



# JASON

## ユーザーガイド

## Contents

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.....	7
2.1	Windows エクスプローラーからの読み込み.....	7
2.2	メインメニューからの読み込み.....	8
2.3	ファイルブラウザからの読み込み.....	8
2.4	キャンバス上のデータ配置.....	10
3	データ操作の概要：表示、処理、解析.....	12
3.1	コンテキストツールバー.....	12
3.2	コンテキストパネル.....	18
3.3	オブジェクトブラウザ.....	19
3.4	表示パネル.....	21
3.5	処理パネル.....	25
3.6	解析パネル.....	28
3.7	パラメータパネル.....	31
3.8	テーブルツールパネル.....	32
3.9	チャートツールパネル.....	33
4	レポート：テーブルとパラメータ.....	35
4.1	テーブル.....	35
4.1.1	パラメータレポート.....	36
4.1.2	処理レポート.....	38
4.1.3	ピークテーブル.....	39
4.1.4	積分/マルチプレット解析テーブル.....	40
4.1.5	マルチプレットレポート（論文書式の選択）.....	41
4.2	オブジェクトの印刷.....	42
5	設定メニュー.....	43

5.1	一般設定.....	44
5.1.1	ユーザーインターフェース.....	44
5.1.2	キャンバス (CANVAS) .....	45
5.1.3	インポート/エクスポート.....	47
5.2	NMR 設定.....	48
5.2.1	軸.....	49
5.2.2	プロット .....	50
5.2.3	ピーク.....	51
5.2.4	マルチプロット/積分.....	52
5.2.5	溶媒.....	54
5.3	MS.....	55
5.3.1	軸.....	56
5.3.2	プロット .....	57
5.4	テーブル.....	58
5.5	チャート.....	59
6	スタッキングと重ね合わせ .....	60
6.1	疑似 2D データ (アレイデータ) .....	66
7	スピンシミュレーション .....	67
7.1	シミュレーションダイアログパネル .....	67
7.2	シミュレーション設定 .....	69
8	分子構造の作成.....	70
8.1	コンテキストバーメニュー .....	71
8.2	構造式パネル.....	71
9	拡張処理オプション.....	73
9.1	線形予測 (リニアプレディクション) .....	73
9.2	ウィンドウ関数.....	74
10	ルール .....	75

10.1	ルールの管理.....	77
10.2	ルールライブラリ.....	78
10.3	処理ルール.....	79
10.4	解析ルール.....	79
10.5	レイアウトルール.....	80
10.5.1	レイアウトルールの重要な特徴.....	80
10.6	ルールの作成.....	81
10.7	ルール名.....	82
11	質量分析.....	83
11.1	MS データを開く.....	83
11.2	MS データの閲覧と操作.....	83
11.2.1	ビューパネル.....	84
11.2.2	パラメータ・パネル.....	85
11.3	MS データの保存.....	85
12	Appendix.....	86
12.1	Windows ショートカットキー.....	86
12.2	サポートファイルフォーマット.....	88

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。

# 1 はじめに

参考動画 : <https://youtu.be/BSckj4wMwfE> JASON をはじめるにあたって

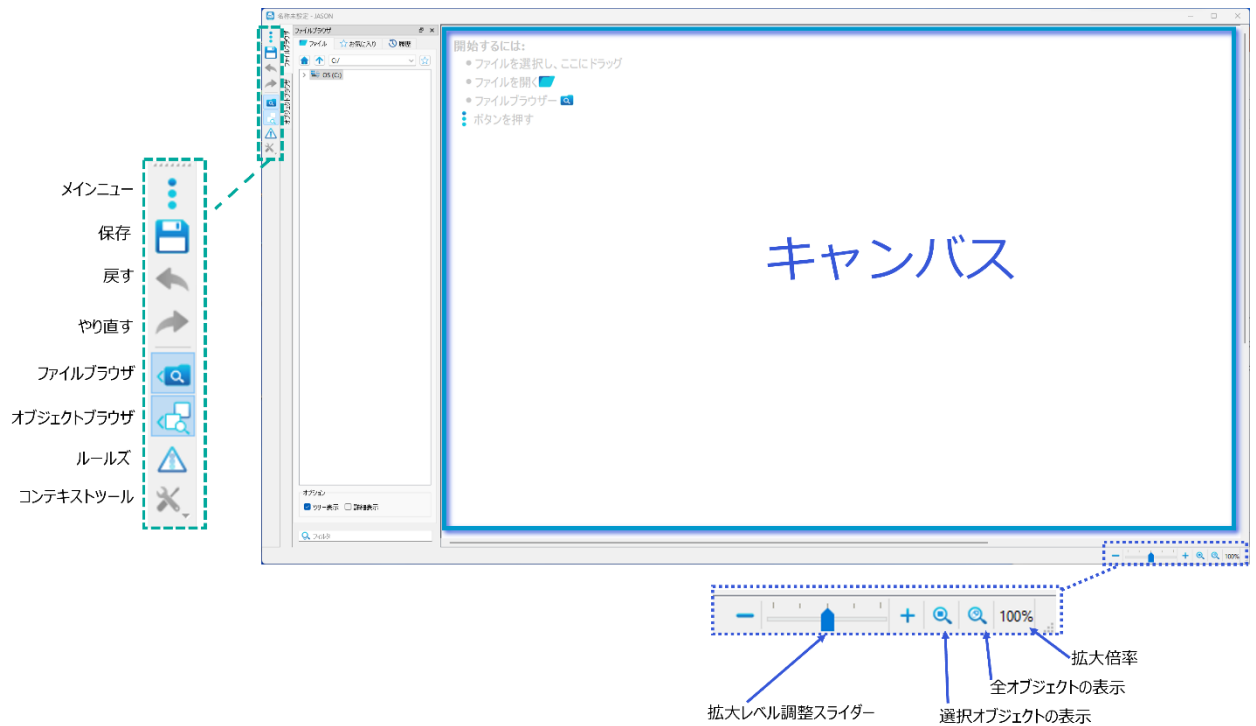


Figure 1: JASON を立ち上げた時の画面

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 (Figure 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. **ルールズボタン** : ルール パネルが開き、ユーザーはルールを作成または選択できるようになります。

**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。

マウスを右クリックして**メイン メニュー** -> **新規** -> **テキスト**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に貼り付けるか、ファイル ブラウザから開くことができます。

キャンバス上のアクティブな項目に注釈を追加するには、項目を右クリックし、メニュー リストから「注釈」を選択します。

右下隅にはズーム コントロールがあります。これについては、データの表示と操作のコンテキストで説明します (セクション 3 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、メイン メニューの 3 つのドット ボタンからアクセスでき、使用可能なすべてのプラグインが表示されます。

プラグインを有効または無効、自動更新を有効にするなどのプロパティを設定できます。

[プラグインの詳細] 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の更新が利用可能な場合は、[バージョン] セクションで強調表示されます。

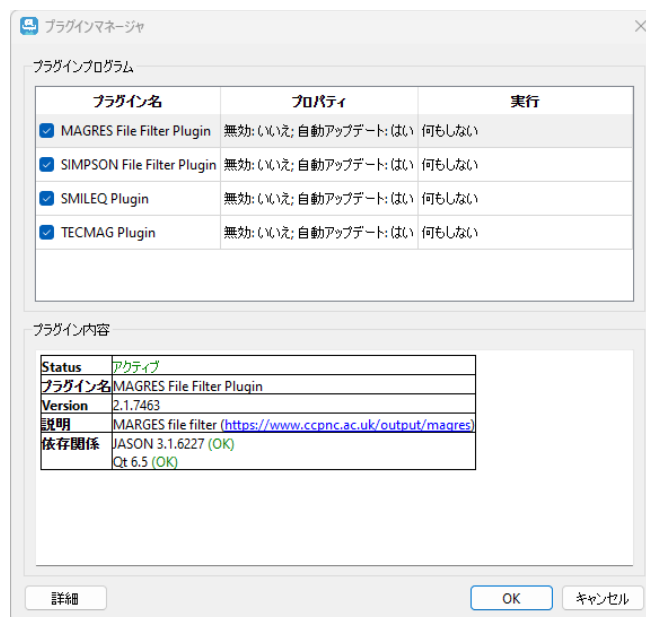


Figure 2: プラグインマネージャー

## 2 データの読み込み

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 (Figure 3)。
2. メイン メニューの [開く] オプションを使用して選択したファイルに移動し、[開く] をクリックします。
3. ファイル ブラウザの切り替えボタンを使用してファイル ブラウザを表示し、それを使用して関連するファイルに移動します。

### 2.1 Windows エクスプローラーからの読み込み

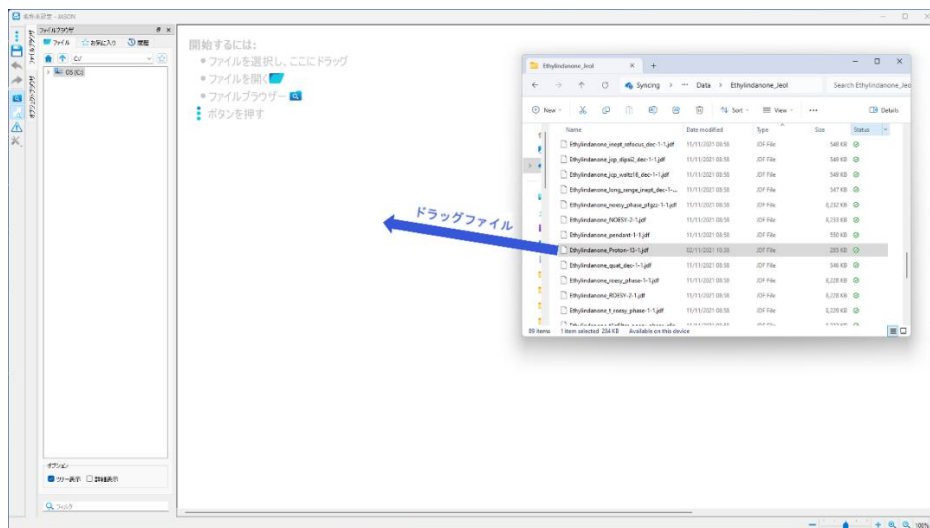


Figure 3: Windows エクスプローラーからファイルを読み込む

適切なデータ ファイルまたはフォルダは、標準の Windows ファイル エクスプローラー ウィンドウからキャンバスにドラッグ アンド ドロップするだけです。Windows エクスプローラーの [開く] オプションを使用して、選択したソフトウェアとして JASON を選択することもできますが、この場合、既存のキャンバスにデータがロードされるのではなく、新しいインスタンス (キャンバス) が立ち上がることに注意してください。

ZIP アーカイブも、JASON にドラッグ アンド ドロップするだけで済みます。JASON は、開くことができるすべてのファイルを自動的に抽出します。

## 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。このブラウザを使用して、ファイルを選択またはダブルクリック、またはキャンバス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むことができます。

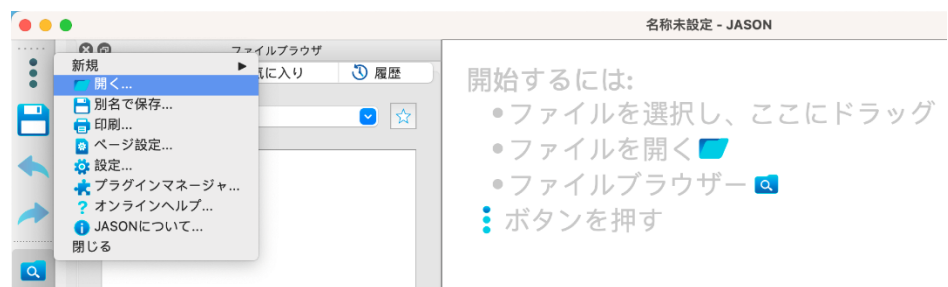


Figure 4 : メインメニューからの読み込み

## 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」トグル ボタンを使用すると、ファイル ブラウザを JASON で表示できます。デフォルトでは、キャンバスの左端に表示されます (Figure 5)。JASON のレイアウトは構成可能であり、ファイル ブラウザは、ファイル ブラウザ フレームの上部にある名前バーを使用してブラウザ全体をドラッグするだけで、キャンバスの任意の端に切り離したり再接続したりすることができます。

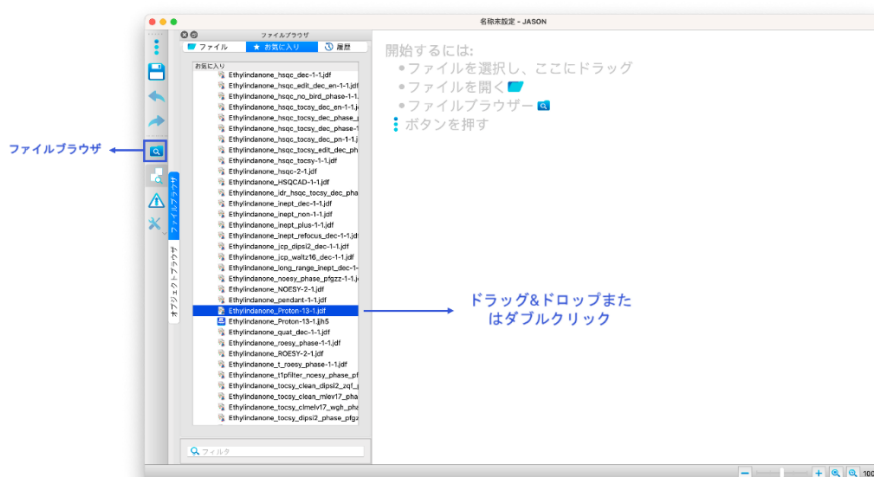


Figure 5: ファイルブラウザからの読み込み



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。

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（Figure 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。

各パネルはタブを左クリックすることで開くことができます。「ファイル」パネルで複数のファイルを選択するにはシフトを押しながら 2 番目のファイルを選択し、その間にあるすべてのファイルを選択するか、コントロールを押しながら個々のファイルを選択します。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。

「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。

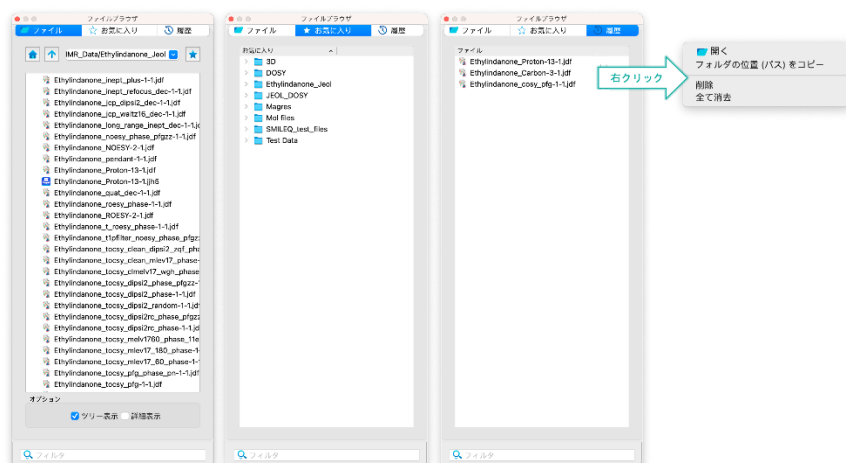


Figure 6: ファイルブラウザタブ

## 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グ(グラブタグ)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。キャンバス上のアイテムのサイズを変更または移動すると、ページの端にスナップされるか、同じページ上の他のアイテムの端に相対的にスナップされます。自由な配置とサイズ変更を行うには、Ctrl を押したままにします。キャンバス オブジェクトの操作方法の詳細については、次のセクションで説明します。

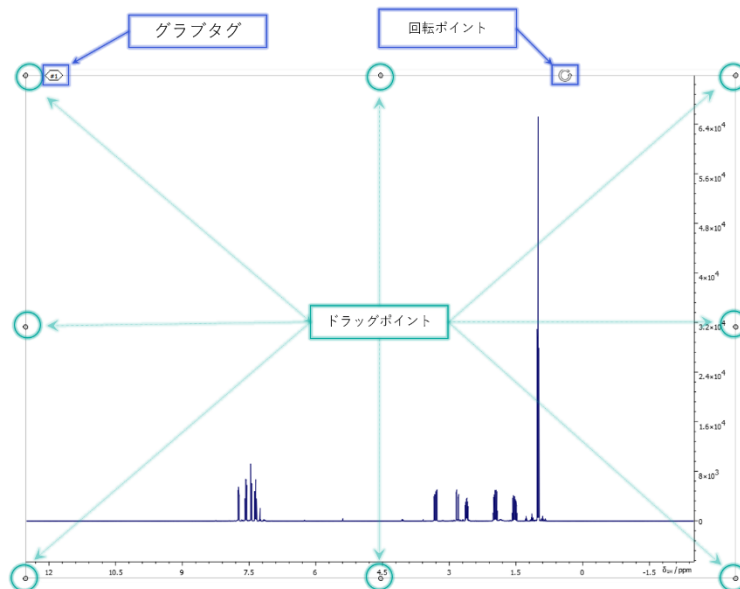


Figure 7: オブジェクトを移動および再スケーリングするためのタグとドラッグポイント

※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それらのキャンバス上の配置は、オブジェクトファイルを開く方法によって決まります。ファイルをキャンバスの空白部分に直接ドラッグ&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又は複数ファイルを選択してドラッグ&ドロップして開くと、オブジェクトの作成は、設定オプションの [一般] セクションで定義されている [キャンバス] タブのレイアウト設定に従い、自動的に配置されます (Figure 8)。設定オプションは、JASON の左上隅にあるメインメニュー、またはキャンバス上でマウスの右クリックのメニューからアクセスできます。これについては、5.1.2 キャンバス を参照ください。

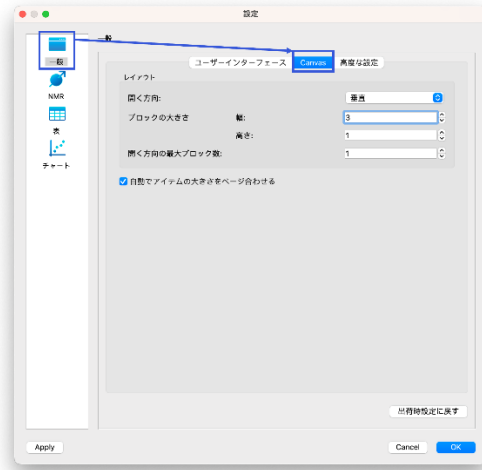


Figure 8: Canvas レイアウト設定

### 3 データ操作の概要：表示、処理、解析

データが JASON に読み込まれると、オブジェクトに依存してさまざまな機能をもつパネルが関連づけられます。このセクションでは、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について説明します。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、コンテキストに依存するパネルがいくつか開きます。たとえば、Figure 9 は 1D NMR スペクトルの典型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

