# JASON 簡易マニュアル (2021.8 版)

このドキュメントは、JASONの概要を説明し、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。 ユーザーは NMR 処理の実用的な知 識を持っていることを前提としています。

1	はし	ごめに3
2	デー	- タ読み込み4
	2.1	メインメニューからの読み込み5
	2.2	ファイルブラウザからの読み込み5
	2.3	Canvas 上のデータ配置7
3	デー	−タ操作の概要:表示、処理、分析9
	3.1	コンテキストツールバー
	3.2	コンテキストパネル19
	3.3	オブジェクトブラウザ20
	3.4	表示パネル
	3.5	処理パネル
	3.6	解析パネル
4	レス	ポート:表とパラメータ
	4.1	表
	4.1	.1 パラメータテーブル30
	4.1	.2 ピークテーブル
	4.1	.3 積分/マルチプレットテーブル33
	4.1	.4 マルチプレットレポート(論文書式の選択)34
5	設定	をメニュー35
	5.1	一般設定
	5.1	.1 ユーザインターフェース
	5.1	.2 Canvas
	5.1	.3 パス
		1

	5.1	.4	インポート/エクスポート	38
	5.2	NM	R 設定	39
	5.2	2.1	軸	10
	5.2	2.2	プロット	11
	5.2	2.3	ピークピック	12
	5.2	2.4	マルチプレット/積分	13
6	J新	告シ	ミュレーション	15
	6.1	シミ	ュレーションダイアログパネル	15
	6.2	シミ	ュレーション設定	16
7	構	造式の	⊃作成∠	18
	7.1	コン	〈テキストメニュー	18
	7.2	構造	豆式ツールパネル	19
8	拡	<b>脹処理</b>	基オプション	50
	8.1	リニ	ニアプレディクション	50
	8.2	ウィ	ンドウ関数	51

画面、機能については作成当時のものです。予告なく変更・追加することがあります。

# 1 はじめに



図1 Canvas

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、Canvas 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、Canvas の 左上隅のメニューには次の機能があります。

- メインメニュー:データの読み込み、保存、印刷のオプションが含まれています。 新しい分子構造の描画とスペクトルシミュレーション、および設定を選択できま す。
- 2. 保存ボタン:ファイルが保存できます。
- 3. 元に戻す/やり直すボタン:最新の操作を元に戻す、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を切り替えます。
- 6. **コンテキストツールボタン**:さまざまなデータ操作ツールの表示を切り替えるため のオプションのメニューです。

右下隅には、データを拡大縮小コントロールする各種ボタンやツールがあります。

# 2 データ読み込み

JASON にデータを読み込む方法は3通りあります。

- 1. Canvas にファイルをドラッグアンドドロップします(図2)。
- 2. メインメニューの[開く]オプションを使用して開きます
- ファイルブラウザボタンを使用して、関連するファイルに移動して開きます
   (図 3)。



図2 Windows エクスプローラーからの読み込み

データファイルは、標準の Windows エクスプローラー画面から Canvas に簡単にドラッ グアンドドロップできます。Windows エクスプローラーで「プログラムから開く」オプシ ョンから JASON を選択することもできますが、このときのデータファイルは、すでに立ち 上がっている JASON に読み込まれるのではなく、新しく立ち上がる別の JASON に読み込 まれることに注意してください。

### 2.1 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。このブラウザを使用して、ファイルをダブルクリック、または Canvas にドラッグすることでデータを開くことができます。Windows エクスプローラーで複数の ファイルを選択する通常の方法を使用して、複数のファイルを読み込みできます。

### 2.2 ファイルブラウザからの読み込み

ファイルブラウザボタンを使用して、ファイルブラウザを JASON 上に表示できます。 デフォルトでは、Canvas の左端に表示されます。図3を参照してください。

注意:JASON のレイアウトは変更可能であり、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。



図3 ファイルブラウザからの読み込み

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4を参照)。

- 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 最近開いたファイルの時系列リスト



図4 ファイルブラウザタブ

希望のディレクトリに移動して目的のファイルを選択することで、ファイルブラウザから ファイルを読み込むことが出来ます。複数のファイルを一度に開くには以下の2つの方法が あります。並んでいる複数のファイルを選択する場合には、1つ目のファイルをマウス左ク リックで選択した後、Shift キーを押しながら2番目(終わり)のファイルを選択すること で出来ます。また、並んでいない複数のファイルの場合には、Ctrl キーを押しながら個々の ファイルを選択することで出来ます。

# 2.3 Canvas 上のデータ配置





#### ※ オブジェクトとは Canvas 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。

JASON で Canvas 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、 オブジェクトが選択され、現在アクティブな状態にあります。 これらの円を使用して、ド ラッグしてオブジェクトを再スケーリングできます。 さらに、選択すると、各オブジェク トの左上隅に小さな番号のタグ(グラブタブ)が表示されます。 これは、オブジェクトを Canvas 上で手動で移動するために使用されます。 Canvas 上でオブジェクトを操作する方 法の詳細については、「3.データ操作の概要」で説明します。

JASON でアイテムを開いたときに Canvas に配置されるレイアウトは、オブジェクトフ ァイルを開く方法によって決まります。 ファイルを Canvas の空白部分にドラッグアンドド ロップすると、ファイルはその位置で開かれます。 ファイルをダブルクリックして開く と、オブジェクトの作成は、設定メニューの[一般]セクションで定義されている[Canvas]タ ブのレイアウト設定で、Canvas に自動的に配置されます。 設定メニューには、JASON の 左上隅にあるファイルメニューからアクセスします。詳細については、「5.1.2 Canvas」 で説明します。



