

smILE Q

SMILEQ plugin ユーザーガイド Ver 4.0

2025年3月作成

はじめに

SMILEQ プラグインは、定量 NMR (qNMR) 解析のための JASON のプラグインです。JASON ver1.3 以降に対応しており、JASON のライセンスとは別に SMILEQ プラグインライセンスが必要です。

内標準法、外標準法、混合物解析および複数データを一括で処理できる複数スペクトル解析も可能です。また、JEOL NMR ソフトウェア Delta (V6.1 以降) と連携することで測定・解析・レポート作成のワークフローを自動でシームレスに実施することが可能です。

第 1 章では、SMILEQ プラグインのインストール方法及びライセンス認証方法について説明します。すでに作業が終わっている場合は第 2 章から読み進めてください。

第 2 章では、解析条件などを設定する SMILEQ パネルの概要を説明します。

第 3 章では、定量解析を実施するための準備について説明します。

第 4 章では、SMILEQ プラグインで実施可能な実際の解析手順例を説明します。

第 5 章では、作成できるレポートについて説明します。

Contents

1	SMILEQ プラグインの有効化	5
1.1	プラグインマネージャーのスタート.....	5
1.2	SMILEQ プラグインのインストール.....	5
1.3	ダイアログの再起動	6
1.4	SMILEQ プラグインライセンスの有効化	6
1.5	有効化の完了	8
2	SMILEQ パネルの概要	9
2.1	分析モード	10
2.1.1	内標準法	10
2.1.2	外標準法 – 分析対象.....	12
2.1.3	外標準法 – 標準物質.....	13
2.2	リファレンスエディター	14
2.3	分析対象シグナルテーブルエリア	16
2.4	計算オプションエリア	17
2.5	Multiplespectrum SMILEQ.....	18
2.6	レポートエディター	19
2.7	混合物解析 – 混合物エディター	20
2.8	その他	21
3	qNMR 解析の準備	22
3.1	ファイル	22
3.1.1	リファレンスファイルの作成.....	22
3.1.2	分析ファイルの作成.....	23
3.2	設定.....	24
3.2.1	設定（一般）	24
3.2.2	Seamless	25
3.2.3	Parameter Mapping	27
3.2.4	Parameter.....	28

4	実際の解析手順.....	29
4.1	内標準法.....	29
4.2	外標準法.....	33
4.3	自動解析.....	36
4.4	複数スペクトル解析.....	38
4.4.1	内標準法の場合.....	38
4.4.2	外標準法の場合.....	40
4.5	混合物解析.....	41
5	レポート作成.....	43
5.1	個別レポート.....	43
5.2	サマリーレポート.....	45
5.3	不確かさレポート.....	46
5.4	標準物質レポート.....	47

本ドキュメントは、JASON ソフトウェアの SMILEQ プラグインの機能概要を説明しており、基本的な操作を把握して使用できるようになることを目的としています。

1 SMILEQ プラグインの有効化

SMILEQ プラグインを使用するには、プラグインを有効化する必要があります。有効化とは、プラグインのインストールとライセンス認証を行うことです。

SMILEQ プラグインのライセンスキーとライセンス情報（Company Type, Term）を手元に用意して進めてください。

1.1 プラグインマネージャーのスタート

図 1 に示すように、メインメニューからプラグインマネージャーを選択します。

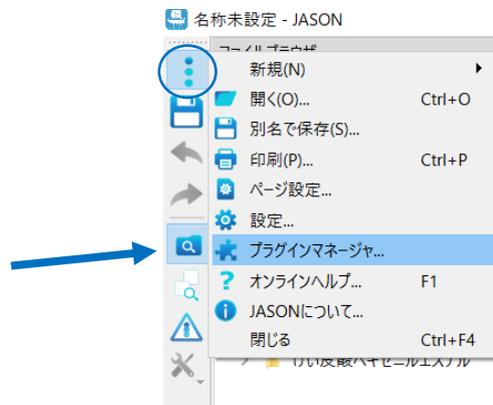


図 1 プラグインマネージャーのスタート画面

1.2 SMILEQ プラグインのインストール

図 2 に示すように、“SMILEQ プラグイン”チェックボックスをオンにして、[OK]ボタンをクリックします。

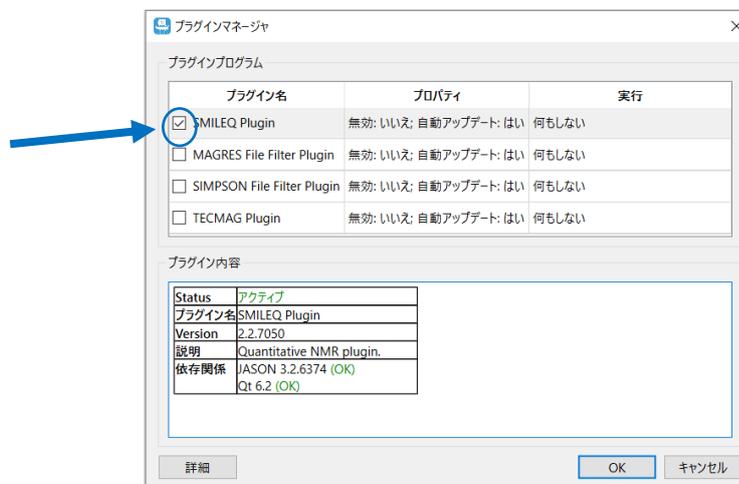


図 2 プラグインマネージャー

1.3 ダイアログの再起動

OK ボタンを押すと、以下のダイアログボックスが表示されます。[OK]をクリックして、JASON を再起動します

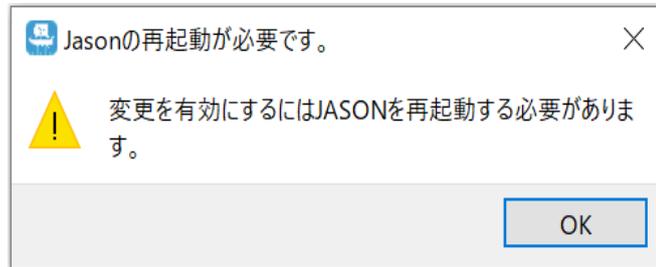


図 3 再起動ダイアログ

👉 JASONの新しいバージョンにアップデートした場合、プラグインマネージャーでSMILEQのフラグを一度OFFにして再起動し、再度プラグインマネージャーでSMILEQのフラグをONにすることで最新のSMILEQプラグインの使用環境となります。

1.4 SMILEQ プラグインライセンスの有効化

SMILEQ プラグインのインストール後に初めて JASON を開くと、図 4 に示すように、[JASON プラグインライセンスダイアログ]ウィンドウが開きます。

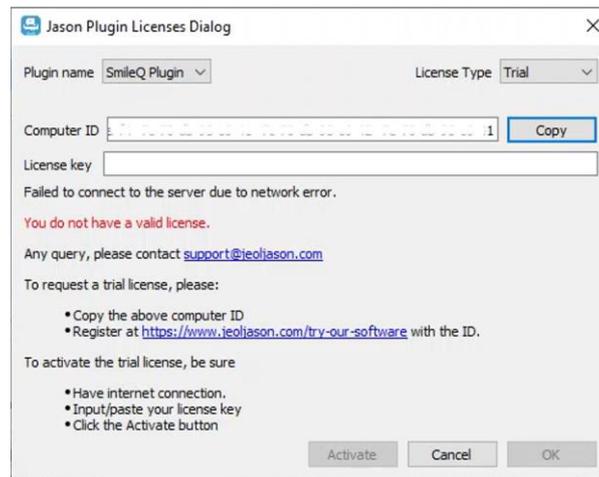


図 4 JASON プラグインライセンスダイアログ（設定前）

1. Plugin name(SMILEQ Plugin)と License Type(Commercial または Trial)を選択します。License Type で Commercial を選択した場合は、Company Type 及び Term のプルダウンメニューから適切な項目を選んでください。最後にライセンスキーをボックスに入力します。

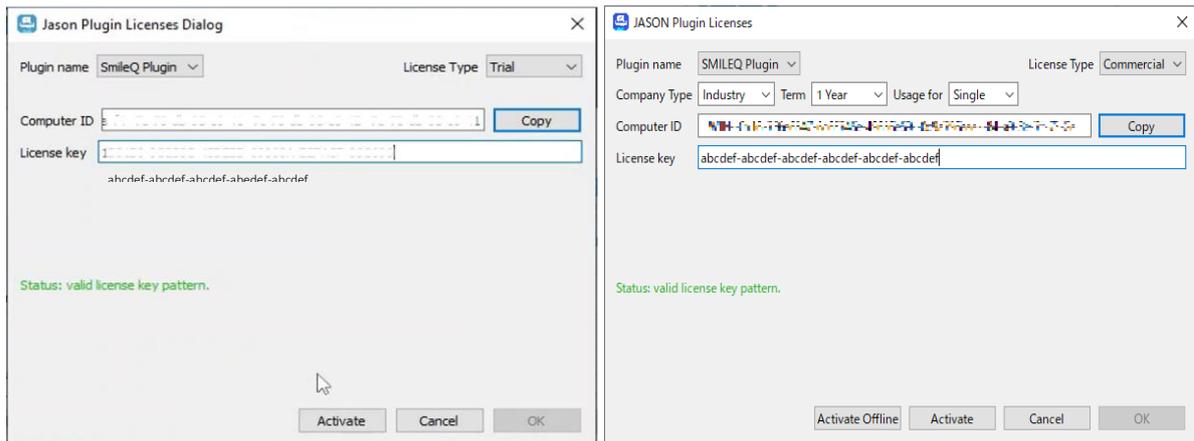


図 5 JASON プラグインライセンスダイアログ（設定後）
 (License Type が 左図 : Trial , 右図 : Commercial)

- 👉 ライセンスキーはコピー&ペーストをお勧めします。
- 👉 有効なライセンスキーが入力されると、[Active]が有効になります。

2. [Active]ボタンをクリックして、ライセンスキーを有効化します。

- 👉 オンラインでのライセンス認証ができない場合はJASONプラグインライセンスダイアログに表示される「Activate Offline」を選択し、次に表示される画面の指示に従って“Request Token”を作成します。こちらをJASONサポートsupport@jeoljason.comまでお送りください

(送付例)

件名 : Offline Activation Request (SMILEQ)

本文 : ライセンスキー 及び Request Token

- 👉 サポートから“Request Token”が届きます。メールで案内する手順でオフライン認証を進めてください。

1.5 有効化の完了



図 6 コンテキストパネル一覧

SMILEQ プラグインの登録に成功すると、フレームの左端にあるコンテキストパネルの 1 つとして機能にアクセスできます。

他のツールパネル（表示や処理など）と同様に、SMILEQ パネルを利用するには NMR データを読み込むか、キャンバス上にある NMR スペクトルを選択しておく必要があります。

