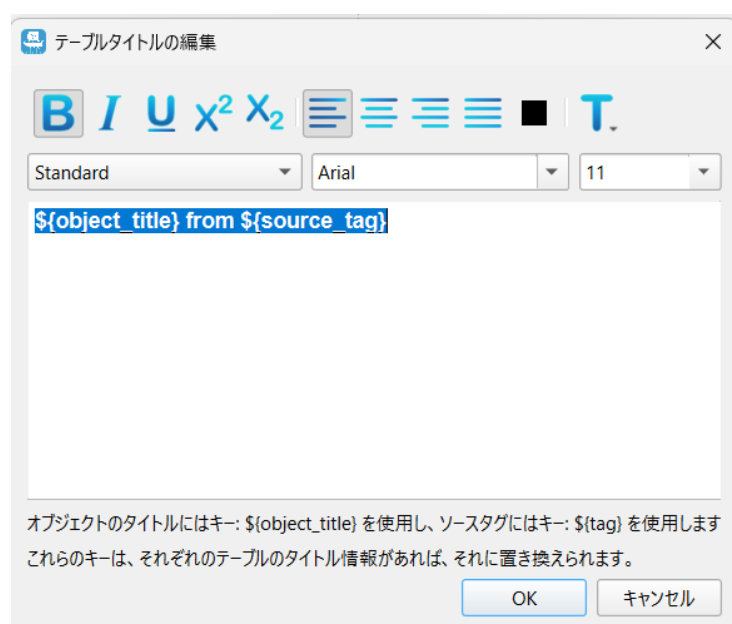


図 37 : テーブルタイトル編集ダイアログ

表の境界線とグリッドは、「表ツール」パネルのチェックボックスを使用して表示/非表示を切り替えることができます。境界線およびグリッドのデフォルト設定は、「設定」メニューから設定できます。任意のセルから横幅および行の高さを手動で直接調整できます。この操作は、元に戻る/やり直すに対応しています。

テーブルを右クリックすると、さまざまな便利なオプションを含むコンテキストメニューが表示されます。コンテキストメニュー内の「垂直方向に展開」オプションを選択すると、テーブルが縦方向に最大まで展開され、全ての行が表示されます。

アクティブな項目がテーブルの場合、「別名で保存」を使用して .txt ファイルとして保存できます。テーブルの内容は、タブ区切りテキスト形式で保存されます。

4.1.1 パラメータレポート

作成メニューのパラメータレポートオプションを選択すると、スペクトルの横にパラメータテーブルが配置されます（図 38）。パラメータテーブルの内容は、パラメータレポートタブで定義されます。パラメータテーブルは、JASON の他のオブジェクトと同様にキャンバス上で操作することができます。グラブタグを使用すると、テーブルを任意の場所にドラッグ＆ドロップでき、ドラッグポイントを使用すると、テーブルのサイズを変更することができます。

JASON では、パラメータはベンダー定義の順序で表示されます。名前列のヘッダーをクリックすると、パラメータをアルファベット順（A→Z または Z→A）に並べ替えることができます。

パラメータテーブルの行の順番は、行を左クリックし、テーブルの上下にドラッグすることで変更することができます。パラメータテーブルを選択すると、パラメータパネルとテーブルツールパネルがタブに追加されます。パラメータパネル（図 39）から、表示されている表に直接新しい項目をドラッグして項目を追加することもできます。

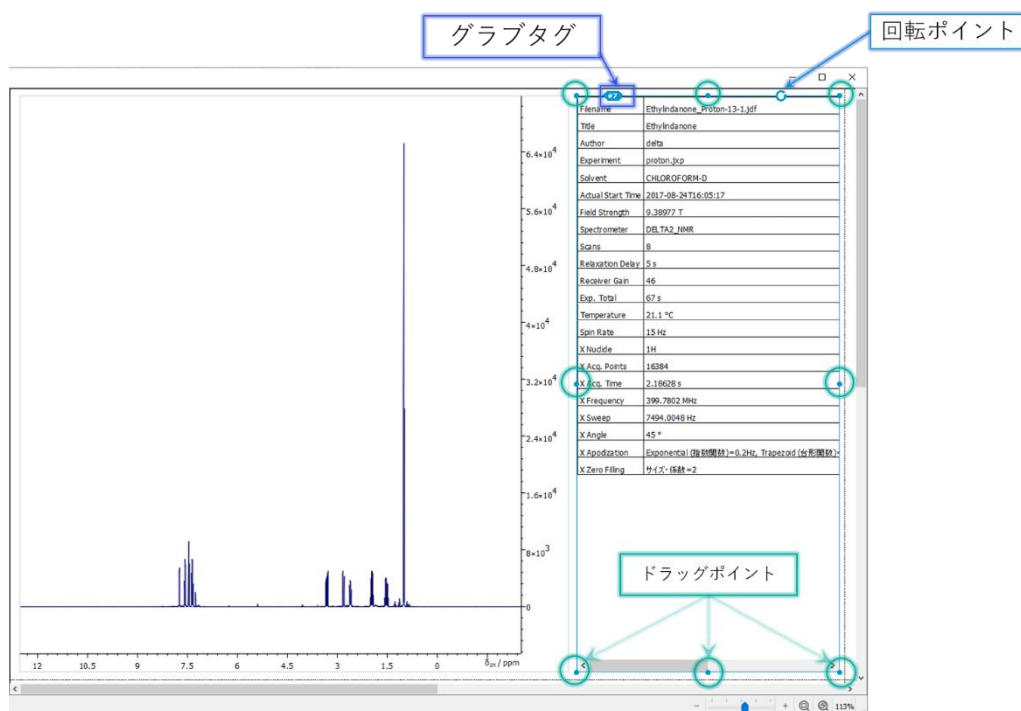


図 38 : パラメータテーブル

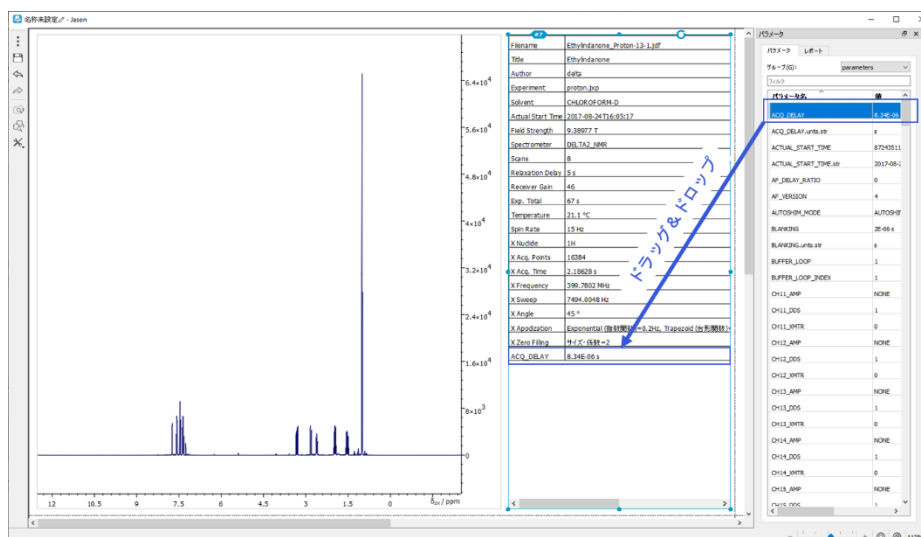


図 39 : パラメータテーブルへの追加

4.1.2 処理テーブル

作成メニューの処理レポートオプションは、スペクトルの横に処理テーブルを配置します（図 40）。処理テーブルの内容は、スペクトルに適用された処理ステップによって定義されます。処理テーブルは JASON の他のオブジェクトと同様にキャンバス上で操作することができます。grab タグを使用すると、ユーザーがテーブルを好きな場所にドラッグ＆ドロップすることができ、ドラッグポイントを使用すると、テーブルのサイズを変更することができます。テーブルの行の順番は、位置を変更したい行を左クリックし、それをテーブルの上下にドラッグすることで行います。

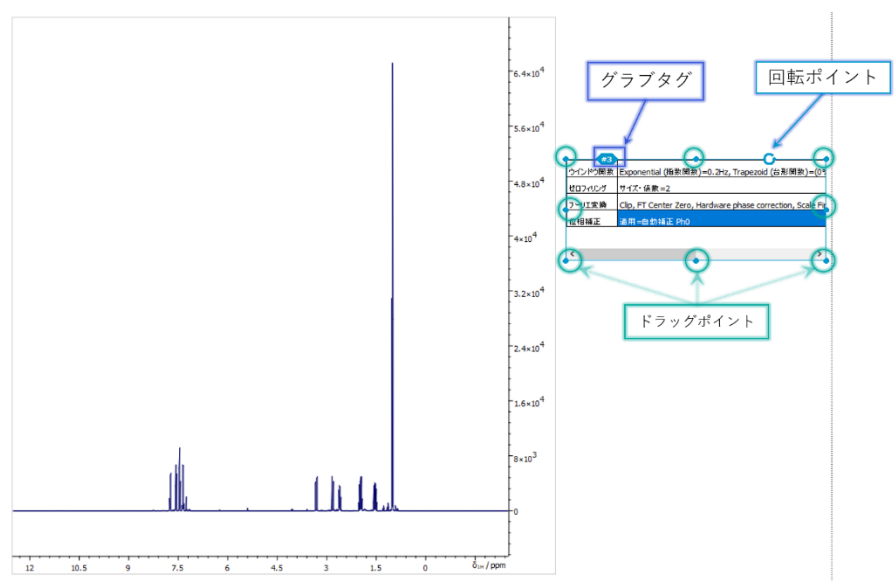


図 40 : 処理レポート

4.1.3 ピークテーブル

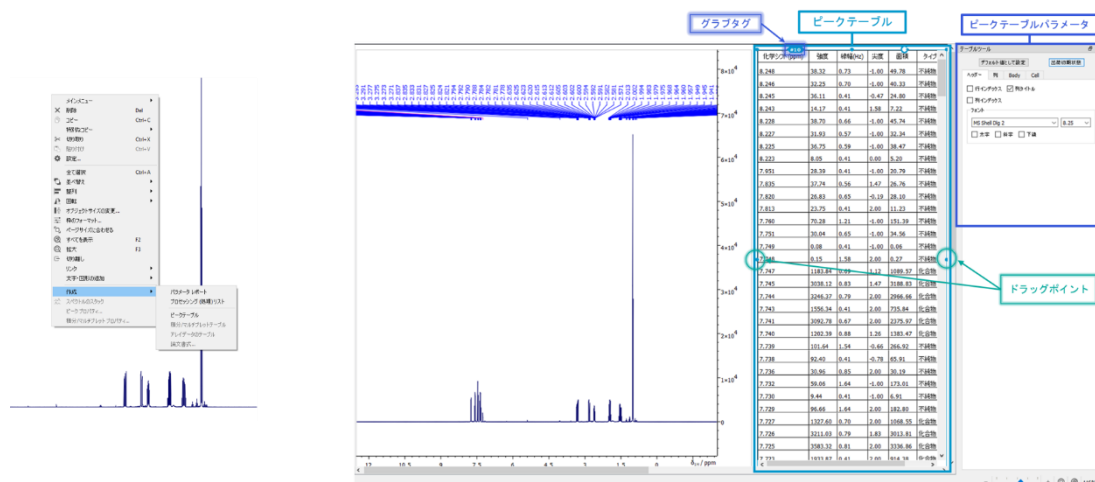


図 41 : ピークテーブル

ピークピッキングを実行すると、マウスの右ボタンで表示されるメニュー中の「作成」からピークテーブルオプションが選択可能になります（図 41）。このオプションを選択すると、スペクトルの横にピークテーブルが作成されます。作成された表は、グラブタグを使って位置を移動させたり、ポイントをドラッグさせたりして大きさを変えたりなどの操作をすることができます。表が収まるボックスが表のサイズより小さい場合、表示位置を動かすためのスクロールバーが現れます。ピークテーブルに加えて、「テーブルツール」パネルも作成されます。このパネルでは、テーブルに表示する列を選択できます。また、テーブル内の文字のフォントやサイズ、および各値の表示桁数（小数点以下の桁数）を変更できます。「改ページ時の分割」チェックボックスをオンにすると、テーブルが複数ページにまたがるサイズに変更された場合、自動的に分割されます。「垂直方向に展開」オプションを使用すると、テーブルが縦方向に展開され、全ての行が表示されます。この機能は、テーブル本体（セル）を右クリックして表示されるコンテキストメニューから利用できます。

表の列の順番は、列の最初のセルを左クリックし、好きな位置までドラッグすることで変更することができます。

4.1.4 積分/マルチプレット解析テーブル

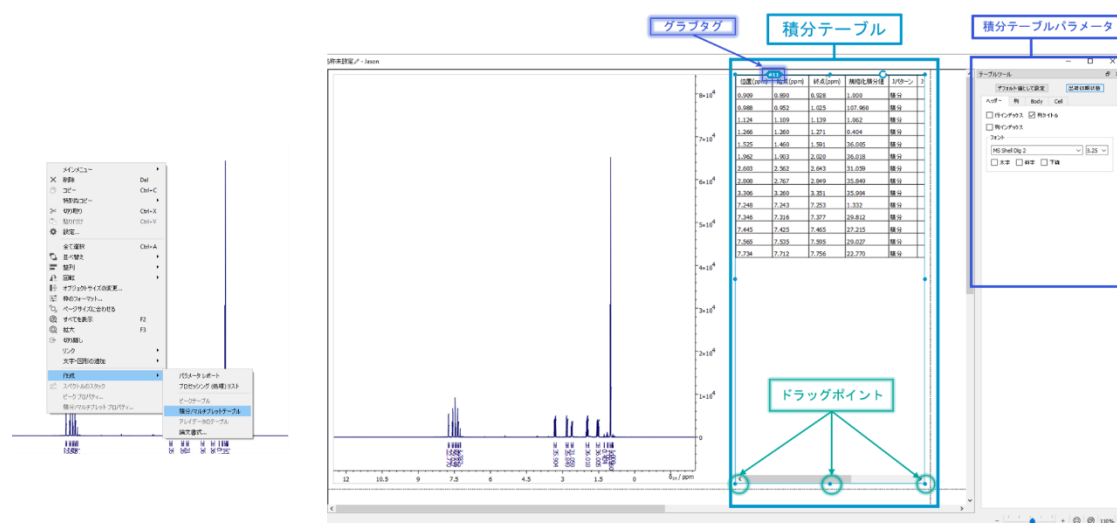


図 42：積分テーブル

積分またはマルチプレット解析が実行されると、マウスの右ボタンで表示されるメニューにある「作成」メニューから積分/マルチプレットテーブルオプションが選択可能になります（図 42）。このオプションを選択すると、スペクトルの横に積分/マルチプレットテーブルが作成されます。この表は、グラブタグを使って表の位置を移動したり、ポイントをドラッグして表の大きさを変えたりして操作することができます。表を含むボックスが表のサイズより小さい場合、表には水平方向と垂直方向の移動のためのスクロールバーが表示されます。積分/マルチプレットテーブルに加えて、「テーブルツール」パネルも作成されます。このパネルでは、テーブルに表示する列を選択できます。また、テーブル内の文字のフォントやサイズ、および各値の表示桁数（小数点以下の桁数）を変更できます。「改ページ時の分割」チェックボックスをオンにすると、テーブルが複数ページにまたがるサイズに変更された場合、自動的に分割されます。表の列の順番は、列の最初のセルを左クリックし、目的の位置までドラッグすることで変更できます。

マルチプレット解析が実行されている場合、「作成」メニューの「積分/マルチプレットテーブル」オプションでは、マルチプレットテーブルが表示されます。マルチプレットテーブルは積分テーブルと同様ですが、帰属されたマルチプレットの種類や、マルチプレット構造が正常に解析された場合には「結合」の情報も含まれます。

4.1.5 メジャーテーブル

メジャーが完了し、「メジャー」モードを終了すると、スペクトルを右クリックして「作成」メニューから対応するオプションを選択することで、メジャーテーブルを作成できます。テーブル内では、対応するセルをクリックして編集することで、開始点および終了点の位置を調整できます。ラベルに表示する情報の種類は、「スタイル」列の対応するセルをクリックした際に表示される「値を選択」ダイアログで、「詳細」と「Hz の差」から選択できます。この設定変更は、そのセルのみに適用されます。

4.1.6 マルチプレットレポート（論文書式の選択）

マルチプレット解析の情報は、上のマルチプレットテーブルのような標準的なものに加えて、学術雑誌で使用されているスタイルのものを作成することが出来ます。このレポートを作成するには、「作成」メニューのオプション、または「分析」パネルの「マルチプレット解析」セクションにある「マルチプレットレポートの作成」ボタンを使用します（図 43）。このオプションを選択すると、利用可能なジャーナル形式のドロップダウンリストが表示され、レポートを作成することが出来ます。このレポートは、JASON から原稿ヘカット＆ペーストすることが出来ます。また、右クリックのコンテキストメニューにある「フォント プロパティ...」を選択すると、選択したマルチプレットレポートのフォントおよび色を変更するためのダイアログが開きます。なお、このダイアログからテキスト内容を編集することはできません。

マルチプレットレポートには識別子ラベルを追加することもできます。このために、マルチプレットレポートテンプレートのオプションには %IDENTIFIER フィールドが用意されています。このフィールドをテンプレートに追加して適用すると、マルチプレット識別子がマルチプレットレポートに表示されます。（例： "... F: 1.96 (dq, J = 4.5, 7.5, 13.7, 1H), ..."）

帰属されている場合、識別子はスペクトル表示およびマルチプレットレポートの両方で、割り当てられた原子番号に変更されます。また、「積分/マルチプレット プロパティ」ダイアログで識別子を変更すると、その変更はスペクトル表示とマルチプレットレポートの両方に反映されます。

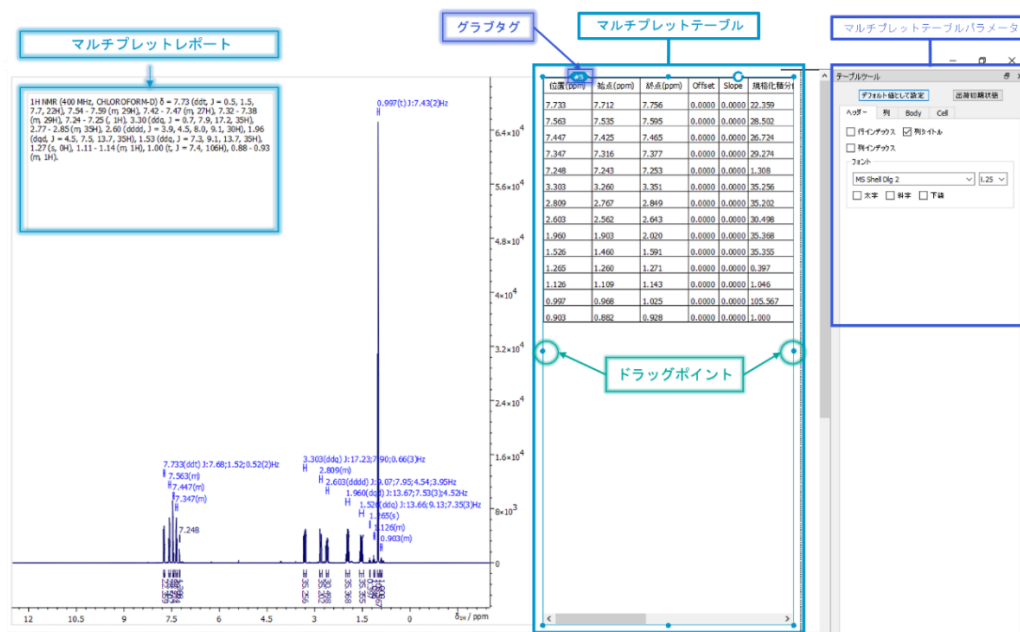


図 43：マルチプレットテーブルとレポート

4.1.7 カスタムテーブル

カスタムテーブルは、メインメニューの「新規→ カスタムテーブル...」から作成できます。また、キャンバス上で右クリックして表示されるメニューからも作成できます。作成時にはダイアログが開き、行数と列数を指定できます。新しく作成されたカスタムテーブルは、A、B、C などの列タイトルを除いて空の状態で作成されます。列見出しやセルのデータは後から編集でき、必要に応じて自由にカスタマイズできます。