図6 Canvas レイアウト設定

# 3 データ操作の概要:表示、処理、分析

この章では、ユーザーが Canvas 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。

3.1 コンテキストツールバー

オブジェクトが読み込まれると、ユーザーはそのオブジェクトについて、コンテキストツ ールバーを通して種々の操作・編集をすることが出来ます(図7)。これは NMR スペクト ルがオブジェクトの場合になります。(コンテキストツールバーの内容はオブジェクトの種 類によって異なります。)



図7 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7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用できるようになります。これは、現在のオブジェクトを操作 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。たとえば、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、マウス操作で領域にズームイン 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。 いくつかの一般的な機能があります。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、マウスをスクロールす るとスペクトルのY軸を拡大・縮小できます。

**1. 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 クトは選択された領域が表示されます。

<u>2. 移動/スケール (P)</u>: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

**3. 手動位相補正(F)**:位相補正モードでは、ユーザー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。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8 緑色の線)



図8 手動位相補正モード

ビボットポイント (PP) は、緑色のピボットライン上のグラブボックス (□) を左クリ ックしてドラッグすることで移動できます。 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動かすことによって実行されます。 マウスは任意の方向に移動できき ます。一次位相補正は、マウスの右ボタンを押したまま、同様の方法で実行されます。位相 補正後、位相補正モードダイアログボックスの終了ボタン (Finish) をクリックして位相補 正モードを終了できます。

2D NMR データにおいても同様の操作で位相補正できます。位相補正モードを選択する と、スペクトルの最大の正のピークがピボットポイントとして選択されます。位相モードダ イアログボックスで[スライスの表示]ボックスがオンになっている場合、ピボットポイント を通過する X および Y トレース(緑色の線)がスペクトル上に表示され、位相補正をサポ ートします。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9)



図9 手動2D位相補正

[カーソルガイドを表示]チェックボックスをオンにすると、2番目のトレースセットを選 択できます。これらは青い線で表示され、2番目のトレース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、マウスの左ボタンを押したままにすることで実行され ます。移動の方向は、位相の方向に対応します。マウスを垂直方向に動かすと、F1 または Y 軸とも呼ばれる間接軸の位相が変化します。マウスを水平方向に動かすと、F2 または X 軸とも呼ばれる直接軸の位相が変更されます。マウスを斜めに動かすと、両方の軸の位相が 同時に変化します。

一次位相補正はゼロ次位相補正と同じように実行されますが、マウスの左ボタンの代わり にマウスの右ボタンを使用します。位相補正が正常に完了したら、位相補正モードダイアロ グの終了ボタンをクリックして位相モードを終了できます。

**4. 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、手動でピークをマー クできます(ピークフラグ)。これは、マウスを目的の位置で左クリックすることで実行 されます。図 10 を参照してください。デフォルトでは、クリック位置のピークトップを選 びますが、Ctrl ボタンを押したままにすると、ピークフラグを自由に配置できます。

![](_page_11_Figure_4.jpeg)

図 10 手動ピークピッキングモード

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]オプションを選択することで作成できます。 表については、4.レポート:表とパラメー タで詳しく説明します。 選択モードを使用してピークを選択し、Delete キーを押すと、ピ ークを削除できます。 選択ツールについては、以下で説明します。

5. 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11を参照してください。積分の範囲はベースラインの下の積分バーとして表示され、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、ラ ベルの外観調整から積分範囲の調整、<del>や</del>ピーク面積の正規化などを変更できます。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。一つの積分値を正規化すると、スペクトル内の全ての積分値に対してそれ が反映され相対値が与えられます。

![](_page_12_Figure_3.jpeg)

図11 手動積分モード

13

6. 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12)左キーを押しながらドラッグすることで、解析領域を選択します。

![](_page_13_Figure_1.jpeg)

手動マルチプレット解析モードを選択した時、しきい値が表示されます(緑色線)。しき い値を超えるピークはマルチプレット解析で使用され、しきい値を下回るピークは無視され ます。その領域ですでにピッキングされているピークがある場合、それらはマルチプレット 解析で使用されます。ピークピッキングが選択されていない場合、JASON はマルチプレッ ト解析の前に自動ピークピッキング選択を実行します。マルチプレットに関する情報は、ピ ークの上部に表示されるマルチプレットバーの上側に報告されます。また同時に、同領域の 積分の結果(積分曲線と積分バー)も表示されます。マルチプレットバーが強調表示される と、マルチプレット解析の対象となっているピークは青い三角形のラベルでマークされ、し きい値よりも低い、つまり解析の対象となっていないピークは小さな灰色のチェックマーク でマークされます。マルチプレットが解析されると、J結合ツリー図も表示されます。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、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。 **7. 手動シフト補正(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、選択した化学シフトに設定できます。 選択を行うには、マウスを使用してカーソ ルを目的の位置に移動し、左クリックしてリファレンスダイアログを開きます。 デフォル トモードでは、カーソルが最も近いピークが選択します。 自由に選択するには、Ctrl キー を押したままにする必要があります。

![](_page_14_Figure_1.jpeg)

図13 リファレンスダイアログボックス

リファレンスダイアログを図 13 に示します。現在の化学シフト値が示され、テキストボ ックスには設定したい値をいれます。多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 F1,F2 軸が示されます。新しい値を入力して[OK]をクリックすると、それに基 づきスペクトルの化学シフトが再設定されます。再設定後、必要な場合に"□オリジナルの リファレンスに戻す"にチェックを入れ OK すると元の値に戻ります。

**8. 選択(S)**: 選択ツールは汎用ツールであり、Canvas 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、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。 9. メジャー (D) :メジャーツールを選択すると、スペクトル上の2点間で正確な距離を 測定することができます。スペクトル上、マウスで最初のポイントを選択して、終了ポイン トまでドラッグすることで測定を行うことが出来ます。デフォルトでは、カーソルは最も近 いピークのある位置を選択しますが、Ctrl キーを押したままにすると自由に位置を選択でき ます。距離測定が行われると、開始点と終点にラベルが作成されます。終点ラベルには、終 点と始点の座標の差が含まれています。 (図 14) メジャーモードを選択すると、「メジャ ー」というラベルの付いた追加のタブが左側に開きます。このタブには、メジャーツールの オプションが含まれています。単一モードでは、新しい距離測定が行われると、前の結果は 削除されます。複数モードでは、前の結果が残ります。