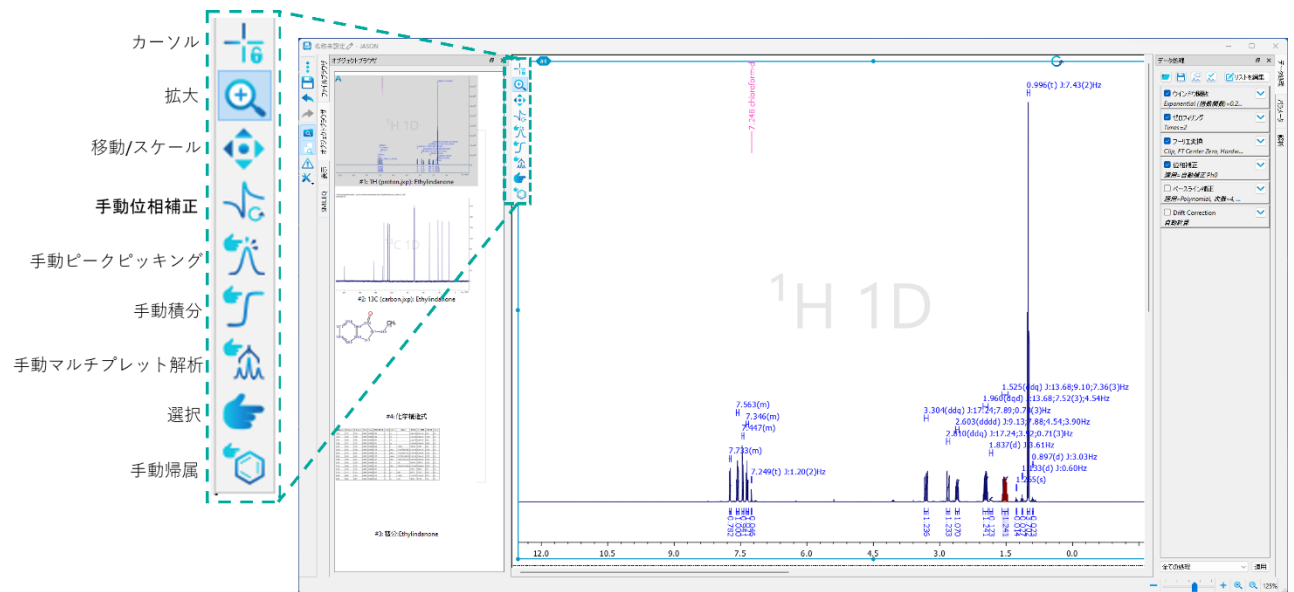


Figure 9: コンテキストツールバー（オブジェクトが NMR スペクトルの場合）

JASON で 1 つのオブジェクトを選択すると、Figure 9 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 スペクトルでは一般的な機能がいくつかあります。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、マウスホイールをスクロールすると、スペクトルの強度が増減します。

**カーソル(C)** :カーソルモードでは、マウスがおかれた位置を表示できます。アイコンの選択中はスペクトルの拡大縮小、移動はロックされています。同核 2 次元スペクトル (COSY、TOCSY、NOESY、ROESY) を解析する際はスペクトルの対角線上にカーソルを置き、水平方向または垂直方向に移動すると、関連するクロスピークを特定するためのボックスが表示されます。

また、

**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。

**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。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。(Figure 10 緑色の線)

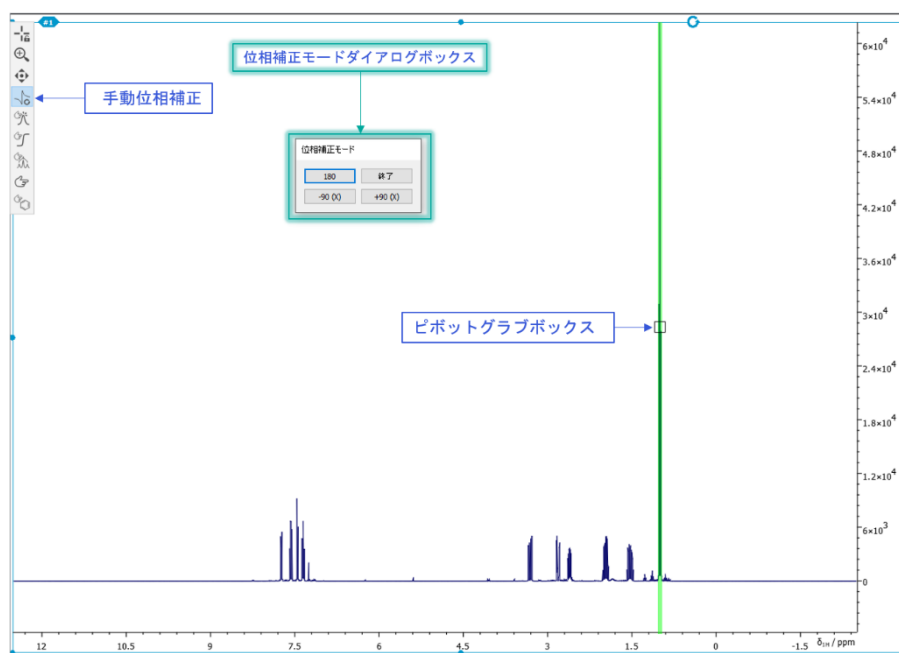


Figure 10: 手動位相補正モード

ピボットポイント (PP) は、緑色のピボットライン上のグラフボックス (□) 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ます。一次位相補正 (P1) 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。位相補正モードダイアログボックスには、"180"、"Finish"、"-90(x)" 及び "+90(x)" の 4 つ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  $180^\circ$  反転します。"終了" ボタンをクリックすると、位相調整モードが終了します。

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。(Figure 11)

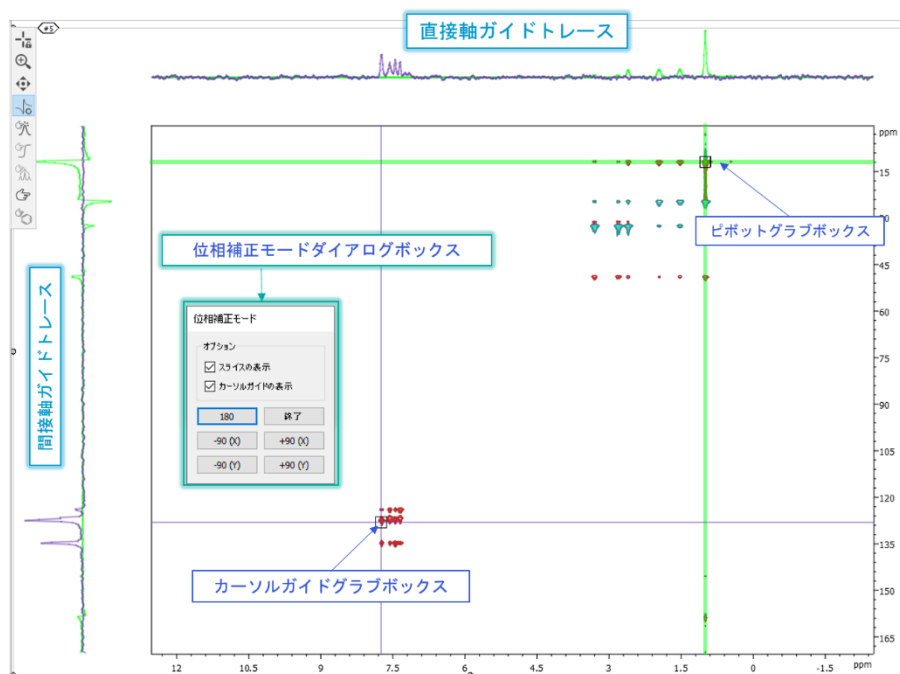


Figure 11: 手動 2D 位相補正

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 0 次位相 (補正) と同じように行われますが、このときはマウスの左クリックではなく、右クリックのドラッグを行います。Ctrl を押しながら位相調整を行うと、位相変化をより細かく制御することができます。

位相補正モードダイアログボックスには、“180”、“Finish”、“-90(x)”、“+90(x)”、“-90(y)”及び“+90(y)”の6つ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。“終了”ボタンをクリックすると、位相調整モードが終了します。”

“スライスの表示” “カーソルガイドの表示” チェックボックスでは、ガイドトレース及びカーソルの表示・非表示が切り替えられます。

**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、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（Figure 12）。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。

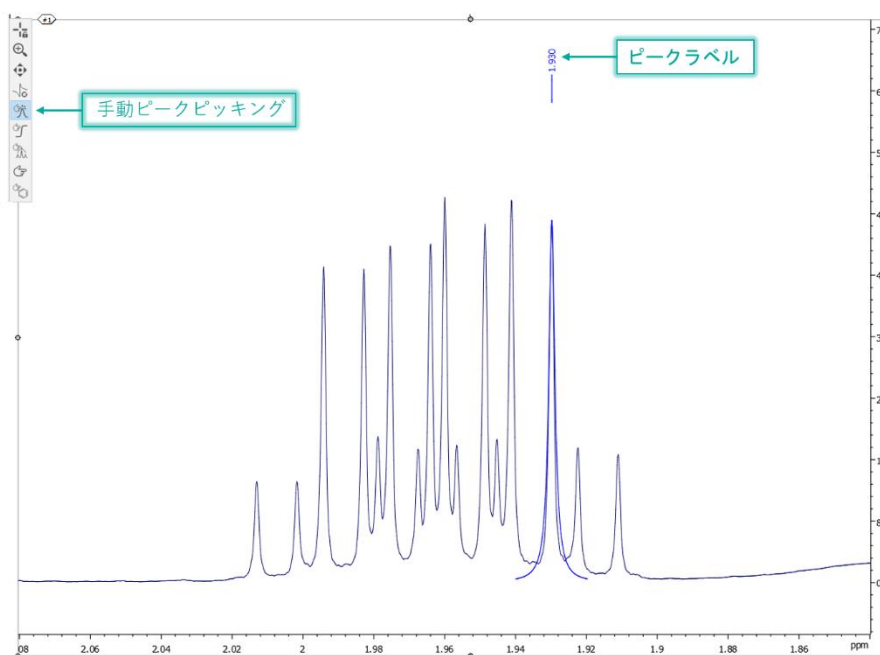


Figure 12: 手動ピークピッキングモード

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。表をクリックし、メニューからチャート作成オプションを選択すれば、データをチャートとして表現することもできます。チャートについては、チャートのセクション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。

**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（Figure 13）。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。

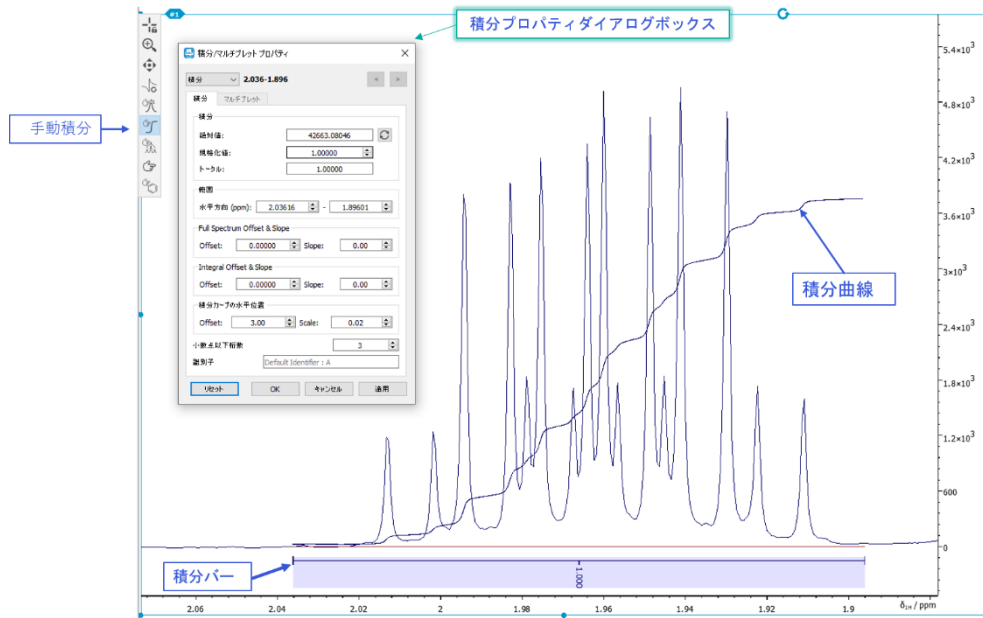


Figure 13: 手動積分モード

**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 (Figure 14)。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。

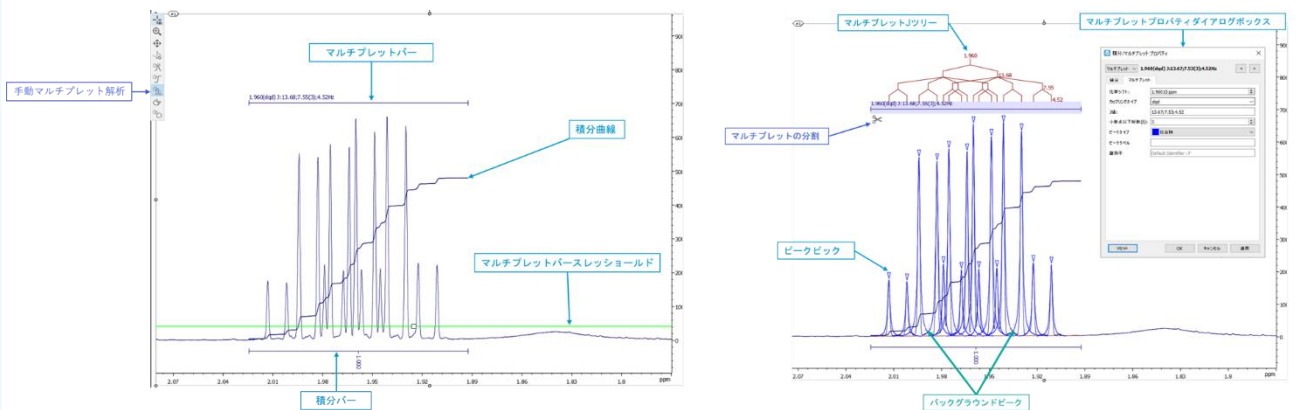


Figure 14: 手動マルチプレット解析モード



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ー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。ピークピー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ーキングを実行します。マルチプレットに関する情報は、ピーク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うすい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。

**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

**手動アサインメントツール (A)** : 手動アサインメント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、構造内の原子にアサインします。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

参考動画 : [https://youtu.be/K32\\_dbH8gmA](https://youtu.be/K32_dbH8gmA) JASON をはじめよう : パネルについて

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（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）を Figure 15 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、好みに応じて再配置できます。パネルは、Figure 15 のように互いに積み重ねることも、Figure 16 のように垂直に積み重ねることもできます。

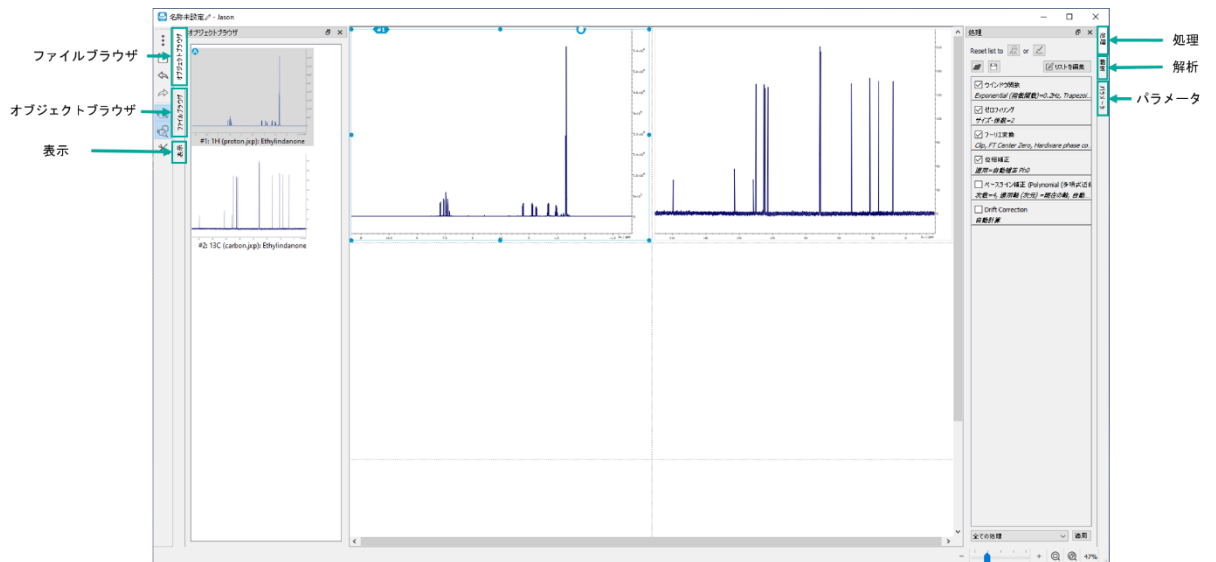


Figure 15: NMR スペクトルのコンテキストツールパネル

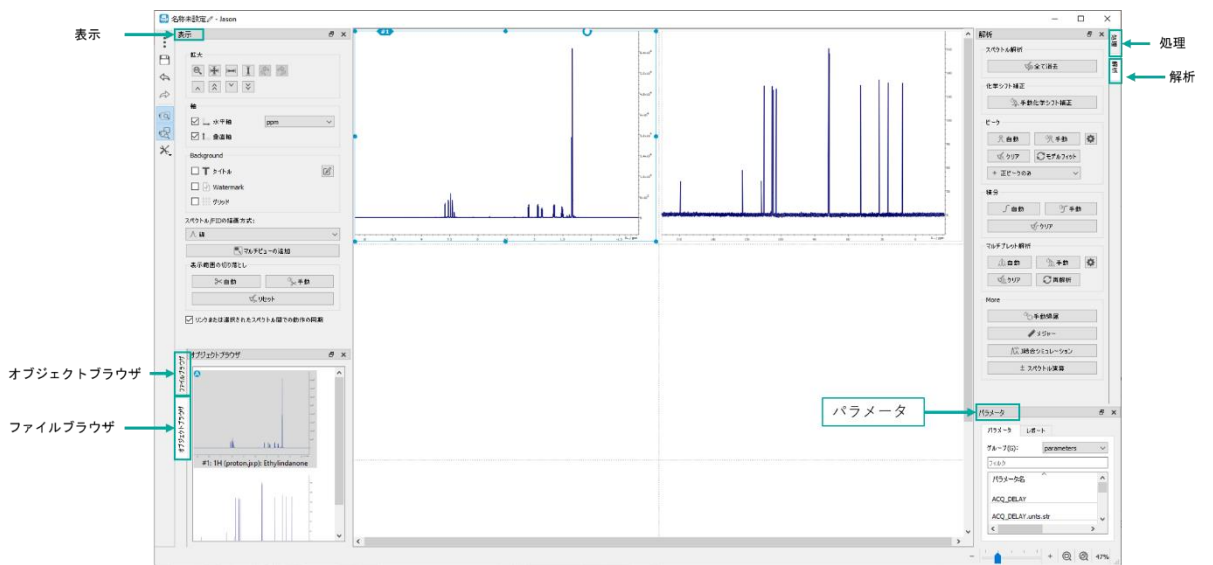


Figure 16: パネルの別表示（垂直）

### 3.3 オブジェクトブラウザ

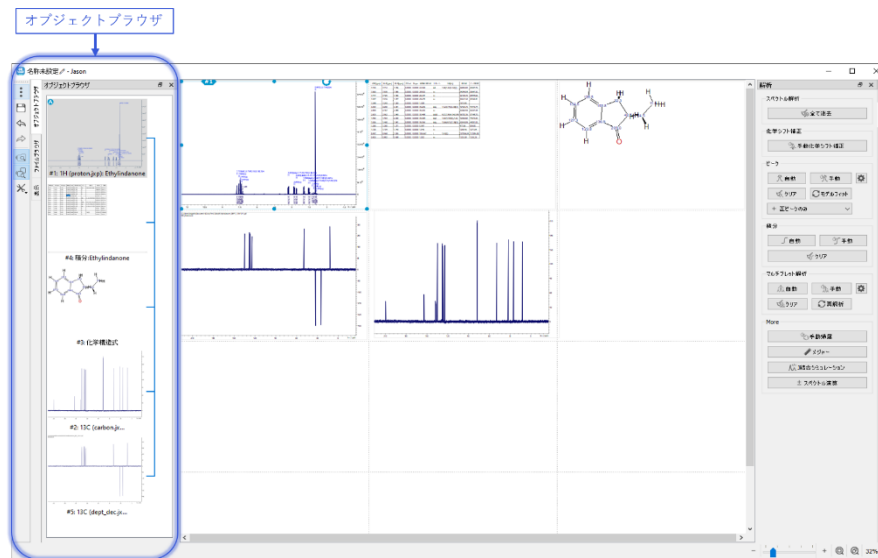


Figure 17: オブジェクトブラウザ

オブジェクトブラウザは、キャンバス上のすべてのオブジェクトの視覚的なリストになります。（Figure 17）

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、キャンパス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 17 には、オブジェクトブラウザ上で  $^1\text{H}$  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で該当のスペクトル（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アイテムを右クリックすると、「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。1 つは、キャンパス（とオブジェクトブラウザ）からオブジェクトを削除するものです。これは、アイテムを選択して delete キーを押しても可能です。2 番目のオプションは、複数のオブジェクト間のリンクの編集を行うオブジェクトリンクダイアログを開きます（図 18）。