行の追加および削除は、テーブルのコンテキストメニューから行うことができます。

「行を追加...」では、追加する行数を指定できます（元に戻す/やり直す 対応）。

「選択した行を削除」では、選択中の行を削除できます。この機能は行が選択されている場合のみ有効です（元に戻す/やり直すに対応）。

列の追加及び削除は「テーブルツール」パネルの「列」タブにある「+」および「-」ボタンを使用して行えます。

表の列タイトルは同じく「テーブルツール」パネルの「列」タブで変更できます。

4.1.8 フィッティングデータ

表データに対するフィッティング機能は、表内の項目を選択した後に表示される右クリックメニューから利用できます。

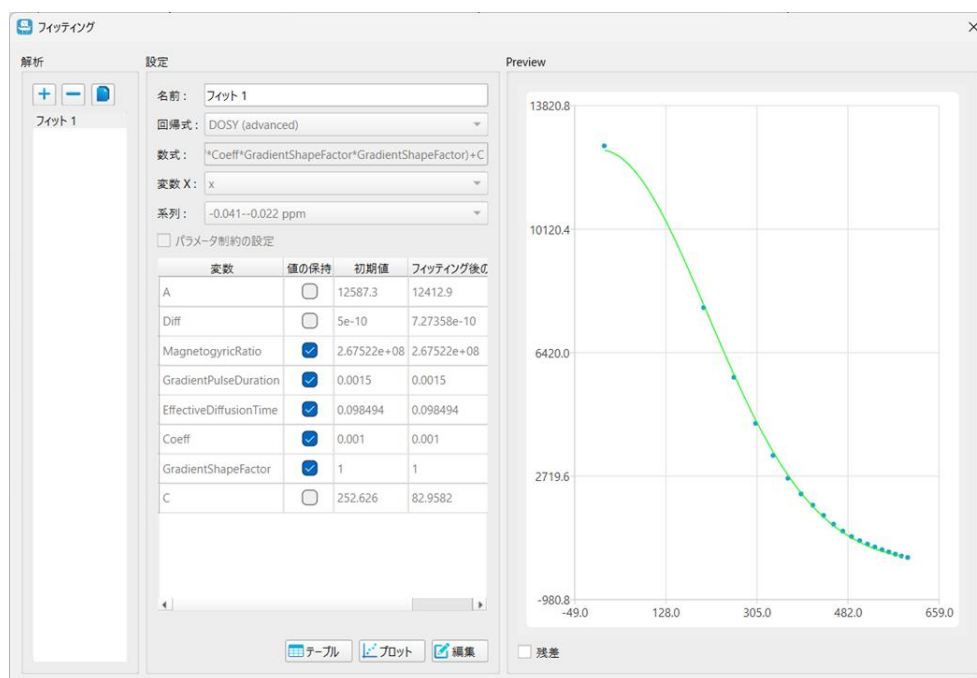


図 44 : フィットデータ ダイアログ

4.2 オブジェクトの印刷

JASON からオブジェクトをプリントアウトするオプションは、メインメニューにあり、現在アクティブなオブジェクトを右クリックした後に表示されるメニューからも可能です。

デフォルトでは、JASON はキャンバス上に現在存在する全てのオブジェクトを印刷に送ります。選択したオブジェクトを印刷するには、まずキャンバスでオブジェクトを選択し、"印刷" ダイアログの "範囲" セクションで "選択したオブジェクト" オプションを選択します (図 45)

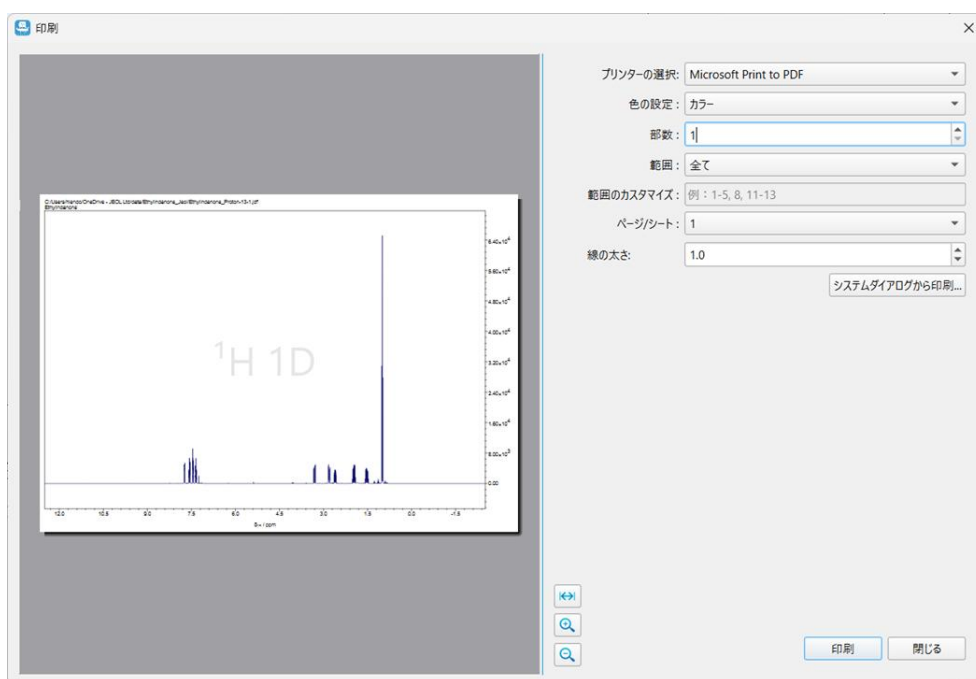


図 45 : 選択したオブジェクトを印刷する

5 設定メニュー

レイアウトや解析ツールの操作性をカスタマイズするための様々なオプションが用意されています。これらは、図 46 に示す設定メニューで制御します。

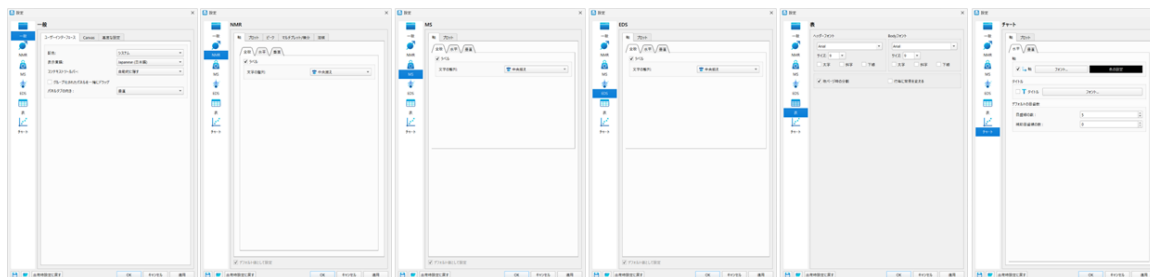


図 46：設定メニュー

設定メニューは、JASON の左上隅にあるメインメニュー、またはキャンバス内の任意の場所で右クリックして表示されるメニューからアクセスできます。「設定」メニューは、「一般設定」、「NMR 設定」、「テーブル設定」、「MS 設定」、「EDS 設定」、「表設定」、「チャート設定」のセクションで構成されています。これらの各セクションにはそれぞれ独自のタブがあり、以下で説明します。

出荷時設定に戻す：このボタンを押すと、設定中の全てのオプションが出荷時の初期値に設定されます。

5.1 一般設定

一般設定には 3 つのタブがあります（図 47）。各設定の変更は、変更後に適用ボタンを押すことで、または、OK ボタンを押して設定ダイアログを終了することで有効になります。キャンセルボタンを押すと、設定の変更が適用されずに終了します。

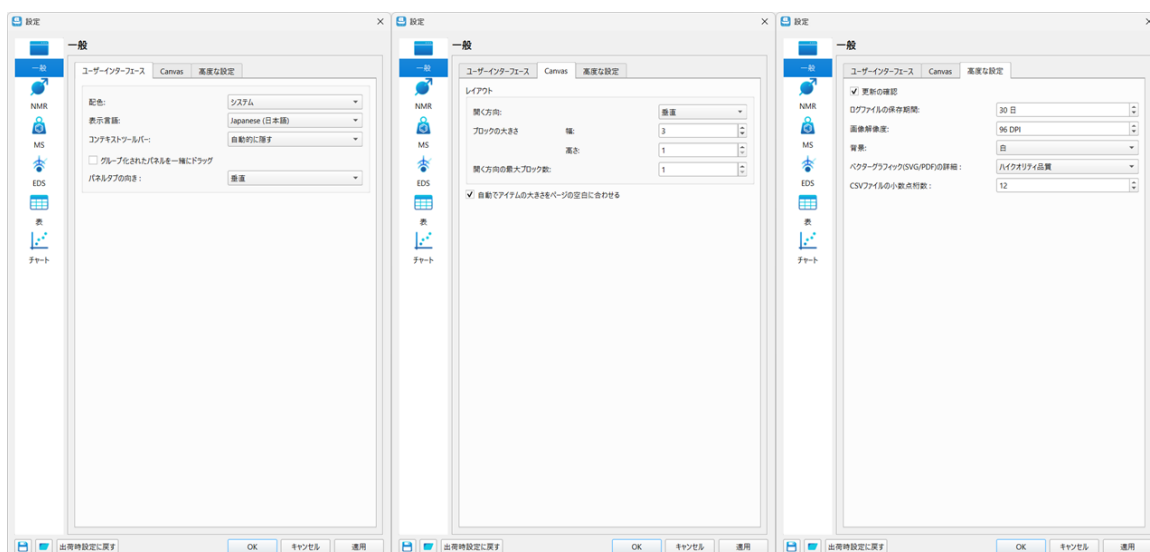


図 47：一般設定

5.1.1 ユーザーインターフェース

ユーザーインターフェースタブの中には 4 つのオプションがあります。

配色：JASON の画面表示をライトモードまたはダークモードから選択できます。JASON のカラーテーマは OS のテーマと同じにすることも、独立して設定することもできます。

表示言語：ソフトウェアの言語を選択できます。現在、英語と日本語をサポートしています。

コンテキストツールバーオプション：3.1 節で説明したコンテキストツールバーを指し、3 つのオプションがあります：

常に表示：常に表示されます。

自動非表示：カーソルがスペクトルの左上隅に移動しない限り、コンテキストツールバーを非表示にします。

非表示：オプションを変更しない限り、コンテキストツールバーを非表示にする。

グループ化されたパネルを一緒にドラッグ：このボックスをオンにすると、3.2 節「コンテキストパネル」およびその後の節で説明されている、互いに積み重ねられたコンテキストパネルを 1 つのオブジェクトとして移動できます（図 18：NMR スペクトルのコンテキストツールパネル図 18 および図 48 参照）。

パネルタブの向き：コンテキストパネルを積み重ねてグループ化すると、図 48 に示すように、タブを水平または垂直向きに表示できます。

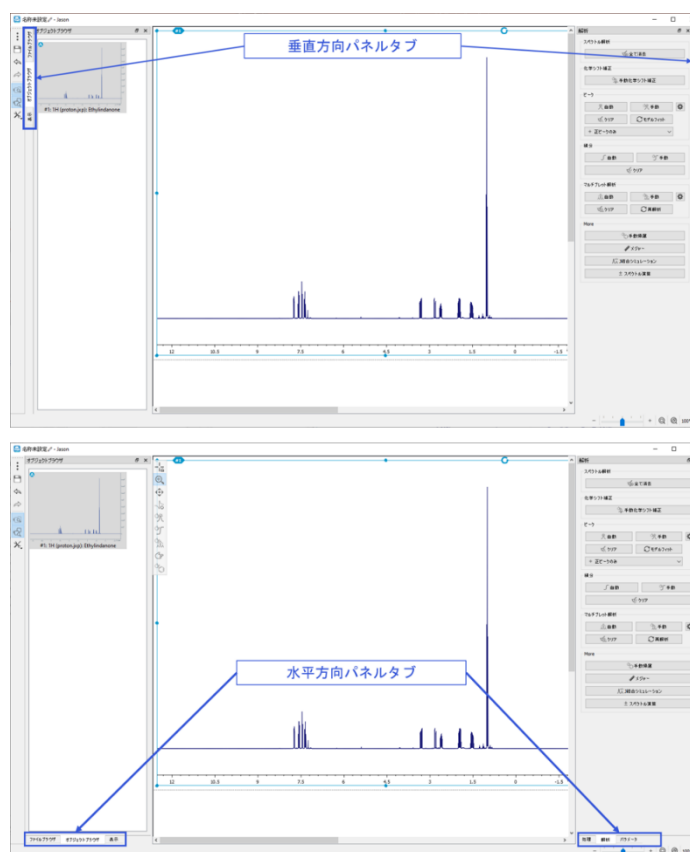


図 48 : パネルのタブ配置

5.1.2 キャンバス (CANVAS)

このタブでは、キャンバスに新しいオブジェクトを追加する際にそれがどのように展開されていくかを定義します。特に、オブジェクトのブロックを [ブロックの大きさ-幅]と[ブロックの大きさ-高さ]で定義して、[開く方向]オプションの設定に応じてそれを展開させることが可能です。

レイアウトでは、

開く方向：ブロックの成長方向を垂直・水平のいずれかを選びます。（ブロックの大きさと最大ブロック数で定義される単位方向）

ブロックの大きさ：幅と高さでブロックに含まれるオブジェクトの数を決めます。

開く方向の最大ブロック数：成長するブロックの単位数です。

例として、デフォルトで設定されている「開く方向」が「垂直」で、ブロックの大きさ-幅 3 ブロックの大きさ-高さが 1、「最大ブロック数」が 1 に設定されている場合を考えます。

最初のオブジェクトは左上隅に配置されます（行 1、列 A）。次のオブジェクトは水平方向に 1 マスずれて（行 1、列 B）配置されます。3 番目のオブジェクトは、さらに水平方向に 1 マスずれて（行 1、列 C）配置されます。最大ブロック数は 1 なので、ここで一つのブロックが完了します。引き続きオブジェクトを追加する場合、次は新しいブロック単位となり、次のブロックの最初のオブジェクト（4 番目）は、前のブロックの最初のオブジェクトの 1 行下（行 2、列 A）に配置されます。5 番目、6 番目のオブジェクトは最初のブロックと同様に、（行 2、列 B）、（行 2、列 C）に配置され、続いています。

1（行 1、列 A）－ 2（行 1、列 B）－ 3（行 1、列 C）

4（行 2、列 A）－ 5（行 2、列 B）－ 6（行 2、列 C）

上の条件で「最大ブロック数」が 2 に設定された場合には、ブロックが水平方向に 2 つまで許されるので 3 番目に引き続き、4 番目は（行 1、列 D）に配置、5、6 と順番に横に配置されます。引き続きオブジェクトを追加する場合、7 番目は（行 2、列 A）に配置されます。

1（行 1、列 A）-2（行 1、列 B）-3（行 1、列 C）-4（行 1、列 D）-5（行 1、列 E）-6（行 1、列 F）

7（行 2、列 A）

キャンバスにアイテムの追加行を作成するには、対象のオブジェクトを右クリックし、コンテキストメニューから「行の挿入」オプションを見つけます。これをクリックすると、選択されたアイテムの上に行が挿入され、選択されたアイテムを含む行とその下の行のアイテムが 1 行下に移動します。

5.1.3 インポート/エクスポート

画像出力： JASON ドキュメントから作成された画像の品質を設定します。

5.2 NMR 設定

NMR 設定パネルには、複数の関連タブがあります（図 49）。各パネルについては、以下の節で説明します。どのような設定変更も、下部にある「デフォルト値として設定」チェックボックスを使用することでユーザーのデフォルト値として設定することができます。