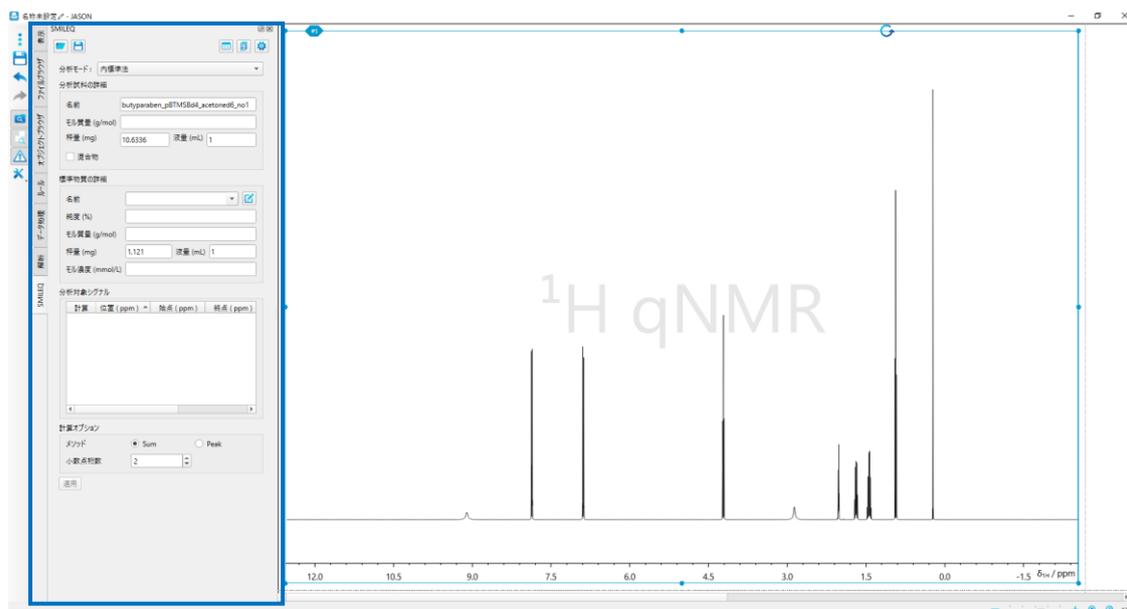


図 7 SMILEQ パネル

2 SMILEQ パネルの概要

SMILEQ パネルは、解析条件に関するパラメータを設定するために使用されます。

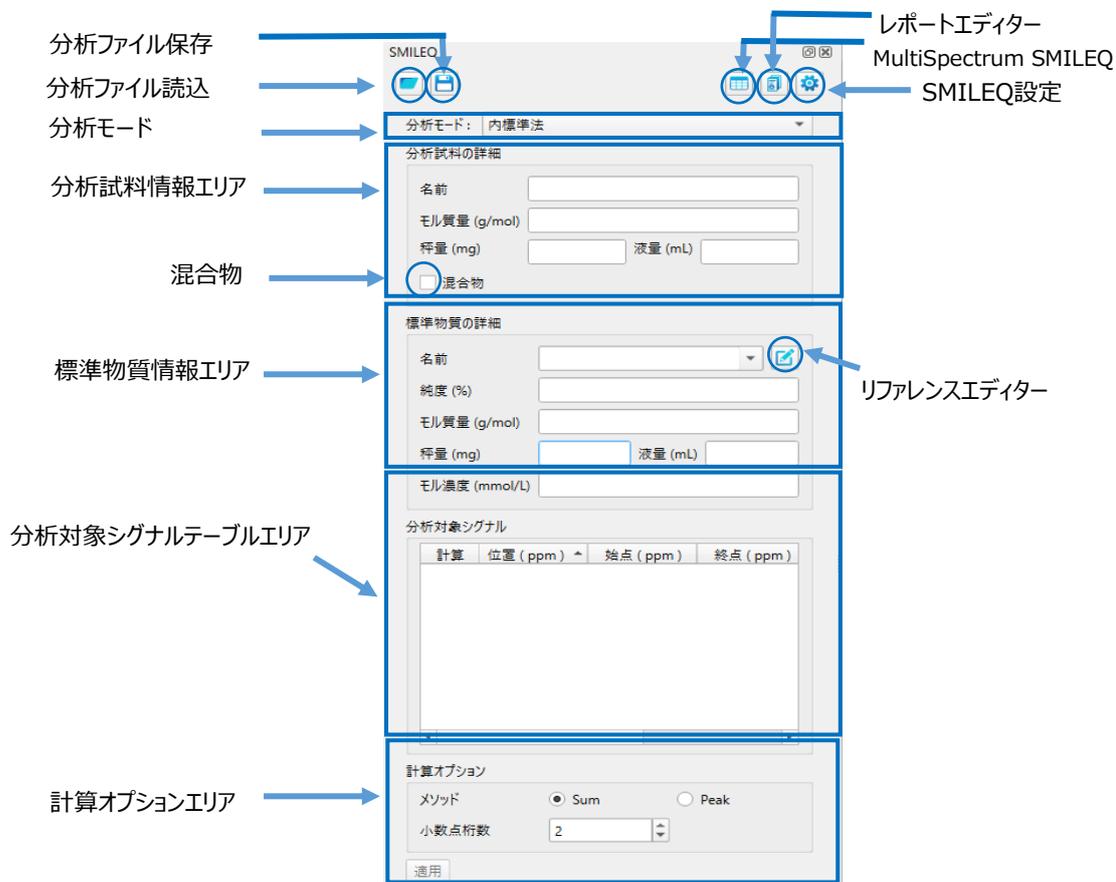


図 8 SMILEQ パネル (内標準法)

 分析モードによってSMILEQパネルで設定できるパラメータは変わります。詳しくは「2.1 分析モード」をご参照ください。

分析ファイル保存、読込	解析に使用する分析ファイルの読込・保存を行います。
レポートエディター	様々なレポート作成を行います。
MultiSpectrum SMILEQ	複数スペクトルの一括処理・解析を行います。 手順は「4.4 複数スペクトル解析」をご参照ください。
SMILEQ 設定	SMILEQ プラグインで使用する各種ファイルが保存先などの設定を行います。
分析モード	対象スペクトルの解析手法を選択します。
分析試料情報の入力エリア	解析に必要な分析試料情報を入力する領域です。
混合物	混合物解析を行うモードに切り替えます。
標準物質情報の入力エリア	解析に必要な標準物質情報を入力する領域です。
リファレンスエディター	解析で使用する標準物質の情報を登録または編集します。
分析対象シグナルテーブルエリア	計算に使用する信号領域、核数、およびそれらが解析に使用するかどうかの定義を設定する領域です。

計算オプションエリア

計算のオプションパラメータを設定します。

2.1 分析モード

SMILEQ プラグインでは、内標準法、外標準法の解析に対応しています。

分析モードで「内標準法」、「外標準法-分析対象」、「外標準法-リファレンス対象」から、解析目的に応じたモードを選択します。スペクトルごとに設定する必要があり、解析対象スペクトルを選択し、分析モードを選びます。

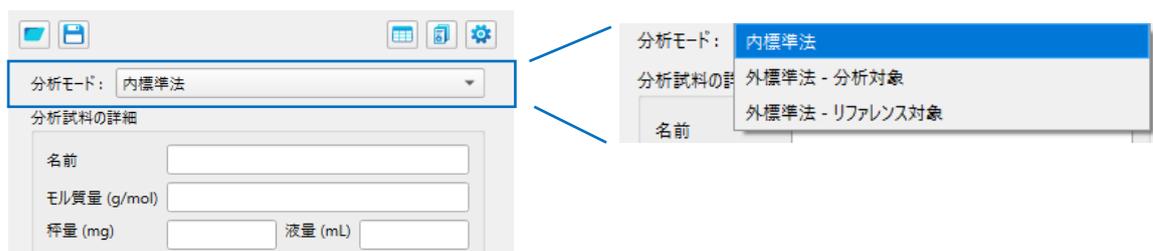


図 9 分析モード

2.1.1 内標準法

外標準法の解析を行う場合、解析対象のスペクトルを選択し、SMILEQ パネルの分析モードを「内標準法」にすると、SMILEQ パネルで分析物情報、標準物質情報、分析対象シグナル情報を設定することができます。

2.1.1.1 分析試料情報エリア

図 10 分析試料情報エリア

名前	サンプル名など識別できる情報を入力します。
モル質量 (g/mol)	モル質量 (分子量) を入力します。
秤量 (mg)	秤量値を入力します。

液量 (mL)	サンプル調製時の溶液量を入力します。(モル濃度が必要でなければ空欄で可)
混合物	混合物解析に切り替えます。

☞ 解析を実行するには名前、モル質量、秤量を入力します。標準物質情報をもとにモル濃度を得るにはモル質量のみを入力します。読込んだNMRデータ (FID) に情報が入っていれば自動で設定されます。

2.1.1.2 標準物質エリア

標準物質の詳細

名前 

純度 (%)

モル質量 (g/mol)

秤量 (mg) 液量 (mL)

モル濃度 (mmol/L)

リファレンスエディター

図 11 標準物質情報エリア

名前	ドロップダウンリストになっており、標準物質を選択します。このリストは「リファレンスエディター」ボタンから編集できます。詳細はセクション「2.2 リファレンスエディター」をご参照ください。標準物質名を選択すると設定されている標準物質の純度 (Purity(%)) とそのモル質量の情報が自動的に設定されます。
純度 (%)	標準物質の純度 (名前で選択した情報から自動設定)
モル質量 (g/mol)	標準物質のモル質量 (名前で選択した情報から自動設定)
秤量 (mg)	秤量値を入力します。
液量 (mL)	サンプル調製時の溶液量を入力します。(モル濃度が必要でなければ空欄で可)

☞ 解析を実行するには名前、モル質量、秤量を入力します。モル濃度を使用するときには秤量と液量の代わりにモル濃度を入力します。読込んだNMRデータ (FID) に情報が入っていれば自動で設定されます。

2.1.2 外標準法 – 分析対象

外標準法の解析を行う場合、解析対象のスペクトルを選択し、SMILEQ パネルの分析モードを「外標準法-分析対象」または「外標準法—標準物質」を選ぶとモードに応じて必要情報が設定できます。

解析対象のスペクトルを選択し、SMILEQ パネルの分析モードを「外標準法-分析対象」にすると、SMILEQ パネルで分析物情報フィールド、リファレンススペクトル、分析対象シグナルなどを設定することができます。

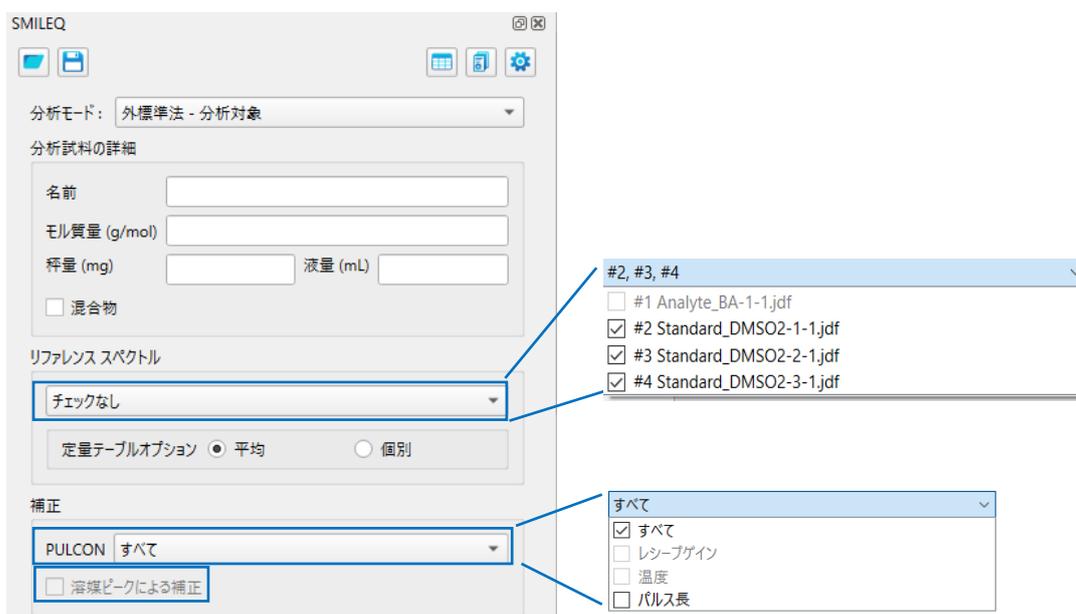


図 12 外標準法-分析対象情報エリア

名前	サンプル名など識別できる情報を入力します。
モル質量 (g/mol)	モル質量（分子量）を入力します。
秤量 (mg)	秤量値を入力します。
液量 (mL)	サンプル調製時の溶液量を入力します。（モル濃度が必要でなければ空欄で可）
混合物	混合物解析に切り替えます。
リファレンススペクトル	ドロップダウンリストから外標準法のリファレンスとして使用するスペクトルを選択します。キャンバス内のデータが一覧表示されます。データが参照条件を満たしている場合にチェックボックスが有効になります。
PULCON	ドロップダウンリストから PULCON で使用する補正パラメータを選択します。標準物質と分析物質でパラメータが異なる場合、そのパラメータのチェックボックスが有効になります。

溶媒ピークによる補正 (SOLCOR)	溶媒ピークによる補正を有効にします。リファレンスと分析対象スペクトルのそれぞれに補正用の溶媒ピーク（マルチプレート解析、信号タイプを溶媒に設定されている条件）がある場合のみ、チェックボックスが有効になります。こちらの機能は以下の文献に基づいた手法です。 文献：J.L.Ochoa, S.Germann, B.Conklin, K.Kurita, D.J.Russell, C.Yang, J.G. Napolitano, <i>Magn Reson Chem</i> , 2023, 5 , 1-7.
------------------------	--

☞ 解析を実行するには名前、モル質量、秤量を入力します。標準物質情報をもとにモル濃度を得るにはモル質量のみを入力します。読込んだNMRデータ（FID）に情報が入っていれば自動で設定されます。

2.1.3 外標準法 – 標準物質

解析対象のスペクトルを選択し、SMILEQ パネルの分析モードを「外標準法-リファレンス対象」にすると、SMILEQ パネルでは標準物質情報のみを設定することができます。

☞ この分析モードでは定量分析の「適用」ボタンは非表示です。



図 13 外標準法-標準物質情報エリア

名前	ドロップダウンリストになっており、標準物質を選択します。ドロップダウンリストは「リファレンスエディター」ボタンで編集できます。詳細はセクション「2.2 リファレンスエディター」をご参照ください。標準物質名を選択すると設定されている標準物質の純度（Purity(%)）とそのモル質量の情報が自動的に設定されます。
純度 (%)	標準物質の純度（名前で選択した情報から自動設定）
モル質量 (g/mol)	標準物質のモル質量（名前で選択した情報から自動設定）

秤量 (mg)	秤量値を入力します。
液量 (mL)	サンプル調製時の溶液量を入力します。(モル濃度が必要でなければ空欄で可)

☞ 解析を実行するには名前、モル質量、秤量を入力します。モル濃度を使用するときには秤量と液量の代わりにモル濃度を入力します。読込んだNMRデータ (FID) に情報が入っていれば自動で設定されます。

2.2 リファレンスエディター

解析で使用する標準物質の情報はリファレンスファイルとして保存して使用します。このファイルはリファレンスエディターで登録、編集することができます。リファレンスエディターを開くためのボタンは分析モードで「内標準法」「外標準法-リファレンス対象」を選択した時に、SMILEQ パネルから選択できます。