オブジェクトリンクダイアログは 2 つのパネルからなり、左側のパネルには現在のアクティブな選択項目が、右側のパネルにはアクティブな選択項目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、その名前の横にあるチェックボックスにチェックを入れることで選択することができます。OK を押すと、オブジェクト間のリンクが形成され、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。

ピーク、積分値、マルチプレットのテーブルを作成した場合は、対応するスペクトルから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の表示領域の右側に青色の接続線として表示されます。

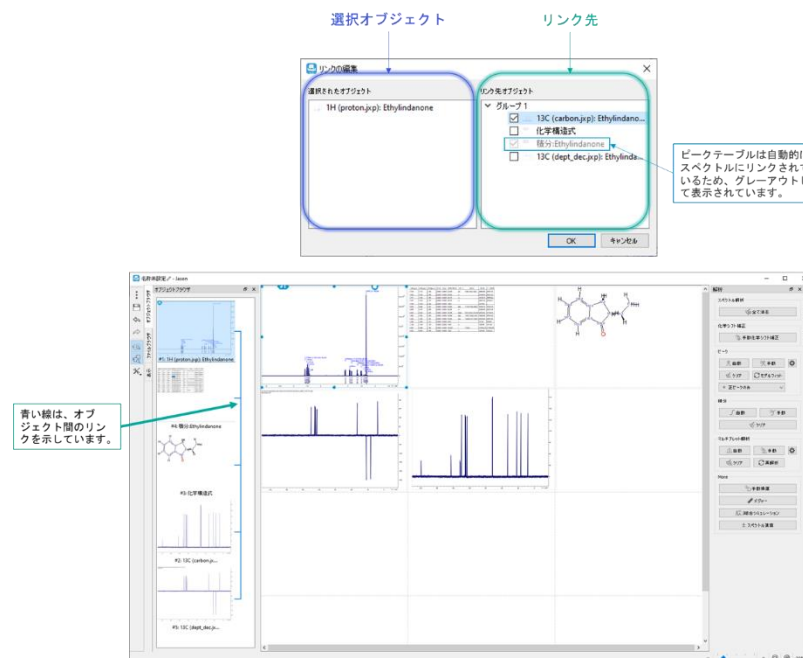


Figure 18: オブジェクトリンクのブラウザ

### 3.4 表示パネル

「表示」パネルには、キャンパス上でオブジェクトを表示する方法のオプションが含まれています。これは状況依存であり、このセクションではスペクトルの「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 Figure 19 に示します。

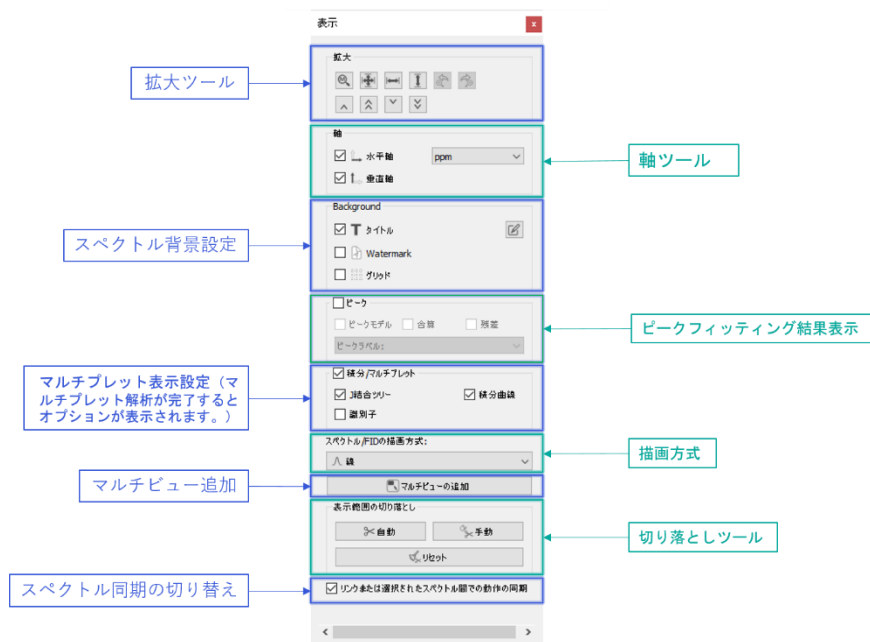


Figure 19: 表示パネル

Figure 19 は 1D スペクトルの表示パネルです。

**拡大ツール：** 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。

**軸ツール：** 軸の表示/非表示の切り替えや単位の変更ができます。

**スペクトル背景設定：** スペクトルの背景に表示するものを選択します。

**ピークフィッティング結果表示：** 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できます。

**マルチプレット表示設定：**有効にすることで、マルチプレット解析実行後スペクトルに、マルチプレットラベル、積分値ラベル、J 結合ツリーをそれぞれ表示します。

**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：

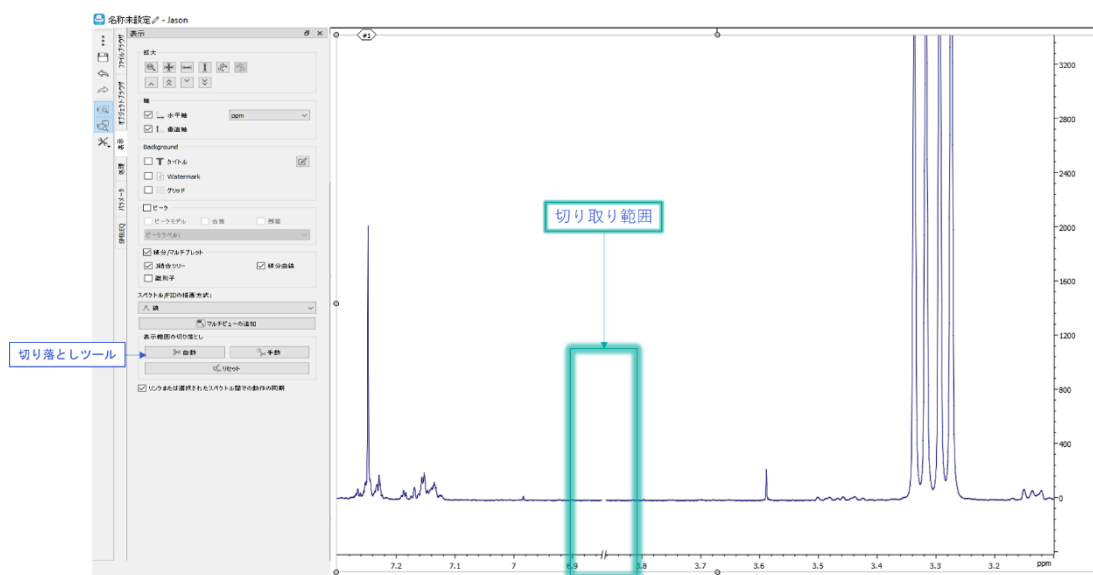


Figure 20: 1D スペクトルの切り落とし例

この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

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、Figure 20 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 (Figure 21)。

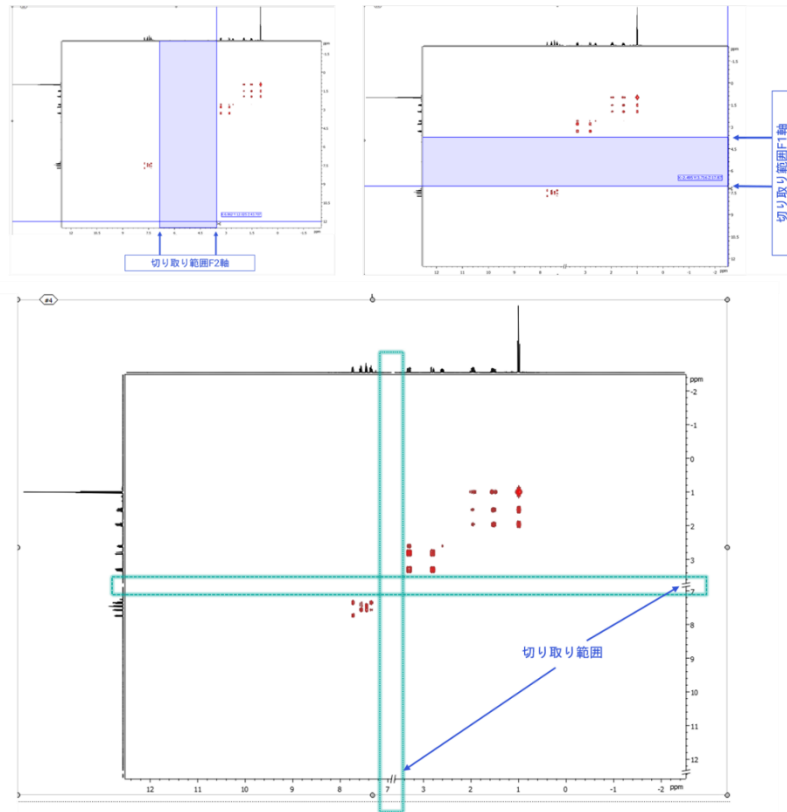


Figure 21: 2D スペクトルの切り落とし例

Figure 21 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"は 1D のみ対応です。

**リンクまたは選抜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出来ます。2D スペクトルの表示オプションは Figure 22 に示すように、2D スペクトルには以下の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。2次元スペクトル（両次元でフーリエ変換）の場合、等高線プロットまたはラスタープロットにすることができます。擬似2次元データ（直接次元 F2 でフーリエ変換）の場合は、オーバーレイプロットまたはスタックプロットにすることができます。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。

軸コントロールには、ドロップダウン ボックスの形式で追加のオプションがあります。このオプションは、2D スペクトルの端にプロットされる内容（JASON では「サイドビュー」と呼ばれます）を決定します。オプションは次のとおりです。1) 合計（軸に応じて、行または列全体のすべてのポイントの合計）。2) スカイライン（各行または列の最大値）。3) スペクトル（ユーザーはキャンバスから 1D スペクトルを選択できます）。4) トレース（ユーザーはクロスヘア カーソルを使用して 2D スペクトルから特定のトレースをプロットできます。軸投影には複数のトレースをプロットできます。

サイドビューは、マウスのスクロール ホイールを使用して拡大縮小でき、Shift キーを押しながらスクロール ホイールを使用して上下に移動できます。

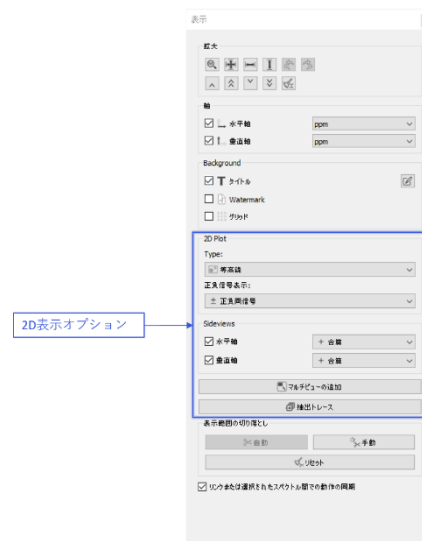


Figure 22: 表示パネルの 2D スペクトル用オプション



### 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処理チェーンのすべてのステップが含まれています。Figure 23 は、1D NMR スペクトルの一般的な処理リストを示しています。このセクションでは、ユーザーが通常の NMR 処理に精通していることを前提としています。

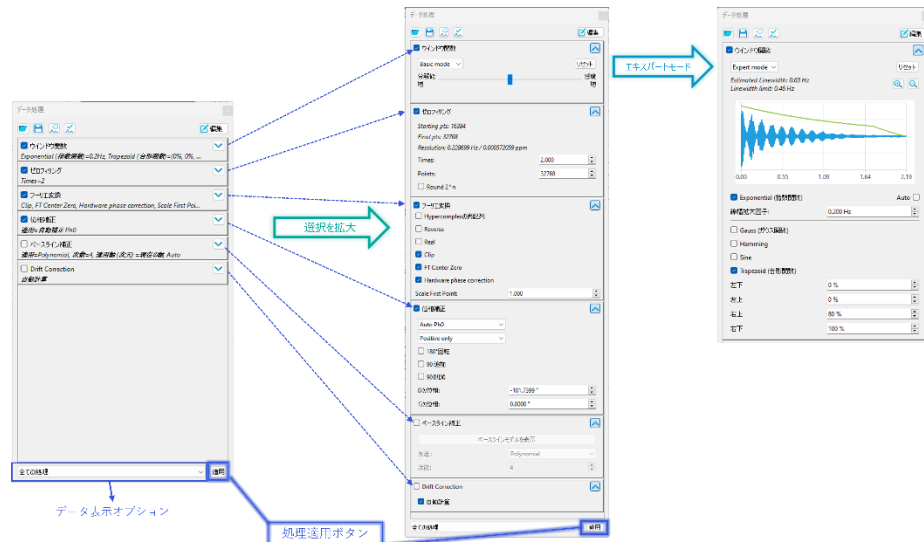


Figure 23: 処理パネル

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。処理リストのすべての項目には、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。名前の右側のボタンを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。

**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。エキスパートモードのパネルには、FIDとウィンドウ関数詳細設定が表示されます。

**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) 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) 指定補正值：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)指定補正值と 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。指定補正值モードでは、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、これは実質的にすべてのピークを反転させることとなります。

**Polynomial ベースライン補正**：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。使用する多項式の次数はこのパネルで変更することができます。手動ベースライン補正を選択する場合は、手動をクリックします。このオプションを選択すると、「インタラクティブ」ボタンが有効になります。「インタラクティブ」ボタンをクリックすると、ユーザーは手動でベースライン補正を行うことができます。手動ベースライン ポイントを操作したり、そのパラメータを変更したりするためのインタラクティブ ツールが多数あります。必ずカスタムベースラインポイントの左端ボタンを選択し、ポイント位置を確認します。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。インタラクティブ ボタンとコントロールの上にマウス カーソルを置くと、機能の簡単な説明のツールヒントが表示されます。

**データ表示オプション**：データを表示を切り替えることができます。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。

**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、保存されている処理リストを読み取って、それを自動で適用しようとします。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（Figure 24）。「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。新しい手順をリストに追加するには、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だけです。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 キーを押します。選択が完了したら、OK ボタンを押すと処理リストが更新されます。

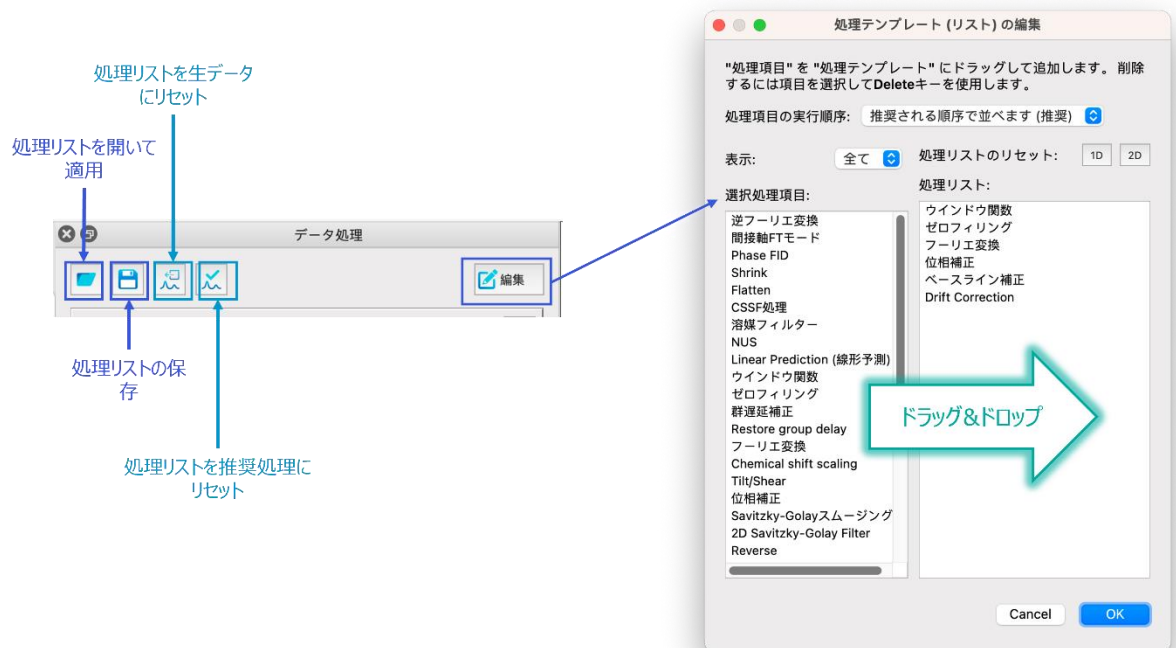


Figure 24: 処理テンプレートの編集

**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（Figure 24）。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。

**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。Figure 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。

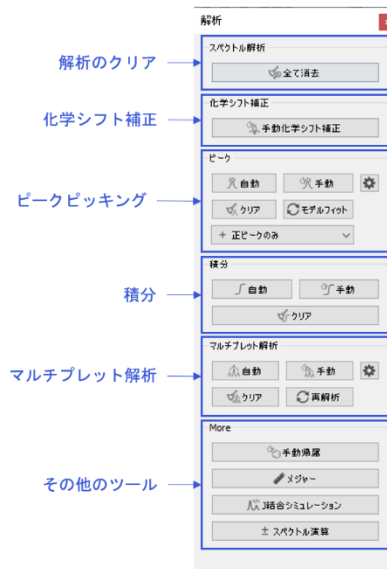


Figure 25: 解析パネル

**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。

**化学シフト補正(R):** レ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、左クリックでレ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 キーを押したままにしてください。

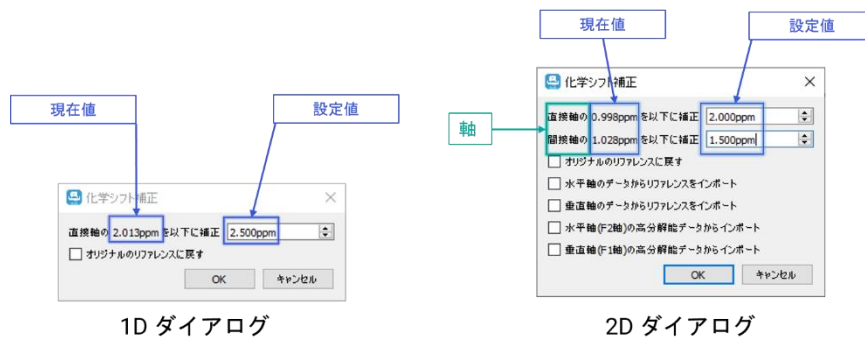


Figure 26: リファレンスダイアログ

リファレンスダイアログを Figure 26 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。値を入力し、OK をクリックすると、スペクトルは新しい基準位置が適用されされます。

**ピークピッキング**：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。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。この時のしきい値は、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。Fit model ボタンにより、フィッティングモデルの変更（ピークの削除/追加、ピークテーブルのパラメータ変更）、または現在のモデルのフィッティングをさらに強制的に繰り返すことによって、フィッティングを改良することができます。