![](_page_15_Figure_1.jpeg)

図 14 メジャーツール

[すべて消去]ボタンは、現在のすべての測定値を削除します。 ユーザーが特定の測定値 を削除したい場合は、カーソルを測定線の1つに近づけることで削除できます。 画面上に 赤いバツ印が表示され、それを使用して測定線を削除します。

![](_page_16_Figure_0.jpeg)

図 15 1D スペクトル上の切り落とし

10. 切り落とし(T): 切り落としツールモードを選択すると、ユーザーは、例えば信号 のないスペクトルの領域を表示上切り落とすことができます。 1D スペクトルでは、これ は、マウスの左下を押したまま水平方向にドラッグして、切り落とす領域を選択することに よって行われます。マウスの左ボタンを離すと、選択した領域が削除されます。 図 15 に 示すように、切り落とされた領域はスペクトルのベースラインに不連続領域として表示され ます。2D データセットの場合、カット領域はマウスの左ボタンを押したまま両軸でドラッ グして選択します。 長方形のカット領域。 カット領域は、軸の不連続として示されていま す。(図 16)

![](_page_17_Figure_0.jpeg)

図16 2Dスペクトルの切り落とし

図 16 のように、1D スペクトルを投影として使用すると、切り落とされた領域がスペクトルのベースラインの不連続として表示されることに注意してください。

11. 手動アサイメント(A): アサイメントツールは分子構造と組み合わせて使用しま す。スペクトル上のマルチプレットまたはピークを選択し、その帰属を構造内の原子に割り 当てます。スペクトル上のピークもしくはマルチプレットのラベルをマウス左クリックによ り選択し、それをそのままドラッグで分子構造上の原子まで持っていくことで帰属が実行さ 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。各パネルの表示・非表示の切り替え は、「1. はじめに」で説明したコンテキストツールにより行うことが出来ます。

NMR スペクトルに使用できるパネルを図 17 に示します。パネルの配置は柔軟であり、 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、ユーザーの好みに応じて再 配置でききます。パネルは、図 17 のように互いに積み重ねることも、図 18 のように垂直 に積み重ねることもできます。

![](_page_18_Figure_3.jpeg)

図17 コンテキストパネルの構成(例1)

![](_page_18_Figure_5.jpeg)

図 18 コンテキストパネルの構成 (例 2)

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(表示、ファイル ブラウザ、オブジェクトブラウザ、処理、解析、パラメータ)があります。ファイルブラウ ザについては「2.3 Canvas上のデータ配置」で説明しました。 その他のパネルについて は、以下で説明します。

## 3.3 オブジェクトブラウザ

![](_page_19_Figure_2.jpeg)

図 19 オブジェクトブラウザ

オブジェクトブラウザは、Canvas 上のすべてのオブジェクトの視覚的なリストになりま す。(図19)オブジェクトブラウザでアイテムを左クリックすると、そのオブジェクトが 選択されます。選択されたオブジェクトは、オブジェクトブラウザ上で強調表示される他、 Canvas 上でもそのオブジェクト周辺のドラッグポイントが塗りつぶされるため識別するこ とが出来ます。図19には、オブジェクトブラウザ上で<sup>1</sup>H スペクトルが選択された様子が 示されています。このとき同時にキャンパス上該当のスペクトル(左上)も選択され、この 状態で例えば画面の拡大(ズーム)をすると、そのスペクトルを全画面表示にすることが出 来ます。

オブジェクトブラウザで一つのオブジェクトを右クリックすると、それに対し、「削除」 及び「リンクの編集」の二つのオプションが表示されます。「削除」は Canvas(およびオ ブジェクトブラウザ)からオブジェクトを削除できます。同じことは、オブジェクトブラウ ザ越しにオブジェクトを選択して Delete キーを押すことでも実行されます。2 番目の「リ ンクの編集のオプション」は、複数のオブジェクト間のリンクの編集を行うダイアログボッ クスが開きます(図20)。このダイアログボックスは2つのパネルからなり、左側に選択 されたオブジェクト、右側にリンク先が表示されます。ユーザーはリンクさせたいオブジェ クトを左側のパネルのチェックボックスから選択します。ユーザーが[OK]を押し、オブジ ェクト間のリンクが形成されると、そのスペクトルの間で拡大・縮小などの動作が同期され ます。

オブジェクト間のリンクは、オブジェクトブラウザだけでなく Canvas 上からも行うこと が出来ます(Canvas 上、右クリックによるコンテキストメニュー→ "選択されたオブジェク ト間のリンク")。この場合、選択されたオブジェクト間全てにおいて相互リンクが作成さ れることに注意下さい。リンクを外すときは、オブジェクトブラウザ-> リンクの編集か ら、ペア毎に明示的にリンクを解除する必要があります。

オブジェクト間のリンクは、オブジェクトブラウザの表示領域の右側に青い接続線として 表示されます。

![](_page_20_Figure_4.jpeg)

図 20 リンクの編集

## 3.4 表示パネル

表示パネルには、Canvas 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。 この節ではスペクトルの表示パネルについて説明します。

![](_page_21_Figure_2.jpeg)