リファレンスエディターのボタンをクリックすると、テーブルが表示され、定量解析に使用される特定の標準物質に関する情報を入力します。

選択しているスペクトルから情報の読み込み、複数の信号を使用する設定も可能です。

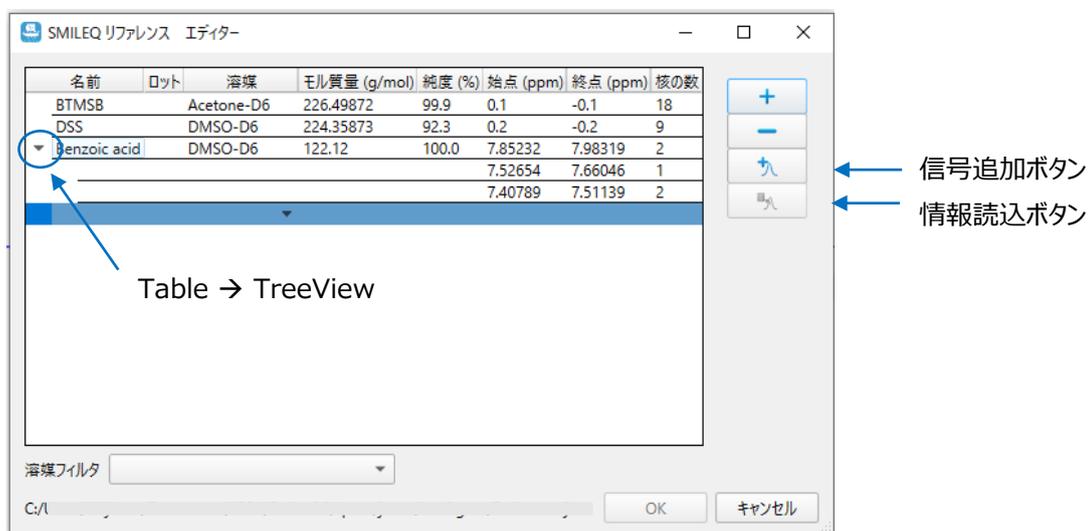


図 14 リファレンスエディター

名前	標準物質名の名称など識別できる名前
ロット	ロット番号などの情報
溶媒	使用想定 of 溶媒
モル質量 (g/mol)	標準物質のモル質量
純度 (%)	試薬純度、認証値

始点、終点 (ppm)	積分範囲
核の数	核の数 (例えばプロトン数)
+、-	行の作成・削除ボタン。新しく追加するときは+ボタンをクリックして、テーブルに行を追加して名前、溶媒などの情報を入力します。
信号追加ボタン	登録済みの行が選択されると有効になります。複数信号を使用する場合、ボタンをクリックすると行が追加され始点、終点、核の数を入力できます。
情報読込ボタン	キャンバス上で選択しているスペクトルに積分/マルチプレット解析が実施されているときに有効になります。選択すると、スペクトルから積分/マルチプレットを反映した新しいエントリが追加されます。核の数は推定値またはユーザー定義値が設定され、溶媒情報も反映されます。確認し修正が必要であれば行います。
溶媒フィルタ	設定した溶媒の標準物質が表示されます。
Table -> TreeView	複数信号が設定されている場合、「名前」の左側に展開アイコンが表示されます。このアイコンをクリックすると、情報の表示・非表示を切り替えられます。情報の入力・削除・編集を行うことができます。
OK	登録情報をがローカル ファイルに保存します。

-  行を追加して標準物質情報を設定する際、青いセルは情報が無効または欠落していることを意味し、これらが修正されるまで保存ボタンを押すことができません。
-  保存先は、リファレンスエディター左下に表示されています。保存先は設定（「3.2.1設定（一般）」をご参照ください）で定義されています。
-  「行を削除」ボタンをクリックすると、選択した行が削除されます。

2.3 分析対象シグナルテーブルエリア

スペクトル上で定義されたすべてのマルチプレット解析または積分領域は分析対象シグナルテーブルに表示されます。分析対象シグナルテーブルエリアは分析モードで「内標準法」「外標準法-分析対象」を選択した時に、SMILEQ パネルに表示されます。

計算	位置 (ppm)	始点 (ppm)	終点 (ppm)	核の数
<input type="checkbox"/>	0.712	0.517	0.906	3
<input checked="" type="checkbox"/>	1.207	1.094	1.320	2
<input checked="" type="checkbox"/>	1.463	1.357	1.568	2
<input checked="" type="checkbox"/>	3.995	3.803	4.188	2
<input checked="" type="checkbox"/>	6.663	6.469	6.857	2
<input checked="" type="checkbox"/>	7.643	7.449	7.837	2

計算チェックボックス

図 15 分析対象シグナルテーブル

計算チェックボックス	計算する信号を識別するために使用され、必要でない信号はチェックボックスを外します。
位置 (ppm)	信号位置
始点/終点 (ppm)	積分範囲の始点と終点の位置
核の数	信号の核の数 (例えばプロトン数) を入力します。

👉 マルチプレット解析または積分領域が定義されたアクティブなスペクトル (キャンバス上で選択されているスペクトル) から、自動的にその情報 (位置、始点、終点、核の数) が入力されます。また新しく定義された場合も自動で入力されます。

2.4 計算オプションエリア

計算に使用する定量情報の選択、小数点桁数を設定することが可能です。計算オプションエリアは分析モードで「内標準法」「外標準法-分析対象」を選択した時に、SMILEQ パネルに表示されます。

図 16 計算オプションエリア

Method	分析対象物質の純度計算は Sum または Peak から選択できます。 Sum: 指定領域のポイントごとの合計を利用します。(積分) Peaks: 波形分離によって決定された領域のピーク面積の合計を使用します。
少数点桁数	結果表に表示される桁数を定義します。
適用	計算が実行され、キャンバス上のスペクトルに結果を表示します。

 計算が実行されると適用ボタンは更新ボタンに変わります。条件を変更して更新ボタンをクリックすると再計算が可能です。

2.5 Multiplespectrum SMILEQ

複数スペクトルの一括処理・解析を行います。

No.	データファイル名	プロセッシングファイル名	分析ファイル名	既存積分の使用	分析試料名	分析試料の分子量 (g/mol)	分析試料の秤量 (mg)	分析試料の液量 (mL)	標準物質の秤量 (mg)	標準物質の液量 (mL)	標準物質の純度 (%)	標準物質のモル濃度 (mmol/L)
#1	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no1	10.6336	1	1.121	1			
#2	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no1	10.6336	1	1.121	1			
#3	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no1	10.6336	1	1.121	1			
#4	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no2	10.5993	1	1.2903	1			
#5	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no2	10.5993	1	1.2903	1			
#6	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no2	10.5993	1	1.2903	1			
#7	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no3	9.9807	1	1.1254	1			
#8	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no3	9.9807	1	1.1254	1			
#9	✓ butyparaben_pBTMSBd4_acetoned...			<input type="checkbox"/>	butyparaben_pBTMSBd4_acetoned6_no3	9.9807	1	1.1254	1			

図 17 Multiplespectrum SMILEQ (内標準法)

データファイル名	選択されたスペクトルのファイル名が表示されます。
プロセッシングファイル名	使用する処理条件のファイルを選択します。
分析ファイル名	使用する分析ファイルがあれば選択します。
分析試料名	自動で読み込まれます。
既存積分の使用	キャンバス上のスペクトルに存在する積分範囲を使用して解析を実行します。
分析試料名	パラメータは必要に応じて入力できます。キャンバス上のスペクトルから取得できる場合は、自動的に入力されます。これらは必要に応じて調整できます。空白の場合は、情報を設定する必要があります。
分析試料モル質量	
分析試料の秤量値	
分析試料の液量	
標準物質モル質量	
標準物質の秤量値	
標準物質の液量	
標準物質の純度	リファレンスファイルの情報を読み込まれます。純度のみ、こちらで編集が可能です。
標準物質のモル濃度	計算値が表示されます。
個別レポート	各スペクトルに結果を表示します。 「個別レポート」ボックスをチェックすると、分析対象として選択された個々のスペクトルごとに定量結果テーブルと定量パラメータレポートが生成されます。
終了後にレポートエディターを開く	ダイアログを閉じると、レポートエディターが開きます。
適用	「適用」をクリックすると、選択したスペクトル全体で定量計算が実行されます。結果は、必要に応じて純度結果タブおよび/またはモル濃度結果に表示されます。

2.6 レポートエディター

レポートエディターを使用すると、複数のデータセットを使用してさまざまな種類の統計レポートを生成できます。

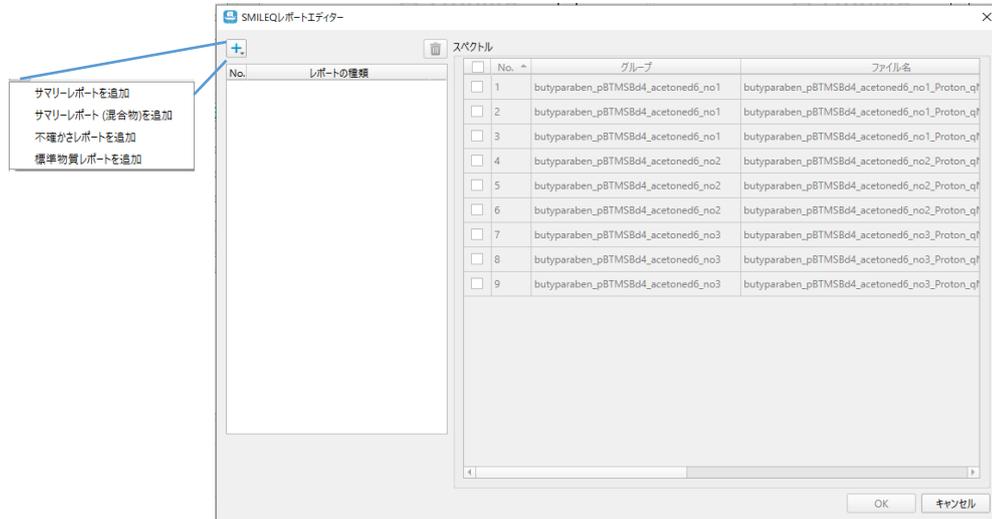


図 18 レポートエディター

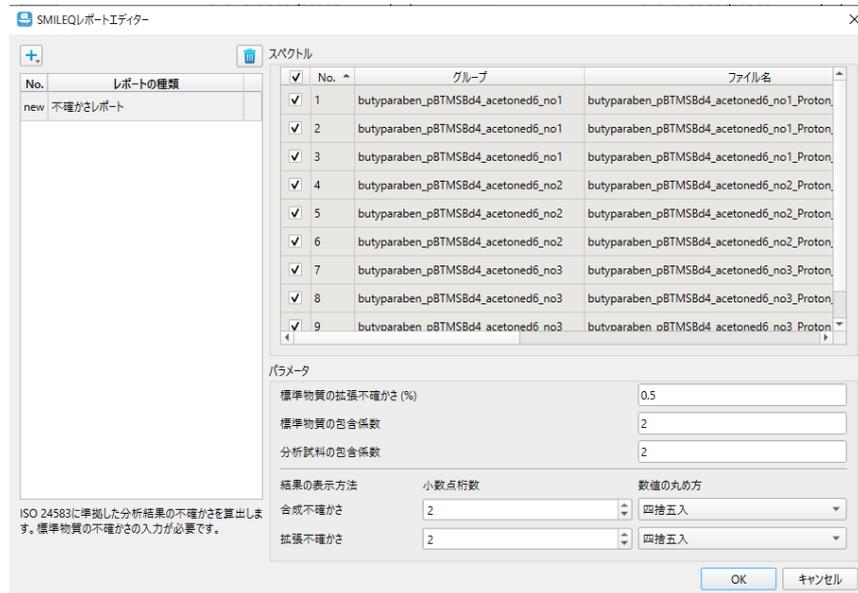


図 19 レポートエディター (不確かさレポート)

実行する分析と必要な情報に応じて、いくつかの異なるレポートが利用できます。サマリーレポートは、純度結果タブとモル濃度結果タブの情報を反映したレポートをキャンバス上に生成します。標準物質レポートオプションは、外部標準法の標準物質解析情報を提供するために使用されます。