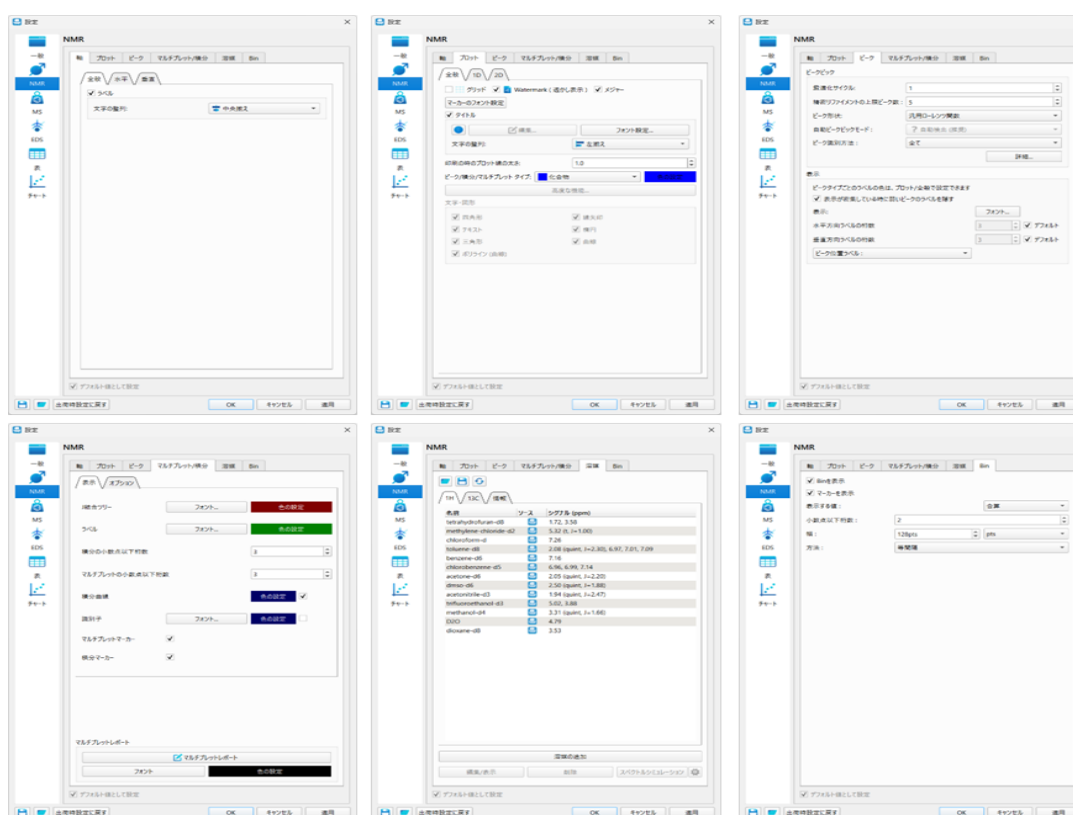


図 49 : NMR 設定 : メインタブ

5.2.1 軸

軸設定は、NMR スペクトルの軸を変更するためのオプションを含み、水平軸および垂直軸に関する設定パネルで構成されます（図 49）

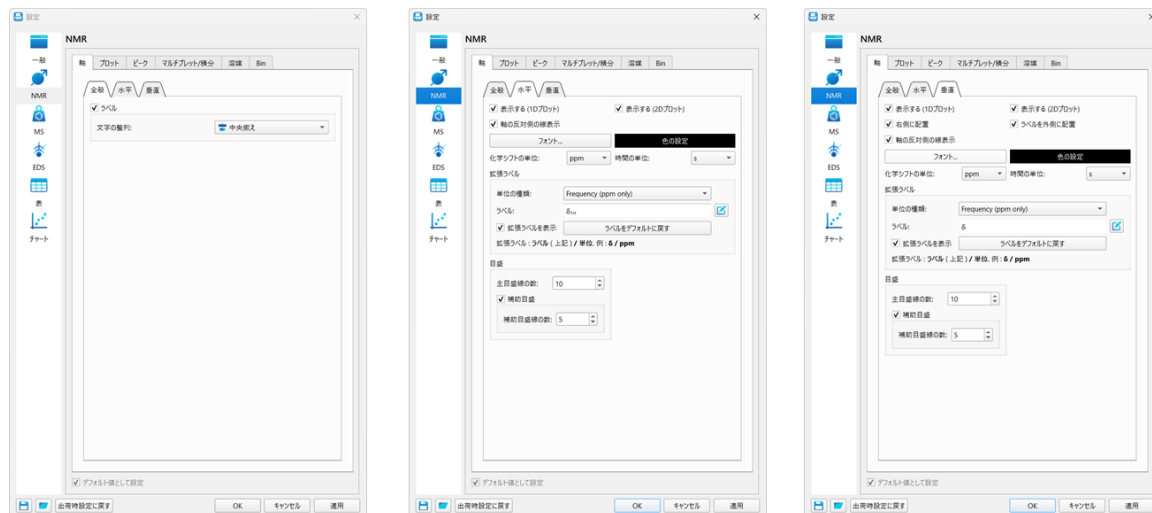


図 50 : NMR 設定 : 軸タブ

「全般」タブには、軸ラベルに関する設定があります。軸タイトル（ラベル）の表示/非表示や、デフォルトの表示位置（右、左、中央）を設定できます。「OK」ボタンをクリックすると設定を適用してダイアログを閉じます。「適用」ボタンをクリックすると、ダイアログを閉じずに設定を適用します。

「水平」タブと「垂直」タブには、それぞれ軸に関する設定があります。

「水平」タブには次の設定があります。

「表示」チェックボックスでは、（水平）軸の表示/非表示を切り替えます。「フォント」ボタンでは、各軸の数値ラベルのフォントを、「色の設定」ボタンでは、軸の色の設定がそれぞれ出来ます。軸の単位の変換は、周波数軸（スペクトル）においては「化学シフトの単位」、時間軸（FID）においては「時間の単位」のドロップダウンリストで変更します。

拡張ラベルセクションでは、表示される軸ラベルをカスタマイズすることができます。ラベルフィールドの右側にある編集ボタンをクリックすると、**軸ラベルの編集**ダイアログが表示されます。このダイアログから、ユーザーは同位体番号、元素名、上付き文字と下付き文字のフォント等の編集ができます。

目盛りオプションでは、目盛りの目標数を設定できます。JASON は、現在の表示範囲の主要な目盛りの数を各目盛りに表示される小数点以下の桁数を最小限に抑えながら、この目標数にできるだけ近づけるように試みます。これは、軸ラベルが表示および印刷の目的で過密に見えないようにするためです。

[補助目盛]チェックボックスでは、補助目盛の表示/非表示を切り替えます。

[補助目盛線の数]ダイアログボックスで、主目盛りの間の補助目盛の数を設定することが出来ます。

「垂直」タブには、上の水平タブと同じオプションの他に次の項目が追加されています。

(垂直方向の) 軸の表示/非表示を切り替えるチェックボックス

軸の表示オプションには[表示する(1D)]と[表示する(2D)]の二つがあります。それぞれ1Dの垂直方向の、2Dの間接観測軸(F1)の軸の表示/非表示のチェックボックスになります。[右側に配置]チェックボックスでは、プロットの左側と右側の間で垂直軸の位置を入れ替えることができます。[ラベルを外側に配置]チェックボックスでは、軸ラベルをスペクトルの内側または外側に表示できます。

5.2.2 プロット

プロットタブには、全てのスペクトルに共通のオプション(全般)、または1Dスペクトルまたは2Dスペクトルに固有のオプションを含む3つのパネルがあります。

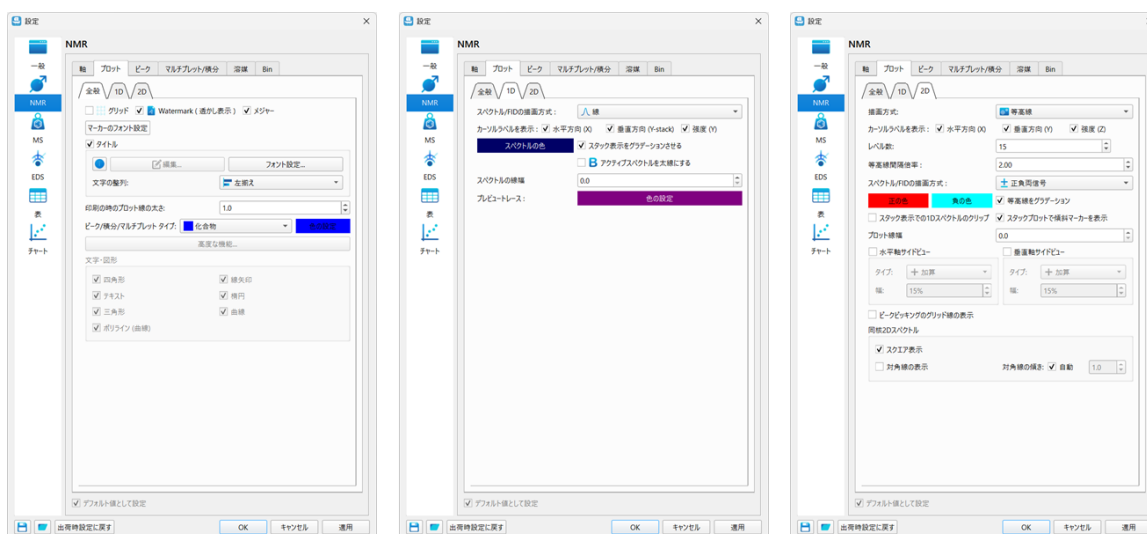


図 51 : NMR 設定 : プロットタブ

「全般」タブには次の設定があります。[グリッド]チェックボックスは、スペクトル上にグリッドの表示/非表示を切り替えます。[Watermark]チェックボックスは、スペクトルの背景にその測定の種類を透かしとして追加します。[マーカーのフォント設定]ボタンを使用すると、十字線カーソルのフォント、スタイル、および色を変更できます。

- [ウォーターマーク](#)の追加方法はこちら、[グリッドラインの表示方法はこちらをご覧ください。](#)

[マーカーのフォント設定] ボタンを使用すると、標準フォントダイアログが開き、十字線カーソルのフォント、スタイル、および色を変更できます。

[タイトル]チェックボックスは、スペクトル上のタイトルの表示/非表示の変更をします。また、[フォント設定] ボタンでスペクトルタイトルのフォントを変更できる。[文字・図形]セクションには様々な種類の表示/非表示を切り替えるためのコントロールがあります。[高度な機能]では、リンクされたスペクトル間の拡大・ズーム動作の連動の可否の設定をすることができます。

1D タブおよび 2D タブには、それぞれ対応するスペクトル表示およびカーソルラベルの外観を設定するためのオプションがあります。

2D タブには、「ピークピッキング用グリッドラインを表示」オプションがあります。「同核 2D スペクトル」セクションでは、「正方形で表示」および「対角線を表示」チェックボックスが用意されています。また、「対角線の傾き」オプションでは、傾きを手動で設定できます。

5.2.3 ピーク

ピークパネルでは、ピークピックと表示の 2 つのセクションから構成されます。

ピークピック：[最適化サイクル]は、ピークモデルをスペクトルデータにフィットさせる際に使用する反復回数を制御します。

[ピーク形状] では、ピークモデルの形状を指定します。現在のオプションでは 疑似フォーク関数 と汎用ローレンツ関数を指定することができます。

[ピーク識別方法]には、全て、微分のみ、局所最大値のみ、および CNN のみ の各オプションがあります。機械学習アルゴリズムは現在、1D スペクトルおよび疑似 2D スペクトルでのみ利用できます。必要に応じて、これをデフォルトのピークピッキング手法として設定できます。

[詳細]ボタンをクリックすると、2D および nD のピークピッキング自動判定設定、およびピークピッキングやピークフィッティングで使用する全てのオプションを含むダイアログボックスが開きます（図 52 参照）。これらの設定値は、ピークピッキング処理を十分に理解している上級ユーザーのみが変更することを推奨します。1D および疑似 2D ワークフローでは、[溶媒による自動化学シフト補正]オプションを利用できます。このオプションを有効にすると溶媒が認識され対応する溶媒ピークが検出された場合のみ、自動ピークピッキングおよびマルチプレット解析で化学シフト基準設定が適用されます。このオプションが無効な場

合、または溶媒情報が存在しない場合や認識されない場合には溶媒ピークを用いた基準設定は適用されません。この機能は後述するルール機能に含まれています。

〔表示〕セクションには、〔表示が密集している時に弱いピークラベルを隠す〕チェックボックスがあります。

このオプションを有効にすると、ラベルが密集している場合には弱いピークラベルが非表示になります。ズーム操作によって十分に拡大され、全てのラベルが横方向に収まるようになると、自動的に表示されます。この設定は、1D スペクトルおよび疑似 2D スペクトルの両方に適用されます。

設定を変更した後は、〔デフォルト値として設定〕チェックボックスをオンにすることで、新しいデフォルト値として保存できます。

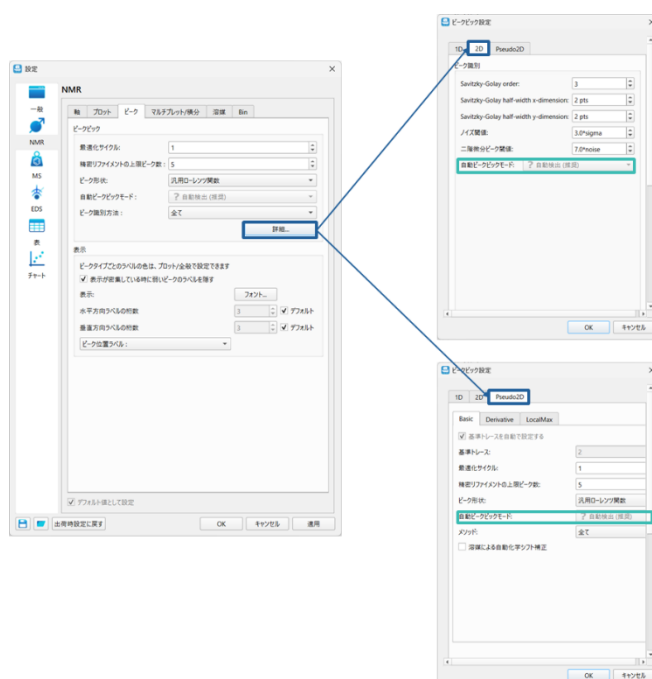


図 52 : NMR 設定 : ピーク

5.2.4 マルチプレット/積分

[マルチプレット/積分]タブには、2つのサブページがあり、マルチプレット解析と積分に関するオプション設定ができます。

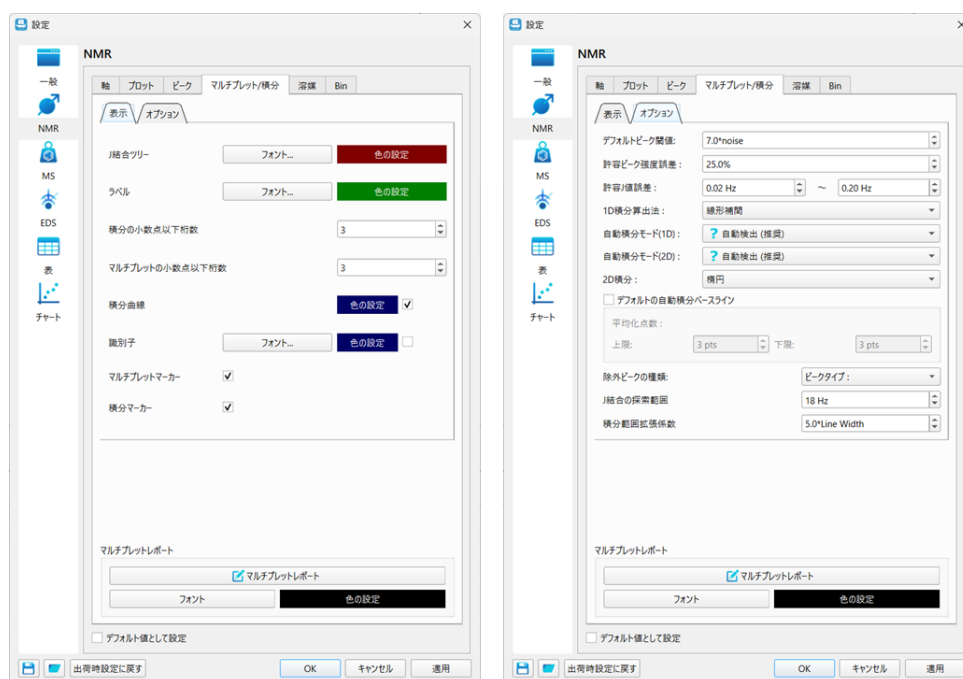


図 53 : NMR 設定 (マルチプレット・積分)

表示セクションでは

J 結合ツリー：これらのオプションを使用すると、スペクトルに表示される J 結合ツリーのフォントと色を定義できます。

ラベル：これらのオプションを使用すると、マルチプレットラベルと積分ラベルのフォントと色を定義できます。

積分値の小数点以下桁数：このオプションを使用すると、積分ラベルに表示される小数点以下の桁数を定義できます。

マルチプレットの小数点以下桁数：このオプションを使用すると、マルチプレットラベルに表示される小数点以下の桁数を定義できます。

積分曲線の色：このオプションを使用すると、積分曲線の色を選択できます。

マーカーチェックボックス：マルチプレットマーカーおよび積分マーカーチェックボックスでは、それぞれ対応するマーカーの表示/非表示を切り替えることができます。どちらもデフォルトではオンになっています。

マルチレポートのフォントとカラー：マルチレポートセッションの[フォント]および[色の設定]オプションでは、デフォルトのフォントと色を設定できます。これらの設定は、新しく開いたマルチプレットレポートに適用され、JJH6 ファイルにも保存されます。

オプションセクションでは以下のオプションが利用可能です。

デフォルトのピーク閾値：自動マルチプレット解析において、ピークをマルチプレットの一部分として含めるか否かのデフォルトの初期閾値になります。

許容ピーク強度誤差：マルチプレット解析は完全な一次マルチプレットを想定していますが、実際のデータでは、さまざまな度合いの二次効果があります。このパラメータは、変動に対応するためにピーク強度に対する許容範囲を提供します。

許容 J 値誤差：完全なマルチプレットでは、正確な間隔でピークの間隔を空ける必要がありますが、ピークピッキングのオーバーラップと不確実性により、ピーク位置に小さなエラーが発生します。マルチプレット分析中に、いずれかのステップで分析がマルチプレット構造を十分に解決できない場合、ピーク許容値は、下限から始まり、上限で終了するように増加することができます。この許容範囲はここで定義されます。

自動積分ベースラインチェックボックス：このボックスがチェックされている場合、JASON は、積分領域が偏りのない平坦なベースライン上にあるかどうかを自動的に検出します。もしそうでなければ、補正を計算し、積分に適用します。ベースライン補正を実施しない場合で積分誤差を小さくしたい場合は ON にします。

J 結合の探索範囲：同じマルチプレットまたは積分領域で隣接する 2 つのピーク間の最大分離を定義します。

積分範囲拡張係数：マルチプレットまたは積分領域の最も外側のピークから、積分領域がどの程度まで広がるかを定義します。

マルチプレットレポートセクション：先に説明した[表示]タブのものと同じ内容ですが、利便性のためにここにも配置されています。これらの設定は、新しく開いたマルチプレットレポートに適用され、JJH5 ファイルにも保存されます。

5.2.5 溶媒

溶媒設定パネルは複数のセクションで構成されています（図 54）。設定内容は「適用」ボタンを押すか、「OK」ボタンを押すことで反映されます。「OK」ボタンを押すと設定ダイアログは閉じられます。変更を反映せずに設定ダイアログを閉じるには、「キャンセル」ボタンをクリックします。