図21 ビューパネル

1D スペクトルの表示オプションを図 21 に示します。

1. 拡大ツール: 拡大レベルをより正確に制御できるようにする一連の手動ズームコントロ ールです。

2. 軸ツール:軸の表示の切り替えや軸に表示される単位の変更ができます。

ピークフィッティング表示: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 ることが出来ます。

**3. マルチプレット解析:**有効にすることで、マルチプレット解析の実行後スペクトル上に、それぞれマルチプレットラベル及び積分値ラベル、J結合ツリーを表示します。

**4. 描画方式:**スペクトルや FID の線(プロット)のスタイルを変更します。選択肢は以下になります;1)線、2)スティック(棒グラフ)、3)線と点。

5. マルチビューの追加: 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。

**6. 切り落とし**:切り落としボタンは、コンテキストツールバーの切り落としツールと同じ ように機能します。切り落としボタンを押すと切り落としツールモードが開始され切り落 とし範囲を指定することが出来ます。

**7. スペクトルの同期の切り替え:**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出来ます。

![](_page_22_Figure_6.jpeg)

図 22 ビューパネル上の 2D 表示オプション

8. 2D表示オプション: 2D スペクトルの表示オプションを図 22 に示します。1D スペクトルのオプションに加えて、2D スペクトル表示には、1) 2D 描画方法:スペクトルの描画のスタイルの選択(等高線図/ラスター図、オーバーレイ/スタック)、また2)正負信号表示に関するオプションがあります。また軸の表示に関する追加のオプションとして、各軸に貼り付ける 1D スペクトルの種類を決める X/Y 軸のサイドビューがあります。チェックボックスで同パラメータを有効にし、貼り付ける 1D の種類(合算、投影、高分解のスペクトル、スライストレース)をドロップダウンボックスより選択します。この内、スライストレースでは、複数のスライストレースを同時に表示することも出来ます。

#### 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すべての処理 のステップが含まれています。 図 23 に、1D スペクトルの一般的なプロセスリストを示し ます。 この節は、ユーザーがルーチン的な NMR データの処理に通じていることを前提と して説明します。

![](_page_23_Figure_3.jpeg)

図 23 処理パネル

プロセスリストの各項目は、左側のチェックボックスによりその処理項目の適用/不適用を 決定、また右側の下向き矢印から内容を展開し、パラメータの編集を行うことが出来ます。 加えた変更を有効にするためには、処理パネル下部の[適用] ボタンにてそれを適用させる 必要があります。いくつかの処理ステップには、拡張使用モードがあり、基本モード、およ びエキスパートモードがあります。これらについては、「8.拡張処理オプション」で説明 します。

<u>1. ウィンドウ関数:</u>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。 エキ スパートモードでは、パネルには FID とウィンドウ関数詳細設定も表示されます。

**2. 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倍未満の倍数、または最終ポイント数を与えること で定義されます。

**3. フーリエ変換:**フーリエ変換のすべ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になります。

**<u>4</u>. 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、次のモードもしくは選 択肢をユーザーは使うことが出来ます。

1) 自動:このモードでは、位相補正は自動的に実行されます

2) 指定補正値: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)絶対値:スペクトルは絶対値で表示されます。

4) 自動補正 Ph0:1 次位相は Acquisition パラメータから決定され、0 次位相は自動的に修 正されます。

2)指定補正値と 4)自動補正 Ph0 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。指定補正値モードでは、手動で位相を変更するために 使用できます。

<u>5. Polynomial ベースライン補正</u>単純な多項式ベースライン補正のパラメータを表示しま す。 多項式の次数を変更できます。

25

**6. データ表示オプション:**この表示プションを使用すると、ユーザーは処理のステップ毎 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) 直接観測軸の時間領域の処理: 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:FT後のF2。フーリエ変換直後の周波数領域データを表示します。

4) すべての処理: すべての処理の適用後にデータを表示します。

![](_page_25_Figure_5.jpeg)

図 24 プロセスリストオプション

**7. 処理テンプレートの編集:**新しいデータセットが開かれると、JASON は保存されてい る処理リストを読み取って解釈し、それを自動的に適用、実行します。ユーザーに適用した い他の処理がある場合、処理パネルの右上隅にある編集処理ボタンを使用して処理項目を追 加できます。図24を参照してください。処理テンプレートの編集ダイアログには、左側に 使用可能な処理機能のリストがあります。右側には、現在の処理リストの内容が確認できま す。左側からドラッグして右側にドロップすることで新しい処理項目リストに追加されま す。デフォルトでは、JASON は自動的に処理をリスト内の最も適切な位置に配置します。 また右側のリストで一つの処理項目を選択して Delete キーを押すことで、処理をプロセス リストから削除できます。編集が終わり[OK]ボタンが押されたときに処理リストが更新さ れます

8. 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。ユーザーが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)を押すことでこれを行うことができます(図24)。編集モ ードのドロップダウンリストが表示され、ユーザーは以下の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、ユーザーは処理項目の追加、並べ替え 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。

9. 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、それぞれ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 25 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。

![](_page_27_Figure_2.jpeg)

図 25 解析パネル

1. すべて消去:実行されているすべての解析をクリアします。

2. 化学シフト補正:コンテキストツールバーの手動化学シフト補正モードと同じです。

3. ビークビック: ピークビックには自動と手動の2つのモードがあります。手動のピー 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になります。自動ピ ークピッキングでは、対象のピークのしきい値を設定するようにユーザーに求め、スペクト ル全体のすべてのピークを自動的にピッキングし、後続のモードをデータに適合させます。 [モデルフィット]ボタンを使用すると、フィッティングモデルを変更する(ピークの削除/ 追加、ピークテーブルのパラメータの変更)か、現在のモデルのフィッティングの反復をさ らに強制することで、フィッティングを調整できます。ピークピッキング後の個々のピーク の操作は、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 アボタンは、選択したすべてのピークをクリアします。 この節の右側にある設定ボタン(歯車)は、NMR 設定のピークタブが開きます。ここでピ ークピックの条件設定ができます。「5.2.3 ピークピック」で詳細は説明します。