ピークピックのターゲットとして、正のピークのみ、負のピークのみ、または正と負両方のピーク、これらの内のいずれかを設定することが可能です。クリアボタンにより、ピックしたすべ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。ここでフィッティングモデル、ピーク識別方法などの設定が出来ます。

**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のグループを含む領域にスペクトルを分離しようとしています。積分領域とラベルの操作は、クリアボタンは、スペクトル全体のすべての積分をクリアします。

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。

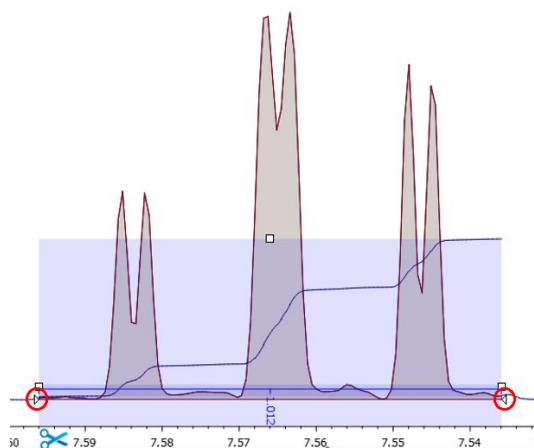


Figure 27: 積分ベースラインのコントロール位置

**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になります。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るにもかかわらず、ピークピッキング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。変更後、再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。

**More：**そのほかのツール

**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。原子は、マルチプレットの中心化学シフト、そうでなければ個々のピークの位置に割り当てられます。

**メジャー (D)：**このモードを選択すると、スペクトル上の2点間の正確な距離をはかることができます。開始点は、マウスをスペクトル上の任意の点に移し、マウスの左ボタンを少しの間押し続けることによって選択されます。距離測定は、開始点から終了点までマウスをドラッグすることによって行われます。1次元スペクトルのデフォルトモードでは、始点・終点はカーソルから最も近いピークの頂点が選択されますが、Ctrl キーを押しながらやると位置を自由にとることができます。測定が行われると、測定の開始点には開始座標のラベルが作成され、終点には2番目のラベルが作成されます。終点ラベルには終点の座標と終点と始点の座標の差分が記載されます (Figure 27)。メジャーモードが選択されると、メジャーパネルがコンテキストツールパネルに追加されます。Single モードでは新しく距離測定が行われると、前の結果は削除されます。Multiple モードでは、各測定の結果の表示を維持します。

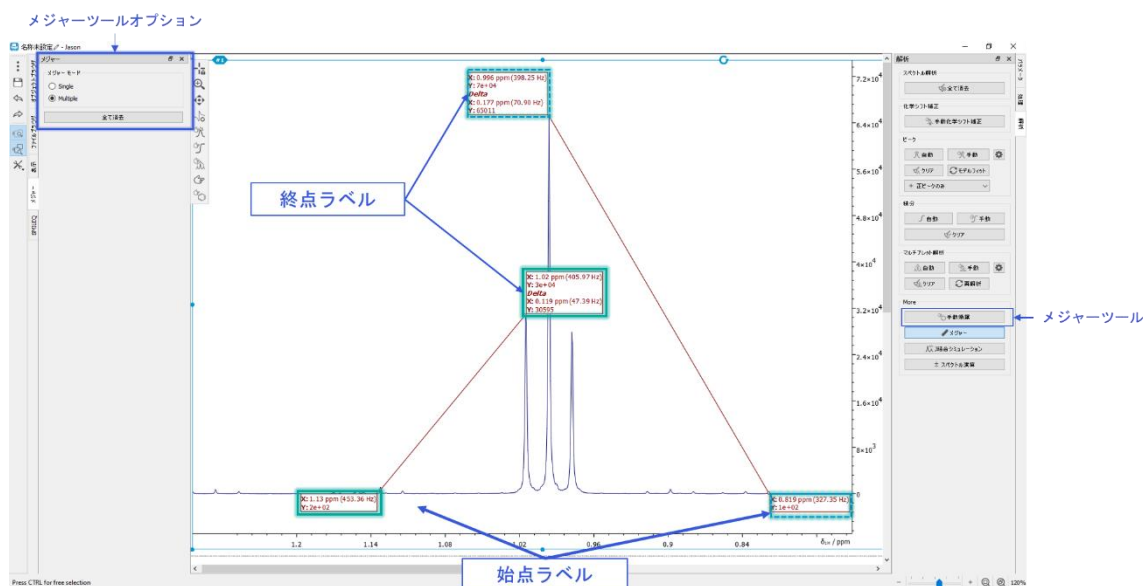


Figure 28: メジャーツール

全て消去ボタンは、現在の測定値をすべて削除します。特定の結果を削除したい場合は、測定線の 1 つにカーソルを近づけることで、赤い十字マークが表示され、それを選択すると削除することができます。

**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**： 演算パネルを表示し、スペクトル演算ができます。

### 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います。パラメータタブは選択されたデータで利用可能なすべてのパラメータのリストで、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すべてのパラメータのリストです。Figure 28 は典型的な 1 次元 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。

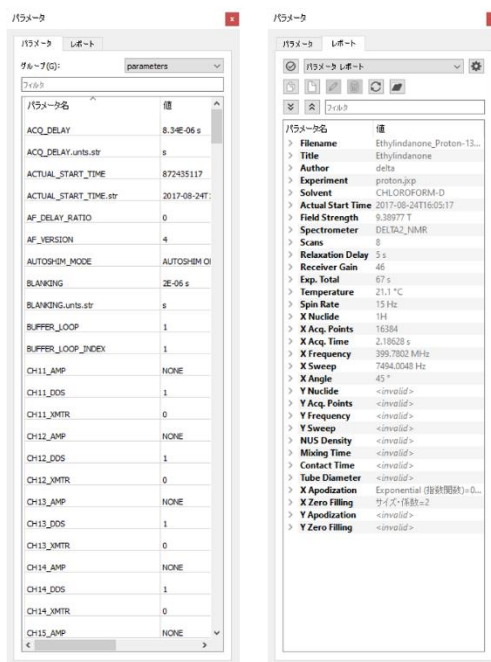


Figure 29: パラメータパネル

### 3.8 テーブルツールパネル

テーブルを作成すると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、「出荷初期状態」ボタンをクリックして工場出荷時の設定に戻るか、「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。



Figure 30: 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 (Figure 30)。

「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。

「本体」タブには、表の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。このパネルでは、表に表示する項目（列）を選択することができます。また、表中の文字のフォントやサイズ、各数値の小数点以下の桁数を変更することができます。本体タブでチェックボックス「改ページ時の分割」をオンにすると、表が複数ページをカバーする大きさに変更された場合に表が分割表示されます。

「セル」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る。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。

グラフが作成され、アクティブ アイテム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、グラフの表示方法をカスタマイズできます。

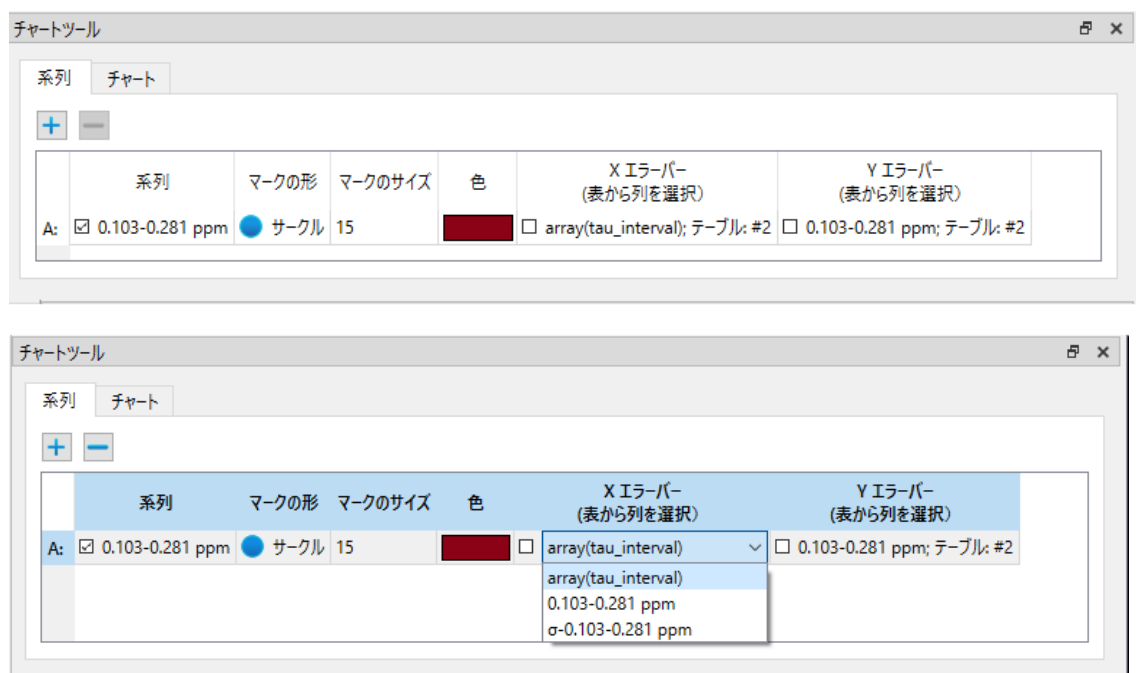


Figure 31: テーブルツールパネル、シリーズタブ

[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（Figure 31）。

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」コ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コ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すべての変更は、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。対応するボタンは'Axes Ranges'セクションにありますし、ショートカットキーの組み合わせで実行することもできます：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。

軸のプロパティをデフォルトに設定するためのコントロールは、'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/やり直しスタックに統合されています。

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'ボタンで新しい設定を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（Figure 32）。

チャート表示パラメータ のその他の設定は'Global Settings'ダイアログの'Chart'タブにあり、'Table'タブの設定と同様に、これらの設定はデフォルト設定に影響するが、現在アクティブなチャートには影響しない。

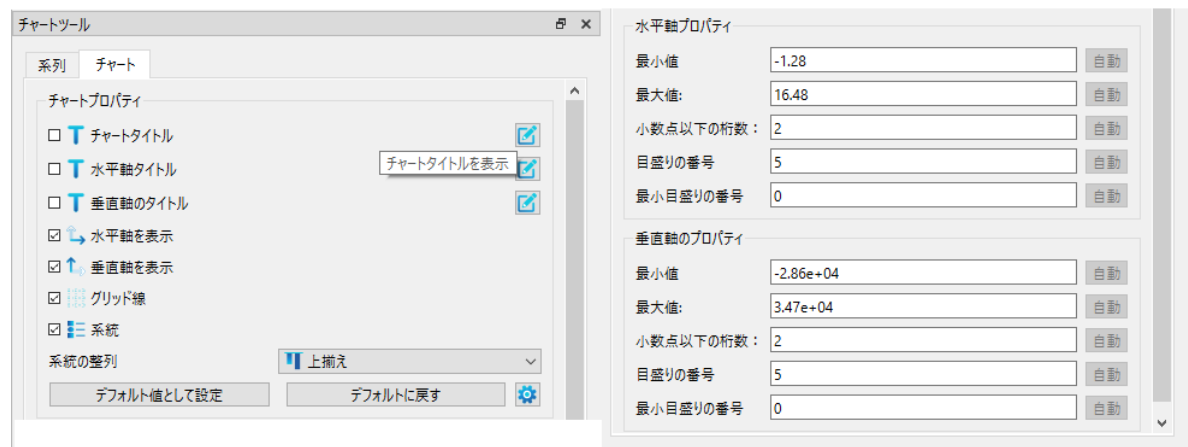


Figure 32: テーブルツールパネル、チャートタブ

## 4 レポート：テーブルとパラメータ

ピークピッキングや積分、一連のマルチプレット解析を実行した場合、そのデータをテーブルの形で表示することができます。このセクションでは、JASON で作成することのできるテーブル・レポートと印刷について説明します。

### 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、メニューを表示させます。メニューの一番下には、5つのオプションを含む作成メニュー（パラメータレポート、処理テーブル、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）があり、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選択が可能となります。

テーブルをコピー/ペーストするには、そのテーブルを選択し、ショートカットキーCtrl+C 及び Ctrl+P により、それぞれコピー & ペーストをすることができます。行またはセルが選択されている（青いハイライト）場合は、これらの項目のみがコピーされます。Ctrl + 列のヘッダーをクリックすると、列全体が選択されます。

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のタイトルは「Peak Table from #3」となります。表のタイトルは、スペクトルのタイトルと同様に、タイトルをダブルクリックすることで編集可能です。

表の境界線とグリッドは、Table Tools 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。デフォルトのボーダーとグリッドは、Settings メニューから設定できます。

Changing the column width manually is an action supported by Undo/Redo. 手動で列幅を変更する操作は、Undo/Redo でサポートされています。

### 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 (Figure 33)。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。grab 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。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 (Figure 34) 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。

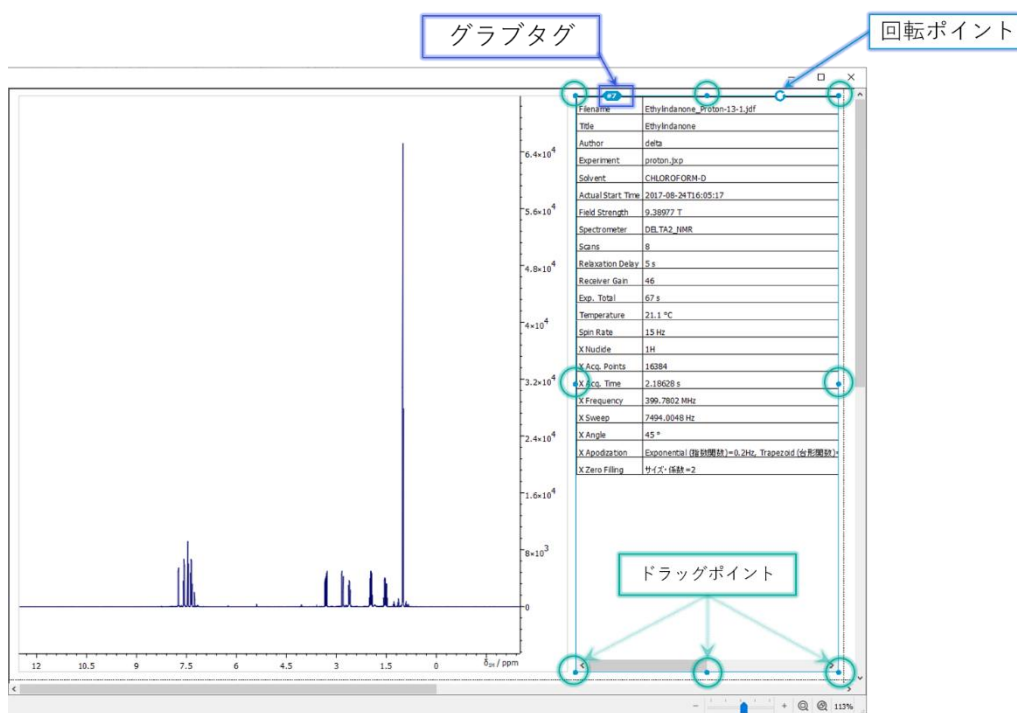


Figure 33: パラメータテーブル

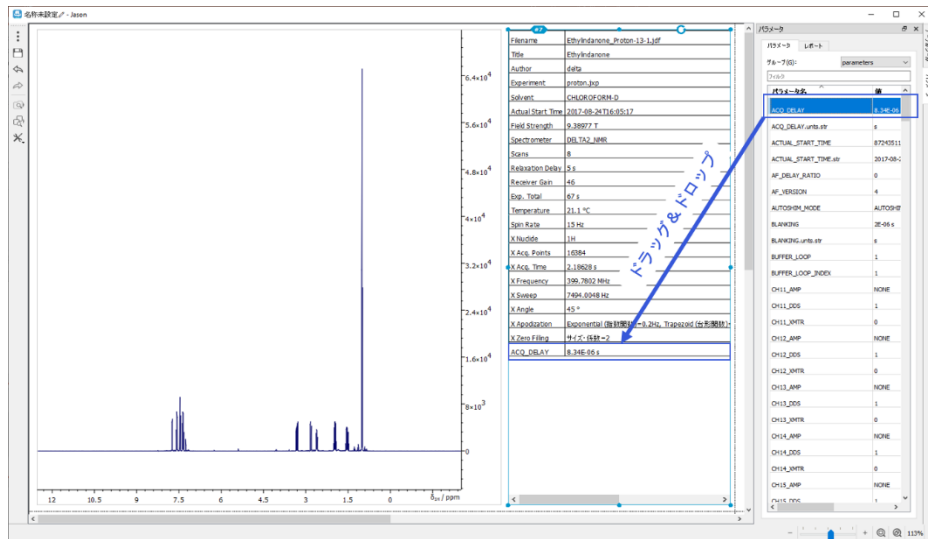


Figure 34 パラメータテーブルへの追加

## 4.1.2 処理レポート

「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（Figure 35）。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。

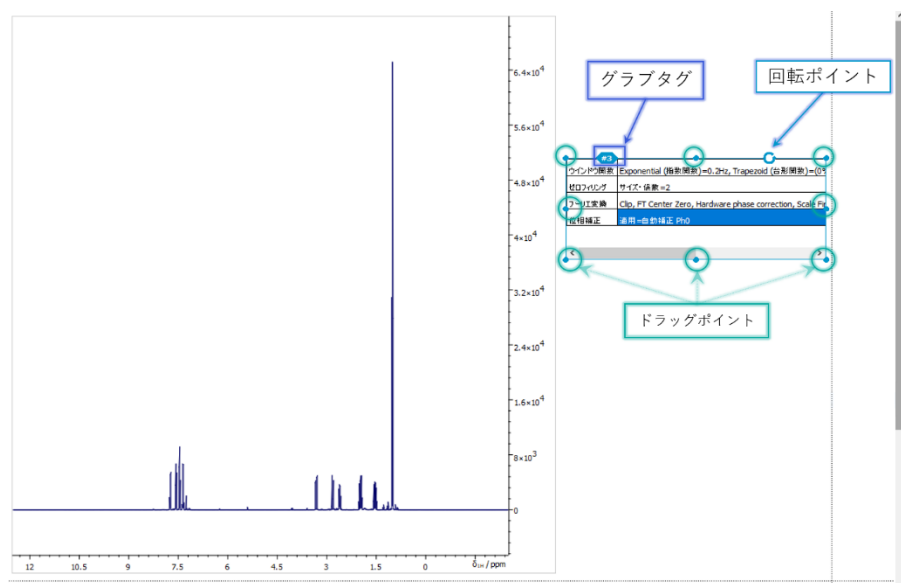


Figure 35 : 処理レポート

### 4.1.3 ピークテーブル

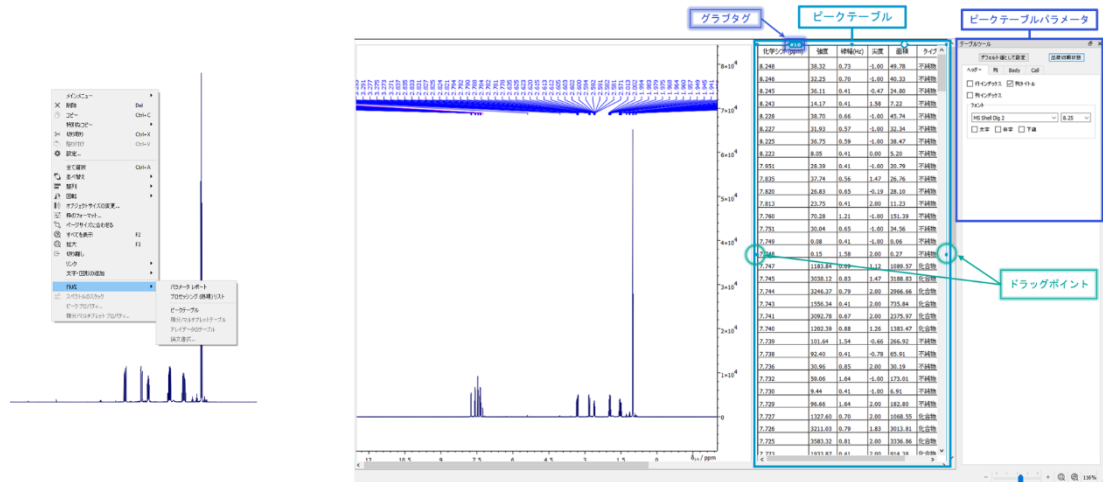


Figure 36: ピークテーブル

ピークが選択されると、マウスの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] オプションが表示されます (Figure 36)。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。テーブルは、グラフ タグを使用してテーブルの位置を移動したり、ポイントをドラッグしてテーブルのサイズを変更したりして操作できます。テーブルを含むボックスがテーブルのサイズより小さい場合は、テーブルに水平方向と垂直方向の両方に移動するためのスクロールバーが表示されます。テーブルに加えて、[ピーク テーブル パラメータ] 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。テーブル内の文字のフォントとサイズ、および各値に表示する小数点以下の桁数を変更できます。[ページ区切りで分割] チェックボックスをオンにすると、テーブルのサイズを変更して複数のページをカバーする場合にテーブルが分割されます。