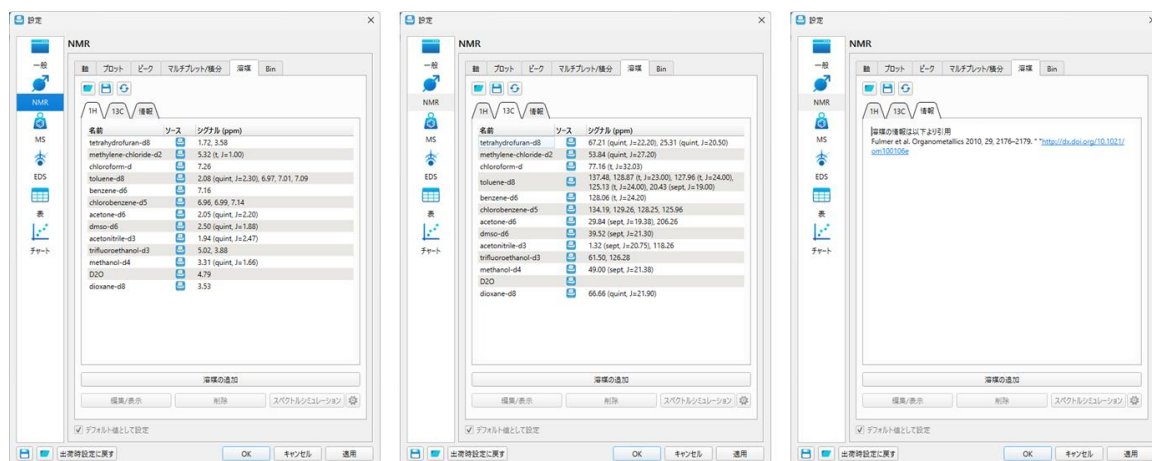


図 54：溶媒設定

パネル下部の「新規溶媒を追加」ボタンをクリックすると、新しい溶媒を追加できます。

5.2.6 Bins（バケット積分）

Bins タブには、1D NMR スペクトルにおける Bin（バケット）の表示および計算に関する設定があります（図 55）。

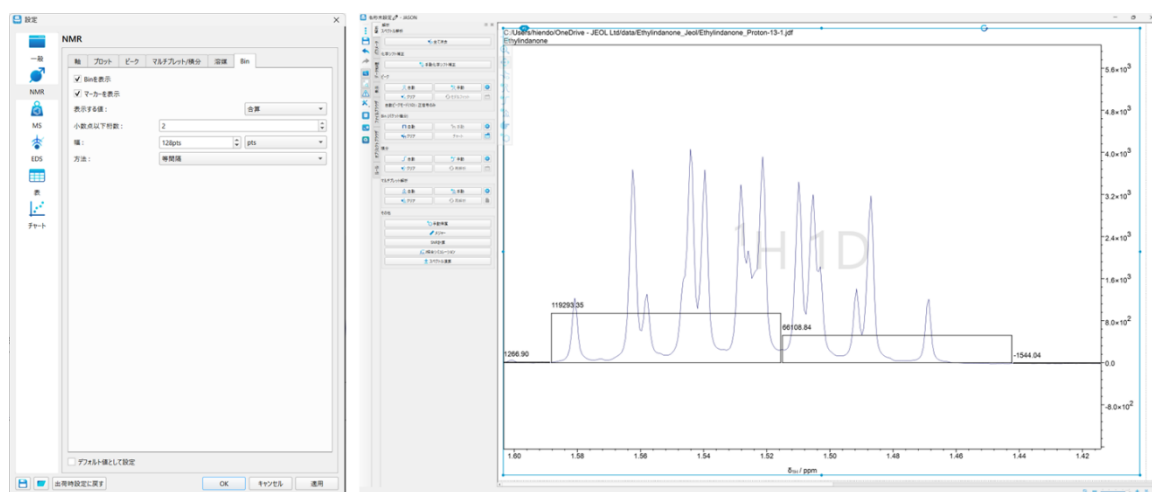


図 55：Bins 設定と Bins の表示

「Bins を表示」オプションは、スペクトルが選択されている場合はそのスペクトルに対してのみ動作し、スペクトルが選択されていない場合は全体設定として動作します。Bin マーカーを表示するには、ズームインが必要な場合があります。

このダイアログでは、小数点以下の表示桁数および Bins（バケット）の幅を設定できます。Bin の幅を変更すると、その後に実行される新しい解析に対して有効になります。また、自動 Binning を実行する際には指定した値が使用されます。

NMR プロットを選択していない状態で「Bin 設定」を開いた場合は、通常どおりデフォルト設定が保存されます。NMR プロットから設定を開いた場合、[デフォルト値として設定] チェックボックスをオンにした場合にのみデフォルト設定が変更されます。

5.3 MS

MS 設定パネルには、「Axis」と「Plot」の関連タブがあります（図 56）。各パネルについては、以下の節で説明します。各設定は、下部の [デフォルト値として設定] チェックボックスを使用してデフォルト設定として保存できます。

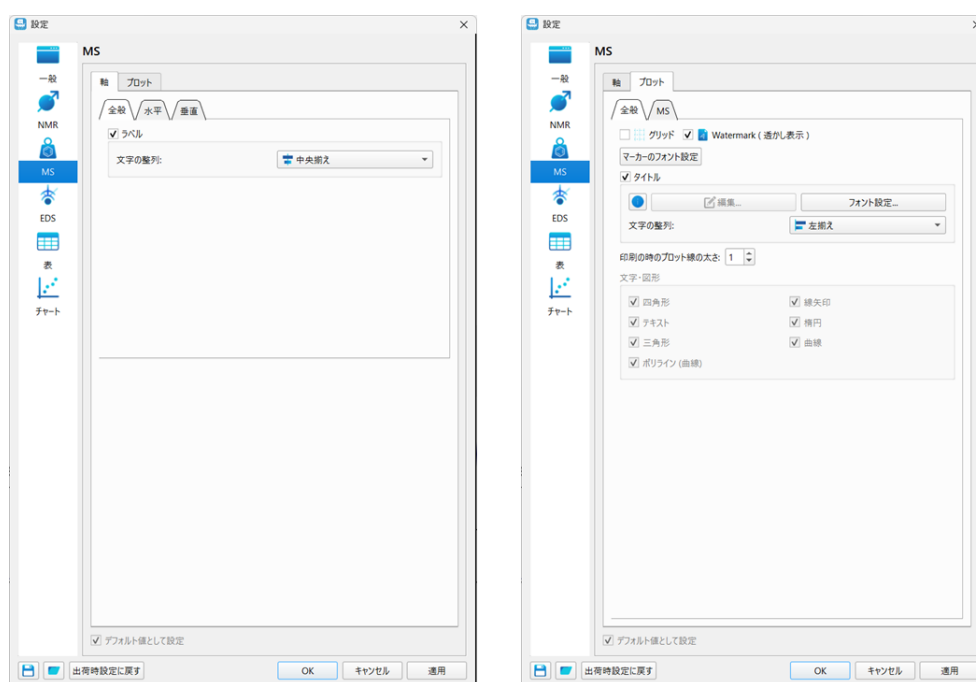


図 56 : MS 設定

5.3.1 軸

軸設定には、MS スペクトルの軸表示を変更するためのオプションが含まれています。軸ラベル、水平軸、および垂直軸に関する設定があります（図 57）。

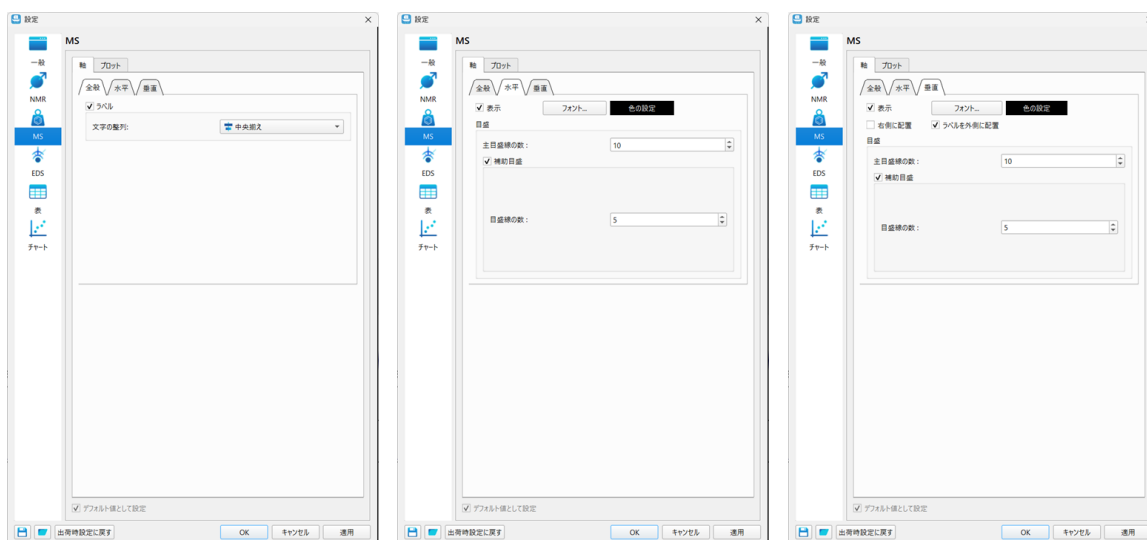


図 57 : MS 軸設定

5.3.2 プロット

プロットタブには、全てのスペクトルに共通するオプションと、MS スペクトル固有のオプションを含むパネルがあります（図 58）

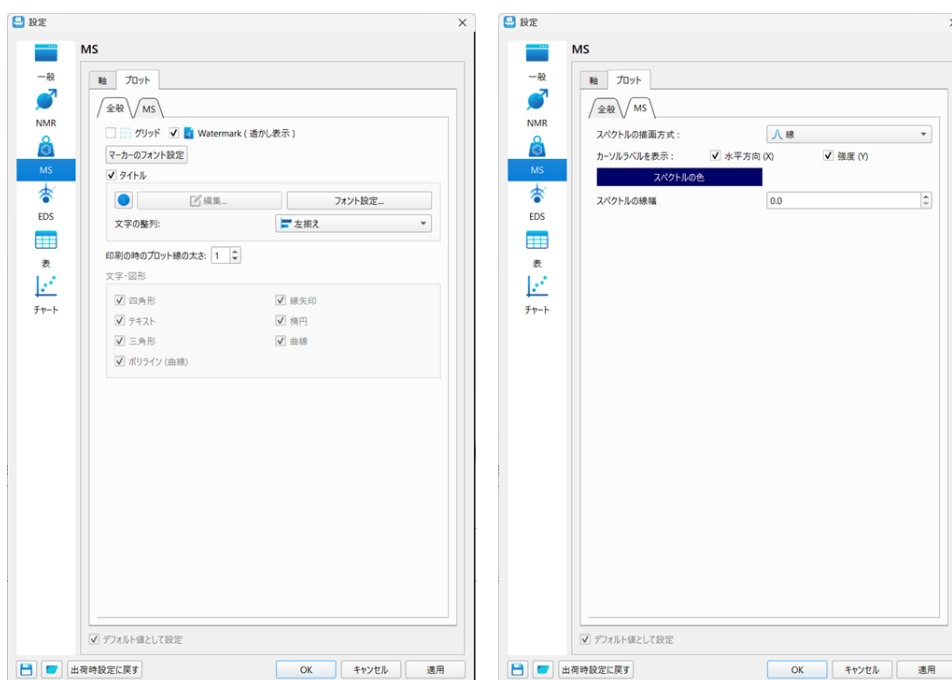


図 58 : MS プロット設定

5.4 テーブル

テーブル設定パネルには、ヘッダーフォントおよび本体フォントに関する設定があります（図 59）。設定の変更は、「適用」ボタンまたは「OK」ボタンを押して設定ダイアログを閉じることで適用されます。「キャンセル」ボタンをクリックすると、変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

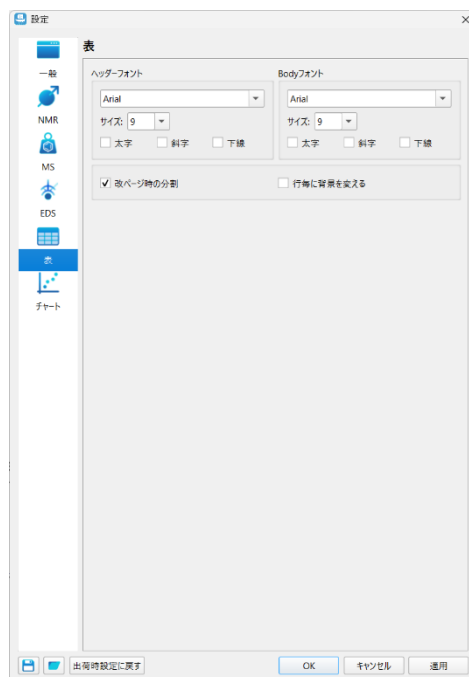


図 59 : 表設定

テーブル設定パネルには、ヘッダーフォントおよび本体フォントに関する設定があります（図 59）。表のヘッダーおよび本文のフォントは、それぞれ [ヘッダーフォント] および [本体フォント] のセクションで変更できます。残りの 2 つのオプションでは、表がキャンバス上の 1 ページの境界を超えた場合の動作を設定したり、行ごとに交互の背景色で表を表示したりできます。設定の変更は、「適用」ボタンを押すか、「OK」ボタンを押して設定ダイアログを閉じることで適用されます。「キャンセル」ボタンをクリックすると、変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

5.5 チャート

チャート設定パネルには、チャート表示に関する設定があります。設定は [軸] および [プロット] のセクションで行います（図 60）。設定の変更は、「適用」ボタンを押すか、「OK」ボタンを押して設定ダイアログを閉じることで適用されます。「キャンセル」ボタンをクリックすると、変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

「テーブル」設定タブと同様に、グローバルの「設定」ダイアログでチャート表示パラメータを変更しても、現在アクティブなチャートには影響せず、デフォルト設定のみに影響します。

「プロット」タブでは、チャート上の凡例の配置を設定したり、チャートタイトルのフォントを変更したり、グリッド線の表示/非表示や色を設定したりできます。

手動帰属を支援するための機能である JASON の 2D グリッドライン：

- 2D スペクトルの帰属時には、炭素の CHn 情報が既知で化学シフトが未帰属の場合、異なる CHn に対応するグリッドラインを異なる色で表示できます（通常、CHn 情報は HSQC のピークが定義された後に表示されます）。
- ピークを帰属すると、そのピークに対応するピークピッキング用グリッドラインの表示が目立たないものになり、未帰属シグナルに集中しやすくなります

「軸」タブは「水平」タブと「垂直」タブで構成され、それぞれの軸に対する設定を個別に行うことができます。「軸」セクションでは水平軸および垂直軸のラベルフォントと軸の色を設定できます。また、「タイトル」セクションでは水平軸および垂直軸のタイトルフォントを設定できます。さらに、各軸の主目盛および補助目盛のデフォルト数を変更できます。

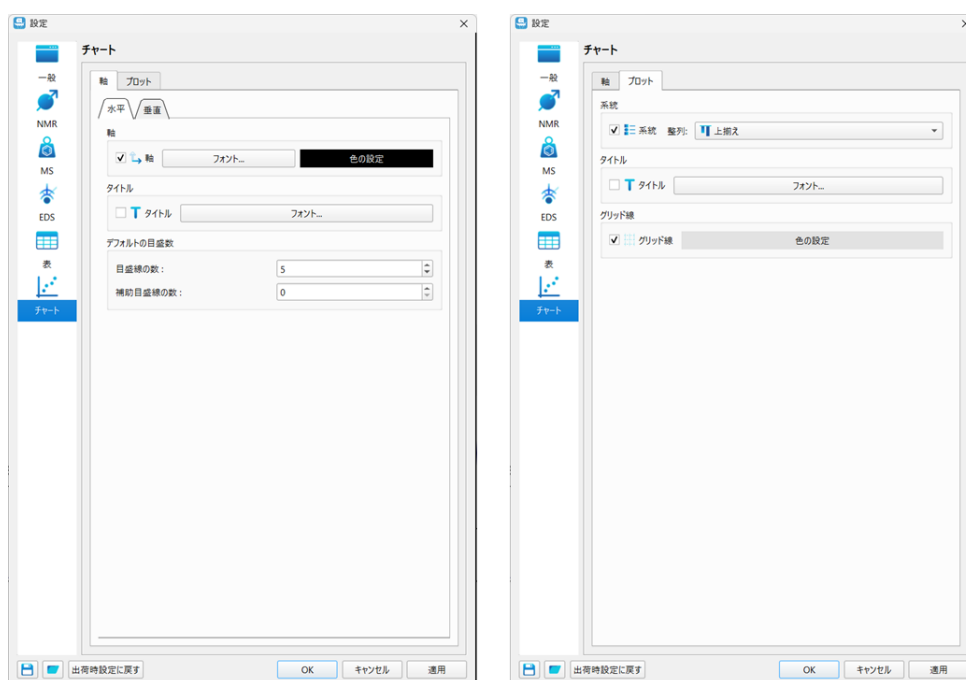


図 60：チャート設定

6 スタッキングと重ね合わせ

スペクトルのスタッキングおよび重ね合わせに関する[動画](#)を参照できます。また、[ドラッグ&ドロップ](#)によってスタックを作成することもできます。

スペクトルのスタッキングや重ね合わせ表示は、対象のスペクトルを選択して、キャンバス上で右クリック、メニューから "スペクトルのスタック" を選択することで作成ができます。

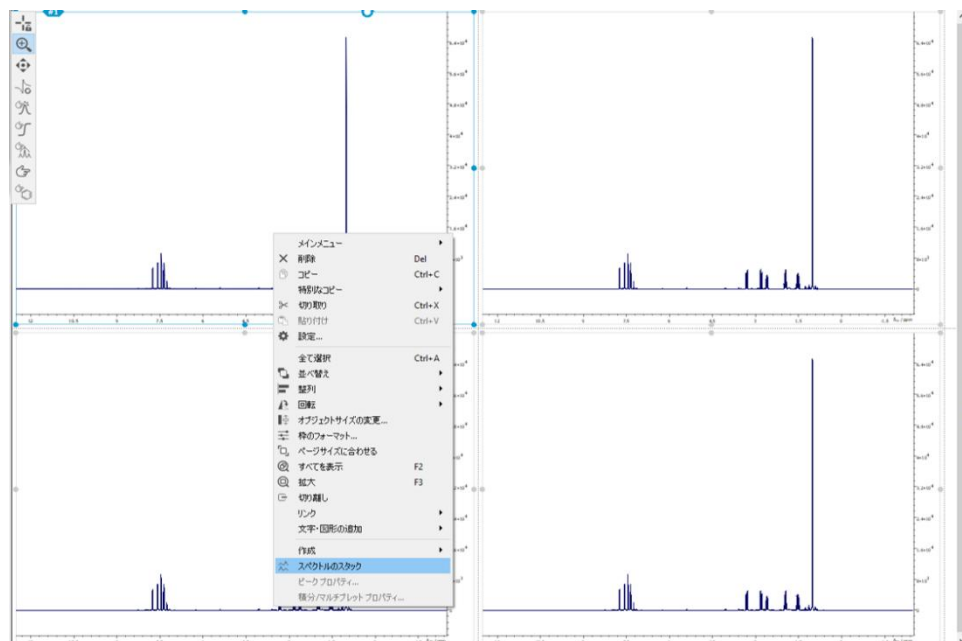


図 61 : スタックのためのメニュー

新しいスタックプロットがキャンバスに追加されます。

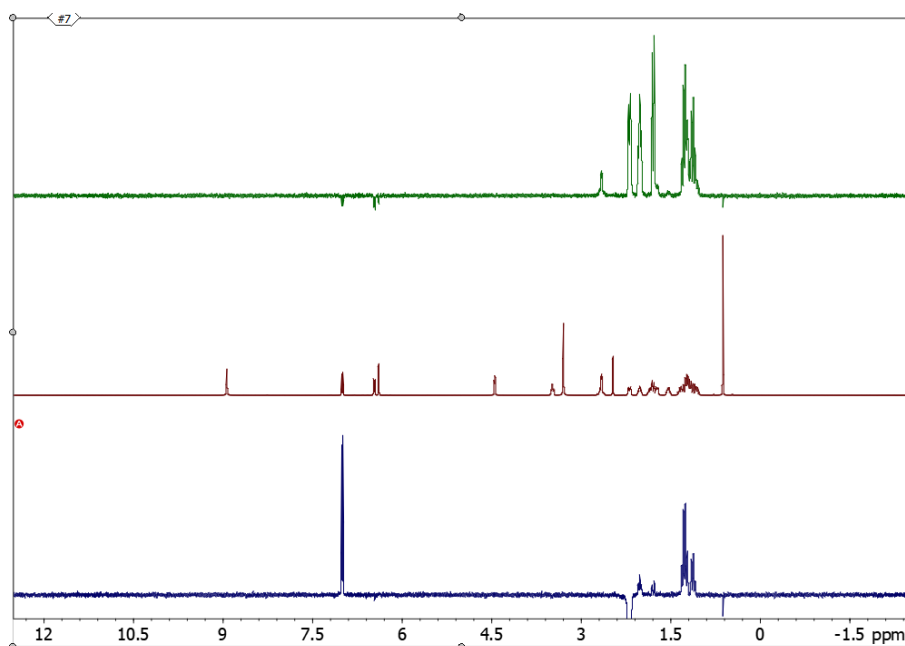


図 62 : スタッキング表示

選択したスペクトルのスタックドプロットがキャンバスに追加されます。

スタックドプロットでその時点での「アクティブ」なスペクトルは、スペクトルの左側の赤い丸の中に「A」で示されます。アクティブなスペクトルの追加処理や操作（例えば、位相調整）は、通常の方法で行うことができます。