**4. 積分:**2つの積分モードがあります。手動モードはコンテキストツールバーの積分モードと同じです。自動モードは、単一のマルチプレットに属する可能性が高いピークのグループを含む領域にスペクトルを分離しようとします。積分領域とラベルの操作は、コンテキストツールバーセクションの積分モードの説明と同じです。クリアボタンは、スペクトル全体のすべての積分をクリアします。

5. 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 クピッキングと積分がすでに実行されていてもピークピックと積分のステップがまだ行われ ていないと仮定して、マルチプレット解析を行います。個々の結果は、範囲を拡張したり、 ピークをマルチプレットに追加したり、マルチプレットから削除したりして操作できます。 ユーザーが変更に満足したら、解析ボタンを押してマルチプレット解析をやり直すことがで きます。クリアボタンは、すべてのマルチプレット解析結果をクリアします。

**6. その他のツール**: J 結合シミュレーションなどのその他のツールを表示、非表示を切り かえられます。

# 4 レポート:表とパラメータ

ピークピッキングや積分、マルチプレット解析等を実行したときには、結果を表にまとめ て表示することが出来ます。

4.1 表

JASON で表を作成するには、オブジェクトを選択し、右クリックでコンテキストメニュ ーを表示します。メニューには、パラメータテーブル、ピークテーブル、積分/マルチプレ ットテーブル、マルチプレットレポート(論文書式の選択)があります。

#### 4.1.1 パラメータテーブル

作成メニューのパラメータテーブルを作成するは、スペクトルの横にパラメータテーブル を配置します(図 26)。パラメータテーブルの位置や大きさはは、JASONの他のオブジェ クトと同じようにそれぞれグラブタブやドラッグポイントにより操作できます。パラメータ テーブルの各パラメータ(行)の順序は、その行を左クリックにより選択して、移動先でド ラッグ・ドロップすることで順序の変更を行うことが出来ます。

別ウィンドウで表示されるパラメータパネルは2つのタブで構成されています。パラメ ータタブは、選択したデータで使用可能なすべてのパラメータのリストであり、レポートタ ブは、パラメータテーブルが作成された場合に表示されるすべてのパラメータのリストで す。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。

図 27 は、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。新しい アイテムは、パラメータパネルの[パラメータ]タブ(図 26 を参照)から表示されたテーブ ルに直接ドラッグすることもできます。

![](_page_30_Figure_0.jpeg)

図 26 パラメータテーブル

パラメータ		8
パラメータ レポート		
グループ(G):	parameters ~	
フィルタ		
パラメータ名	値 ^	
ACQ_DELAY	8.34E-06 s	
ACQ_DELAY.unts.str	s	
ACTUAL_START_TIME	872435117	
ACTUAL_START_TIME.str	2017-08-25T00:05:17	
AF_DELAY_RATIO	0	
AF_VERSION	4	
AUTOSHIM_MODE	AUTOSHIM OFF	
BLANKING	2E-06 s	
BLANKING.unts.str	s	
BUFFER_LOOP	1	
BUFFER_LOOP_INDEX	1	
CH11_AMP	NONE	
CH11_DDS	1	
CH11_XMTR	0	
CH12_AMP	NONE	
CH12_DDS	1	
CH12_XMTR	0	
CH13_AMP	NONE	
CH13_DDS	1	
CH13_XMTR	0	
CH14_AMP	NONE	
CH14_DDS	1	
CH14_XMTR	0	
CH15_AMP	NONE	
CH15 DDS	1 ~	
<	>	

パラメータ	é	p
パラメータ レポート		
∅ パラメータリスト	~ <b>ö</b>	
× < 71№9		
パラメークタ	Ġ.	
Ellanamo	Ethylindanone Proton 12-1 idf	
Title	Ethylindanone	
Author	delta	
Experiment	proton ivo	
> Experiment	CHLOROGORM D	
Actual Start Time	2017 09 25700-05-17	
> Actual Start Time	2017-08-25100:05:17	
> Field Strength	9.389771	
Spectrometer	DELIA2_NMK	
> Scans	8	
> Relaxation Delay	5 5	
> Receiver Gain	46	
> Exp. Total	67 s	
> Temperature	21.1 °C	
> Spin Rate	15 Hz	
> X Nuclide	1H	
X Acq. Points	16384	
> X Acq. Time	2.18628 s	
> X Frequency	399.7802 MHz	
> X Sweep	7494.0048 Hz	
> X Angle	45 °	
> Y Nuclide	<無効>	
> Y Acq. Points	<無効>	
> Y Frequency	<無効>	
> Y Sweep	<無効>	
> NUS Density	<無効>	
> Mixing Time	<無効>	
> Contact Time	<無効>	
> Tube Diameter	<無効>	
X Apodization	Exponential (指数関数)=0.2Hz, Trapezo	
> X Zero Filling	Factor or Size=2	
> Y Apodization	<無効>	
> Y Zero Filling	<無効>	

図 27 パラメータパネル

## 4.1.2 ピークテーブル

![](_page_31_Figure_1.jpeg)

図 28 ピークテーブル

ピークピッキングが実行されると、マウス右ボタンのコンテキストメニューの作成メニュ ーにピークテーブルのオプションが有効になります(図28)。ピークテーブル作成を実行 すると、スペクトルの横にピークのテーブルが作成されます。他のオブジェクト同様、ピー クテーブルについてもその位置と大きさは、グラブタブ及びドラッグポイントを利用して変 更が出来ます。テーブルのサイズがそれを含むオブジェクトのサイズより大きい場合、水 平及び垂直方向にスクロールバーが現れます。

ピークテーブルを選択すると、ピークテーブルツールパネルが表示されます。このパネル では、テーブルに表示する情報(各列)の取捨選択、各パラメータ値の小数点以下の桁数の 編集が出来ます。また、「ページで分離」チェックボックスは、ピークテーブルのサイズが 複数のページにまたがるように変更された場合にテーブルを分割します。