不確かさバジェットオプションは、ISO 24583 に従って計算されます。図 19 に示すように、計算に関連するパラメータを設定できます。

2.7 混合物解析 – 混合物エディター

混合物解析を行う際には、分析対象となる化合物の名前とモル質量を登録する必要があります。このエディターでは、この情報を登録します。

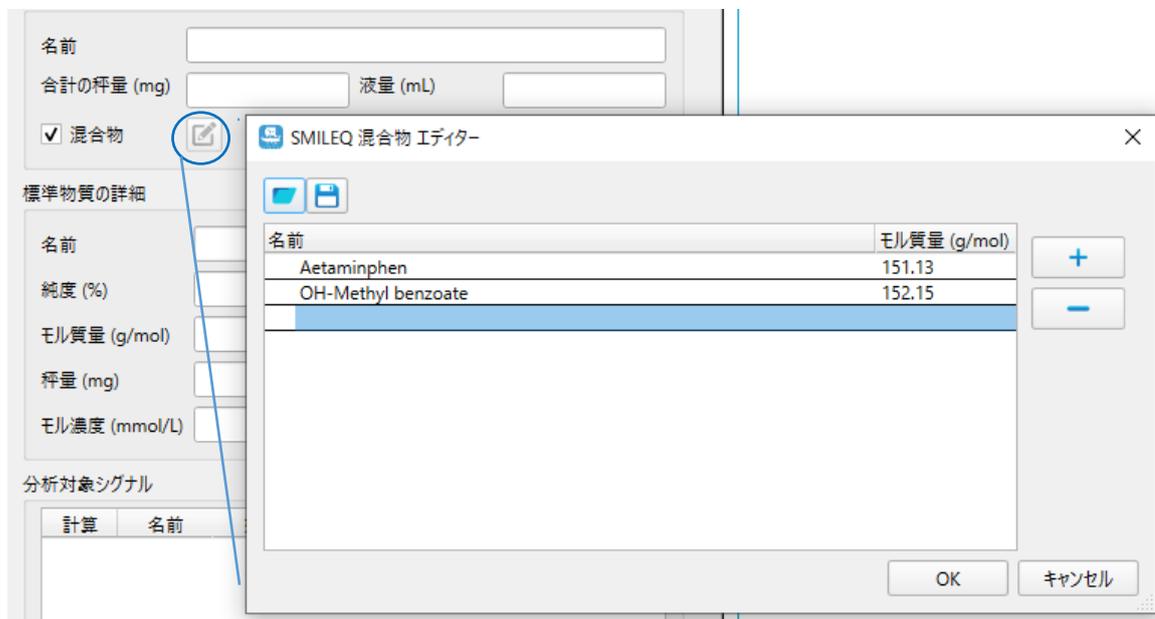


図 20 SMILEQ 混合物エディター

名前	サンプル識別子を入力します。
モル質量	分子量を g mol ⁻¹ 単位で入力します。
+, -	「+」ボタンをクリックして、テーブルにエントリを追加します。「-」ボタンをクリックすると、エントリが削除されます。
ファイルを開く	リストをファイルとして開く
ファイルを保存	リストをファイルとして保存
OK	登録情報がローカル ファイルに保存します。

2.8 その他

設定

SMILEQ プラグインで使用する各種ファイルが保存されるパスの定義、ファイル定義などの設定を行います。詳細は「3.2 各設定」をご参照ください。

分析ファイル保存

SMILEQ パネルで設定したパラメータをファイルとして保存します。詳細は「3.1.2 分析ファイルの作成」をご参照ください。以下の表に分析ファイルに保存される主なパラメータを記載します。

分析試料情報	名前、モル質量、液量
標準物質情報	名前、モル質量、液量、リファレンスデータファイル名（外標準-分析対象の時のみ）
分析積分情報	積分範囲、核の数、
分析関連情報	分析モード、計算オプション情報

分析ファイル読込

分析ファイルを読み込むことで解析パラメータを自動で設定することができます。

3 qNMR 解析の準備

SMILEQ プラグインでは、解析条件を最適化しながら解析を行う「手動解析」と、解析条件が保存された分析ファイルを使用する「自動解析」の2つが可能です。これらの実際の手順については、第4章で説明します。第3章では、解析を実施するための事前準備について説明します。

3.1 ファイル

自動解析を実行するには、解析を開始する前にリファレンスファイルと分析ファイルを準備する必要があります。「手動解析」を実行する場合は、リファレンスファイルのみ準備します。

3.1.1 リファレンスファイルの作成

標準物質情報はリファレンスファイルとして保存して使用します。

1. 分析試料情報入力エリアにある「リファレンスエディター」ボタンをクリックします。
2. 新しく行を追加して下記の情報を入力します。

名前	標準物質名などの識別できる名称
ロット	ロット番号などの情報
溶媒	使用想定 of 溶媒
モル質量	標準物質のモル質量
純度(%)	試薬純度、認証値
始点、終点 (ppm)	積分範囲
核の数	核の数 (例えばプロトン)

特定の標準物質に対する追加のシグナルは、「追加のシグナルを追加」ボタンを押すことで追加できます。適切な積分または複数信号が定義された標準物質のスペクトルが利用可能な場合は、「スペクトル積分からエントリを作成」ボタンを使用してリファレンスエディターにエントリを入力できます

3. 「OK」ボタンをクリックします。
ローカルファイルに保存されます。



リファレンスエディターの詳細は「2.2 リファレンスエディター」をご参照ください。

3.1.2 分析ファイルの作成

SMILEQ プラグインを使用すると、ユーザーは効率的で自動化された qNMR 分析用の分析ファイルを作成することもできます。これにより、計算で使用されるパラメータが JASON 定量分析ファイル Jason Quantitative Analysis File (.jqaf) として保存されます。ファイルを作成するには、まず必要なデータを準備し、解析を実行します。

化合物の「質量」を除く分析パラメータが保存されます。保存されたファイルは、テンプレートの作成時に使用されたのと同じ条件で取得された他の NMR データの定量解析を実行するために使用できます。

 作成手順は「4.1 内標準法」または「4.2 外標準法」に従ってください。

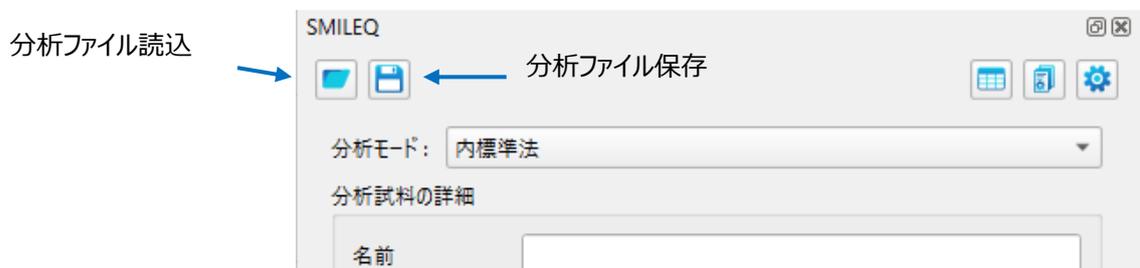


図 21 分析ファイルの保存と読込

3.2 設定

SMILEQ 個別の設定は、SMILEQ パネル右上の「設定」ボタン（歯車）から設定、編集できます。4 つのタブ「設定（一般）」、「Seamless」、「Mapping」、「パラメータ」があります。

3.2.1 設定（一般）

「設定（一般）」タブではファイルの指定、または参照先を設定します。

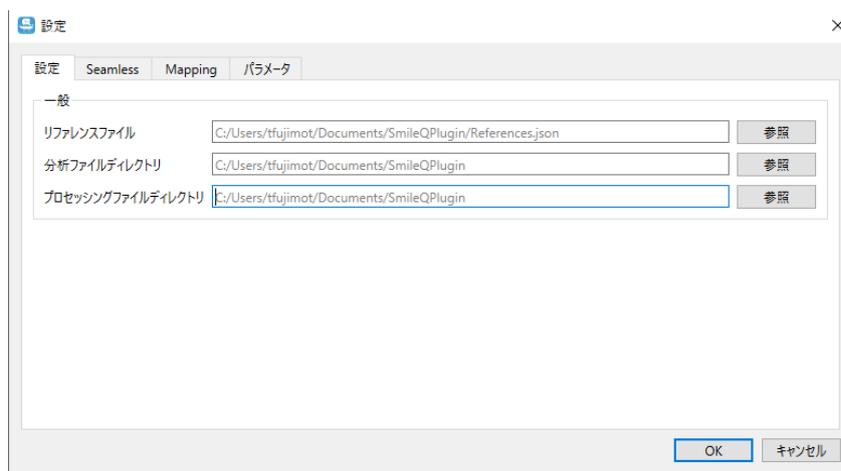


図 22 設定 - 設定（一般）

リファレンスファイル	リファレンスファイルを指定します。
分析ファイルディレクトリ	分析ファイルの参照先を指定します。
プロセッシングファイルディレクトリ	プロセッシングファイルディレクトリの参照先を指定します。

3.2.2 Seamless

SMILEQ プラグインでは、Delta(JEOL NMR 標準ソフトウェア)と JASON と連携して、定量 NMR 測定、演算処理、及びレポート作成を自動で行うことができます。Seamless といいます。

Seamless では構成ファイル (Jason Quantitative Configuration File 拡張子 .jqcf) が必要です。構成ファイルには分析ファイルの参照先、結果の保存先などが記録されています。SMILEQ 設定の Seamless タブにある以下のツールを使用して、[保存] ボタンをクリックして、SMILEQ で使用する構成ファイルを作成します。

 このセクションでは、Seamless の SMILEQ 関連の設定について説明します。Seamless を使用して分析を実行する必要がない場合は、これらの設定は必要ありません。



図 23 設定 - Seamless

分析ファイルディレクトリ	分析ファイル (.jqaf)の参照先を指定します。
結果保存ディレクトリ	結果の保存先を指定します。
PDF に保存	結果の pdf として出力するか選択します。
プロセッシングファイル	プロセッシングファイルの参照先を指定します。
リファレンスファイル	リファレンスファイルを指定します。
保存ファイル名	結果ファイルの名前を指定します。結果ファイルは“保存ファイル名+日付時刻”の形式で保存されます
レポート出力	必要に応じてサマリレポート、不確かさレポートを指定します。不確かさレポートの場合は標準物質の拡張不確かさの入力が必要です。

設定パラメータの反映ボタン	「設定（一般）」タブの内容を、「分析ファイルディレクトリ」と「リファレンスファイル」に反映します。
構成ファイルエクスポートボタン	内容を構成ファイル(.jqcf)として出力します。

-  「処理ファイル」が設定されていない場合は、デフォルトの処理リストが適用されます。
-  「保存ファイル名」が設定されていない場合は、分析ドキュメントは「結果」という名前で保存されます。
-  最終出力ドキュメントの名前には、日付と時刻が追加されます。
-  SMILEQを使用して自動qNMR分析を実行するには、Delta V6.1以降が必要です。
詳細については、Delta ユーザーマニュアル「JASON ユーザーマニュアル/SMILEQ セットアップガイド」を参照してください。

3.2.3 Parameter Mapping

「Mapping」タブでは、SMILEQ のパラメータと測定データのパラメータの対応を設定します。

SMILEQ は、元のデータから特定のパラメータを読み取り、qNMR ワークフローを高速化できます。生データから SMILEQ へのパラメータのマッピングは、図 24 に示すように、SMILEQ 設定のマッピング タブで設定できます。

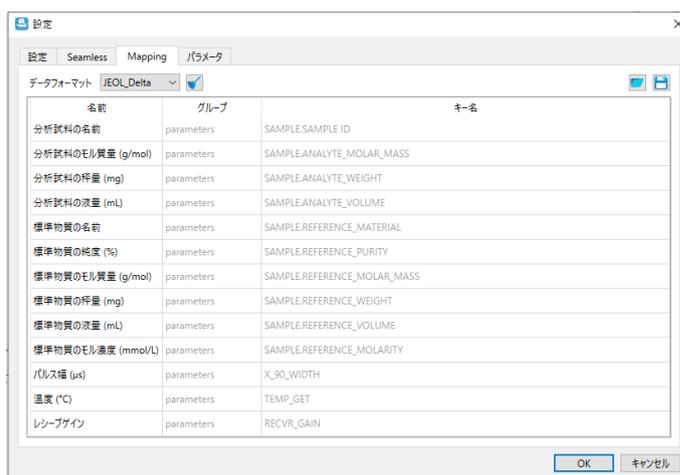


図 24 設定 – Mapping

 JEOL データにはデフォルト値が用意されており、変更することができます。JEOL以外のファイルを取り扱う場合は上部のドロップダウン リストから指定し、グループはパラメータが見つかるファイルを指定します。マッピングは右上のアイコンを使用して保存および読み込みできます。

3.2.4 Parameter

「Parameter」タブ個別レポートの結果のまとめで表示されるパラメータを設定できます。

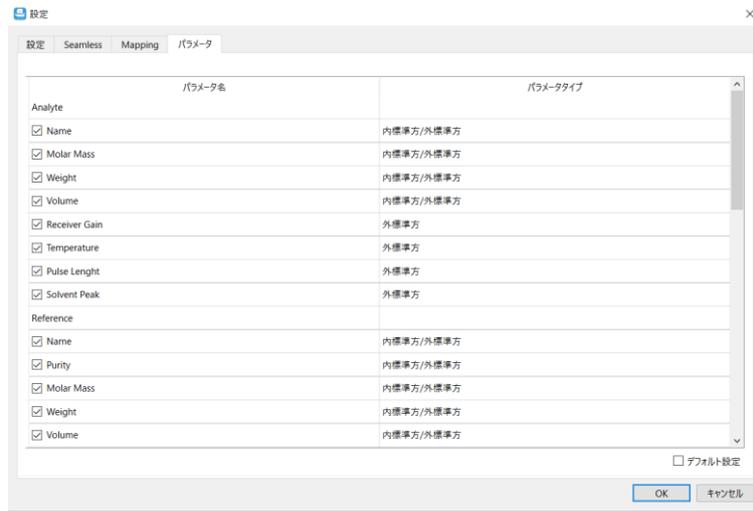


図 25 設定 – Parameter

☞ OKボタンを押すと、JASON設定だけでなく、キャンバス上で選択されている結果にも反映されます。また、「デフォルト設定」にチェックを入れてOKボタンを押すと、設定がデフォルトとして保存されます。