グローバル設定ダイアログの 2D NMR タブの'Plot'セクションにある'Clip 1D Spectra in Stack'オプションは、スタック内の 1D スペクトルとトレースの描画のクリッピングを制御します。デフォルトでは「Off」ですが、擬似 2 次元およびマルチプロットスペクトルでも機能します。

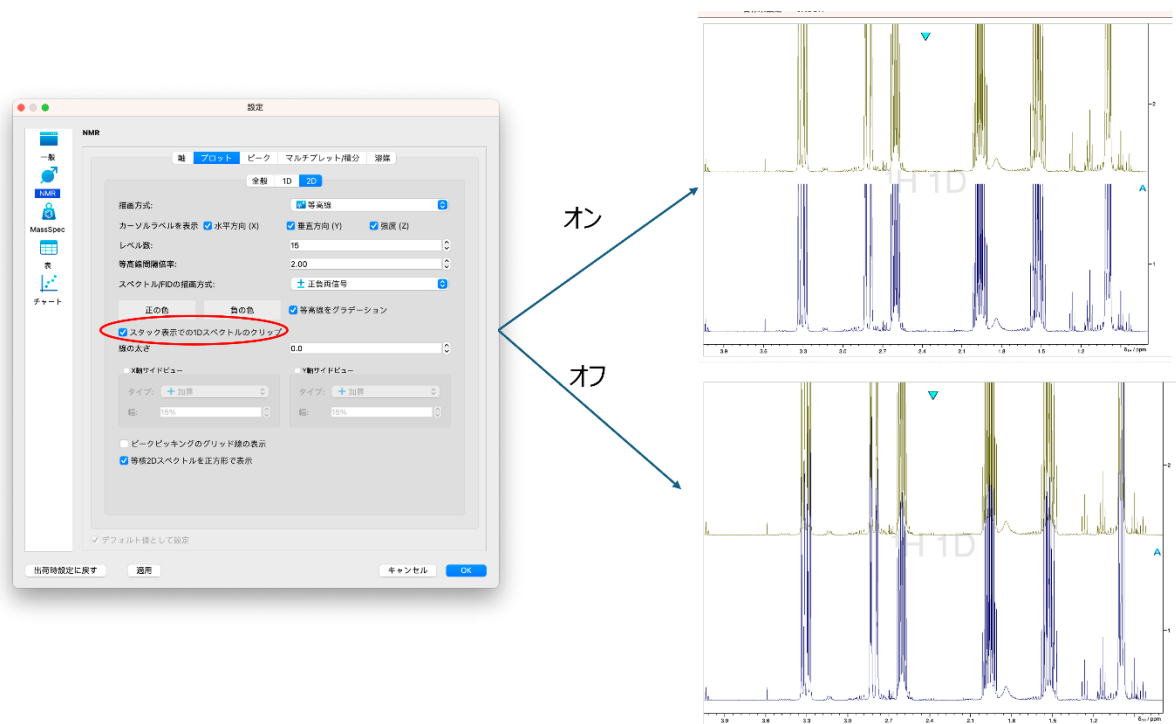


図 63：スタックで 1 次元スペクトルをクリップ

6.1 スタックパネル

スタックドプロットを選択するとスタックパネルが新たに追加されます。スタック パネルでは、スタックドプロットの各スペクトルの順序と大きさを簡単に操作できます。



図 64 : スタックパネル

任意のスペクトルのスケールを調整するには、スタックパネルのテーブルの該当する行に「Y スケール」の値を入力します。スペクトルの強度を正規化するには、スタックパネルの左上にある "強度の規格化" ボタンをクリックします。また、スケーリングとシフトをリセットするには、"シフトとスケールのリセット" ボタンをクリックします。

スタックプロットにおいてその時点でのアクティブなスペクトルが、スタックパネルの行が太字フォントで表示されます。スタック内の別のスペクトルをアクティブにするには、テーブル内の該当する行のデータセット名をダブルクリックします。スペクトルの順序を調整するには、行をクリックし、テーブル内の他の行の上または下に、希望する位置にドラッグします。

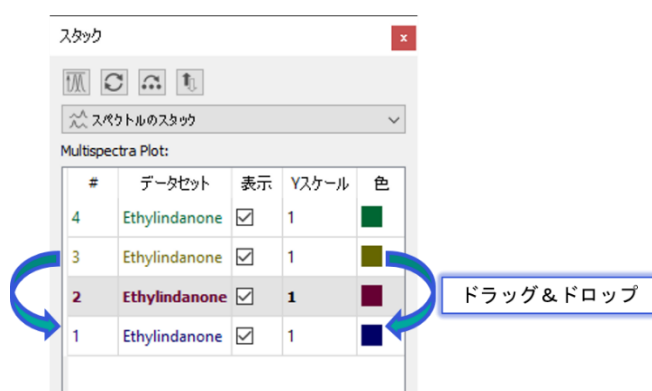


図 65 : スタッキングプロットの配列調整

スタックドプロットのスペクトルの色を変更するには、その行の右側の色のついた四角をダブルクリックし、"色を選択" ウィンドウで希望の色を選択・設定します。

スペクトルを非表示にするには、該当する行の「表示」ボックスのチェックを外す。大量のスペクトルをスタックした場合、スタックの n 番目のスペクトルだけを表示することが望ましい場合がある（例：10 番目のスペクトル）。これを行うには、「間引き表示」ボタンを使い、間引きファクターを入力する。

〔Show Tilt〕チェックボックスでは、スタックプロットの傾き（スペクトル同士の相対的な水平方向シフト）を制御する三角形スライダーの表示/非表示を切り替えることができます。この機能は、疑似 2D スタックおよびマルチスペクトルスタックでも同様に動作します。

〔Stack〕パネルからテキスト編集ダイアログを利用できるため、トレースタイトルにフォント変更、上付き文字、下付き文字、ギリシャ文字などを含めることができます。

スタックプロット内の個々のトレースタイトルを編集するには、次のいずれかの方法を使用します。

- 〔Trace Title〕列のトレースタイトルを右クリックしてコンテキストメニューを表示する。
- タイトル欄をダブルクリックして編集する。

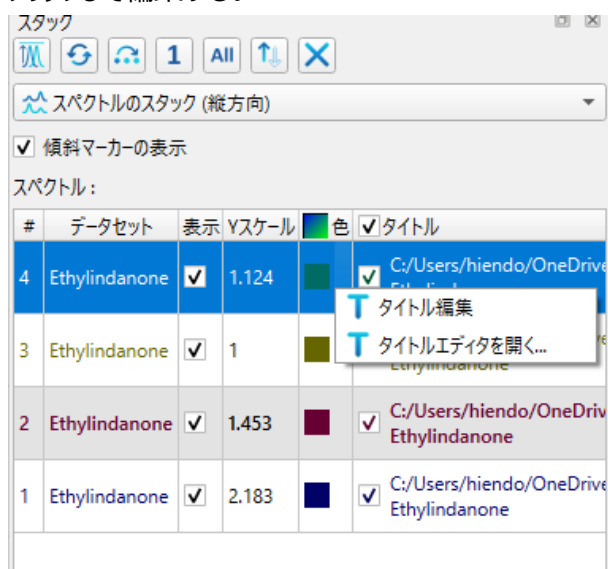


図 66：スタックプロットでの個別トレースのタイトル編集

スペクトルを積み重ねるのではなく、重ね合わせる場合は、ドロップダウンメニューから「スペクトルの重ね書き」を選択します。

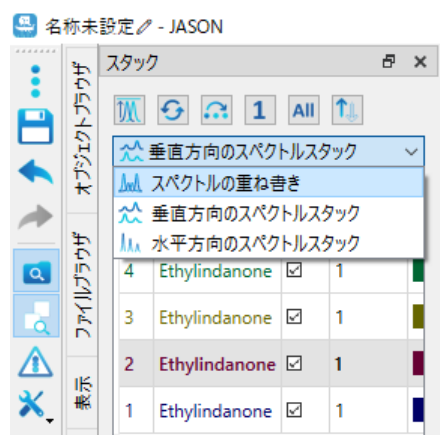


図 67 : スタック表示から重ね書き表示への変更

スペクトル重ね書きモードでは、"Y スケール" に値を入力することで、各スペクトルの垂直方向の位置を調整することができます。

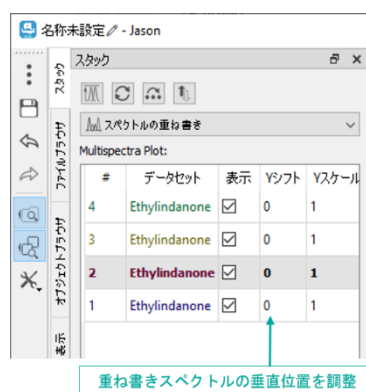


図 68 : 重ね書きスペクトルの Y 軸方向調整

マルチスペクトルスタックでは、スタック上でマウスホイールを回転させると、全てのスペクトルのスケールリングが変更されます。SHIFT キーを押しながらマウスホイールを回転させると、1D および 2D のマルチスペクトルのオーバーラップにおいて、個々の (アクティブな) スペクトルのスケールリングが変更されます。スタックパネルのテーブルのスケールリング値 (1D スペクトルの場合は "Y Scale"、2D の場合は "Amp. Scale") は連動して更新されます。

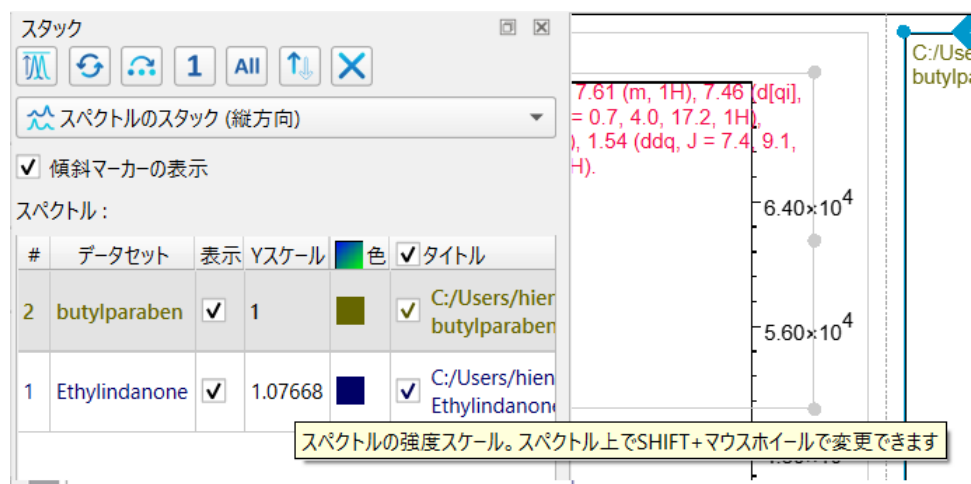


図 69：スタックプロットにおけるスペクトル強度スケールの変更

スタックプロットでは、各トレースに対して個別に位相補正を行うことができます。そのためには、[データ処理] パネルの [位相補正] セクションで、デフォルトの [Auto Ph0] の代わりに [Custom] モードを選択することで個別に補正することができます。[手動] ボタンを押すことでインタラクティブに位相補正を行うことができます。0 次、1 次位相のセルに新しい位相値を入力することもできます。

通常の 2D スペクトルと同様に 1D 投影スペクトルと 2D スペクトルの横軸および縦軸に追加することもできます。

マルチスペクトル 2D プロットにおける投影の動作は以下のとおりです。

重ね表示：両方向のサイドビューを表示できます。

縦スタック：横方向のサイドビューのみ表示できます。

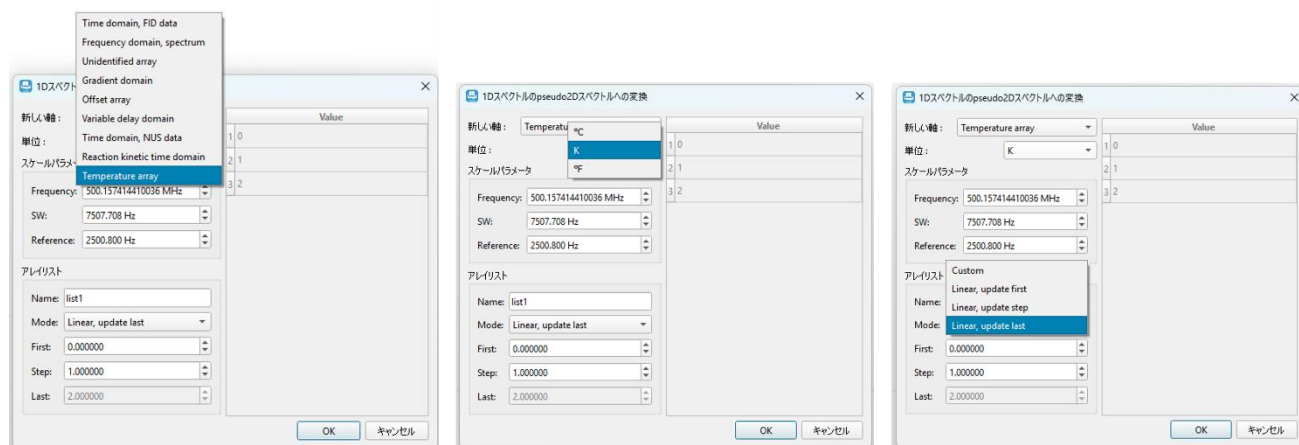
横スタック：縦方向のサイドビューのみ表示できます。

マルチプロット 2D で「投影」または「合算」のサイドビューを有効にした場合、各スペクトルに対してサイドビューが作成されます。色は対応するスペクトルの正の色に従って設定されます。スペクトルの減算をする場合は係数“-1”を入力します。

マルチプロット 2D で「スペクトル」サイドバーを設定した場合、サイドバー作成時にアクティブだったスペクトルに関連付けられます。スペクトルの色は単一 2D スペクトルの場合と同じ方式に従い、トレースが作成された順序に応じて定義済みの色セットを順番に使用します。

マルチプロット 2D で「トレース」を設定した場合、トレースはアクティブなスペクトルから取得されます。トレースの色は前述の方法で設定されます。アクティブなスペクトルを切り替え、トレース選択時にマルチプルモードを使用することで、異なるスペクトルからトレースを取得することもできます。また、スペクトルの表示/非表示の状態は、そのスペクトルに関連付けられたサイドビューの表示/非表示にも反映されます。オブジェクトブラウザーからのドラッグ&ドロップ操作にも対応しています。

注：スタック表示されたスペクトルを擬似 2D に変換することが可能です。表示パネルにある 'Pseudo 2D に変換' ボタンを押すとダイアログが開き、多くのドメインタイプのオプション（全てではありませんが、いくつかのオプション）を持つ新しい次元に必要な全てのパラメータを指定することができます。（図 70）



ドメイン・オプション

単位オプション（温度例）

配列リストモードのオプション

図 70：擬似 2D オプションへの変換

6.2 疑似 2D データ (アレイデータ)

JASON で疑似 2 次元データセットを開くと、1 次元スライスのスタックが JASON に表示されます。表示されている各トレースのプロット領域では、ピーク位置に縦線が表示され、疑似 2D NMR データの垂直スタック表示では、これらの縦線が上下で水平線によって連携されます。コンテキスト [スタック] パネルには、疑似 2D 表示に関連するオプションがあります。対応するテーブルで各トレースの表示/非表示を切り替えたり、[間引き表示] ボタンを使用して間引き表示を設定したりできます。

疑似 2D データは、2D プロットセクションで変換ボタンを選択することにより、表示パネルで 1D スタック表示に変換することができます。この変換が実行されると、スタックパネルには、スタック内の 1D スペクトルを編集するための機能が含まれます。

注：疑似 2D は実質的に、1 つの処理リストを持つ単一のデータセットですがスタックはそれぞれが処理リストを持つ個別のデータセットです。

7 スピンシミュレーション

JASON では、メインメニューから「シミュレーション」を選択することで、1D スペクトルのシミュレーションを実行できます。メインメニューから新規シミュレーションを選択すると、シミュレーションダイアログパネルが開き、同時に結果を表示する新規のオブジェクトが作られます（図 71）。このダイアログでは、最大 20 スピンまでの化学シフト値および J 結合定数のほか、関連する各種パラメータを入力できます。ダイアログパネルにシミュレーションの条件を入力すると、もしくは「シミュレーション (S)」ボタンを押すと、結果のスペクトルがオブジェクトに表示されます。