ピークテーブルのフォント、サイズはピークテーブル上でマウス右ボタンのコンテキスト メニューの Font から編集可能です。 4.1.3 積分/マルチプレットテーブル

![](_page_32_Figure_1.jpeg)

図 29 積分テーブル

積分が実行されると、コンテキストメニューの作成メニューに積分/マルチプレットテーブ ルのオプションが有効(選択可能)になります(図29)。積分/マルチプレットテーブル を選択すると、スペクトルの横に積分のテーブルが作成されます。他のオブジェクト同様、 積分テーブルについてもその位置と大きさは、グラブタブ及びドラッグポイントを利用して 変更が出来ます。テーブルのサイズがそれを含むオブジェクトのサイズより大きい場合、水 平及び垂直方向にスクロールバーが現れます。

積分テーブルを選択すると、積分テーブルツールパネルが表示されます。このパネルで は、テーブルに表示する情報(各列)の取捨選択、各パラメータ値の小数点以下の桁数の編 集が出来ます。また、「ページで分離」チェックボックスは、ピークテーブルのサイズが複 数のページにまたがるように変更された場合にテーブルを分割します。テーブル内の列の順 序は、列の最初のセルを左クリックして、希望の位置にドラッグすることができます。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 ションはマルチプレットテーブルを表示します。マルチプレットテーブルは積分テーブル と同じですが、識別されたマルチプレットのタイプと、マルチプレット構造が正常に解決された場合の「カップリングに関する情報が含まれます(図 30)。

積分/マルチプレットテーブルのフォント、サイズはピークテーブル上でマウス右ボタン のコンテキストメニューの Font から編集可能です。

4.1.4 マルチプレットレポート (論文書式の選択)

作成メニューの論文投稿..を実行することで、化学シフト及びマルチプレットの情報を論 文の投稿形式にして表示することが出来ます(図 30)。この結果のテキストは JASON から切り取って他に貼付けたり、エクスポートすることが出来ます。対応する論文の形式 は、オプション選択時にドロップダウンリストに表示されます。

![](_page_33_Figure_4.jpeg)

図 30 マルチプレットテーブルとレポート

# 5 設定メニュー

設定メニュー(図31)には、JASONの外観と操作性をカスタマイズするための様々なオプションがあります。

![](_page_34_Picture_2.jpeg)

図 31 設定メニュー、一般設定(左)および NMR 設定(右)

設定メニューは、JASON の左上隅にあるファイルメニューから、または Canvas 内の任意 の場所で、右クリックで開くメニューからアクセスできます。設定メニューには、"一般"と "NMR"のセクションがあり、それぞれに以下で説明する個々の様々な設定を行う独自のタ ブのセットがあります。

### 5.1 一般設定

一般設定には4つのタブがあります(図 32)。各パネルの設定については以下の節で説 明しますが、いずれも"適用"ボタンを押すことでその変更が反映されます。なお、出荷時設 定に戻すボタンでデフォルト値に戻すことができます。

![](_page_35_Figure_2.jpeg)

図 32 一般設定

5.1.1 ユーザインターフェース

ユーザーインターフェイスタブの中には4つのオプションがあります。

1. 表示言語:ソフトウェアの言語を選択できます。

2. コンテキストツールバーを自動に表示/非表示: このボックスをオンにすると、カーソル をスペクトルの左上隅に移動しない限り、3.1 で説明したコンテキストツールバーが非表示 になります。

3. 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、セクション 3.2 以降で説明した、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 17、18、33 を参照してください。

**<u>4</u>. 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 33 に示す ように、タブを水平または垂直に表示できます。

![](_page_36_Figure_6.jpeg)

図 33 パネルのタブ配置

5.1.2 Canvas

このタブでは、新しいオブジェクトを追加する際、それがどのように Canvas 上に展開し ていくかを定義します。デフォルトでは、オブジェクトは、[開く方向]オプションでの選択 に応じて、Canvas に水平または垂直に順番に追加されます。オブジェクトのブロック(一 塊り)を定義してオブジェクトを追加することを希望する場合は、そのサイズは[ブロック サイズの幅]オプションと[ブロックサイズの高さ]オプションで定義されます。

例として、「開く方向」が「垂直」で、ブロックの幅と高さが2に、「開く方向の最大 ブロック数」が1もしくは2に設定されている場合を考えます。この場合は、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、(ブロックの幅が2のため)最初 のオブジェクトの1行下(行2、列A)に配置されます。4番目のオブジェクトは、3番目 のオブジェクトの横隣(行2、列B)に配置され、一つのブロックが完了します。この後追 加されるオブジェクトは、上の条件で[最大ブロック数]が1に設定された場合には、ブロ ックが垂直方向に展開でかつ最大のブロック数が1のため(行3、列A)に配置されます。 また、[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(行1、列C)に配置されます。それ以降は、前のブロックと同様にマスが埋めら れていきます。

### 5.1.3 パス

1. 作業パス: JASON のドキュメントを保存するときのデフォルトのフォルダパスになり ます。フォルダパスは、参照ボタンを使用してフォルダの場所を参照するか、入力すること で変更できます。

**2. PDF パス**: JASON のドキュメントを PDF として保存する場合、これがデフォルトの ディレクトリです。 ディレクトリは、参照ボタンを使用してファイルシステムを参照する か、入力することで変更できます。

#### 5.1.4 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制御します。

# 5.2 NMR 設定

NMR 設定パネルには4つのタブがあります(図34)。

B定 ? ×	
● 設定 ? ×       ● 設定     ? ×       ● 砂     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● 砂     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● 砂     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● 砂     ● む)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● む)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● む)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● ひ)ト ビークビック マルチブレット/協会       ● む     ● む)ト       ● む     ● む)ト       ● む     ● む)       ● む     ● む)	● 設定 ? ×           ●         設定         ? ×           ●
Улинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       Развилаха       ОК       Рудинасилаха       Рудинасилаха       Рудинасилаха       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       ОК       Рудинасилаха       Рудинасилаха	Image: Stand
OK キャンセル 週用	OK キャンセル 適用