4 実際の解析手順

SMILEQ プラグインでは、取得した FID に対して、内標準法、外標準法を選択し、「手動解析」または「自動解析」を行うことができます。

4.1 内標準法

 動画は URL: <https://youtu.be/qrk803hcQJw> でご覧いただけます。

この手順は、キャンバスに読み込まれた特定のスペクトルについて、パラメータなどを最適化しながら設定し、特定のスペクトルの結果を報告します。

SMILEQ パネルで解析を進める前に NMR データ (FID) のデータ処理 (FFT, アポダイゼーション、ゼロファイリング、位相調整、ベースライン補正、リファレンス設定など) を実施しておきます。

1. 対象スペクトルを選択し、解析パネルでマルチプレット解析または積分でシグナルの定量情報 (積分値) を取得します。

 マルチプレット解析または積分結果のうち、標準物質、溶媒、不純物などの分析対象ではないシグナルの定量情報は予め削除します。

2. SMILEQ パネルで、分析モードが内標準法であることを確認し、分析試料情報エリアに必要なパラメータを入力します。

 FID に秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。

 モル濃度が不要でない場合は容量の入力は必須ではありません。入力する場合は、標準物質情報エリアにも同じ値を入力します。

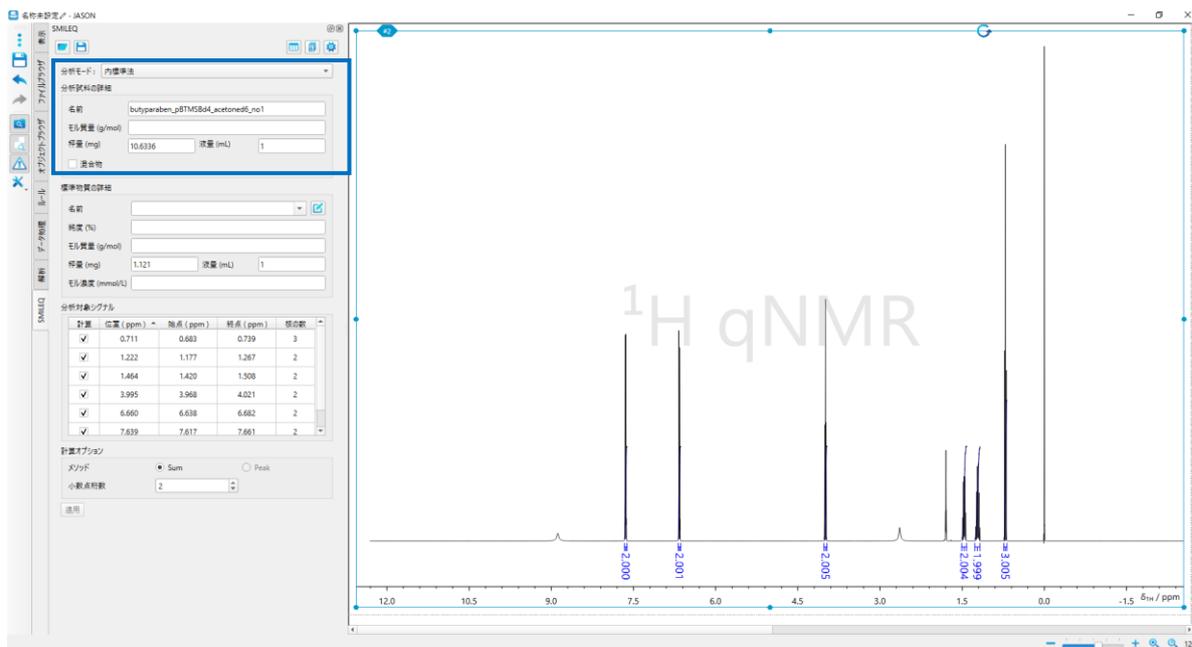


図 26 SMILEQ パネル (分析試料情報設定画面)

3. 標準物質情報エリアに必要な情報を入力します。予め登録されている標準物質情報を「名前」のプルダウンメニューから選択します。

✎ FIDに秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。

✎ モル濃度が不要でない場合は容量の入力は必須ではありません。入力する場合は、分析試料情報エリアと同じ値を入力します

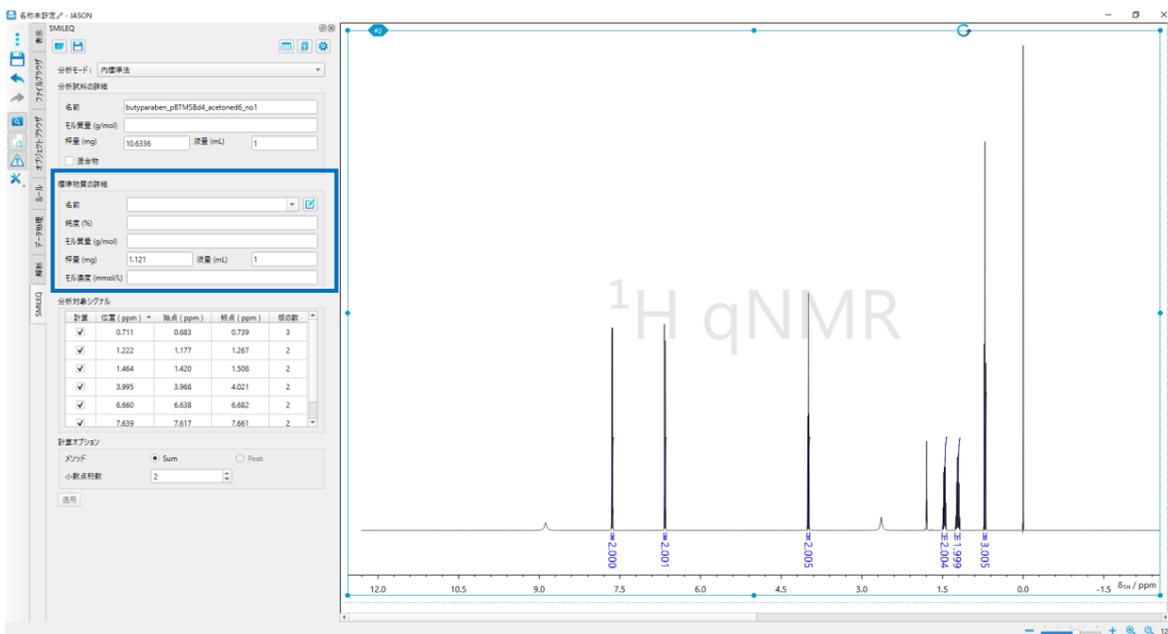


図 27 SMILEQ パネル（標準物質情報設定画面）

4. 分析対象シグナルエリアの詳細を確認します。必要に応じて、分析対象シグナルの追加、積分範囲の調整、核の数を入力または修正します。

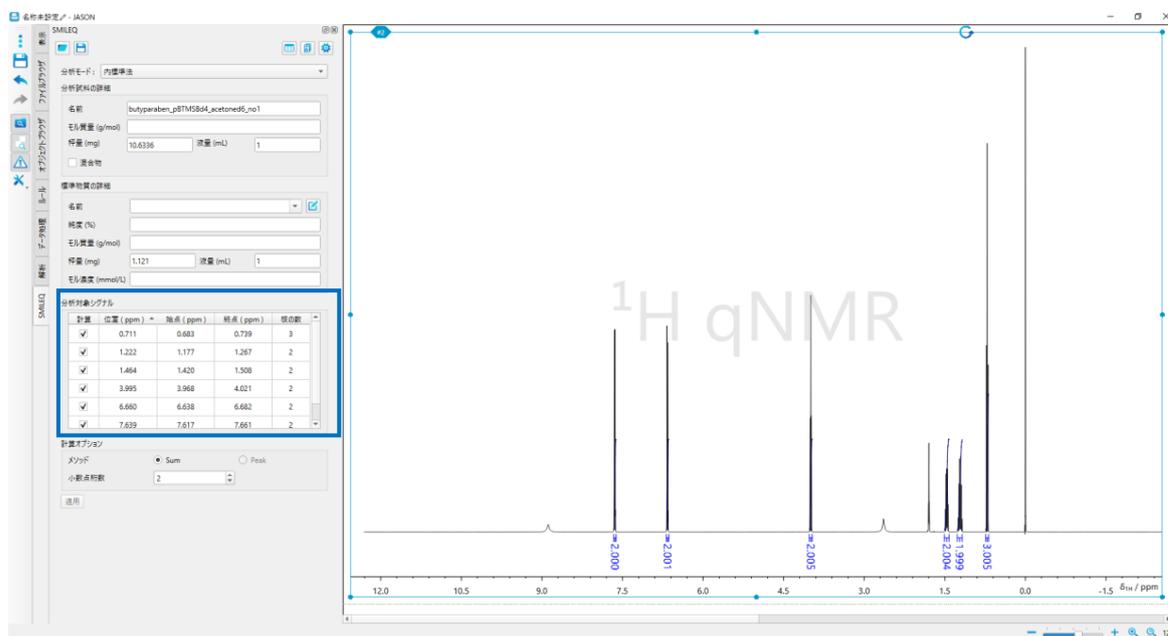


図 28 SMILEQ パネル（分析対象シグナル確認画面）

5. 計算オプションを設定した後、「適用」ボタンをクリックして結果を表示します。

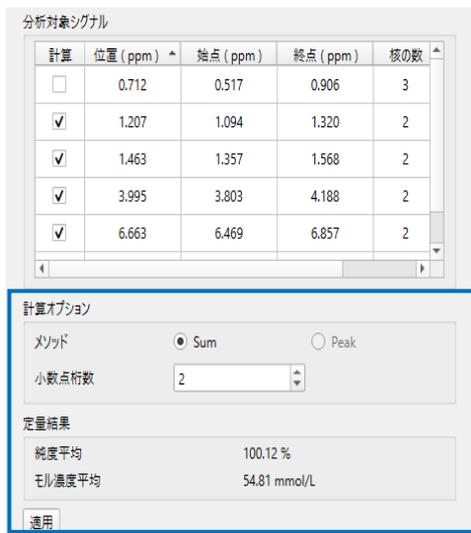


図 29 SMILEQ パネル (計算オプション)

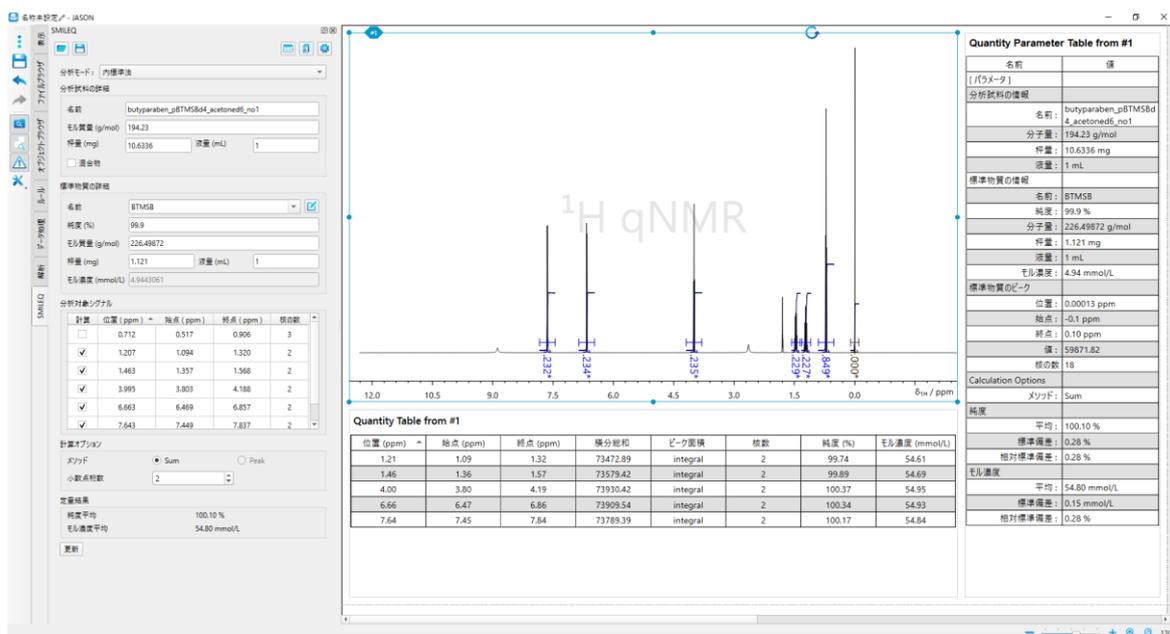


図 30 定量解析結果例

解析条件（積分範囲、標準物質、モル質量など）は分析ファイルとして保存可能です。この分析ファイルは4.3「自動解析」で説明されている手順に必要です。

「適用」ボタンをクリックすると「更新」ボタンに変わります。条件の修正があった場合はこのボタンで再解析できます。

4.2 外標準法

この手順は、キャンバスに読み込まれた特定のスペクトルについて、パラメータなどを最適化しながら設定し、特定のスペクトルの結果を報告します

SMILEQ パネルで解析を進める前に、NMR データ (FID) のデータ処理 (FFT, アポダイゼーション、ゼロフィリング、位相調整、ベースライン補正、リファレンス設定など) を実施しておきます。外標準法では分析試料、標準物質スペクトルすべてをキャンバス上に読み込んでおきます。

1. 標準物質スペクトルを選択し、SMILEQ パネルで、分析モードのプルダウンメニューから「外標準法-リファレンス対象」を選択します。

標準物質情報エリアに必要な情報を入力します。予め登録されている標準物質情報を「名前」のプルダウンメニューから選択します。

- ☞ FIDに秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。
- ☞ モル濃度が不要でない場合は容量の入力は必須ではありません。
- ☞ 複数スペクトルを使用する場合は、すべてのスペクトルに対して設定をしておきます。