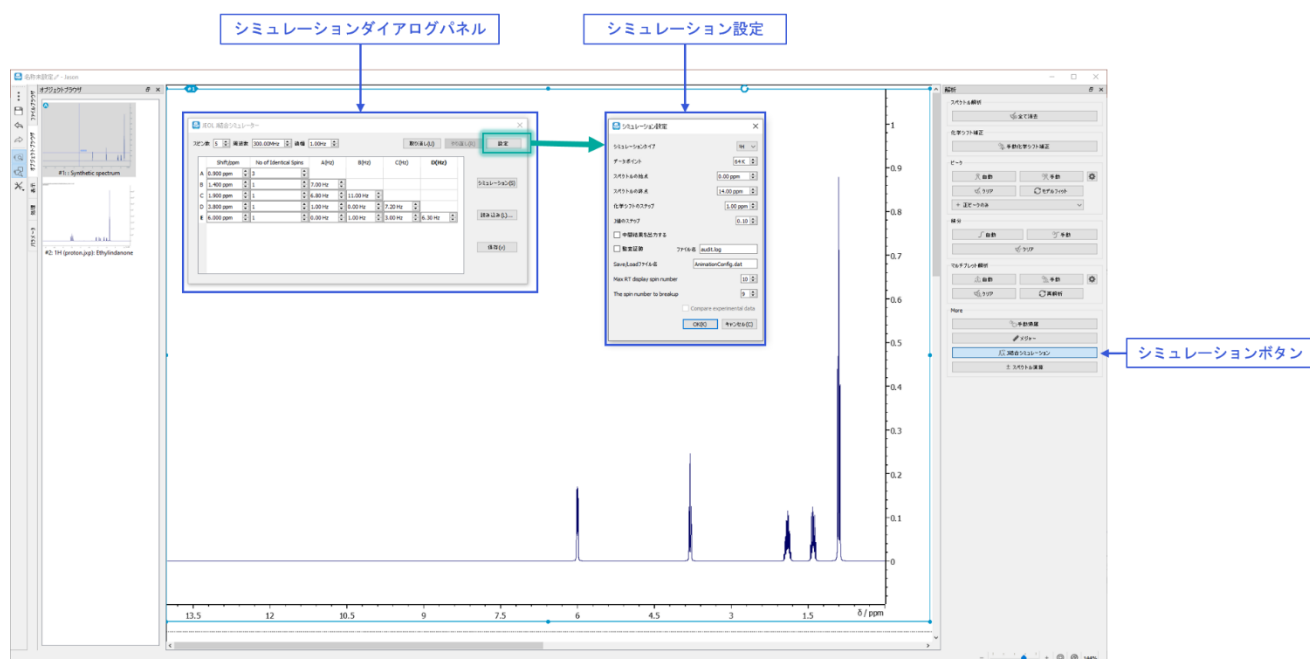


図 71 : スピンシミュレーションインターフェース

7.1 シミュレーションダイアログパネル

スピンの数 : シミュレーションに含まれる、互いに異なる共鳴の総数を指定します。

周波数 : シミュレーションの基準周波数 (MHz) を指定します。

線幅 : シミュレーションで使用するピークモデルの線幅 (Hz) を指定します。

元に戻す/やり直し : 直前の操作を取り消したり、取り消した操作を再実行したりできます。

設定 : シミュレーション設定ダイアログを開きます。

シミュレーション : 現在のシミュレーションパラメータでシミュレーションを実行します。

読み込み : 保存済みのシミュレーションパラメータを読み込みます。

保存 : 現在のシミュレーションパラメータを保存します。

以下のパラメータは、シミュレーション対象となるスピン系に関する設定です。スピン系は、表計算ソフトのようなセル形式のテーブルで表されます。シミュレーションするスピン数に応じて、各行には A、B、C … のラベルが付けられます。これらのラベルはスピンのラベルにも対応しており、3 列目以降の列見出しにも使用されます。各列の説明を以下に示します。

Shift/ppm : スピンの化学シフト値 (ppm) を指定します。

等価スピン数 : 1 つの共鳴周波数に対して複数のスピンを関連付けることができます。例えばメチル基は 3 つの等価スピンから構成され、この列で指定できます。ただし、同じ化学シフトを持っていても磁気的に非等価なスピンは、それぞれ個別に入力する必要があります。

A(Hz)、B(Hz)、C(Hz) など : これらの列はスピンラベルに対応しています。各セルには 2 つのスピン間の J 結合定数が Hz 単位で入力されます。例えば、A 列・B 行には JAB が入力されます。

7.2 シミュレーション設定

設定ボタンをクリックすると、シミュレーション設定が表示されます。シミュレーション設定にはシミュレーションの一般的なパラメータがあります。

データポイント数 : スペクトルの作成に使用される実際のデータポイントの数。

スペクトル始点 : 開始の化学シフト値 (ppm) 。

スペクトル終点 : 最後の化学シフト値 (ppm) 。

シフトステップ : J 結合シミュレーションダイアログパネルの化学シフトの値を変化させる際のステップサイズを決めます。(マウスホイールまたはパラメータセル端の矢印ボタンを使って変える際のステップ幅)

J 結合ステップ : J 結合シミュレーションダイアログパネルの J 結合の値を変化させる際のステップサイズを決めます。(マウスホイールまたはパラメータセル端の矢印ボタンを使って変える際のステップ幅)

監査証跡 : シミュレーションの監査証跡のオン/オフを切り替えます。

保存/ロードファイル名 : シミュレーションパラメータが保存およびロードされるファイルです。

最大 RT 表示スピン数 : シミュレーションパラメータが変更されると、スピンの総数 (同一と非同一の合計) がこのオプションで設定された数より少ない場合、シミュレーションされたスペクトルがリアルタイムで更新されます。

8 3D スペクトルビューワー

この機能は、NMR スペクトル上で右クリックし、表示されるコンテキストメニューからサーフェイスビューワーまたはキューブビューワーを選択することで利用できます。通常、2D NMR スペクトルでは 3D Surface Viewer が利用でき、3D NMR スペクトルでは 3D Cube Viewer が利用できます。

3D スペクトルビューワー には、全てのプロットタイプに共通する GUI コントロールに加え、サーフェス表示およびキューブ表示専用の追加ツールが用意されています。

8.1 サーフェイスビューワー

サーフェイスビューワーは、2D NMR スペクトルを 3 次元サーフェスとして表示します。スペクトル強度は、2 つの化学シフト軸上で平坦なベースラインから立ち上がるピークとして表示されます。（図 72）

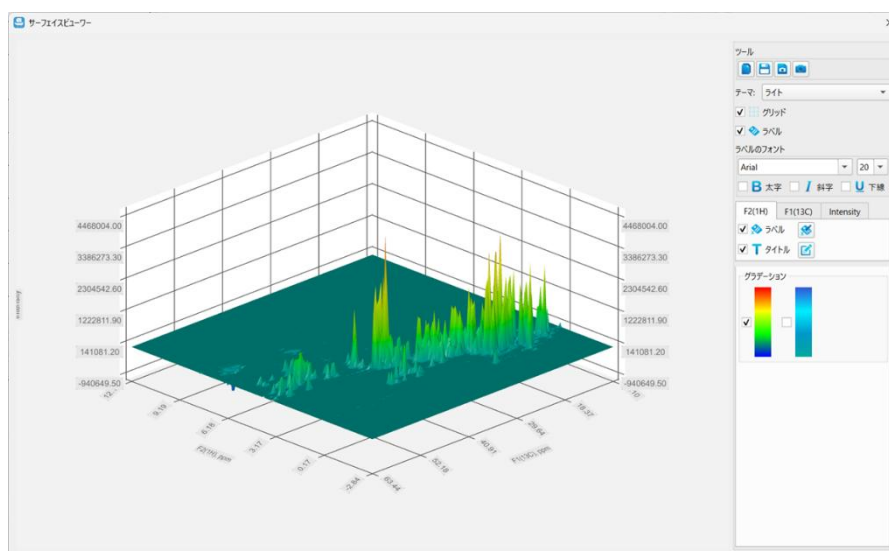


図 72 : サーフェイスビューワー

8.2 キューブビューワー

キューブビューワーは、NMR スペクトルを 3 次元キューブとして表示します。検出されたピークはスペクトル空間内に孤立した等値面（isosurface）として表示されます。

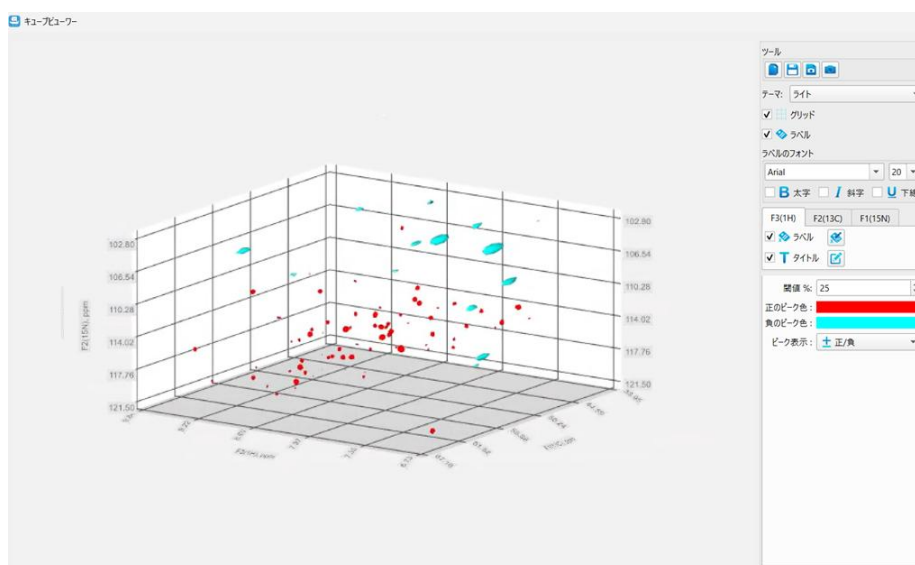


図 73 : キューブビューワー

8.3 3D スペクトルビューワー共通コントロール

全てのプロットタイプで共通に利用できる 3D スペクトルビューワーの GUI コントロールには、以下の機能があります。

画像をコピー：現在の 3D スペクトルのスクリーンショットを取得し、画像をクリップボードへコピーします。

画像を保存：現在の 3D スペクトルのスクリーンショットを取得し、画像を保存するためのダイアログを開きます。

画像を配置：現在の 3D スペクトルのスクリーンショットを取得して JASON のキャンバス上へ配置し、その後 3D ビューワーを閉じます。キャンバス上の画像をダブルクリックすると、3D ビューワーが再度開き、保存時と同じ表示状態が復元されます。

テーマ：ビューワーのテーマを変更できます。デフォルトでは JASON の現在のカラーテーマが使用されます。テーマは「システム」「ダーク」「ライト」から選択できます。

グリッド チェックボックス：スペクトルビューワー内の全てのグリッド線の表示/非表示を切り替えます。

ラベル チェックボックス：X、Y、Z 軸の軸ラベルの表示/非表示を切り替えます。

ラベルのフォント：X、Y、Z 軸の全ての軸ラベルに使用するフォントを設定します

軸プロパティの設定では、各軸に対して個別にプロパティを設定できます。

軸ラベル チェックボックス：軸ラベルの表示/非表示を切り替えます。

軸ラベルの回転を編集：軸ラベルの回転角度を調整します。

軸タイトル チェックボックス：軸タイトルの表示/非表示を切り替えます。

軸タイトルを編集：軸に表示するタイトルを編集します。

8.4 3D スペクトルビューワー専用コントロール

サーフェイスビューワー専用の GUI コントロール機能を以下に記載します。

カラーグラデーション：サーフェイスの描画に使用するカラーグラデーションを変更できます。

グラデーションは次の 2 種類から選択：

Blue to Red（デフォルト）：ヒートマップ形式のグラデーションです。暖色系（赤）は高いシグナル強度を示し、寒色系（青）は低いシグナル強度を示します。

JASON Colors：JASON の現在のカラースキームに基づくカラーグラデーションを使用します。

3D キューブビューワー専用の GUI コントロールの機能を以下に記載します。

閾値：ピーク表示に使用する閾値の割合を変更することで、等値面（isosurface）のしきい値レベルを調整できます。デフォルト値は 25% です。新しい値を入力した後、Enter キーを押すと設定が適用されます。

正ピークおよび負ピークの色：デフォルトでは JASON NMR の設定が使用されますが、ユーザーが任意に変更することもできます。正ピークまたは負ピークの色をクリックすると、色選択ダイアログが開き、任意の色を選択できます。

ピーク表示：ドロップダウンメニューを使用してピークの極性を設定できます。正ピークのみ、負ピークのみ、または両方を表示するよう選択できます。

デフォルト設定は JASON NMR の設定に従います。

9 分子構造の作成

JASON における構造作成について[説明した動画](#)を参照できます。

分子構造は自身で描画することも、ファイルから読み込むことも、テキストから入力することもできます。

ファイルは、メインメニューの「開く」オプションを使用するか、キャンバス上にファイルをドラッグ&ドロップするだけで読み込みます。対応しているファイル形式は、.mol、.sdf、.cdxml です。SMILES 文字列は JASON にコピー & ペーストできます。また、.smi テキストファイルは SMILES 文字列として解釈され、JASON へドラッグ&ドロップするとキャンバス上に分子構造が作成されます。

メインメニューの「新規」から「構造」オプションを選択すると、新たな構造をオブジェクト上に描画できます。構造のオブジェクトを選択すると、[図 74](#) に表示されているオプションが表示されます。構造表示の改変・編集などは、オブジェクト左上隅に現れるコンテキストバーのメニューと構造式ツールパネルから行います。また、構造インターフェースには「View」タブが含まれます。この例ではキャンバス右側に表示されていますが、他のパネルと同様に配置を変更することができます。

これらについては以下で詳しく説明します。

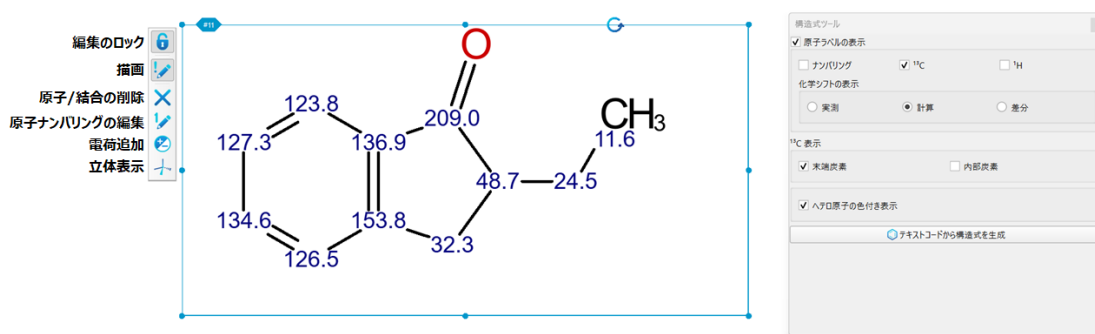


図 74：構造式描画インターフェース

テキストから構造を作成する機能は、'構造式ツール'パネル内の'テキストコードから構造式を生成'ボタンにあります。JASON では、クリップボードや分子パッケージから直接テキストをペーストすることをサポートしています。.mol、.sdf、SMILES、InChI、SMARTS、プレーンテキスト、HTML など、様々なフォーマットがサポートされています。システムはフォーマットを自動判別し、JASON キャンバス上に対応するアイテムを作成します。フォーマットが特定できない場合は、クリップボードの内容がデフォルトのテキストアイテムとして作成されます。

注 1：.sdf テキスト形式の場合、JASON は.sdf ファイルとして処理され、最初の分子ブロックのみを扱います。

9.1 コンテキストバーメニュー

編集のロック : 構造式を編集の後、誤ってそれに変更が加えられるのを防ぐために構造をロックできます。ロックを外すときは、もう一度このボタンを押します。

描画 : 構造を描画または編集するための主要なツールです。

- 1) このモードでは、パネルの空白部分を左クリックすると、炭素原子が描画されます。
- 2) 原子をクリックしてドラッグすると、結合が延長され、新しい炭素原子で終了します。
- 3) 結合をクリックしてドラッグすると、構造が拡張されてリング構造が作成されます。リング内の原子の数は、マウスドラッグの長さに依存します。ドラッグが実行されている間、提案されたリング構造が表示されます。
- 4) 原子をクリックすると、可能な代替原子核のリストが循環し、炭素原子を別の原子、たとえば酸素または窒素に変更されます。
- 5) 結合をクリックすると、結合の多重度や結合のステレオ表現など、結合の一連のオプションが順番に表示されます。結合の多重度が変わると、結合する水素もこれを考慮して調整されることに注意してください。
- 6) 原子核は、原子をクリックし、キーボードから適切な原子核の文字を入力することで、設定することができます。

原子/結合の削除 : 構造内の原子または結合を削除するために使用します。

電荷追加 : 原子に電荷を追加するために使用します。

ステレオ表示編集 : 化学結合のステレオ表現を編集するために使用されます。

9.2 構造式ツール

原子ラベルの表示：以下のオプションで選択したラベルの表示/非表示を切り替えます。

ナンバリング：各原子に固有の番号を付与します。

^{13}C 実測/計算/差分：炭素原子の化学シフト値を表示します。_化学シフト値は、スペクトルの帰属値（実測）、計算値（計算）、またはその差分（差分）の中から選択できます。

^1H 実測/計算/差分：水素原子の化学シフト値を構造上に表示します。化学シフト値は、スペクトルの帰属値（実測）、計算値（計算）、またはその差分（差分）の中から選択できます。

構造上の ^{13}C と ^1H の両方のシフトを同時に表示するように選択することも可能で、この場合の ^1H シフトは括弧内に表示されます。

Carbon、末端炭素の表示：構造式の末端炭素原子と、それに結合する水素原子を明示的に表示するかどうかを切り替えます。

Carbon、内部炭素の表示：構造式の全ての炭素原子と、それに結合する水素原子を明示的に表示するかどうかを切り替えます。

ヘテロ原子を色で表示：これにより、ヘテロ原子を色で表示するオプションが切り替わります。

原子ラベルを変更するには、マウスカーソルを合わせて希望の文字を入力します。（構造オブジェクトがアクティブでなければならない。数値ラベルとテキストラベルの両方を追加できます）原子ラベルを削除してデフォルトの数値を表示するには、「Delete」キーまたはスペースキーを 1 回押します。

帰属に関連する追加オプションは、構造上で右クリックした際に表示されるコンテキストメニューから利用できます。既に説明した帰属情報表示オプション（「構造式に表示」および「原子に表示」）に加えて、「相関情報を表示」および「H 表示」オプションも利用できます。また、「自動帰属」オプションに加えて、構造が選択されている場合には「帰属をクリア」オプションも利用できます。さらに、分子構造式が選択されていてマウスカーソルが特定の原子上にある場合には、「#x 原子から帰属を削除」によって、その原子の帰属のみを削除できます。帰属済み構造では、炭素および水素に対する 帰属情報（RMSD）を表示できます。この情報はバックグラウンドで自動更新されます。対応するチェックボックスは「構造式に表示」オプション内にあります。

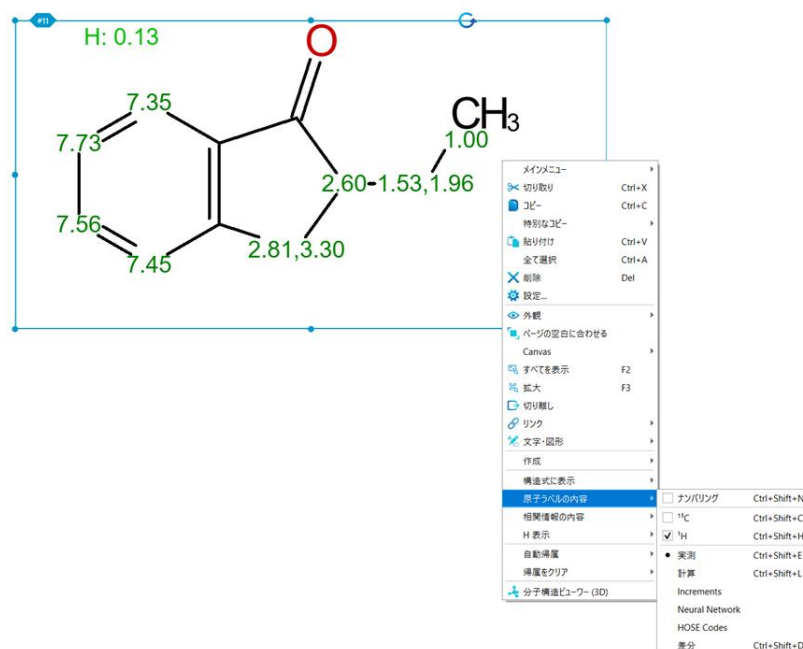


図 75：帰属ツールのコンテキストメニュー

9.3 分子構造ビューワー（3D）

分子構造を 3D 表示する機能は、「化学構造式」オブジェクト内で右クリックした際に表示されるコンテキストメニューから利用できます。マウスまたはタッチパッドを使用して、分子モデルを任意の角度に回転させることができます。