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だけで変更できます。

### 4.1.4 積分/マルチプレット解析テーブル

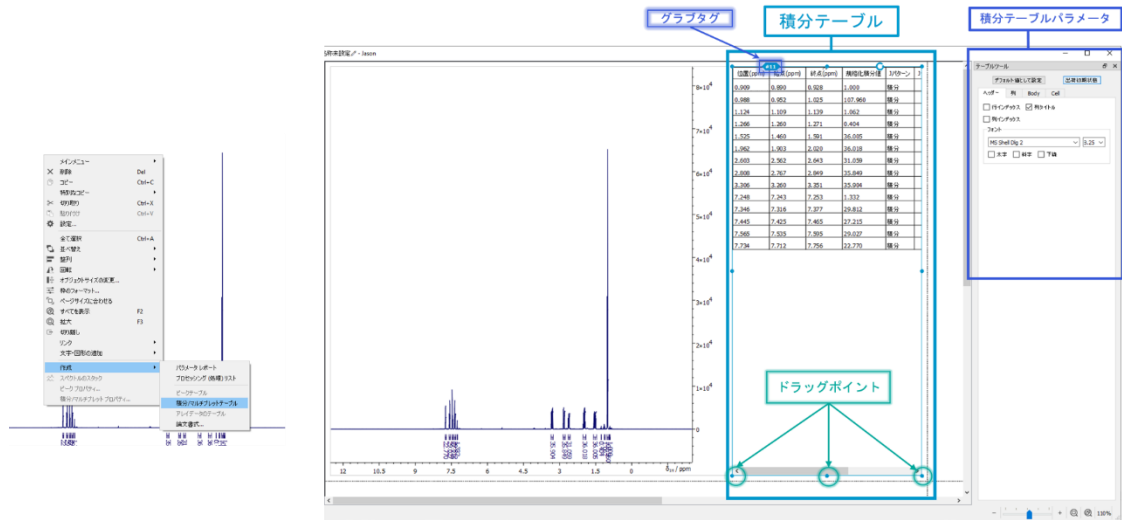


Figure 37: 積分テーブル

積分が作成されると、マウスの右ボタンのコンテキストメニューの [作成] メニューに積分/マルチプレット解析テーブルのオプションが表示されます (Figure 37)。このオプションをクリックすると、スペクトルの横に積分のテーブルが作成されます。テーブルの位置を移動するにはグラブ タグを使用し、テーブルサイズを変更するにはポイントをドラッグします。テーブルを含むボックスがテーブルサイズより小さい場合は、テーブルに水平方向と垂直方向の両方に移動するためのスクロールバーが表示されます。テーブルに加えて、[積分表パラメータ] 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。テーブルの文字のフォントとサイズ、および各値の小数点以下の桁数を変更できます。[ページ区切りで分割] チェックボックスをオンにすると、テーブルサイズを変更して複数のページをカバーする場合に表が分割されます。

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だけで変更できます。

マルチプレット解析が実行されている場合は、[作成] メニューの [積分/マルチプレット解析] オプションを選択すると、マルチプレット解析テーブルが表示されます。これは積分テーブルと同じですが、マルチプレットタイプが実行された場合は、特定されたマルチプレットタイプと J カップリングに関する情報が含まれます。



### 4.1.5 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 テーブルに加えて、マルチプレット解析の情報は、[作成] メニューのオプションを使用してマルチプレット レポートとして表示することもできます (Figure 38)。レポートは学術雑誌で使用されるスタイルで、JASON から原稿に切り取って貼り付けることができます。このオプションを選択すると、使用可能なジャーナル形式のドロップダウン リストが表示されます。

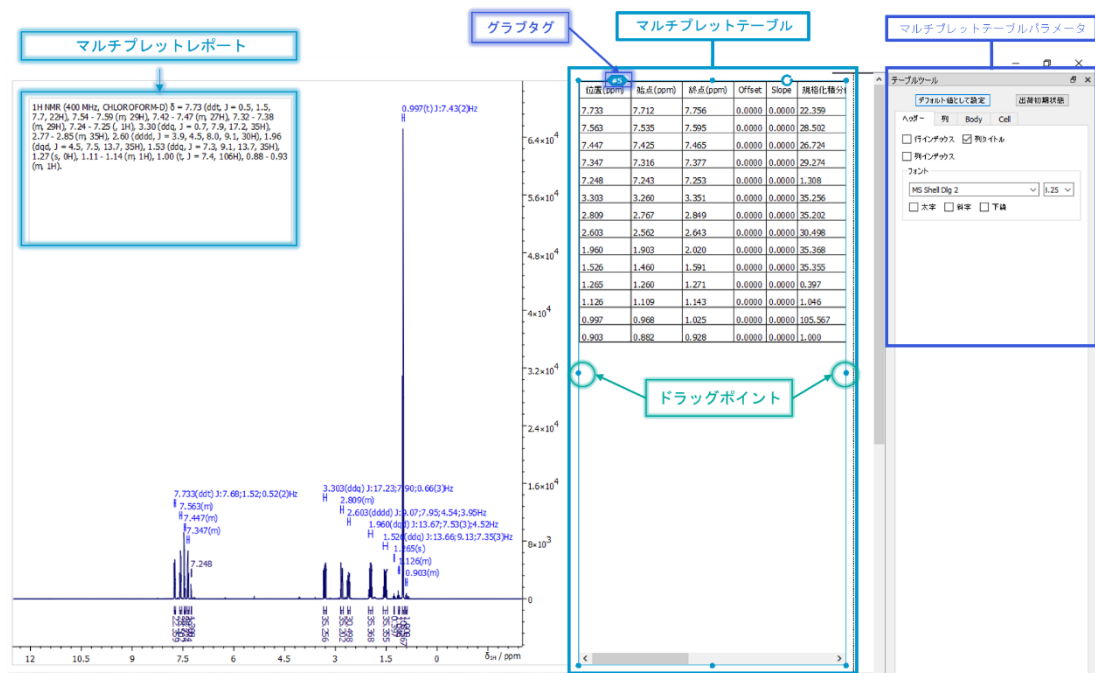


Figure 38: マルチプレットテーブルとレポート

## 4.2 オブジェクトの印刷

JASON からオブジェクトを印刷するオプションは、メインメニューにあります。また、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 はキャンバス上に存在するすべてのオブジェクトを印刷に送信します。関心のあるオブジェクトを選択して印刷するには、まずキャンバスでそれらの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 (Figure 39) :

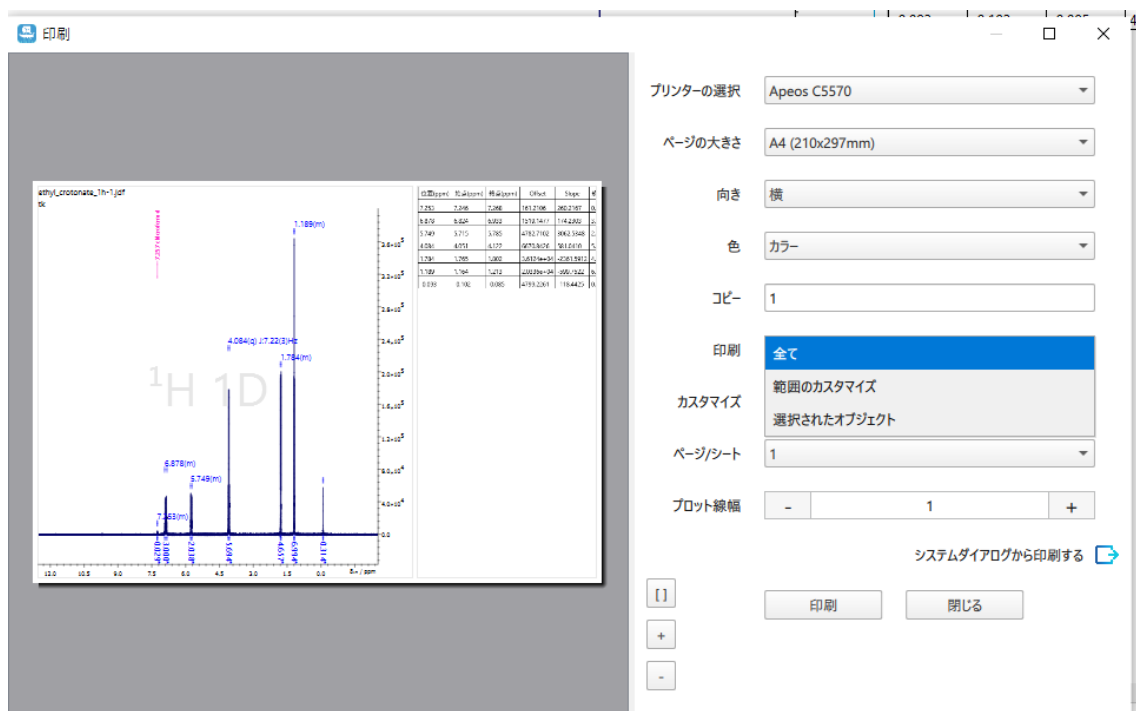


Figure 39: 選択したオブジェクトを印刷する

## 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、Figure 40 に示す設定メニューで制御します。

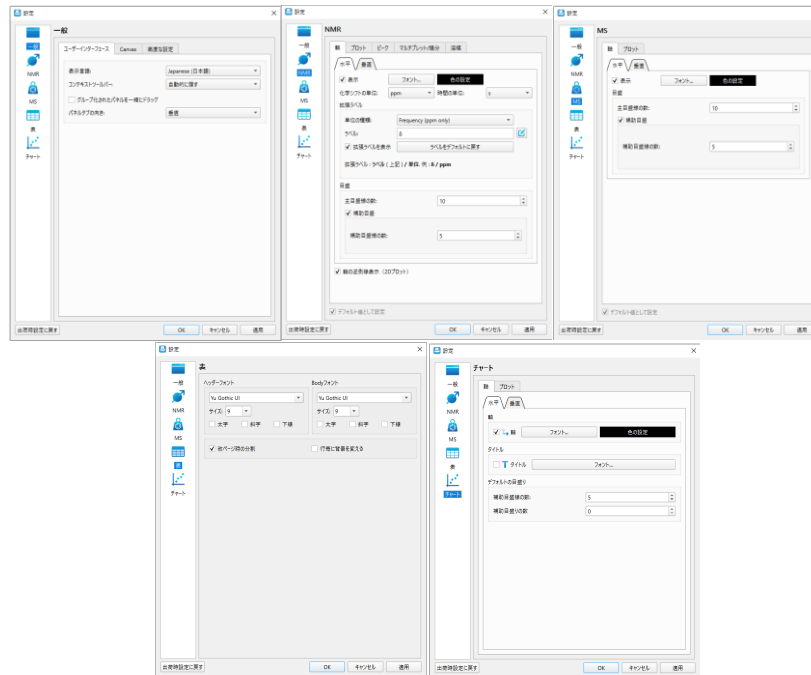


Figure 40: 設定メニュー、一般設定（左）、NMR 設定（中）、テーブル設定（右）

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、またはキャンバス内の任意の場所で、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、一般設定、NMR 設定、テーブル設定の 3 つのセクションで構成されています。これらのセクションはそれぞれタブページで分けられています。

**出荷時設定に戻す**：このボタンを押すと、設定中のすべ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

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。

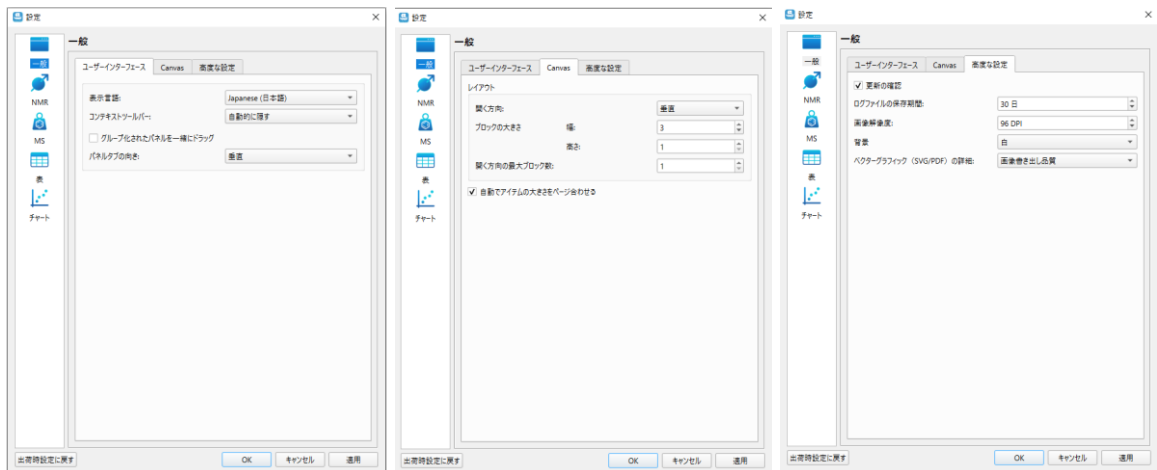


Figure 41: 一般設定

一般設定には3つのタブがあります (Figure 41)

### 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。

**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** : 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」

「自動的に隠す」は、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」は、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します。

**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、互いに積み重ねられたコンテキストパネル (例えば Figure 15,42) を1つのオブジェクトとして移動できます。

**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、Figure 42 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。

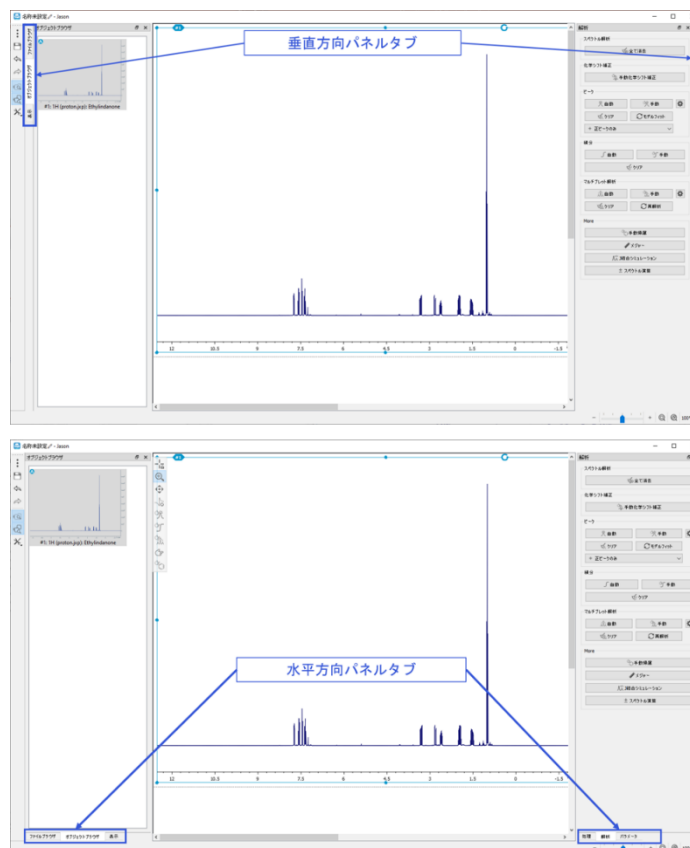


Figure 42: パネルのタブ配置

### 5.1.2 キャンバス (CANVAS)

このタブでは、新しいオブジェクトをキャンバスに追加する方法を定義します。デフォルトでは、オブジェクトは、[開く方向] オプションで選択した内容に応じて、キャンバス上で水平または垂直に順番に追加されます。

新しいオブジェクトは、配置の 2 つのロジック レイヤーを持つレイアウトを使用してキャンバスに配置されます。最初のロジック レイヤーでは、オブジェクトは設定で指定された幅と高さのブロックを埋めます。このブロックがいっぱいになると、同様のルールに従ってキャンバス上に新しいブロックが作成されます。

2 番目のロジック レイヤーは、キャンバスが拡大できる方向を定義します。2 番目のレイヤー内でキャンバスにブロックを配置する場合、ユーザーは、ブロックを追加しながらキャンバスを制限なく拡大できる方向 (水平または垂直) を選択できます。この方向は、設定では [開く方向] と呼ばれます。わかりやすくするために、

開いた方向に垂直な方向を [制限方向] と呼びます。制限された寸法のサイズは、[最大ブロック数] パラメータの値によって制限されます。

以下では、このレイアウト システムの詳細と例をいくつか説明します。

ファイル ブラウザでダブルクリックするなどして新しいオブジェクトをキャンバスに配置すると、この新しいオブジェクトのキャンバス上の配置は次のルールに従って決定されます。

- 1) 空のキャンバスでは、左上のページが最初に使用されます。
- 2) 新しく開いたオブジェクトは最初にブロックを埋めます。オブジェクトは最初に制限された次元に沿って（つまり、開いた次元に垂直に）配置され、最大の高さまたは幅（適切な方）に達します。
- 3) ブロックが完了すると、新しいブロックが開始されます。この新しいブロックは、ブロック数がユーザー定義の「最大ブロック数」設定と等しくなるまで、制限された方向に沿って配置されます。
- 4) 「最大ブロック数」に達すると、新しいブロックは開いた方向に沿って開始されます。この新しいブロックは、これらのルールに従って配置されます。

「最大ブロック数」オプションが 1 に設定され、ブロック サイズが  $1 \times 1$ （つまり、ブロックが 1 つのオブジェクトに対応）の場合、後続のすべてのオブジェクトは、「開く方向」オプションで選択した内容に応じて水平または垂直に追加されます。つまり、すべての新しいオブジェクトは、1 つの列または行に垂直または水平に追加されます。

「最大ブロック数」オプションが数値 N に設定され、ブロック サイズが  $1 \times 1$  の場合、オブジェクトは N 個のオブジェクトに達するまで制限された次元で追加され、その後、オブジェクトの新しい行/列は、開く方向の設定に従って開始されます。

ブロック サイズが任意の値  $A \times B$  のセットである場合、「最大ブロック数」と「開く方向」の設定は、個々のオブジェクトだけでなく、ブロックに適用されます。サイズ  $A \times B$  のブロックは、上記のルールに従って最初に埋められます。次に、次のブロックの配置は、個々のオブジェクトと同じルールを使用して、パラメータ「最大ブロック数」と「開く方向」によって決定されます。これは、最大ブロック数が 2 に設定され、開く方向が垂直である  $3 \times 2$  配置の場合に、以下の図に示されています。