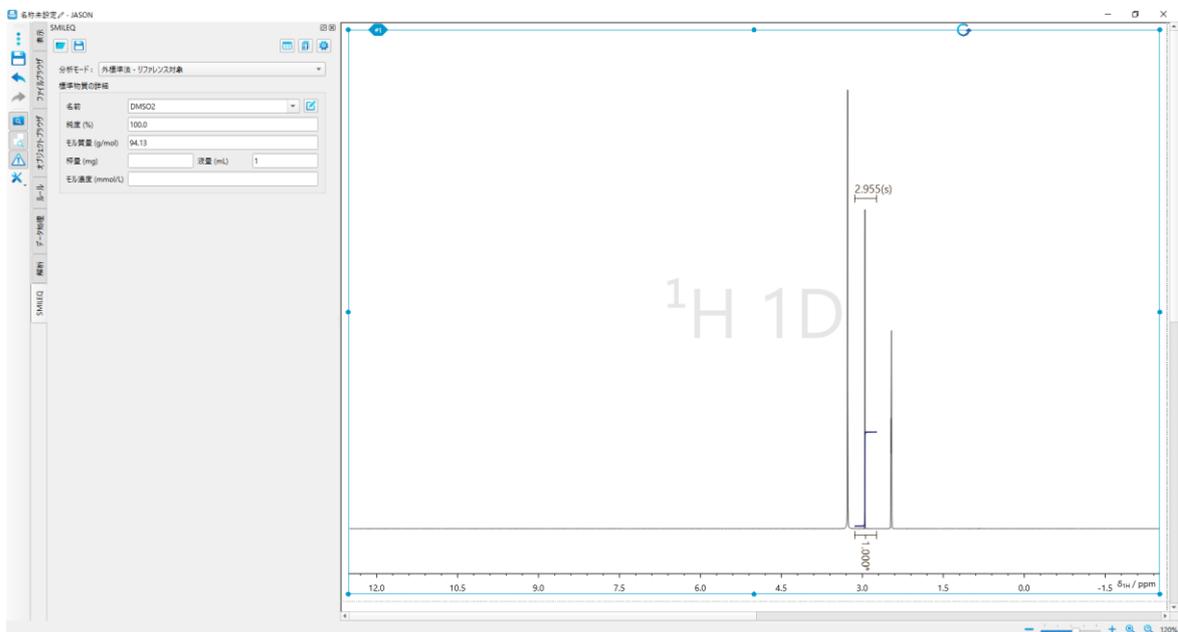


図 31 SMILEQ パネル 外標準法 (リファレンス対象設定画面)

2. 分析対象スペクトルを選択し、SMILEQ パネルで、分析モードのプルダウンメニューから「外標準法-分析対象」を選択します。解析パネルでマルチプレット解析または積分でシグナルの定量情報（積分値）を取得します。

 マルチプレット解析または積分結果のうち、標準物質、溶媒、不純物などの分析対象ではないシグナルの定量情報は予め削除します。

3. 分析試料情報エリアの情報を入力します。

 FIDに秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。

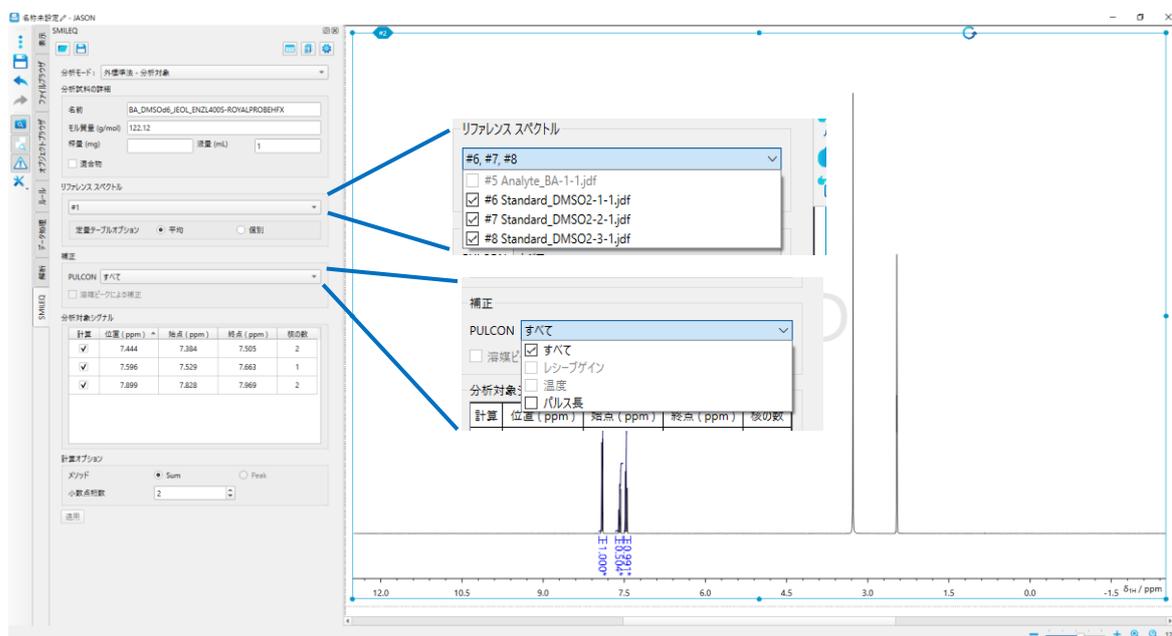
 モル濃度が必要でない場合は容量の入力は必須ではありません

4. リファレンススペクトルエリアではどのスペクトルを使用するか選択します。

 複数使用する場合、平均値または個別に計算をすることができます。それぞれ、定量テーブルオプションの平均または個別のどちらかを選択します。

5. 補正エリアで、PLUCON で使用する校正パラメータを選択します。

 標準物質と分析試料のスペクトルでパラメータが異なる場合、そのパラメータのチェックボックスが有効になります



計算	位置 (ppm)	始点 (ppm)	終点 (ppm)	積の数
<input checked="" type="checkbox"/>	7.444	7.384	7.505	2
<input checked="" type="checkbox"/>	7.596	7.529	7.663	1
<input checked="" type="checkbox"/>	7.899	7.828	7.969	2

図 32 SMILEQ パネル 外標準法-分析試料除法設定画面

6. 分析対象シグナルエリアの詳細を確認します。必要に応じて、分析対象シグナルの追加、積分範囲の調整、核の数を入力または修正します。

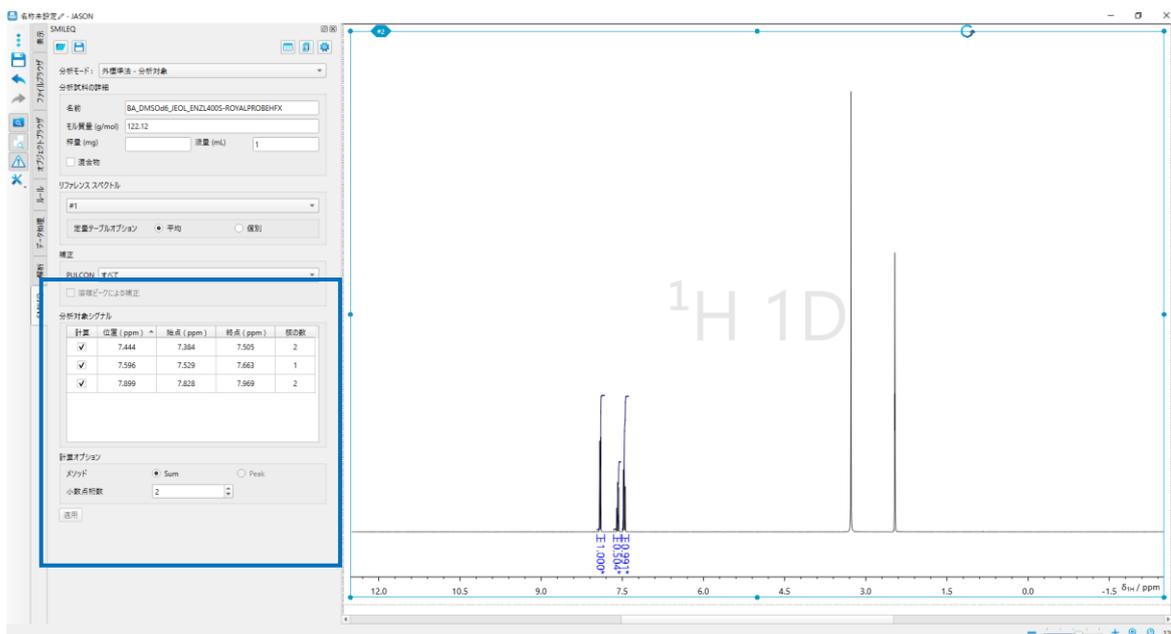


図 33 SMILEQ パネル 分析対象シグナルテーブル / 計算オプション

標準物質と分析サンプルのスペクトル間でパラメータが異なる場合は、そのパラメータのチェックボックスをオンにします。が有効になります。これにより、パルス幅、温度、受信機ゲインなどの補正が可能になります。

7. 計算オプションを設定した後、「適用」ボタンをクリックして結果を表示します。

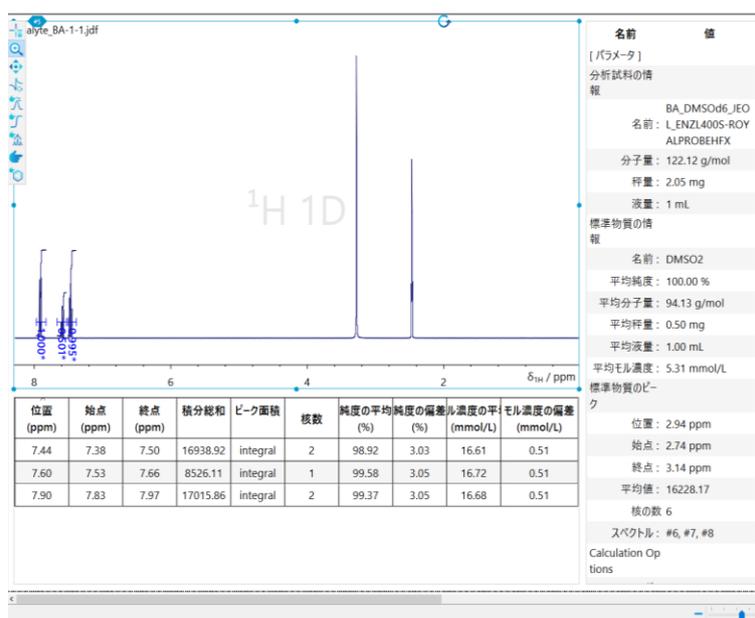


図 34 定量解析結果例

- ✎ 解析条件（積分範囲、標準物質、モル質量など）は分析ファイルとして保存可能です。この分析ファイルは「4.3 自動解析」で説明されている手順に必要です。外標準法では、分析対象とリファレンス対象のそれぞれで分析ファイルの作成が必要です。
- ✎ 「適用」ボタンをクリックすると「更新」ボタンに変わります。条件の修正があった場合はこのボタンで再解析できます。

4.3 自動解析

👉 動画はURL: <https://youtu.be/ZDecamUawH4>でご覧いただけます。

この手順は分析ファイル（重量以外の情報が保存されたもの）を使用して、定量解析を実施し、特定のスペクトルの結果を報告します。同一条件で解析を行うケースに活用できます。

SMILEQ パネルで解析を進める前に、NMR データ（FID）のデータ処理（FFT, アポダイゼーション、ゼロフリンギ、位相調整、ベースライン補正、リファレンス設定など）を実施しておきます。