3D 分子ビューワーの「ツール」タブには、以下の機能があります。

画像をコピー：3D モデル画像を取得し、クリップボードへコピーします。

画像を保存：「ファイル保存」ダイアログを開き、分子画像を保存できます。

画像を配置：3D モデルのスクリーンショットを取得してキャンバス上に画像として配置します。配置後は 3D ビューワーが自動的に閉じられます。配置された画像をダブルクリックすると、画像作成時と同じ設定で 3D ビューワーが再び開きます。保存される情報には、カメラ位置、3D モデル表示形式、測定情報、および結晶単位格子の表示/非表示設定が含まれます。

カメラをリセット：カメラ位置を初期表示状態に戻します。

分子を再読み込み：3D 分子ビューワー内の全ての設定を初期状態に戻します。

〔3D 表示の更新〕では、分子の表示形式として「Ball and Stick」「Ellipsoid」「Lines」の 3 種類から選択できます。また、背景色として黒または白を選択できます。

「計測」タブでは、2 原子間の距離、3 原子間の角度、および 4 原子間のねじれ角を測定できます。

10 拡張処理オプション

一部の処理オプションには、初心者向けのベーシックモードと、NMR 処理をより深く理解しているユーザー向けのエキスパートモードの 2 つの操作モードがあります。ベーシックモードでは、JASON はユーザーがパラメータを適切に選択できるように支援しますが、エキスパートモードではユーザーが希望する効果を詳細に設定できるようにします。例えばリニアプレディクション（線形予測）とウィンドウ関数には拡張オプションがあります（図 76）。

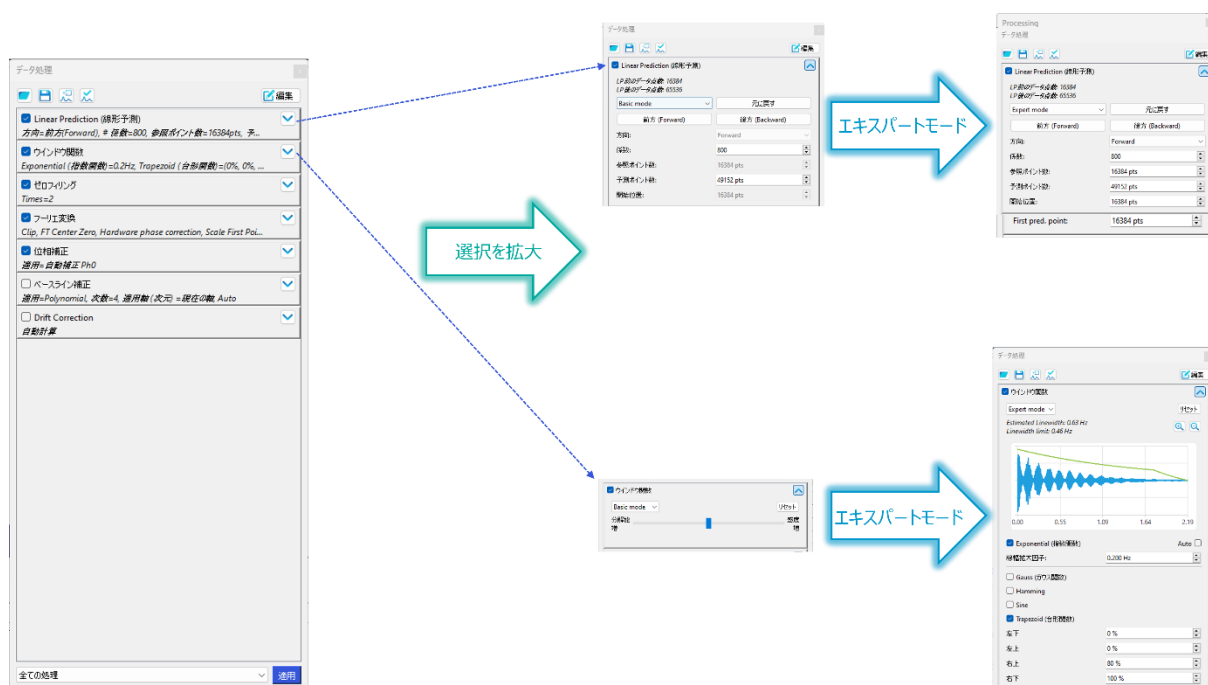


図 76：拡張処理オプション

10.1 リニアプレディクション（線形予測）

線形予測オプションを拡張する際、線形予測オプションボックスの右上隅にある矢印を使用すると、線形予測に関する完全なオプションが表示されます。最初のオプションはドロップダウンボックスで、ベーシックモードまたはエキスパートモードを選択することができます。

デフォルトのパラメータ値は、アボダイゼーションや他のパラメータと同様、オリジナルのベンダーフォーマットで指定された場合、データからインポートされます。2D データで線形予測が使用されていない場合、

JASON は非アクティブな線形予測要素を処理リストに挿入し、そのパラメータは 4 倍改善された解像度を提供するように自動的に設定されます。

リセットボタンは、線形予測をデフォルトにリセットし、JASON へのデータインポート時に LP 処理が適用されていない場合は、その処理も削除します。

前方または後方のボタンは、適切な予測方向に対して線形予測パラメータを自動的に設定します。

基本モードでは、ユーザーが編集可能なオプションはわずかで、JASON が自動的に適切なパラメータを選択するため、ユーザーは線形予測パラメータを設定する必要はありません。

係数：使用する線形予測係数の数。

予測ポイント：線形予測によって予測される点の数。

エキスパートモードでは、デジタルフィルターされたデータに対して直接次元で後方 LP を適用した場合の群遅延補正を含む高度なオプションが利用できます。

10.2 ウィンドウ関数

ウィンドウ関数の制御についても、線形予測のときと同様に基本モードとエキスパートモードの 2 つのモードがあり、ドロップダウンメニューからその選択ができます。

基本モードでは、スライダーのみがユーザーに表示され、ユーザーは、スペクトルの分解能の向上と感度（信号対雑音比）の向上の間でスペクトルの品質を調整できます。デフォルトでは、JASON はスペクトルの平均線幅に基づいてバランスを選択します。現在このモードは 1D スペクトルでのみ使用できます。

ウィンドウ関数設定とそのパラメータの完全な制御は、エキスパートモードで提供されます。エキスパートモードでは、データに関連付けられた処理リストのパラメータがデフォルトとして使用され、ウィンドウ関数設定のプレビューもこのモードで表示されます。

11 ルール

JASON のルール機能では、スペクトルや特定タイプのアイテムがキャンバス上に読み込まれ配置された際に実行される一連のアクションを定義できます。

設定するルールには、処理、分析、レイアウトの 3 つのタイプがあります。スペクトルがキャンバス上で開かれると、JASON はまず処理ルールを探します。もしあれば、そこに書かれている処理が適用されます。そうでない場合は、標準的な処理が適用されます。次に JASON は、分析ルールとレイアウトルールを適用します。各タイプのマッチングルールが複数ある場合、最初のものが適用されます。

3 種類のルールは全て、選択できる前提条件が同じです。この条件は選択するデータによって変わります。一般的に、処理ルールはより多くの条件を選択し、分析およびレイアウトルールはより少ない条件を使用します。この違いは、各ルールのダイアログボックスにあるデフォルトでチェックされている条件項目を見ることで確認できます。（図 77 参照）

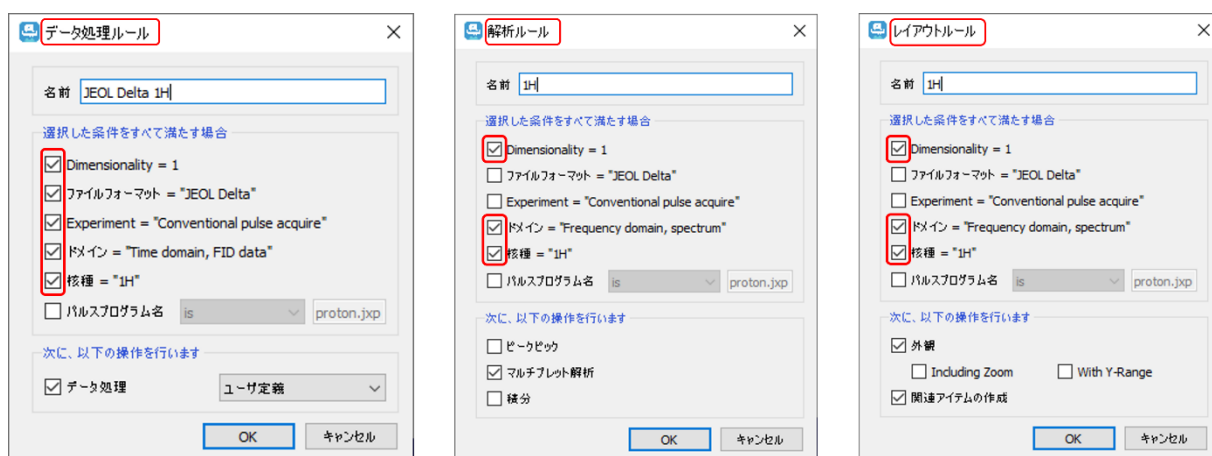


図 77：ルールダイアログボックス

実験種別が不明な場合は、代替条件としてパルスプログラム名が提案されます。また、JCAMP-DX フォーマットのデータの場合、オリジナルの条件が追加されます。

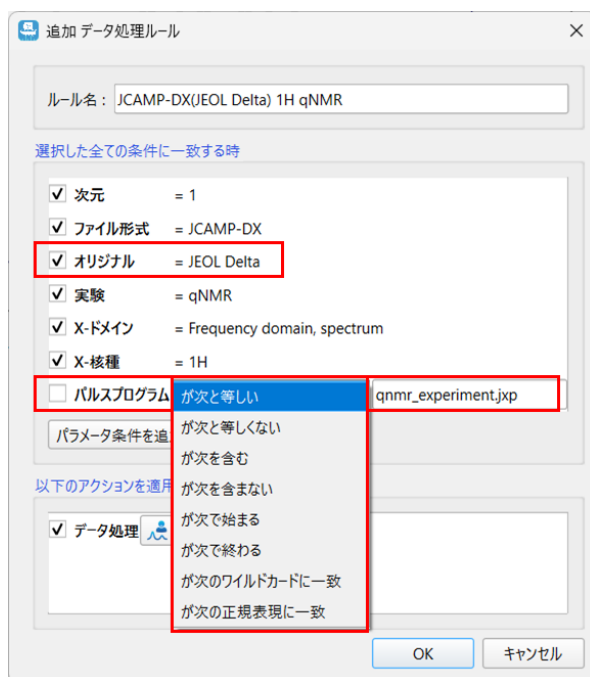


図 78 : パルスプログラムによる処理ルール

2次元スペクトルの場合、処理ルールでは Y 次元の条件が利用可能になります。



図 79 : 2D データ処理ルールダイアログ

11.1 ルールの管理

ルールは、ツールバーの「ルール」パネルのトグルボタンをクリックすることで利用可能な「ルール」パネルで管理することができます：

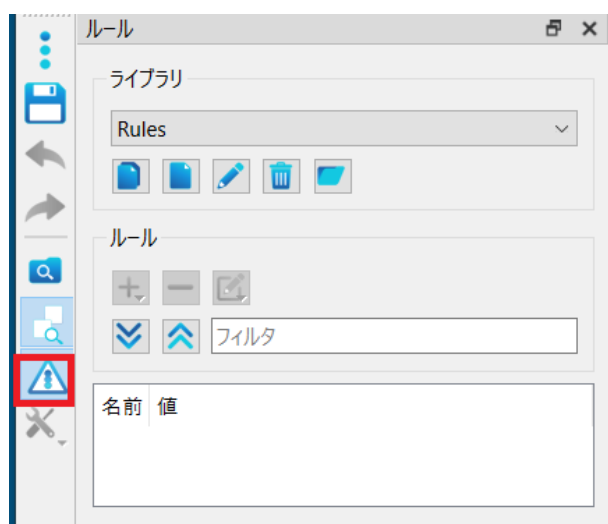


図 80：ルールパネルの管理

11.2 ルールライブラリ

ルールはライブラリにグループ化できるため、用途ごとに異なるルールセットを整理できます。[ライブラリ] セクションでは、ルールをライブラリへ整理するための機能のみを扱います。ルールの適用方法については、11.3「ルール」を参照してください。利用可能なルールライブラリはドロップダウンリストに表示されます。表示されている名称は現在選択中のライブラリ名です。「複製」機能は現在のライブラリの複製を作成します。複製されたライブラリ名には(+1)が付加されます。(例：User Rules (1), User Rules (2)など)。

「新しいライブラリを追加する」ボタンを押すとダイアログが開き、新しいライブラリ名を指定できます。作成されたライブラリは現在のライブラリとなり、作成時点ではルールを含みません。「名前を変更する」および「ライブラリの削除」は現在のライブラリを対象に動作します。また、「開く」ボタンを押すとルールライブラリが保存しているフォルダが開きます。

現在のライブラリに属するルールは[ルール]パネルに表示されます。各ルールの横には種類（データ処理、解析、レイアウト）が表示されます。

11.3 ルール

「Rules」パネルでは、個々のルールの管理およびルールの適用を行います。ルールは単独でもライブラリ単位でも適用できます。本マニュアルのこのセクションではルールの管理について説明し、ルールの適用については、ルールの種類を理解した後に「ルールの作成」セクションで詳しく説明します。

新しいルールの追加は、キャンバス上にアクティブなスペクトルがある場合に利用できます。ルールを追加するには、「+」アイコンをクリックし、レイアウトルール、処理ルール、または解析ルールのいずれかを選択します。その後、表示されるダイアログで必要な条件およびアクションを設定します。

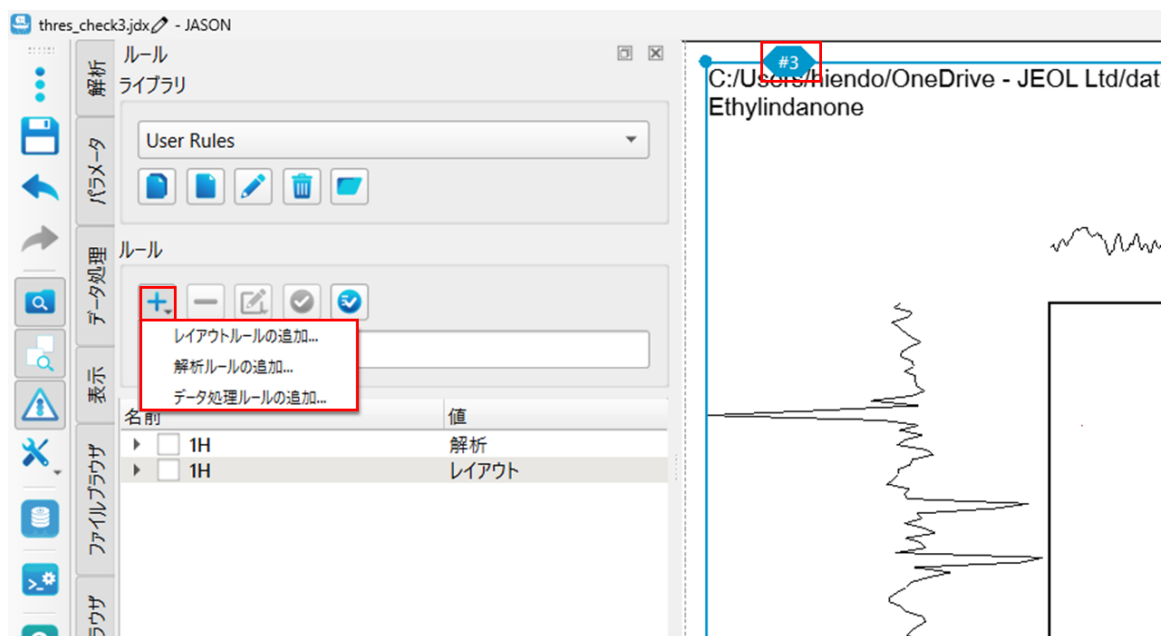


図 81：新規ルールの追加

「ルール」パネルでは、Ctrl+クリック、Ctrl+A、Shift+ ↑、Shift+ ↓ などの標準的な複数選択操作を使用して、複数のルールを選択できます。一覧でルールが複数選択された場合は一度に削除できます（「削除」選択ルール）。削除前には確認ダイアログが表示されます。単一のルールを削除する場合は確認メッセージにルール名が表示され、複数のルールを削除する場合は選択中のルール数が表示されます。

「編集/更新」ボタンでは選択したルールを適用する条件および実行するアクションを再設定できます。このボタンは選択したルールが現在選択中のスペクトルに適用可能な場合にのみ有効になります。

「全てを展開」と「全てを畳む」ボタンを押すと「ルール」パネルに現在表示されている全てのルール情報を展開したり、折りたたんだりできます。

11.4 処理ルール

処理パネルで選択できる項目と同様に、ユーザー定義、推奨条件、生データに組み込まれている条件の処理タイプから選択することができます。

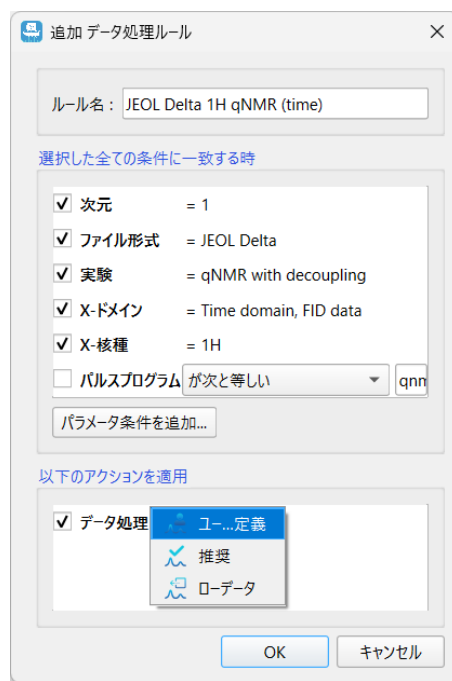


図 82 : 「処理ルール」ダイアログ

11.5 解析ルール

解析ルールは自動ピークピッキング、積分、およびマルチプレット解析をサポートしています。スペクトルの元で設定された内容に応じて、対応するチェックボックスが自動的にチェックされます。



図 83 : 「解析ルール」ダイアログ

11.6 レイアウトルール

レイアウトルールは、現在利用可能なオプションは 2 つ（外観と関連項目）です。外観とは、スペクトルに適用されるジオメトリ、スタイル、ズーム、注釈、カットなどを指します。関連項目とは、リンクされた全てのテーブル、マルチプレットレポート、インセット、分子、および元のスペクトルから作成されたインセットなどの同じ種類の項目です。さらに、関連項目には、スペクトルおよび上記の関連項目と同じページ上にある全ての画像およびテキストボックスが含まれます。このように、レイアウトルールは、実際に表示されているアイテム全体を定義しています。