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 メニューで [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、選択したアイテムの上に行が挿入され、選択し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。この操作では、元に戻す/やり直し機能がサポートされています。

### 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、その下に 4 つの関連するタブがあります (Figure 43)。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。

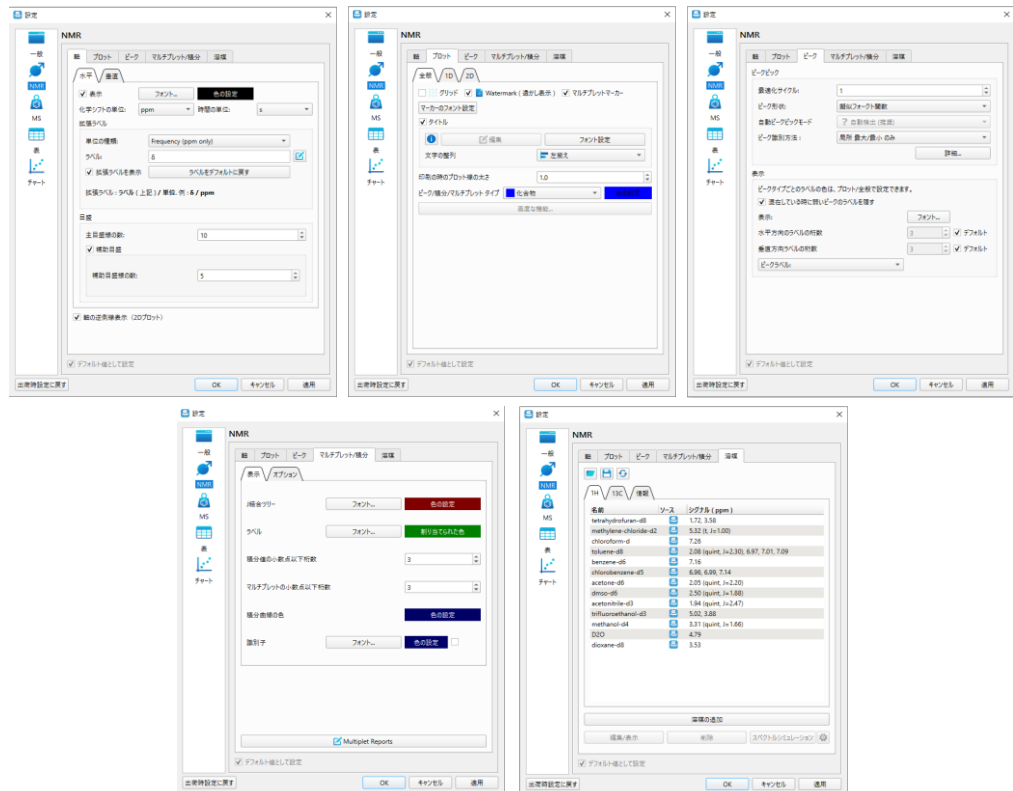


Figure 43: NMR 設定 : メインタブ



## 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、水平と垂直軸の設定の 2 つのパネルで構成されます (Figure 44)

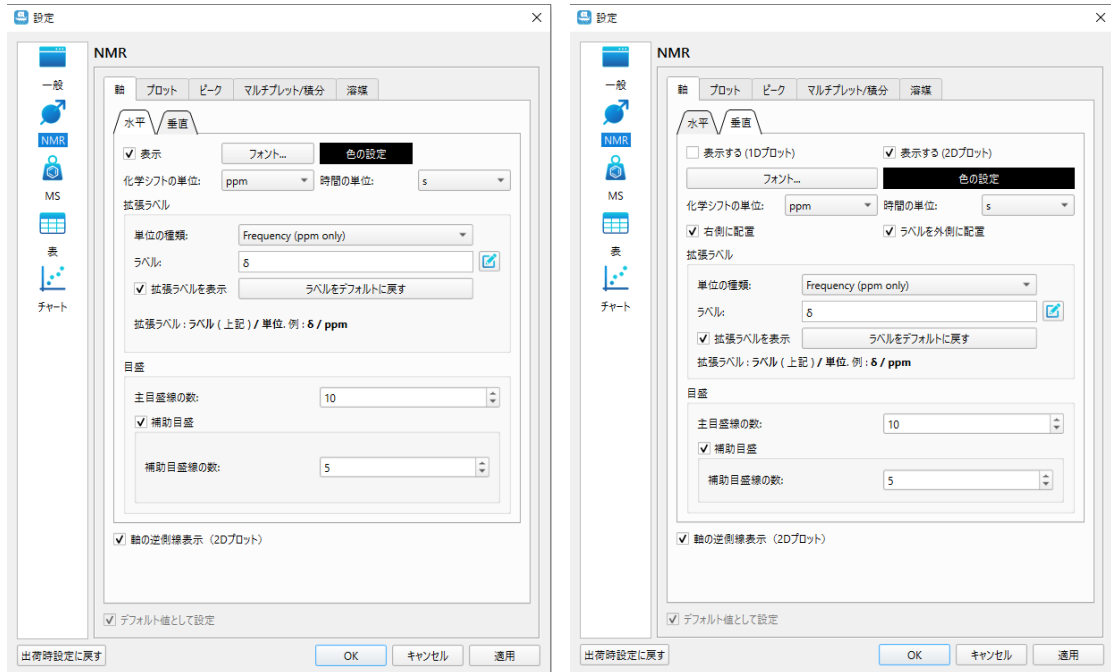


Figure 44: NMR 設定 : 軸タブ

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] 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できます。

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、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。

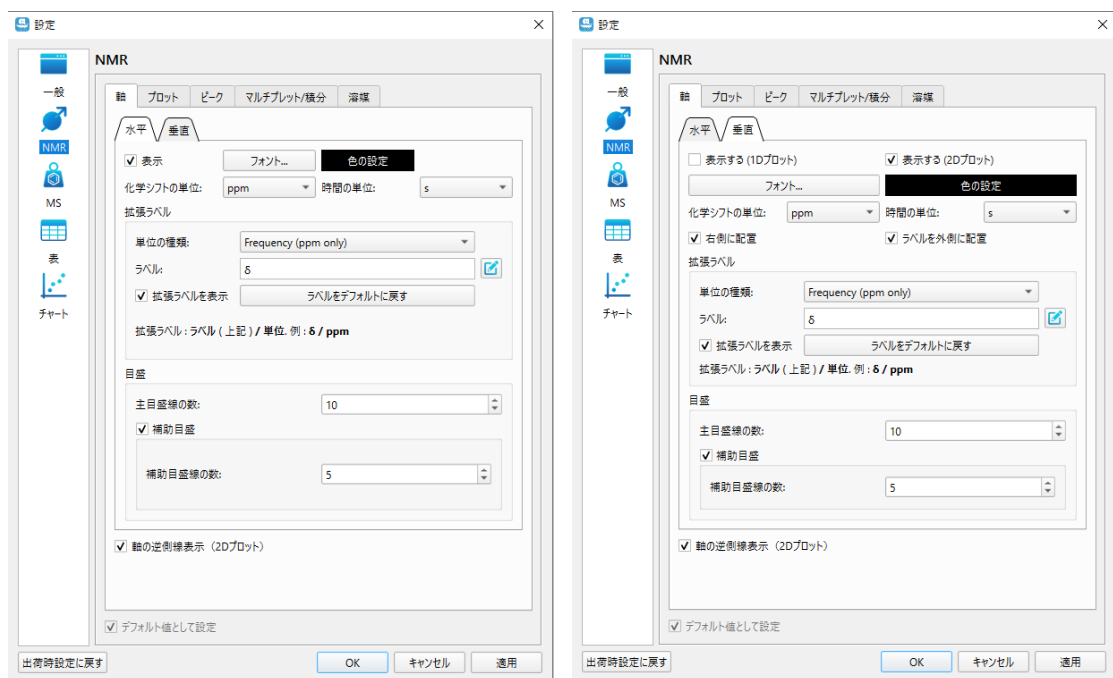


Figure 45: NMR 設定 : プロットタブ

「全般」タグには次の設定があります。[グリッド]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。

参考動画 : [https://youtu.be/dD\\_GXJ1fEeM](https://youtu.be/dD_GXJ1fEeM) ウォーターマークの追加

<https://youtu.be/qmvjk190lKw> グリッドライン表示方法

[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、チェックを入れることによって、内容の編集、及びフォントの設定、表示位置の変更を可能にします。[印刷時のプロット線幅]では、印刷時のスペクトルの線の太さを設定することができます。

[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。[他のスペクトルを拡大させない]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したスペクトルのズームを更新するかどうかの設定。[他のスペクトルの拡大を無視する]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に対応するかの設定になります。

### 5.2.3 ピーク

ピークタブには、ピークピックと表示の 2 つのセクションからなります。

[最適化サイクル] : 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] : 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 疑似フォークト関数 と汎用ローレンツ関数を指定することができます。

[自動ピークピックモード]: 正のみ、負のみ、正と負のピーク、自動検出 (推奨) を選択できます。

[ピーク識別方法] : 全て、微分のみ、局所 最大/最小のみ を選択できます。

詳細設定ボタンをクリックすると、ピーク選択とピーク 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 (Figure 46)。これらの値は、ピーク選択プロセスを完全に理解している熟練ユーザーのみが変更する必要があります。

「混在している時に弱いピークラベルを隠す」: メインピークが多い場合、表示されるピークラベルの数を自動的に減らします。

[表示]: フォントボタンでは、スペクトル上のピークラベルのフォントを変更できます。また、色の設定ボタンからは、ピークラベルとピークラインの色を変更できます。

[水平方向のラベルの桁数] : 桁数を変更できます。

[垂直方向のラベルの桁数] : 桁数を変更できます。

パラメータを変更したら、ユーザーは [デフォルトとして設定] チェック ボックスをオンにして、これらを新しいデフォルト値として保存できます。

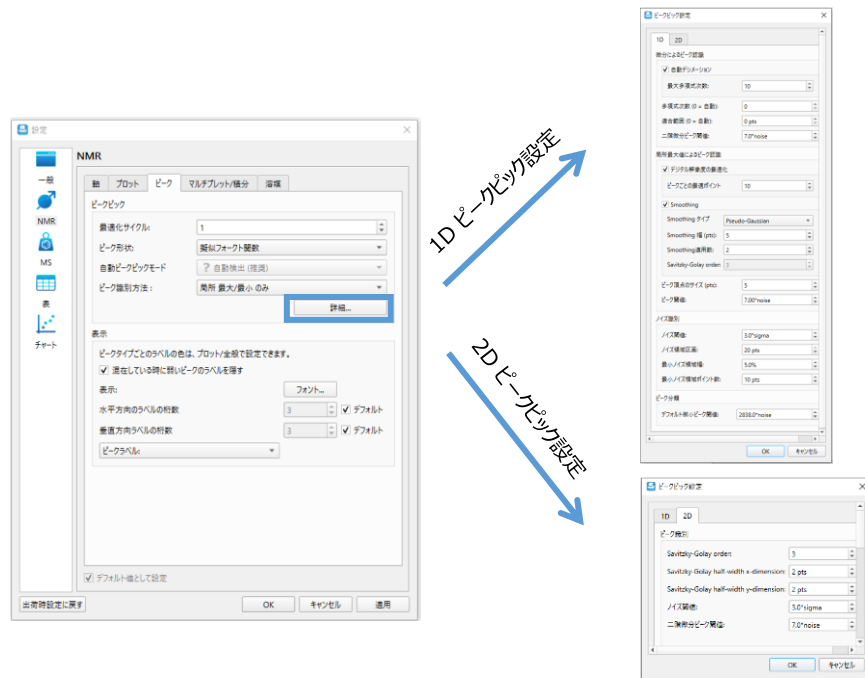


Figure 46 : NMR 設定 : ピーク

### 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。

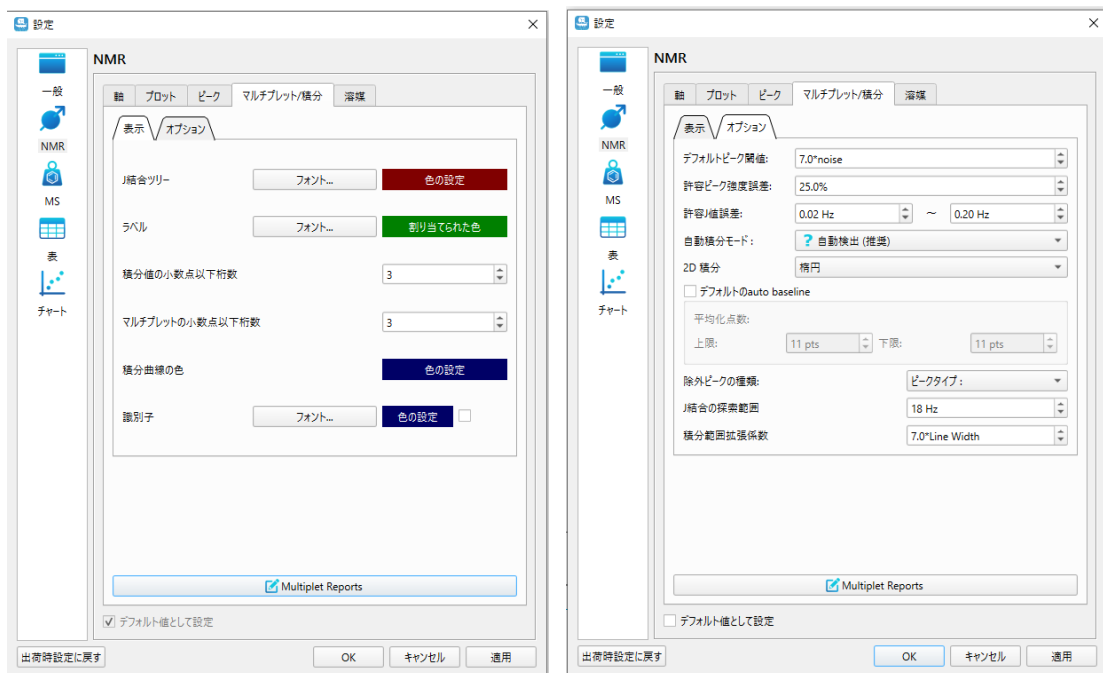


Figure 47 : NMR 設定 (マルチプレット・積分)

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。

**識別子**：フォントと色の設定が可能です。

**Multiplet Report**: Multiplet Report Editor が開き、任意のフォーマットの作成ができます。

オプションセクションでは

**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。

**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。

## 5.2.5 溶媒

「溶媒」設定パネルには 3 つのセクションがあります (Figure 48)。変更を適用するには、「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ます。変更を中止するには、「キャンセル」ボタンをクリックします。変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

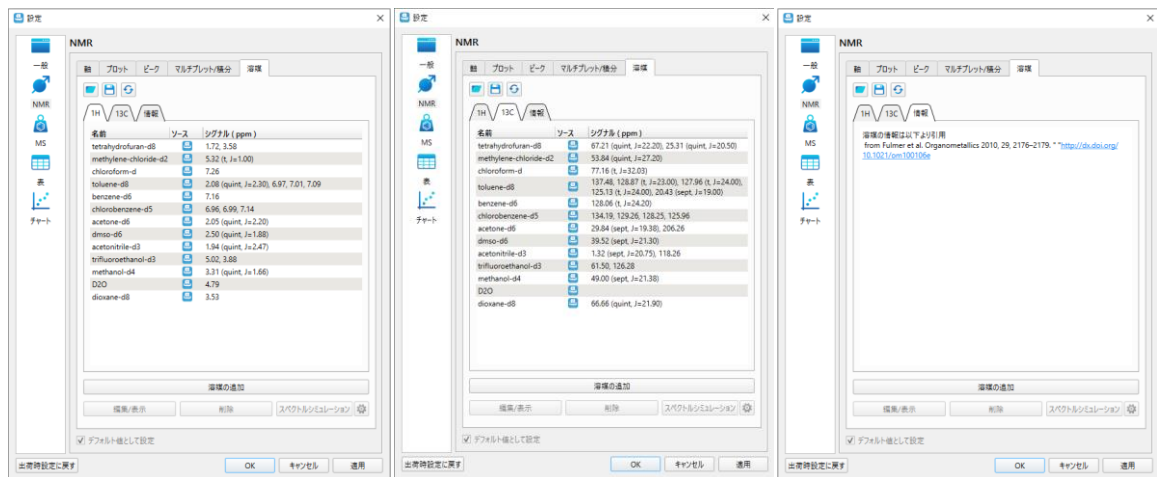


Figure 48: NMR 設定 (溶媒)

パネルの下部にある「新しい溶媒を追加」ボタンをクリックして、新しい溶媒を追加できます。

### 5.3 MS

「MS 設定」パネルには、「軸」と「プロット」の 2 つの関連タブがあります (Figure 49)。各パネルについては、以下のセクションで説明します。下部にある「デフォルトとして設定」チェックボックスを使用して、任意の設定をデフォルトとして設定できます。

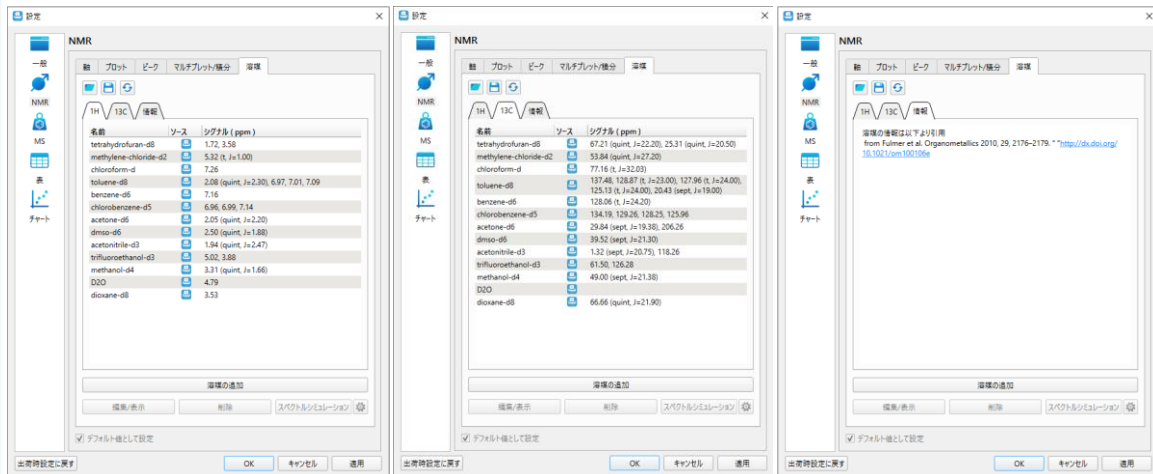


Figure 49: MS 設定

### 5.3.1 軸

「軸」設定には、MS 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、水平軸の設定と垂直軸の設定の 2 つのパネルで構成されています (Figure 50)。

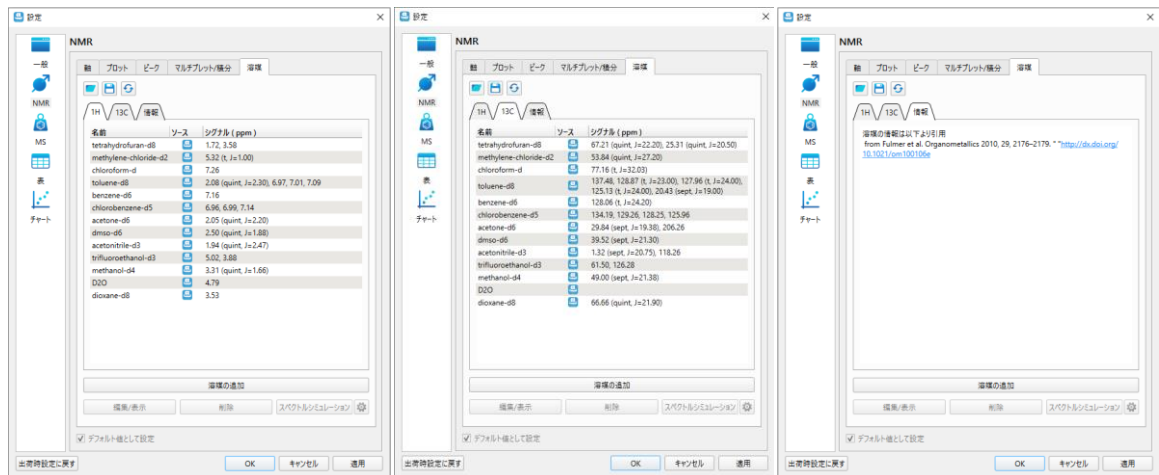


Figure 50 : MS 設定 (軸)