1. SMILEQ パネルで、分析ファイルの読み込みボタンから分析ファイルを読み込みます。

✎ 分析ファイルの作成は「4.1 内標準法」をご参照ください。

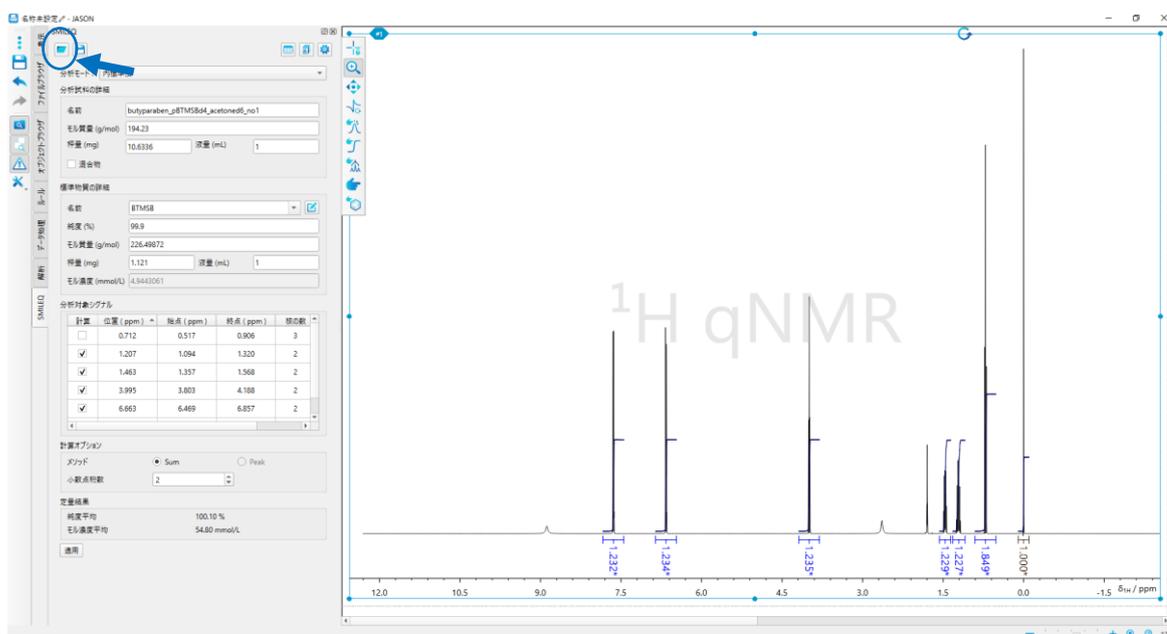


図 35 分析ファイルの読み込み

2. 分析試料情報エリアと標準物質情報エリアの空白欄を入力します。また、必要に応じてその他の設定条件を確認します。

 FIDに秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。

 モル濃度が不要でない場合は容量の入力は必須ではありません。入力する場合は、分析試料情報エリア、標準物質情報エリアに同じ値を入力します。

3. 計算オプションを設定した後、「適用」ボタンをクリックして結果を表示します。

 「適用」ボタンはクリックすると「更新」ボタンに変わります。条件の修正があった場合はこのボタンで再解析できます。

 自動解析は外標準法のデータについても可能です。
その場合、分析対象物と標準物質ごとに分析ファイルを用意して使用します。

4.4 複数スペクトル解析

複数スペクトル解析とは複数の FID を一度に処理・解析を実行することをさします。実行するためには事前に、使用するファイルの指定、参照するディレクトリの指定、使用するプロセッシングファイル（「3.解析の準備」）及び、分析ファイルを準備する必要があります。

複数スペクトル解析は内標準法、外標準法に対応しています。

4.4.1 内標準法の場合

 動画は URL: <https://youtu.be/kjRLq-eO8Lw> でご覧いただけます。

1. キャンバスに解析を行うデータを読み込みます。
2. 読み込まれたスペクトルに対し、それぞれ選択して SMILEQ パネルの分析モードをプルダウンメニューから選択します。
3. キャンバス上のスペクトルをどれか一つ選択し、SMILEQ パネルの MultiSpectrum SMILEQ ボタンをクリックします。

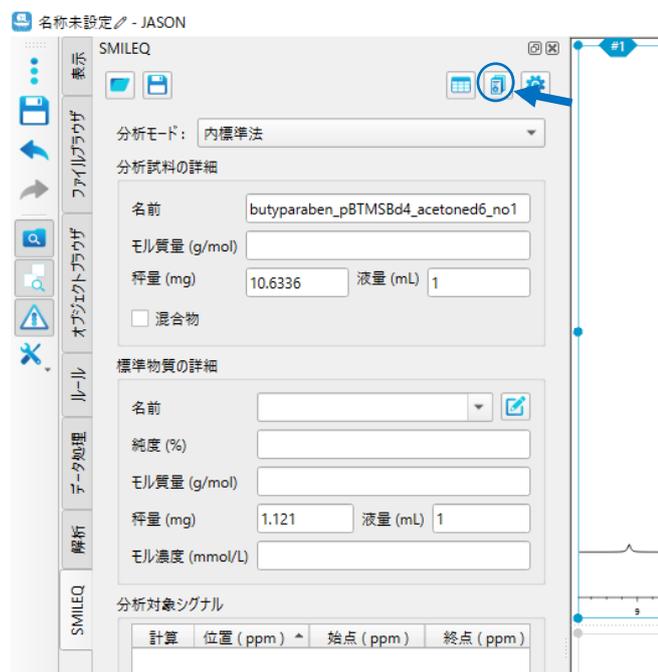


図 36 MultiSpectrum SMILEQ ボタン

4. MultiSpectrum SMILEQ ツールで、プロセッシングファイル、分析ファイルをそれぞれプルダウンメニューから選択します。分析試料、標準物質の秤量値などを入力します。

- ✍ FIDに秤量や液量などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。
- ✍ モル濃度が必要でない場合は容量の入力は必須ではありません。入力する場合は、分析試料、標準物質に同じ値を入力します。
- ✍ 標準物質の純度 (%) は変更することが可能です。

5. 入力後、適用ボタンをクリックします。

- ✍ 計算が実行され、純度結果、モル濃度結果（容量が設定されている場合）がタブの切り替えで表示されます。

No.	文件名	位置 (1.46 ppm)	位置 (4.00 ppm)	位置 (6.66 ppm)	位置 (7.64 ppm)	位置 (1.21 ppm)	平均 (%)	純度 (%)	標準偏差 (%)
#1	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no1_Proton_qNMR-13-1.pdf	99.89	100.37	100.34	100.17	99.74	100.10	0.28	0.28
#2	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no1_Proton_qNMR-14-1.pdf	99.60	100.43	100.31	100.27	100.00	100.12	0.33	0.33
#3	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no1_Proton_qNMR-15-1.pdf	99.52	100.40	100.27	100.12	99.80	100.02	0.36	0.36
#4	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no2_Proton_qNMR-5-1.pdf	99.65	100.42	100.03	99.99	100.05	100.03	0.27	0.27
#5	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no2_Proton_qNMR-6-1.pdf	99.53	100.54	100.45	100.46	100.14	100.22	0.42	0.42
#6	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no2_Proton_qNMR-7-1.pdf	99.69	100.40	100.18	100.18	99.89	100.07	0.28	0.28
#7	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no3_Proton_qNMR-5-1.pdf	99.83	100.21	100.20	100.02	99.99	100.05	0.16	0.16
#8	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no3_Proton_qNMR-6-1.pdf	99.81	100.16	100.30	100.60	99.81	100.14	0.34	0.34
#9	butylparaben_pBTMSBd4_acetoned5_no3_Proton_qNMR-7-1.pdf	99.79	100.21	100.21	100.00	100.10	100.06	0.18	0.18

図 37 結果表（純度）

6. レポートを作成します。

- ✍ 個別レポートのチェックボックスをチェックし、適用ボタンをクリックすると、各スペクトルにレポートが作成されます。
- ✍ サマリーレポート、不確かさレポートはレポートエディターを使用して作成します。

4.4.2 外標準法の場合

1. キャンバスに解析を行うデータを読み込みます。
2. 読み込まれたスペクトルに対し、それぞれ選択して SMILEQ パネルの分析モードをプルダウンメニューから選択します。

 分析試料スペクトルは外標準法-分析対象、標準物質スペクトルは外標準法-リファレンス対象と設定します。

3. キャンバス上のスペクトルをどれか一つ選択し、SMILEQ パネルの MultiSpectrum SMILEQ ボタンをクリックします。

4. MultiSpectrum SMILEQ ツールで、プロセッシングファイル、分析ファイルをそれぞれプルダウンメニューから選択します。分析試料、標準物質の秤量値などを入力します。

 FIDに秤量や体積などの情報が入っている場合、データを読み込んだ時に自動で設定されます。

 モル濃度が不要でない場合は容量の入力は必須ではありません。入力する場合は、分析試料、標準物質に同じ値を入力します。

 標準物質の純度 (%) は変更することが可能です。



No.	データファイル名	プロセッシングファイル名	分析ファイル名	既存積分の使用	分析試料名	分析試料分子量 (g/mol)	分析試料の秤量 (mg)	分析物質の流量 (mL)	標準物質の秤量 (mg)	標準物質の流量 (mL)	標準物質の純度 (%)	標準物質のモル濃度 (mmol/L)
#1	<input type="checkbox"/> Analyte_BA_s-1-1.jdf			<input type="checkbox"/>	BA_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							
#2	<input type="checkbox"/> Analyte_BA_s-2-1.jdf			<input type="checkbox"/>	BA_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							
#3	<input type="checkbox"/> Analyte_BA_s-3-1.jdf			<input type="checkbox"/>	BA_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							
#4	<input checked="" type="checkbox"/> Standard_DMSO2-1-1.jdf			<input type="checkbox"/>	EC_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							
#5	<input checked="" type="checkbox"/> Standard_DMSO2-2-1.jdf			<input type="checkbox"/>	EC_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							
#6	<input checked="" type="checkbox"/> Standard_DMSO2-3-1.jdf			<input type="checkbox"/>	EC_DMSOd6_JEOL_ENZL400S-ROYALPROBEHFX							

図 38 MultiSpectrum SMILEQ ツール（外標準法）

5. 入力後、適用ボタンをクリックします。

 計算が実行され、純度結果、モル濃度結果（容量が設定されている場合）がタブの切り替えで表示されます。

6. レポートを作成します。

 個別レポートのチェックボックスをチェックし、適用ボタンをクリックすると、各スペクトルにレポートが作成されます。

 サマリーレポート、標準物質レポートはレポートエディターで作成します。

4.5 混合物解析

混合物解析とは、1つのサンプルに複数の分析対象物を含むスペクトルを処理および解析することを意味します。この手順は、キャンバスに読み込まれた特定のスペクトルについて、手動定量解析を実行し、結果をレポートするために使用されます。

SMILEQ を使用して解析を進める前に、アポダイゼーション、ゼロファイリング、FFT、位相およびベースライン補正、化学シフト参照など、すべての標準的な NMR データ処理手順が実行されていることを確認してください。

1. 対象スペクトルを選択し、解析パネルでマルチプレット解析または積分でシグナルの定量情報（積分値）を取得します。

 この段階で標準物質、溶媒、不純物などの信号を除外できます。

2. SMILEQ パネルで、Mixed Analytes チェックボックスをオンにして、SMILEQ Mixed Analyte Editor を開きます。分析物情報を追加する必要がある場合は、「2.7 混合物解析-混合物エディター」を参照してください。

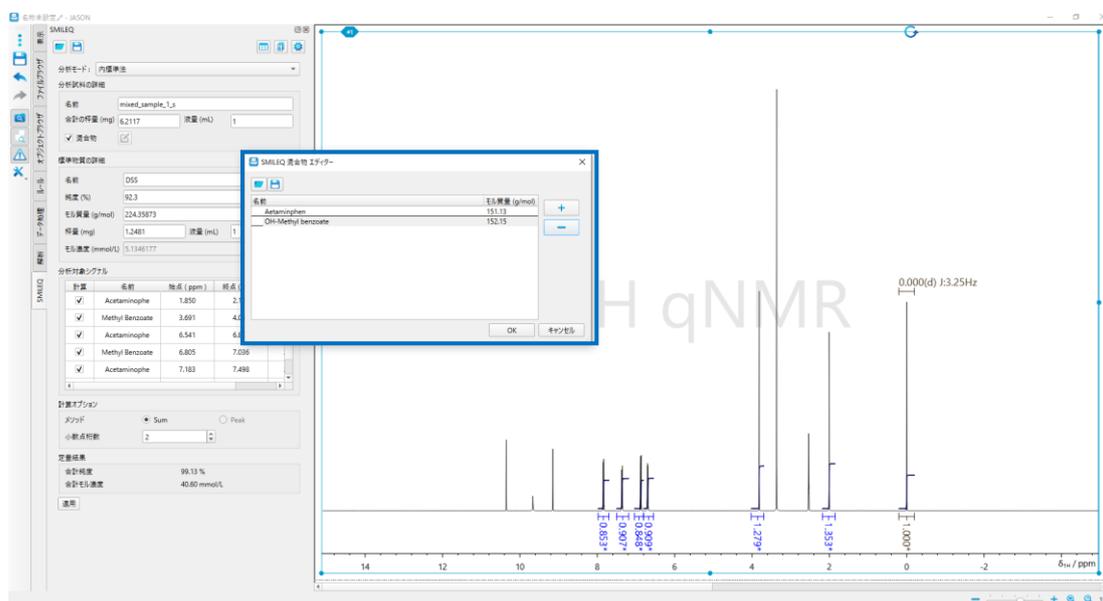


図 39 混合物解析-混合物エディター

3. サンプル情報を入力します。

 生データ (FID) に質量や体積などのパラメータが保存されている場合、これらの値は SMILEQ ウィジェットの適切なフィールドに自動的に設定されます。

4. 標準物質エリアのボックスを入力します。「名前」から目的の参照を選択し、分析に必要な参照パラメータを入力します。
5. 「ターゲットシグナルテーブル」のプルダウンメニューである名前の列でターゲット分析物を選択します。
6. 計算オプションを設定したら、「適用」ボタンを押して結果を表示します。