図 34 NMR 設定:メインタブ

このパネルで何らかの設定を変更した後は、パネル下部の[適用]ボタンを押して変更を 有効にします。また[デフォルトとして設定]を利用することで、変更した内容を今後デフ ォルトとして設定できます。

一部の設定項目はスペクトルを選択している時にアクティブになります。

#### 5.2.1 軸

軸設定には、NMR スペクトルの軸を変更するためのオプションが含まれており、横軸 (水平)と縦軸(垂直)の設定の2つのパネルで構成されています(図 35)

🚇 設定	? ×		? ×
	? ×	設定         NMR           一般         第         ブロット         ピークビック         マルチブレット/横分           NMR         第         ブロット         ビークビック         マルチブレット/横分           NMR         第         ブロット         ビークビック         マルチブレット/横分           Visible (1D plots)         ジ Visible (2D Plu)         フォント         2	? ×
目盛 主目盛禄の数: 10 ⊡ 補助目盛 補助目亟禄の数: 5 ▼ デフォルト優として設定	0	化学シフトの単位:     ppm ・ 時間の単位:       「日金     コーパレを外側に目       主目盛緑の数:     10       「補助目盛     10       「補助目盛     10	
ОК	キャンセル 適用	ОК	キャンセル 適用

図 35 NMR 設定:軸タブ

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]と「色の設定」ボタンからは、それぞれ軸の数値のフォント、軸の色の設定が 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。

目盛りオプションでは、ユーザーはダイアログボックスを使用して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、各メジャーティック間の補助目盛数を設定する ことが出来ます。 垂直タブには、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)] 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、すべてのスペクトルに共通のオプション(全般)、または 1D スペクトルと 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。

![](_page_40_Figure_5.jpeg)

図 36 NMR 設定: プロットタブ

「全般タグ」には次の設定があります。[グリッドを表示]チェックボックスは、スペクトル 上のグリッドの表示を切り替えます。[タイトル行を表示]チェックボックスは、スペクト ル上のタイトルの表示を切り替えます。標準のフォントダイアログを開く2つのボタンが あります。[マーカーのフォント設定]ボタンを使用すると、ユーザーは十字線マーカーの フォント、スタイル、および色を変更できます。[タイトルフォント]はスペクトルタイト ルのフォントを変更できます。[高度な機能]ボタンは、図 37 に示すダイアログを開きま す。オプションは、親スペクトルと挿入のジョイントズーム動作を決定します。

🚇 高度なブロット機能	?	$\times$
────────────────────────────────────		
🗌 他のスペクトルの拡大を無視する		
ОК	++)	ノセル

図 37 高度なプロット機能

最初のチェックボックスは、現在アクティブなスペクトルがリンクされたスペクトルのズ ームを更新する要求をするかどうかを切り替えます。(他のスペクトルを拡大させない)

2番目のチェックボックスは、リンクされたスペクトルが現在選択されているスペクトルか らの要求に対応するかどうかを切り替えます。(他のスペクトルの拡大を無視する)

5.2.3 ピークピック

[ピークピック]タブには2つの主要なオプションがあります(図38)。

<u>1. 最適化サイクル</u>: ピークモデルをスペクトルデータに適合させるときに使用される反復 またはサイクルの数を制御します。

**2. ピーク形状:** ピークモデルを選択します。現在利用可能なオプションは、汎用ローレン ツ関数と疑似フォークト関数になります。

**3. 表示:**2つのボタンが関連付けられています。[フォント]ボタンを使用すると、スペクトル上のピークラベルのフォントを変更でき、[カラー]ボタンを使用すると、ピークラベル とピークラインの色を変更できます

ピーク形状下の[詳細]ボタンをクリックすると、ピークピッキングとピークフィッティ ングで使用されるすべ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38)。こ れらの値は、ピークピッキングプロセスを理解している熟練ユーザーのみが変更することを おすすめします。

		🔛 ビークビック詳細	? ×
Rz 	? × NMR	<ul> <li>● ビークビック好細</li> <li>ビーク塩別</li> <li>ビーク塩、ジーンシン</li> <li>量かずシス・ション</li> <li>量かずシス、ジョン・</li> <li>「0</li> <li>ジ項ズン数(0 = 自物):</li> <li>0</li> <li>(0 pts</li> <li>二階除うビーク階値:</li> <li>ブク*noise</li> <li>ノイズ間切</li> <li>ノイズ間切</li> <li>ノイズ間切(1)</li> <li>デフォルト微小ビーク開価:</li> <li>「20*noise</li> </ul>	? ×
	C アフイルFill C し L R 2 と 2 と 2 と 2 と 2 と 2 と 2 と 2 と 2 と 2		

図 38 NMR 設定: ピークピック

# 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、両方の分析機能のオプションがまとめられています。

設定	?	
_	NMR	
設	軸 プロット ビークビック マルチプレット/積分	
/R	デフォルトピーク閾値: 7.0*noise	\$
	許容ビーク強度誤差: 25.0%	
	許容J値誤差: 0.02 Hz 🔷 0.20 Hz	٢
	」結合ツリー フォント 色の設定	
	ラベル フォント 色の設定	
	積分値の小数点以下桁数 3 €	
	マルチブレットの小数点以下桁数 3 👤	
	積分曲線の色 色の設定	
	Auto baseline	
	Default points for averaging:	
	Upper: 3 pts 🗘 Lower: 3 pts 🌩	
	Search J Width 18 Hz	•
	Integral Width Factor 40.0*Line Width	-