### 5.3.2 プロット

プロット タブには、Figure 51 に示すように、すべてのスペクトルに共通するオプションと MS スペクトルに固有のオプションを含む 2 つのパネルがあります。

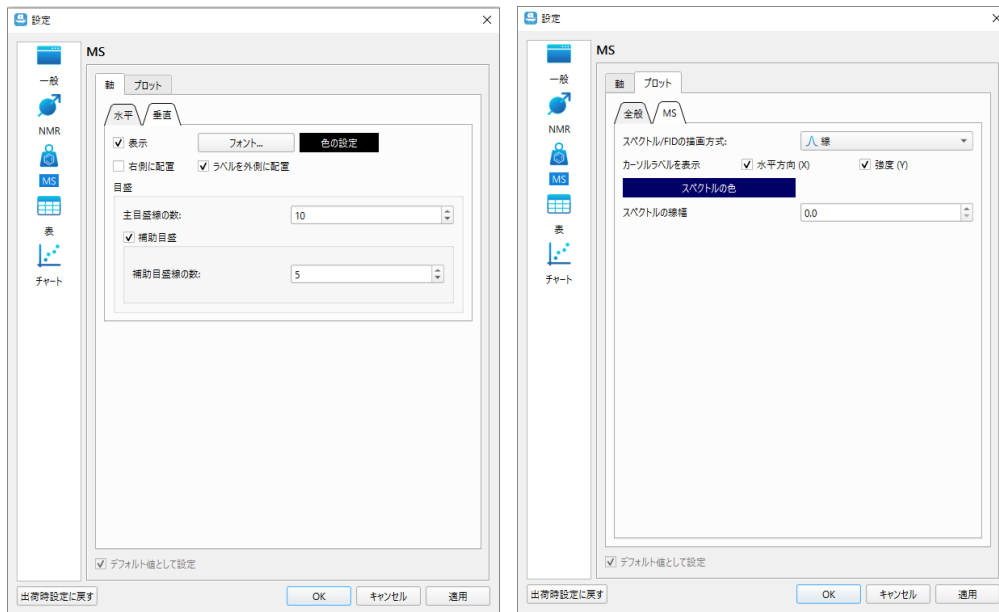


Figure 51 : MS 設定 (プロット)

## 5.4 テーブル

「テーブル」設定パネルには 2 つのセクションがあります (Figure 52)。変更を適用するには、「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ます。変更を拒否するには、「キャンセル」ボタンをクリックします。変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

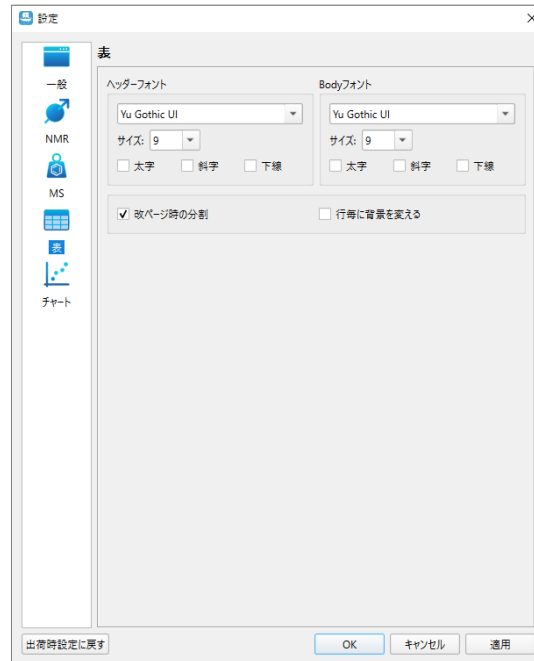


Figure 52 : テーブル設定

表のヘッダーとボディのフォントは、それぞれ「ヘッダーフォント」と「本体フォント」のセクションで変更することができます。改ページの分割チェックボックス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定義し、行ごとに背景を変えるチェックボックスは各行で交互に色を変えて表を表示することができます。

以上の設定ダイアログの変更は、適用ボタンを押すか、OK ボタンを押すことで実際に適用されます。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の設定が含まれており、「軸」と「プロット」の 2 つのセクションがあります (Figure 53)。変更を適用するには、「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ができます。変更を拒否するには、「キャンセル」ボタンをクリックします。変更を適用せずに設定ダイアログを閉じます。

「テーブル」設定タブの場合と同様に、グローバル「設定」ダイアログでチャート表示パラメータの設定を変更すると、デフォルト設定に影響しますが、現在アクティブなチャートには影響しません。

「プロット」タブでは、チャート上の凡例の配置を定義したり、チャートのタイトルのヘッダーのフォントを変更したり、グリッド線のオン/オフを切り替えたり、グリッド線の色を選択したりできます。

「軸」タブは 2 つのタブで構成され、チャート表示パラメータの水平軸と垂直軸の個別の設定が含まれています。ユーザーは、「軸」セクションで水平軸と垂直軸のラベルのフォントと軸の色を調整し、「タイトル」セクションで水平軸と垂直軸のタイトルのフォントを調整できます。また、グラフの各軸のデフォルトの目盛り数と副目盛り数を変更することもできます。

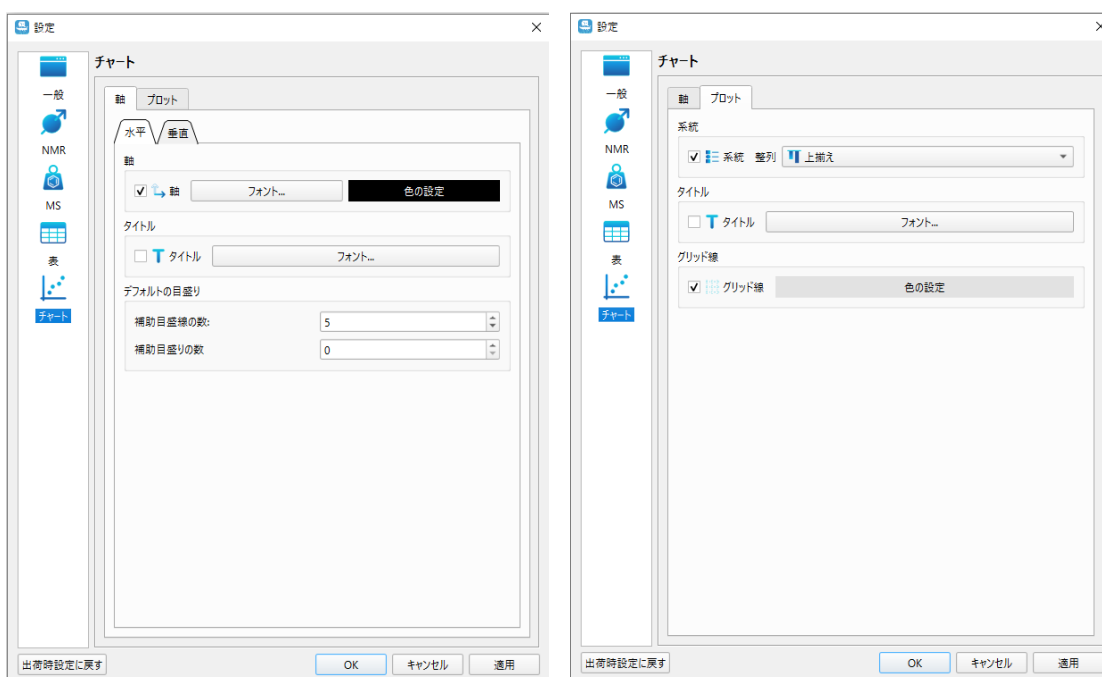


Figure 53: チャート設定

## 6 スタッキングと重ね合わせ

参考動画 : [https://youtu.be/gJrj\\_vo5dsk](https://youtu.be/gJrj_vo5dsk) スペクトルの重ね書き

<https://youtu.be/TpUDC4sNnLc> ドラッグ&ドロップによる重ね書き

[https://youtu.be/ZpOm\\_0fgKt8](https://youtu.be/ZpOm_0fgKt8) スタッキング機能

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。

オブジェクトブラウザから追加する方法もあり、詳しくは上記の動画を参照ください。

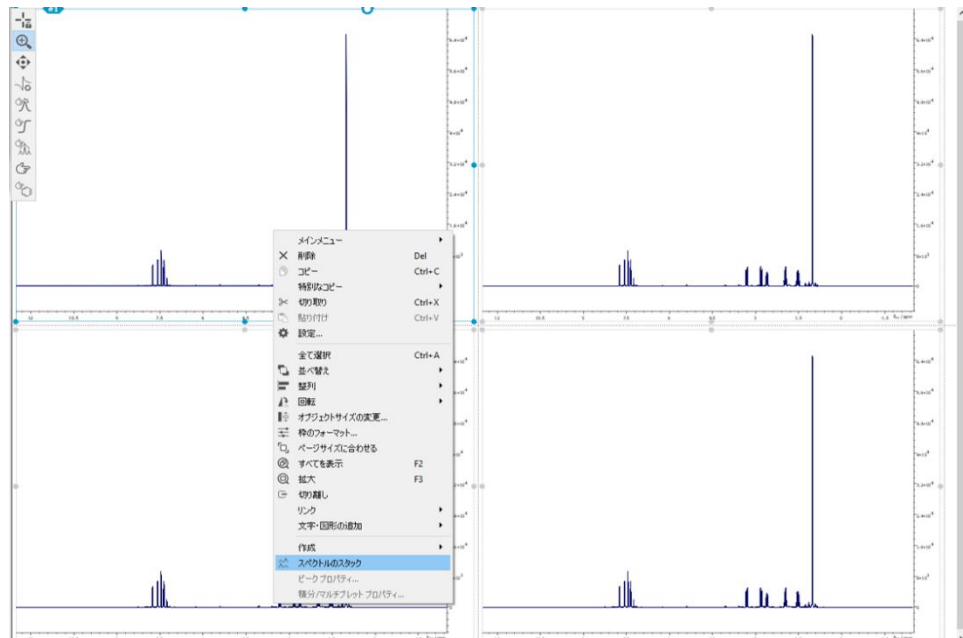


Figure 54: スタックのためのメニュー

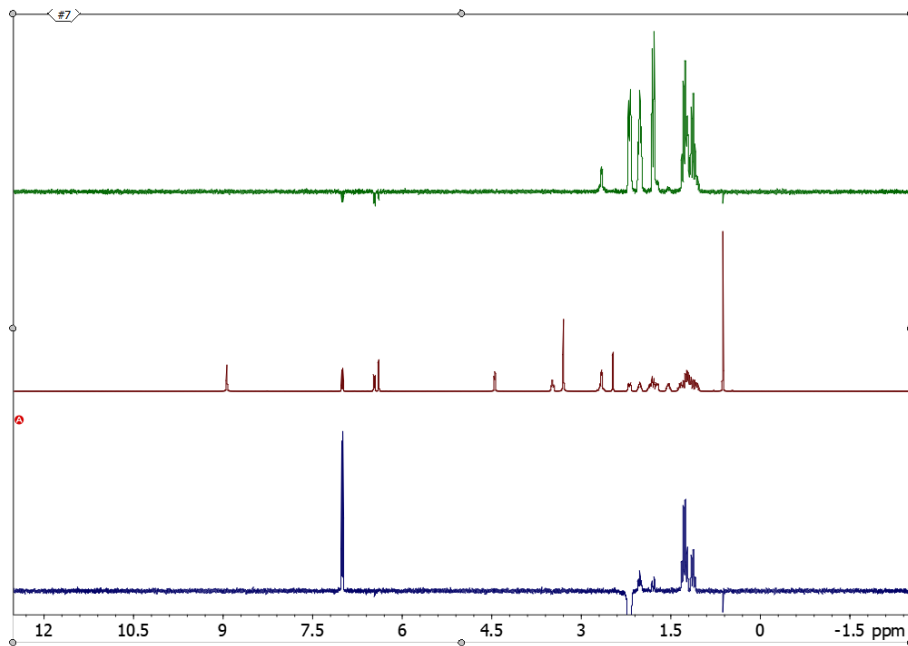


Figure 55:スタッキング表示

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。

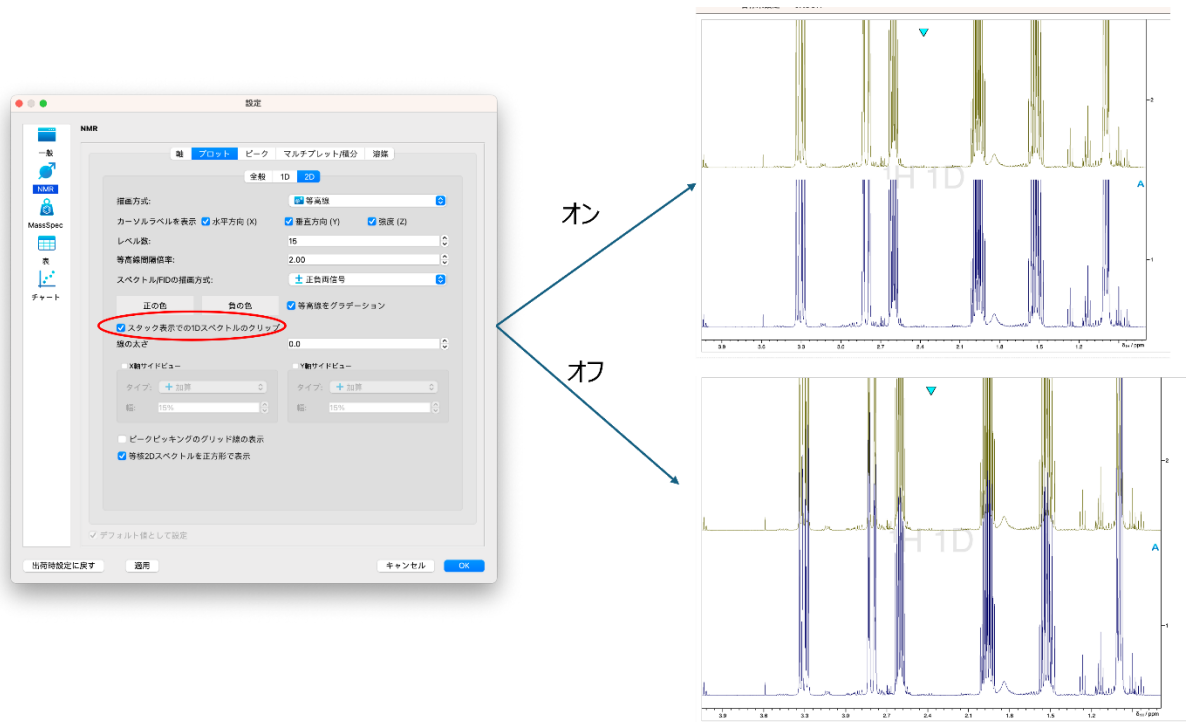


Figure 56: 'スタックで 1 次元スペクトルをクリップする'