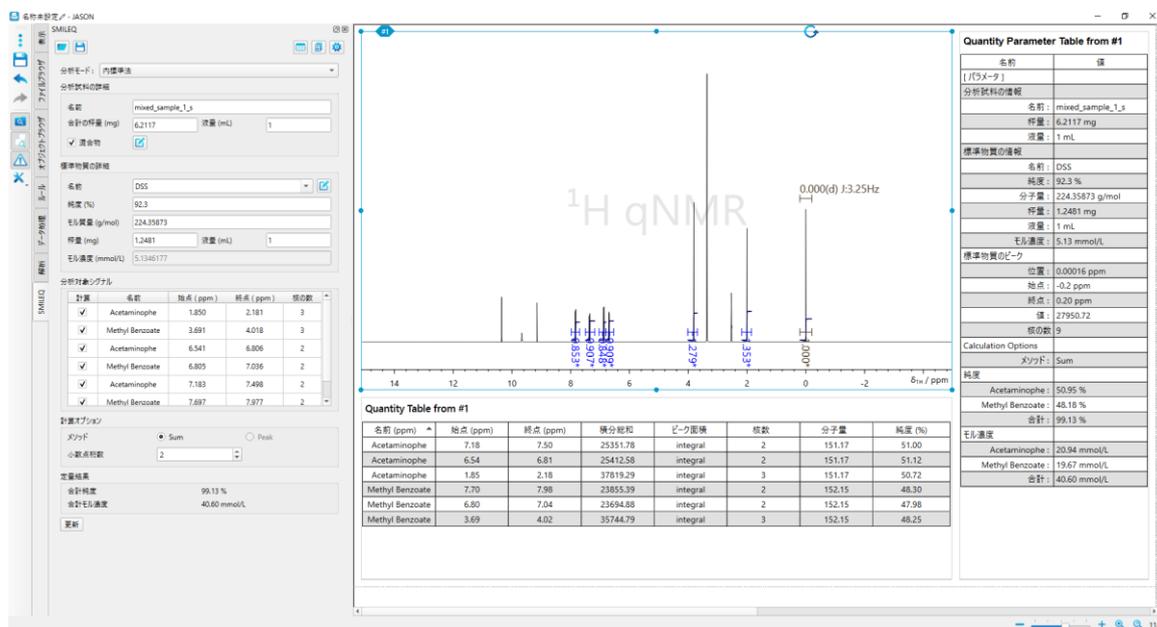


図 40 : 混合物解析



混合解析は、自動解析および複数スペクトル解析でも利用できます。

5 レポート作成

解析結果は個別レポート、サマリーレポート、不確かさレポート（内標準法のみ対応）、標準物質レポート（外標準法のみ対応）で出力することができます。

この章ではそれぞれのレポートについて説明します。

5.1 個別レポート

SMILEQ パネルまたは MultiSpectrum SMILEQ ツールの適用ボタンで各スペクトルに結果を表示する個別レポートの作成ができます。内標準法、外標準法に対応しています。

純度の平均、SD、および RSD が計算され、結果の概要の下部に表示されます。

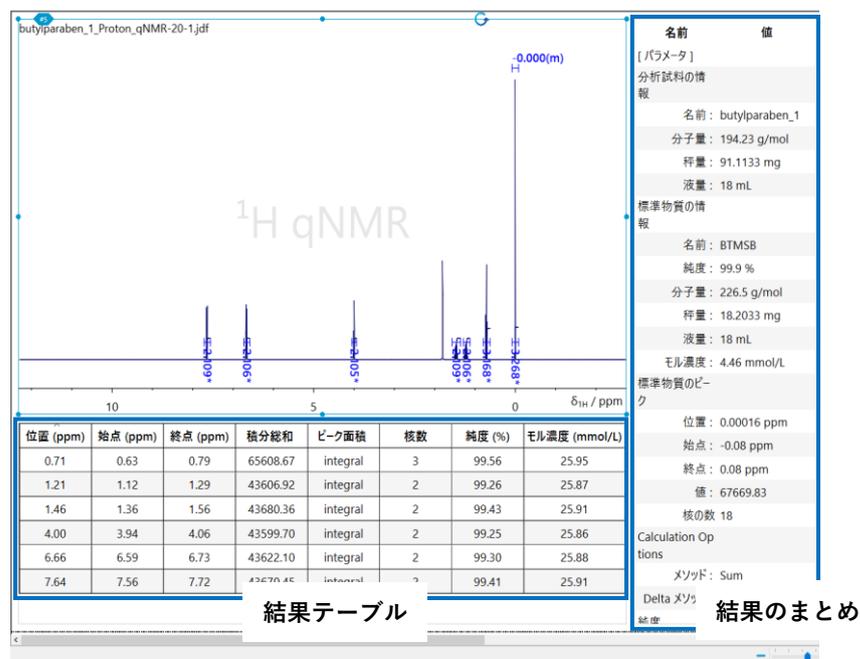


図 41 SMILEQ パネル（分析試料情報設定画面）

結果テーブル	各分析対象シグナルの純度またはモル濃度の結果が報告されます。
結果のまとめ	分析結果の概要を表示しています。

- ☞ 定量化に使用される分析対象シグナルの定量情報がマルチプレット解析を使用して定義されている場合、計算オプションのピーク（ピーク面積の推定値）が利用可能になります。ただし、積分として定義されている場合、ピーク面積の計算を使用することができません。
- ☞ 結果テーブルは、テーブルが選択された時に表示されるテーブルパネルを使用して各パラメータを表示または非表示にしたり、テーブルの色を表示したりするように変更できます。
- ☞ 結果テーブルには「計算」チェックボックスが選択されている分析対象シグナルエリアで定義されたシグナルの結果のみが表示されます。
- ☞ 液量を入力すると、モル濃度の列が結果テーブルに自動的に追加され、モル濃度の平均と偏差が結果のまとめに追加されます。
- ☞ 結果テーブル、結果のまとめはテーブルツールパネルでカスタマイズが可能です。詳細はJASON ユーザーガイド ver5.0「3.8 テーブルツールパネル」を参照ください。

結果のまとめ	
パラメータ名	
分析試料の情報	
名前	分析対象物名など
分子量	モル質量 (g/mol)
秤量	質量・秤量値 (mg)
液量	調製したサンプル溶液の容量 (mL) /このパラメータはモル濃度を計算します。
標準物質の情報	
名前	リファレンスエディターで登録されている名前
純度	標準物質の純度 (認証値など) (%)
分子量	モル質量 (g/mol)
秤量	質量・秤量値 (mg)
液量	調製したサンプル溶液の容量 (mL) /このパラメータはモル濃度を計算します。
モル濃度	モル濃度 (mmol/L)
標準物質のピーク	
位置	信号位置(ppm)
始点	積分範囲の始点 (ppm)
終点	積分範囲の終点 (ppm)
値	積分値
核の数	信号の原子核数 (プロトン数など)
メソッド	積分を使用するか、波形分離のピーク面積を使用するかの計算オプション
Delta Method	qNMR シームレスの場合、パラメータが表示されます。qNMR 分析方法の「prescribed」とは、解析に分析ファイルを使用することを意味します

[結果テーブル]	
パラメータ名	
純度	
平均	純度の平均値 (%)
標準偏差	計算対象すべての純度値の標準偏差 (%)
相対標準偏差	計算対象すべての純度値の相対標準偏差 (%)
モル濃度	
平均	モル濃度の平均値(mmol/L)
標準偏差	計算対象すべてのモル濃度の標準偏差 (%)
相対標準偏差	計算対象すべてのモル濃度の標準偏差 (%)

5.2 サマリーレポート

MultiSpectrum SMILEQ ツールで、サマリーレポートを作成することができます。

複数スペクトルを使用した場合の各パラメータの統計解析結果をレポートとして出力します。内標準法、外標準法に対応しています。

Summary Report (Purity)

Sample name	Pos (ppm)	Run 1 (%)	Run 2 (%)	Run 3 (%)	Avg. (%)	SD (%)	RSD (%)	Avg. (%)	SD (%)
butyparaben_pBTMSB d4_acetoned6_no1	1.46	99.89	99.60	99.52	99.67	0.19	0.19	100.08	0.30
	4.00	100.37	100.43	100.40	100.40	0.03	0.03		
	6.66	100.34	100.31	100.27	100.30	0.03	0.03		
	7.64	100.17	100.27	100.12	100.19	0.07	0.07		
	1.21	99.74	100.00	99.80	99.85	0.14	0.14		
	Avg. (%)	100.10	100.12	100.02					
	SD (%)	0.28	0.33	0.36					
butyparaben_pBTMSB d4_acetoned6_no2	1.46	99.65	99.53	99.69	99.62	0.09	0.09	100.11	0.32
	4.00	100.42	100.54	100.40	100.45	0.07	0.07		
	6.66	100.03	100.45	100.18	100.22	0.22	0.22		
	7.64	99.99	100.46	100.18	100.21	0.23	0.23		
	1.21	100.05	100.14	99.89	100.03	0.13	0.13		
	Avg. (%)	100.03	100.22	100.07					
	SD (%)	0.27	0.42	0.28					
butyparaben_pBTMSB d4_acetoned6_no3	1.46	99.83	99.81	99.79	99.81	0.02	0.02	100.08	0.22
	4.00	100.21	100.16	100.21	100.19	0.03	0.03		
	6.66	100.20	100.30	100.21	100.24	0.06	0.06		
	7.64	100.02	100.60	100.00	100.21	0.34	0.34		
	1.21	99.99	99.81	100.10	99.97	0.15	0.15		
	Avg. (%)	100.05	100.14	100.06					
	SD (%)	0.16	0.34	0.18					

図 42 サマリーレポート (純度) 例

5.3 不確かさレポート

MultiSpectrum SMILEQ ツールで、不確かさレポートを作成することができます。

内標準法のみに対応しています。

不確かさレポートは ISO24583 の算出方法を採用しています。

包含係数、表示桁数や値の丸め方などの設定は、レポートエディター内で可能です。標準物質の拡張不確かさ (%) の値はレポート作成に必須です。

Uncertainty of the Purity (according to ISO 24583)										
Sample name *	Pct (ppm)	Run 1 (%)	Run 2 (%)	Run 3 (%)	Run 4 (%)	SD (%)	Avg. (%)	SD (%)	Avg. (%)	SD (%)
MultiSpectrum.pdf ISO24583method _pct	1.05	99.93	99.91	99.79	99.91	0.02	100.00	0.19		
	4.00	100.21	100.16	100.21	100.19	0.03				
	8.86	100.20	100.30	100.21	100.24	0.06				
	7.64	100.02	100.80	100.00	100.22	0.26				
MultiSpectrum.pdf ISO24583method _pct	1.21	100.05	100.14	99.98	100.02	0.10	100.11	0.31	100.09	0.21
	1.45	99.95	99.93	99.99	99.92	0.09				
	4.00	100.42	100.54	100.40	100.46	0.07				
	8.86	100.00	100.45	100.19	100.22	0.22				
MultiSpectrum.pdf ISO24583method _pct	1.21	99.74	100.00	99.80	99.85	0.14	100.00	0.20		
	1.45	99.89	99.90	99.82	99.87	0.19				
	4.00	100.37	100.43	100.40	100.40	0.03				
	8.86	100.34	100.31	100.27	100.30	0.03				
	7.64	100.17	100.27	100.12	100.19	0.07				

Uncertainty Budget (according to ISO 24583)						
	Source of uncertainty	Unit	Value (%)	Standard uncertainty (%)	Sensitivity coefficient	Relative standard uncertainty (%)
MSE experiments	Measurement repeatability	%	100.21	0.34	1.00	0.34
	Variations from different signals selected	%	100.06	0.31	1.00	0.31
	Variations from ICPMS sample solution preparations	%	100.09	0.01	1.00	0.01
Purity of standard	The purity of the internal standard used	%	99.90	0.3	1.00	0.25
					Combined standard uncertainty (%)	0.53
					Coverage factor	2
					Expanded uncertainty (%)	1.05

図 43 不確かさレポート例

 Uncertainty of the Purity表内容の下線で示された値は、Uncertainty Budgetの結果を算出する際に使用された値です。

5.4 標準物質レポート

MultiSpectrum SMILEQ ツールで、標準物質レポートを作成することができます。

外標準法のみに対応しています。

標準物質の情報と複数スペクトルを使用した場合の各パラメータの統計計算結果をレポートとして出力します。

External Reference					
Sample name	Pos (ppm)	Start (ppm)	End (ppm)	Proton	Integral Value
BA_DMSOd6_JEOL_...	7.90	7.85	7.98	2	16994.18
	7.58	7.53	7.66	1	8536.85
	7.46	7.41	7.51	2	16953.30
BA_DMSOd6_JEOL_...	7.91	7.85	7.98	2	17159.91
	7.58	7.53	7.66	1	8598.82
	7.47	7.41	7.51	2	17118.98
BA_DMSOd6_JEOL_...	7.90	7.85	7.98	2	16927.25
	7.58	7.53	7.66	1	8505.30
	7.46	7.41	7.51	2	16900.09

External Reference Summary									
Sample Name	Reference Integral Value	Proton	Solvent Integral Value	Mass (mg)	Volume (mL)	Molarity (mmol/L)	Area/Proton	CCF	DCCF
BA_DMSOd6_JEOL_...	42484.34	5	0.00	2.00	1.00	16.38	8496.87	1.93e-06	0.00e+00
BA_DMSOd6_JEOL_...	42877.71	5	0.00	2.00	1.00	16.38	8575.54	1.91e-06	0.00e+00
BA_DMSOd6_JEOL_...	42332.64	5	0.00	2.00	1.00	16.38	8466.53	1.93e-06	0.00e+00
							Avg.	1.92e-06	0.00e+00
							SD	1.27e-08	0.00e+00
							RSD	0.66	nan

図 44 標準物質レポート例

お問い合わせ先

support@jeoljason.com (JASON サポート) 日本語対応可能です。