11.6.1 レイアウトルールの重要な特徴

1. レイアウトルールは、スペクトルと他のアイテムの位置に関する情報を保存し、ルールが適用されたときに、スペクトルとその関連アイテムが全て正しく配置されるようにします。スペクトルは、ルールが作成されたときと同じキャンバス上の位置にある必要はありません。これにより、スペクトルをキャンバス上のどこに配置しても、レイアウトが正しく適用されるようになります。
2. テーブルがその外観を記憶するようになります。例えば、パラメータテーブルは、作成時のテンプレートを記憶しているので、同じように表示されます。
3. 分子を含むレイアウトルールを適用する場合、空の分子アイテムが作成され、ユーザーが後で描画するか、molfile をドラッグ & ドロップすることができます。分子オブジェクトが空であっても、そのプロパティはレイアウトルールから取得されます。
4. テキストボックスや画像は、レイアウトルールによって元通りに配置されます。
5. ズームをコントロールする機能が提供されています。ズーム情報をルールで保存するかどうかを制御するチェックボックスがあります。また、1D スペクトルの場合、垂直方向のズーム範囲をルールに保存するかどうかを制御するチェックボックスがあります。set plot cuts チェックボックスは、レイアウトルールに自動またはユーザー定義のプロットカットを含めることができます。レイアウトルールの作成に使用したスペクトル項目にカットが含まれている場合、コンボボックスには Custom Ranges または Automatic オプションが表示されます。スペクトル項目にカットが含まれていない場合は、Automatic オプションのみが表示されます。

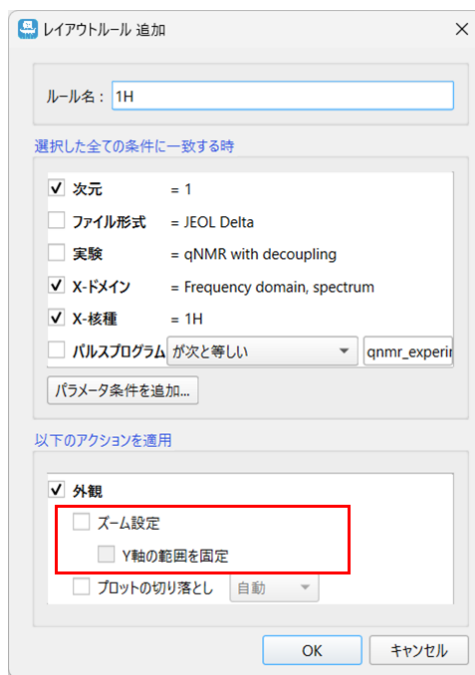


図 84 : レイアウトのルール ; 外観のオプション

11.7 ルールの作成

作成されたルールは、ルールパネルのリストに表示されます。ルールに対して、削除、無効化、名前の変更、編集（マウスの右クリック）、並び替え（ドラッグ＆ドロップ）の操作を行うことができます。

アクティブなスペクトルに適用可能なルールは、一覧内でアクティブカラーにより強調表示されます。

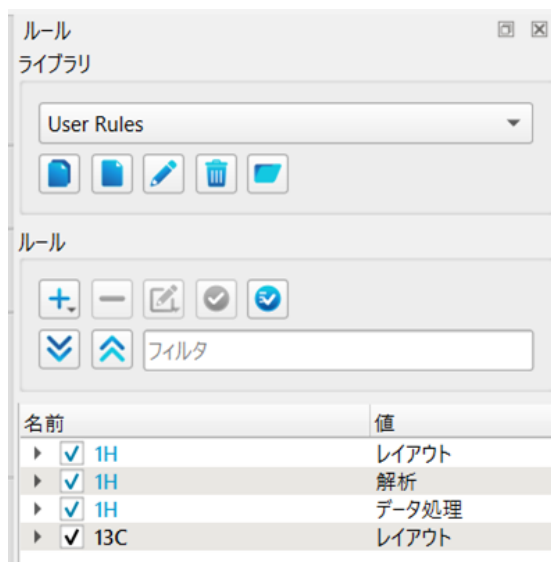


図 85 : ルールの編集

アクティブスペクトルに適用されるルールは、ルールのリストにアクティブカラーで強調表示されます。同じタイプの複数のルールが適用可能な場合、適用可能性のあるルールは、薄暗いアクティブカラーで強調表示されます。

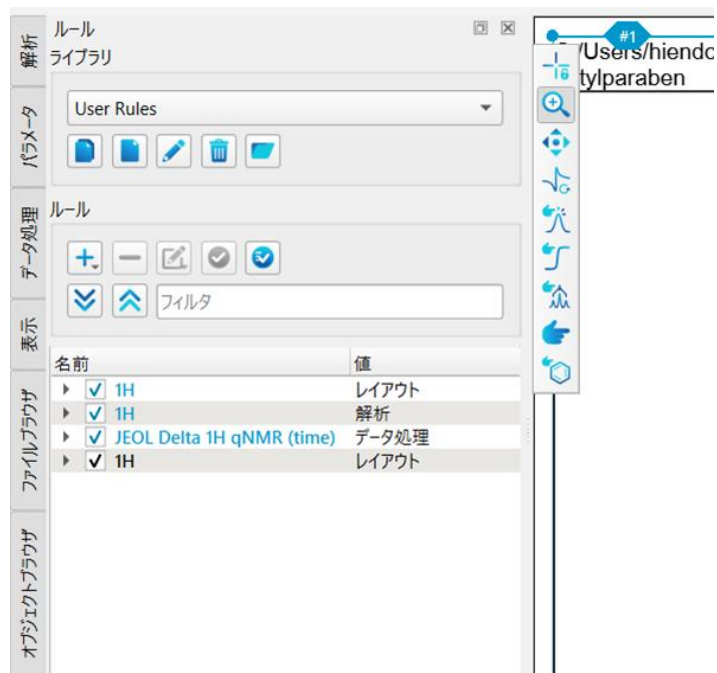


図 86 : アクティブスペクトルに適用されるルールのハイライト表示

「ルール適用」ボタン（およびコンテキストメニューの「ルールを適用」項目）は、ルールパネルでスペクトルと適用可能なルールの両方が選択されている場合に有効になります。「ルール適用」機能は、複数のスペクトルを選択している場合にも使用できます。その場合は、選択したスペクトルのうち少なくとも 1 つがアクティブである必要があります。

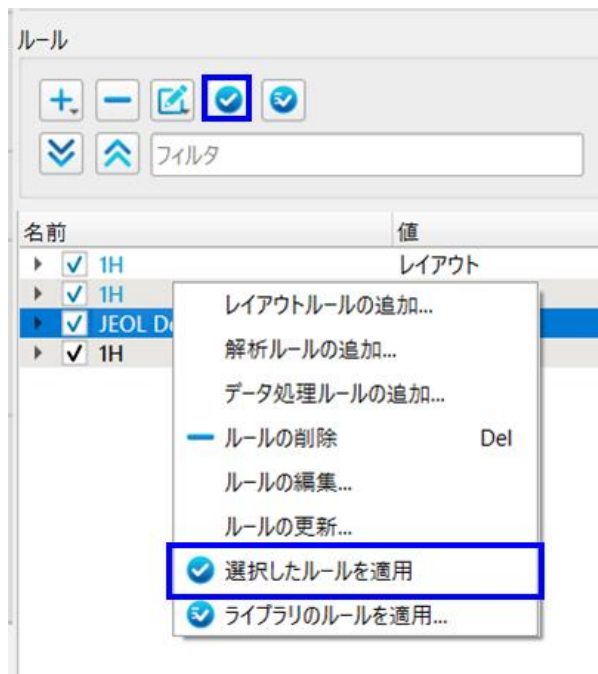


図 87：ルールの適用オプション

ルールは「ルールの更新」オプションを使用して更新できます。「ルールの更新」オプションは、選択したルールが対象のスペクトルに適用可能な場合にのみ有効になります。

11.8 ルール名

ルール名は自動的に生成されますが、編集することができます。自動生成される名前は、選択された条件に基づいて、意味のある名前になるように生成されます。名前は一意である必要はありませんが、ユーザーが設定することで、使いやすくなります。

12 質量分析

JASON バージョン 3.2 より、日本電子 JMS-S3000 SpiralTOF 装置の質量分析データがサポートされました。

JASON キャンバスは、質量分析データに対しても NMR データと同じように機能します。

12.1 MS データを開く

データを開くには、JASON ファイルブラウザで目的のファイルを探し、ファイルをダブルクリックするか、キャンバスにドラッグ＆ドロップします。JASON のメインメニューから、または Ctrl + O（Mac では Cmd）でファイルを開くこともできます。

ファイルを開くもう一つの方法は、Windows のファイルエクスプローラーまたは Mac のファインダーウィンドウからファイルをキャンバスにドラッグすることです。ファイルは、マウスカーソルがドロップした場所のキャンバス上で開かれ、「設定」→「一般」→「キャンバス」→「レイアウト」の設定に従って整理されます。

12.2 MS データの閲覧と操作

MS データを JASON キャンバスで開くと、スペクトルの左上にコンテキストメニューが表示されます。コンテキストメニューには、以下のようにスペクトルを操作するための利用可能なツールが含まれています：

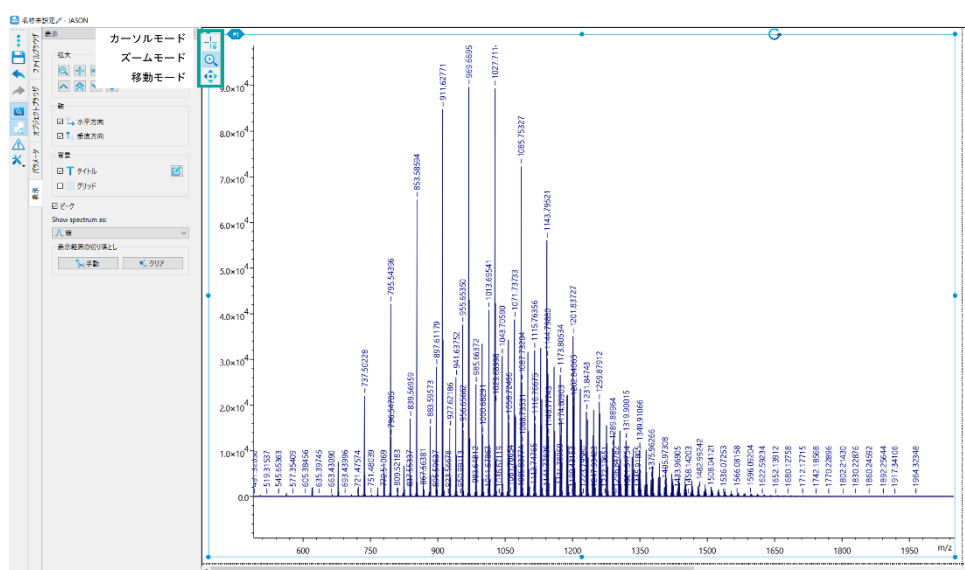


図 88 : 質量分析コンテキストメニュー

12.2.1 ビューパネル

View パネルには MS データを表示するためのツールがあります。

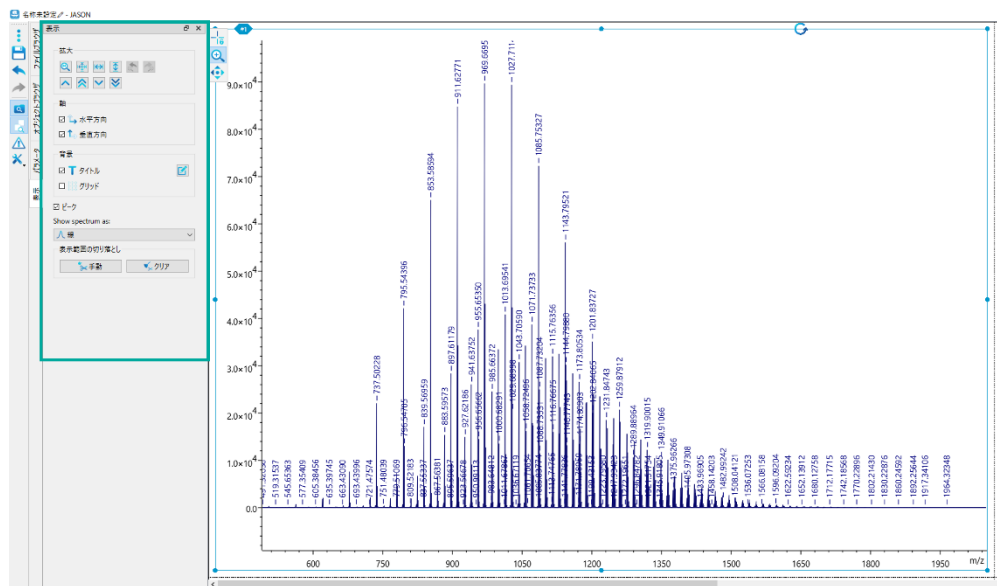


図 89 : ビューパネル (質量分析データ)

拡大 : 表示されるスペクトルのズームを変更することができます。

軸 : それぞれの軸のオン・オフができます。

背景 : スペクトルのタイトルの表示/非表示、編集、および必要に応じてスペクトル上にグリッドを表示することができます。

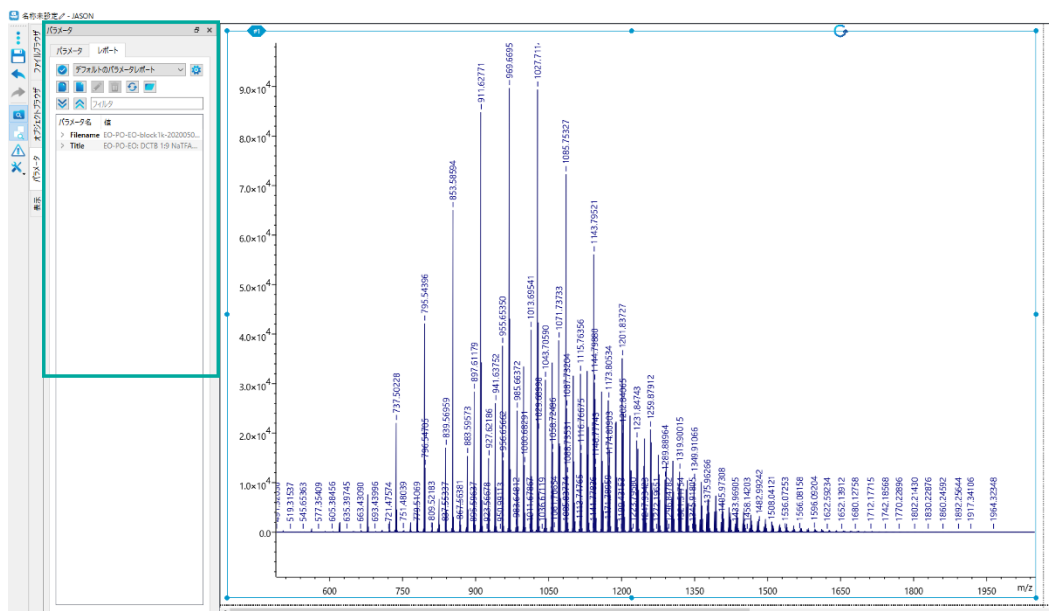
ピーク : スペクトル上のピークの表示のオン・オフを切り替え、ドロップダウンボックスを使ってプロットされたピークの種類（線、スティック、線と点）の表示を変更することができます。

文字・図形チェックボックス : スペクトル上の文字・図形の表示/非表示を切り替えることができます。また、表示する文字・図形の種類を選択できます。

表示範囲の切り落とし : マニュアルツールを使ってスペクトルの領域をカットすることができます。カットはクリアボタンでクリアできます。

12.2.2 パラメータ・パネル

“パラメータ”パネルにはスペクトルに関連するパラメータが表示され、“レポート”タブではパラメータ・レポートを作成することができます。



13 Appendix

13.1 Windows ショートカットキー



JASON

キーボード ショートカット





F1 オンラインヘルプ
Macでは
Cmd + Shift + ?



F2 全てのオブジェクトを
画面サイズに合わせる



F3 選択されたアイテムに
ズームする



Delete 選択項目を
削除

 拡大

 カーソル

 手動ピークピッキング

 手動帰属

 手動位相補正

 手動化学シフト補正

 手動積分

 メジャー

 選択

 手動切り取り

 手動マルチプレット解析

 パンニング
(スペクトルの移動/スケール)

ヒント: キーを押し続けると一時的にモードになり、キーを離すと終了します。

 開く

 コピー

 戻る

 Zoom戻す

 印刷

 保存

 ペースト

 やり直す

 Zoomやり直す

 全選択

 新しいJASONドキュメント

 カット

 JASONを閉じる

 全キャンバス Zoom



Macは、Cmd使用

www.jeoljason.com

その他の便利な機能：キーボードショートカットとキーボードの組み合わせを以下に示します：

Windows	MacOS	
Key	Key	Functionality

Del	Del	Delete selected item
Ctrl+A	Cmd+A	Select all
Ctrl+Z	Cmd+Z	Undo
Ctrl+X	Cmd+X	Cuts selected items to clipboard
Ctrl+C	Cmd+C	Copy selected item
Ctrl+V	Cmd+V	Paste item
Ctrl+S	Cmd+S	Save
Ctrl+U	Cmd+U	Undo Zoom
Ctrl+I	Cmd+I	Redo Zoom

Ctrl (Cmd) キーともう 1 つのキーが指定されている場合、Ctrl (Cmd) キーを押したまま、2 つ目のキーを押します。

参考：動画サイト “JEOL JASON NMR ソフトウェア” チャンネル

<https://www.youtube.com/channel/UC7UkJqLGeLy-quBv1ikiKJQ>

操作や機能を定期的に紹介しています。



13.2 サポートファイルフォーマット

- Bruker TopSpin:
 - raw (fid/ser): conventional 1D, 2D, and 3D; 2D NUS, DOSY, pure shift
 - processed (1r, 2rr, 3rr, 4rr,...8rr) data
- Bruker WinNMR:
 - raw and processed 1D and 2D data
- CCP-NC MAGRES (free plugin) compatible with output files created by:
 - CASTEP
 - Quantum ESPRESSO
- Chemagnetics/Varian Spinsight: 1D, 2D raw and processed data
- JCAMP-DX from any other software, including vendor-specific 1D and 2D data:
 - ACDLabs
 - Bruker TopSpin
 - JEOL Delta
 - Nanalysis
 - NUTS
 - Magritek
 - Mestrelab
 - Oxford Instruments
 - ThermoFisher picoSpin
 - Q_Magnetics
 - Varian/Agilent
- JEOL Delta (JDF):
 - raw: conventional 1D, 2D, and 3D; 2D NUS, DOSY, pure shift
 - processed: 1D, 2D and 3D
 - JDA (JEOL Data Archive)

- JEOL Alice 2: 1D and 2D data
- Magritek:
 - SpinSolve: 1D, 2D, and 2D DOSY
 - SpinSolve Expert: 1D, 2D
- NMRPipe:
 - Processed 1D and 2D, (no support for DOSY)
- RS2D SPINit:
 - 1D and 2D including versions both before and after 2022.06
- QOne SpinStudioJ
- SIMPSON (free plugin): 1D
- TECMAG/TNMR (free plugin): 1D, 2D
- Varian/Agilent VnmrJ:
 - Raw (fid): conventional 1D, 2D; 2D NUS and DOSY