図 39 NMR 設定:マルチプレットと積分設定

利用可能なオプションは次のとおりです。

1. 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。

**2. 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。

**3. 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。

**<u>4.</u>** 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。

5. 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インテグラルラベルのフォントと色を定義できます。

**6.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。

**7. 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。

8.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。

# 6 J 結合シミュレーション

JASON では1D スペクトルのシミュレーションを行うことが出来ます。

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40)。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。

![](_page_44_Figure_3.jpeg)

図 40 J 結合シミュレーション

- 6.1 シミュレーションダイアログパネル
- 1. スピン数:シミュレーションにおける同一でない共鳴の総数です。
- 2. 周波数:シミュレーションの基本共鳴(MHz)です。
- 3. 線幅:シミュレーションのピークモデルの線幅(Hz)です。

**4. 取り消し/やり直し:**直前の操作を取り消す(一つ前の状態に戻す:Undo)、または最後の"取り消し"操作をキャンセルします(直前の操作を再び有効にする:Redo)、を行うと きにそれぞれ使用します。 5. 設定:シミュレーション設定ダイアログを開きます。

<u>6. シミュレーション</u>:設定されたのシミュレーションパラメータを使用してシミュレーシ ョンを実行します。

7. 読み込み:以前に保存したシミュレーションパラメータのセットを読み込みます。

8.保存: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の対象のスピンシステムを規定するものです。設定 するスピンの数に応じて、ダイアログボックスのセルの行にはA、B、C、・・とラベル付け がなされます。これはそのまま各スピンの帰属となり、パネル3列目以降で他スピンとのJ 結合値の関係を規定するのに使われます。

#### 1. シフト/ ppm: スピンの化学シフト値です。

2. No of Identical Spins: 複数のスピンを特定の共鳴周波数に関連付けることができます。 たとえば、メチル基は3つの同一のスピンで構成されます。 2つのスピンの化学物質のシ フトが同じであるが、磁気的に同等ではない場合は、各スピンをシミュレーションに明示的 に追加する必要があることに注意することが重要です。

<u>3. A (Hz)、B (Hz)、C (Hz) など</u>: これらの列見出しは、テーブルテーブルに追加し たスピンに応じて割り当てられます。各セルには、2つのスピン間の J 結合が含まれていま す。たとえば、列 A、行 B が交差するセルには結合定数 JAB が入ります。

#### 6.2 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。

1. 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。

- **2.** スペクトル始点: PPM での x 軸の開始化学シフト値
- 3. スペクトル終点: PPM での x 軸の最後の化学シフト値。

**4. 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)

5. 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)

6. 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。

**7.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。

8. Max RT display spin number: 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。

# 7 構造式の作成

分子構造をファイルから開く、もしくは新規に描画することが出来ます。ファイルから読 み込む場合は、メインメニューの「開く」から分子構造ファイル(.mol,.sdf)を開くか、フ ァイルを Canvas 上にドラッグアンドドロップします。また、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 41 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メニューと構造式 ツールパネルから行います。

![](_page_47_Figure_3.jpeg)

### 図 41 構造式作成

### 7.1 コンテキストメニュー

**1. 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。

2. 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。 結合の多重度が変化すると、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。

3. 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。

4. 電荷追加:原子に電荷を追加するために使用します。

5. 立体: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。

7.2 構造式ツールパネル

1. 原子ラベルの表示:このパネルで選択出来るオプションの有効/無効の切り替え。

2. ナンバリング: 各原子に固有の番号を付与します。

<u>3.13C 実測/計算/差分:</u>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。

<u>4. <sup>1</sup>H 実測/計算/差分:</u>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。

**5. Carbon、末端炭素の表示:**構造式の末端炭素原子に結合する水素原子に対する明示的な あるいは非明示的な表示を切り替えます。

**6. Carbon、内部炭素の表示:**構造式の炭素原子に結合する水素原子に対する明示的あるい は非明示的な表示を切り替えます。

**7. 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。

# 8 拡張処理オプション

一部の処理オプションには、初心者向けの基本モードと、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。基本モードで 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、同時にユー ザーが希望する効果を選択できるようにします。例えばその中には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 42)。

![](_page_49_Figure_2.jpeg)

図 42 拡張処理オプション

8.1 リニアプレディクション

線形予測オプションボックスの右側にある矢印を使用して線形予測オプションを展開する と、利用可能な線形予測のオプションが示されます。ユーザーはまずドロップダウンボック スで、基本もしくはエキスパートのモードを選択します(モードオプション)。

基本モードでは、ユーザーは線形予測の方向を、ドロップダウンメニューの方向から前方 または後方に選択できます。基本モードと前方線形予測が選択されている場合、モードオプ ションの<del>すぐ</del>下にある4つのボックスが使用可能です。

**1. リセット**:線形予測をデフォルトにリセットします。 この時点では、それは追加のポイントではありません。

**2. x1 LP**: FID の長さを増やして、元のポイント数の2倍にし、FID に線形予測ポイントの fid の長さを加えます。

<u>3. x2 LP:</u>FID の長さを増やして、元のポイント数を3倍にし、FID に線形予測ポイント の fid の長さの2倍を加えます。

4. <u>x3 LP:</u>FID の長さを増やして、元のポイント数を4倍にし、FID に線形予測ポイントの fid の長さの3倍を加えます。

基本モードでは線形予測パラメータを設定する必要はありません。JASON がパラメータ のセットを自動的に選択し、ユーザーはそれ以外の線形予測のパラメータにアクセス出来ま せん。

なお、後方線形予測またはエキスパートモードが選択されている場合、x1 LP、x2 LP、 および x3LP ボタンは使用できなくなります。

エキスパートモードが選択されている場合は、詳細なパラメータのオプションが使用出来ま す。

#### 8.2 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出来ます。

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。