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。

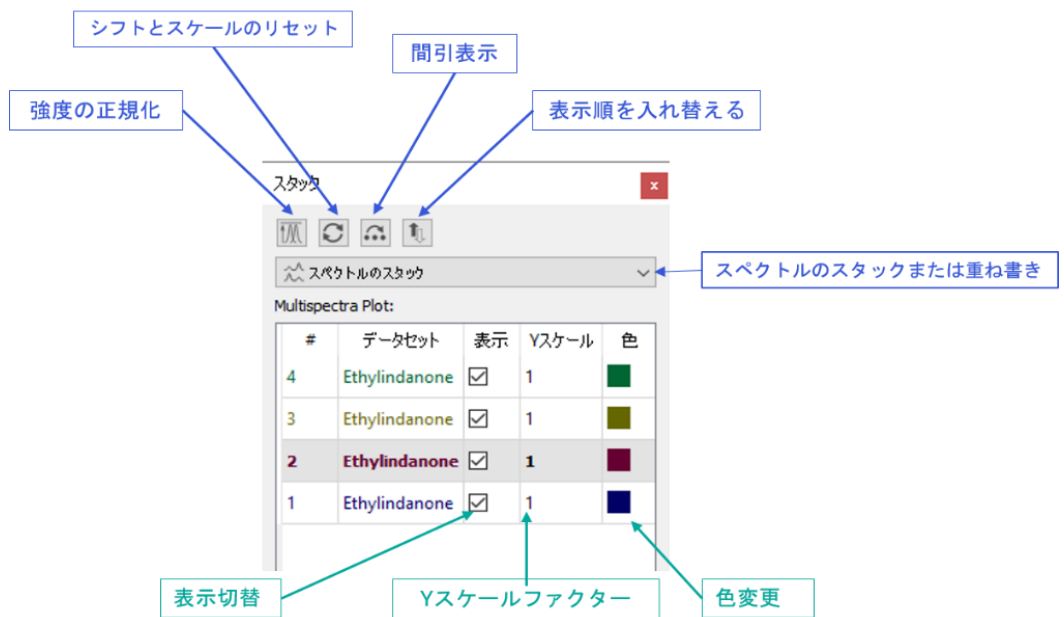


Figure 57: : スタックパネル

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。

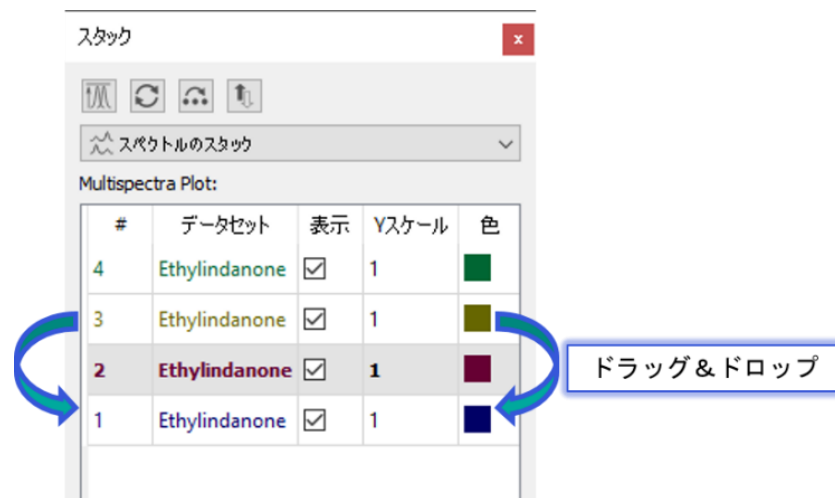


Figure 58 : スタッキングプロットの配列調整

スタック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。

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。

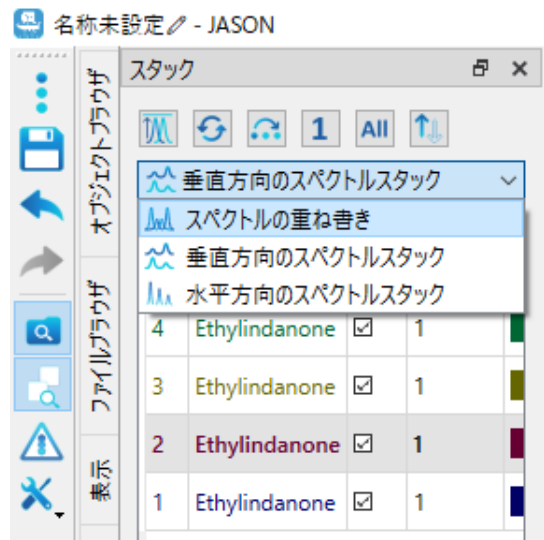


Figure 59 : スタック表示から重ね書き表示への変更

重ねて表示するには、Figure 60 に太字で示したスタック・パネルで項目を選択します。

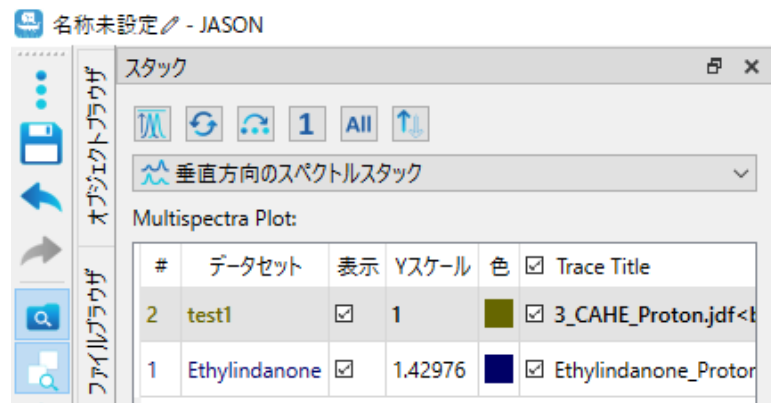


Figure 60: マルチスペクトルスタックにおけるスペクトル強度スケールの変更

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。



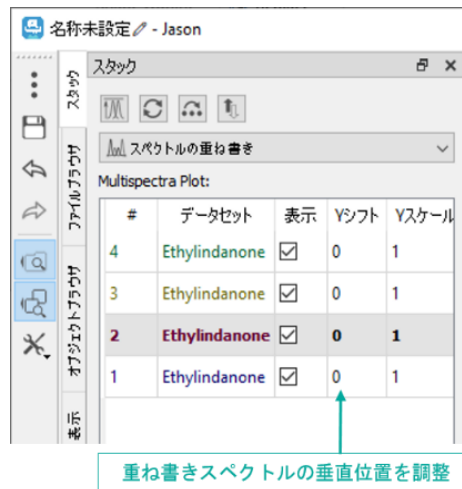
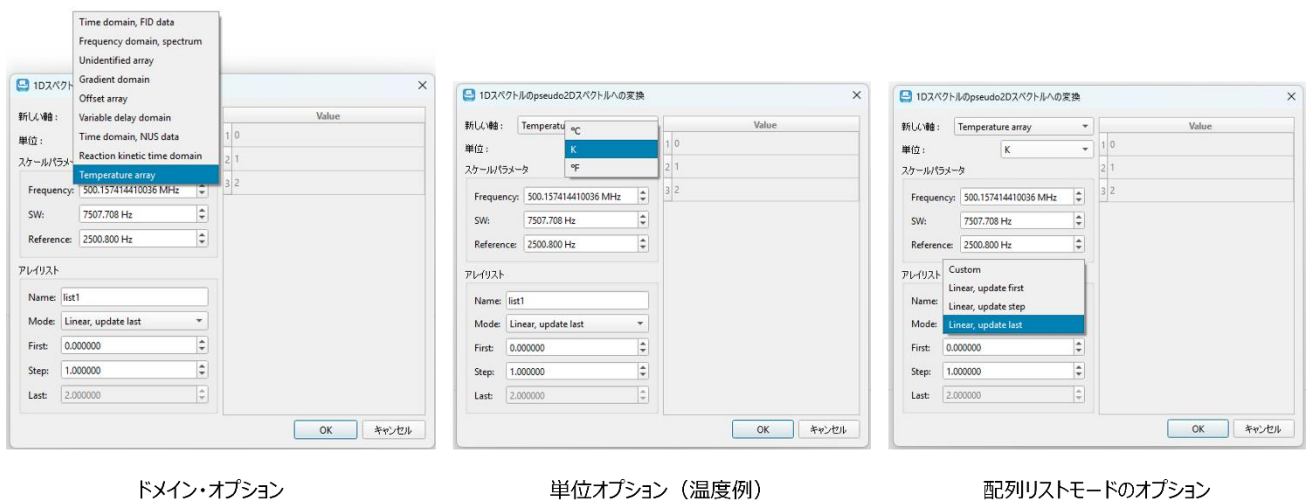


Figure 61: : 重ね書きスペクトルの Y 軸方向調整

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、すべてのスペクトルのスケールが変更されます。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が変更されます。スタックパネルのテーブルのスケール値 (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。

注：スペクトルのスタックを擬似 2D に変換することが可能です。View'パネルにある'Convert to Pseudo 2D' 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。



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

Figure 62: 擬似 2D オプションへの変換

## 6.1 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。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含まれています。テーブルや"間引き表示"ボタンでスペクトルの表示を切り替えることが可能です。

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 は事実上、1 つの処理リストを持つ 1 つのデータセットであり、スタックはそれぞれの処理リストを持つ個々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] オプションを選択すると、1D スペクトルのシミュレーションを実行できます。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 パネルが開きます (Figure 63)。これにより、ユーザーは最大 20 スピンの化学シフトと J カップリング定数を他の関連パラメータとともに入力できます。データを入力すると、シミュレーションされたスペクトルがキャンパスの新しいパネルに表示されます。

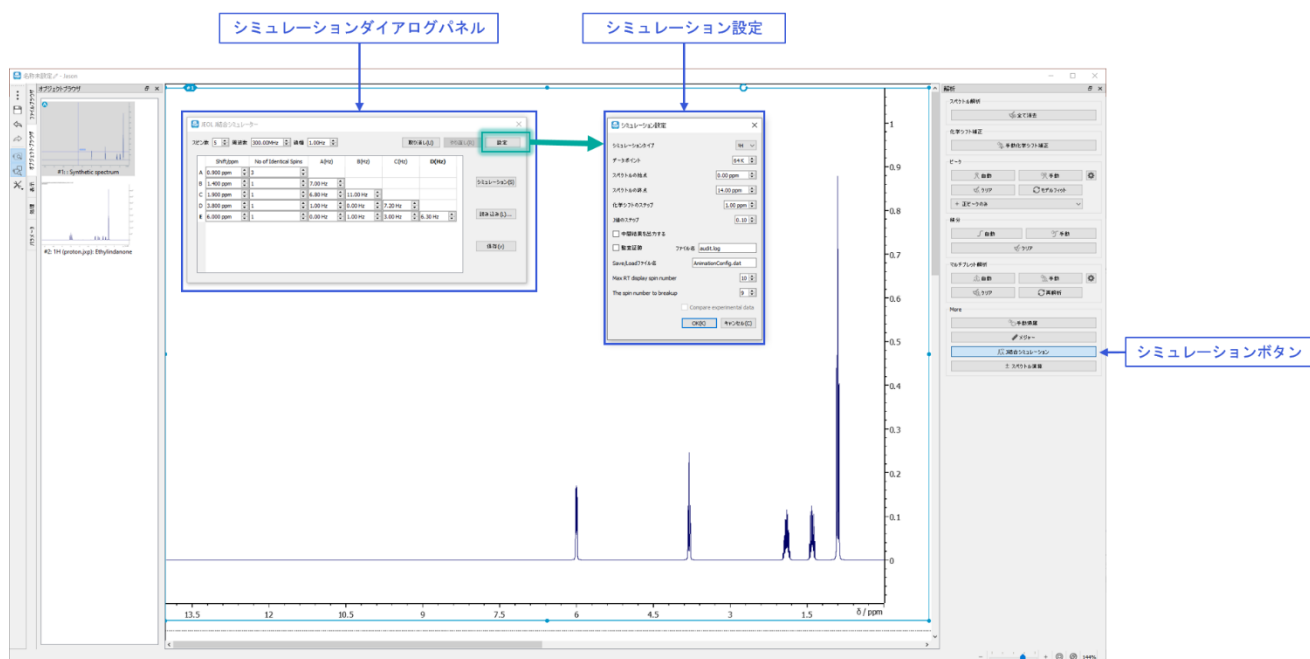


Figure 63 : スピンシミュレーションインターフェース

### 7.1 シミュレーションダイアログパネル

**スピン数:** シミュレーション内の同一でない共鳴の合計数です。

**周波数:** シミュレーションの基本周波数 (MHz) です。

**線幅:** シミュレーションのピーク モデルの線幅 (Hz) です。

**取り消し/やり直し:** 前のコマンドを元に戻すか、最後の元に戻した操作をやり直すことができます。

**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 パラメータを使用してシミュレーションを実行します。

**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。

**保存:** 現在のシミュレーション パラメータを保存します。

次のパラメータは、シミュレートされるスピン システムに関連しています。スピン システムは、スプレッドシートのようなセルのテーブルを使用して記述されます。シミュレーション内のスピンの数に応じて、セルの行には A、B、C など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 列目以降のラベル付けに使用されます。列見出しについては、以下で説明します。

**Shift/ppm:** これは、スピンの ppm 単位の化学値です。

**No of Identical Spin:** 特定の共鳴周波数に複数のスピンを関連付けることができます。たとえば、メチル基は 3 つの同一スピンの構成されます。これは、この列に収容できます。2 つのスピンの同じ化学シフトを持つが磁氣的に同等でない場合は、各スピンを明示的にシミュレーションに追加する必要があることに注意してください。

**A(Hz)、B(Hz)、C(Hz) など:** これらの列見出しは、テーブル行に割り当てられたスピン ラベルに関連しています。各セルには 2 つのスピン間の J 結合が含まれます。たとえば、列 A の場合、行 B には結合定数 JAB (Hz) が含まれます。

## 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。

**同位体**： $^1\text{H}$  または  $^1\text{H} + ^{13}\text{C}$  を選択します。

**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)。

**化学シフトのステップ**：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)

**J 値のステップ**：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)

**化学シフトの小数点以下の桁数**：桁数を設定します。

**J カップリングの小数点以下の桁数**：桁数を設定します。

**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。

**Save/Load 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 分子構造の作成

分子構造は描画、ファイルから読込、テキスト（文字列）入力で作成できます。

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、ファイルをキャンバスにドラッグ アンド ドロップするだけでロードできます。サポートされている形式は、.mol、.sdf、および .cdxml です。

メインメニューから [新規] -> [構造] オプションを選択すると、新しい構造を描画できます。構造を選択すると、Figure 64 に示すオプションが表示されます。構造インターフェースは、パネルの左上隅にあるコンテキストメニューと [表示] タブで構成されます。この場合はキャンバスの右側に表示されますが、他のパネルと同様に、これは構成可能です。これらについては、以下で詳しく説明します。

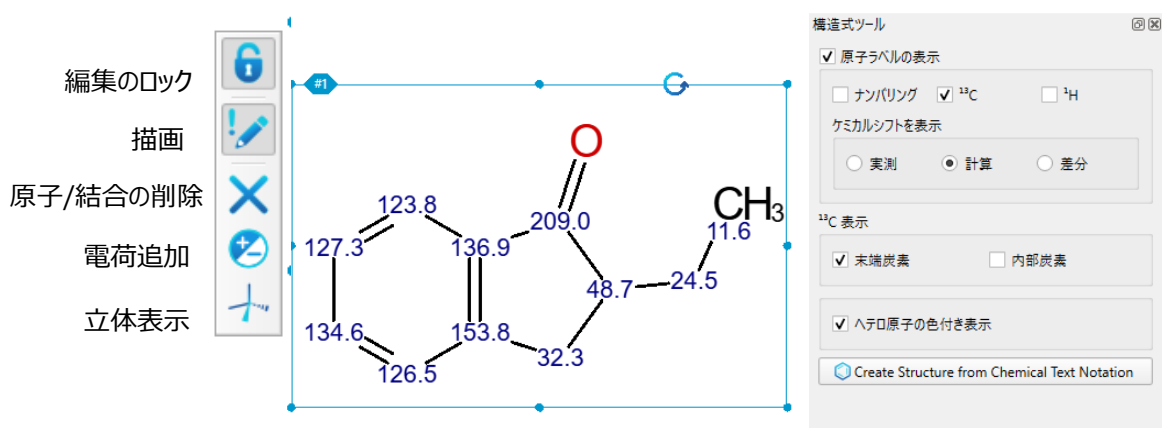


Figure 64 : 構造式作成インターフェース

テキストから構造を作成する機能は、'構造式'パネルの'Create Structure from Chemical Text Notation'ボタンにあります。JASON 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。システムは自動的にフォーマットを識別し、JASON キャンバス上に対応する項目を作成します。フォーマットが特定できない場合は、クリップボードに貼り付けられた内容を使用して、デフォルトのテキスト・アイテムが作成されます。

注：.sdf テキスト形式の場合、JASON は.sdf ファイルと同様に処理し、最初の分子ブロックのみを扱います。

## 8.1 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สด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せん。
- 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。

**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。

## 8.2 構造式パネル

**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。

**ナンバリング**：各原子に固有の番号を付与します。

**<sup>13</sup>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。

**ケミカルシフトを表示-<sup>1</sup>H 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 <sup>13</sup>C と <sup>1</sup>H の両方のケミカル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 <sup>1</sup>H は括弧内に表示されます。

**<sup>13</sup>C 表示-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。

**<sup>13</sup>C 表示-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なあるいは非明示的な表示を切り替えます。

**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。

**Create Structure from Chemical Text Notation** : SMILES などのテキスト入力ができます。

原子ラベルを変更するには、マウスポインタを合わせて希望のテキストを入力します（構造パネルアクティブの状態）。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、スペースキーを 1 回押します。

構造を右クリックして表示されるメニューで、明示的な水素を追加/削除するコマンドを見つけることができます。



## 9 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 (Figure 65)。

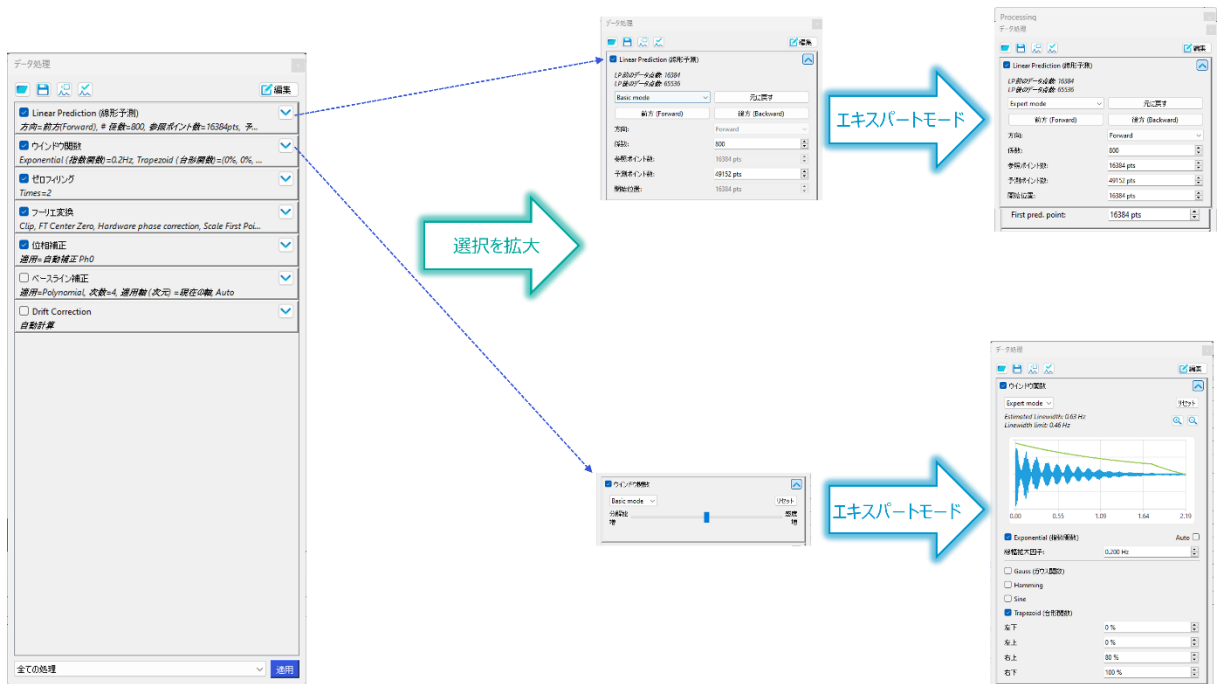


Figure 65 : 拡張処理オプション

### 9.1 線形予測 (リニアプレディクション)

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、アポ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あり、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。

## 9.2 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レビューもこのモードで表示されます。

## 10 ルール

キャンバス上にデータが読み込まれ、配置されたときに生じる一連のアクションをあらかじめ設定することができます。

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、最初のもので適用されます。

3 種類のルールはすべて、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。これは、対応するダイアログボックスのデフォルトでチェックされている条件チェックボックスで示されます (Figure 66) 。

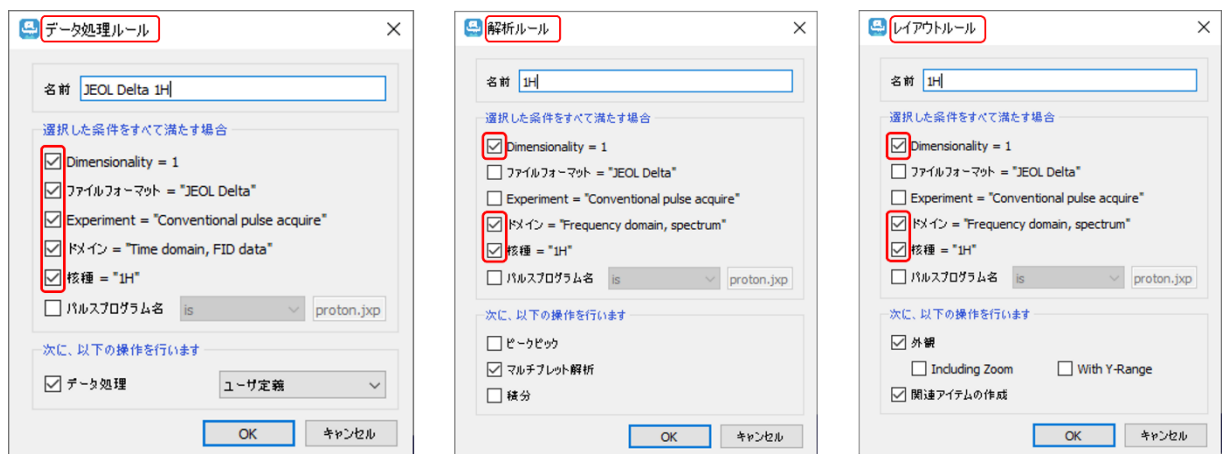


Figure 66 : ルールダイアログボックス

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、Origin 条件が追加されます。

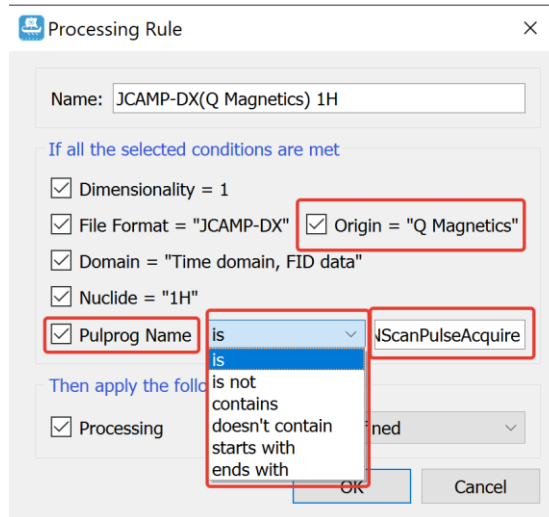


Figure 67: パルスプログラムによる処理ルール

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。

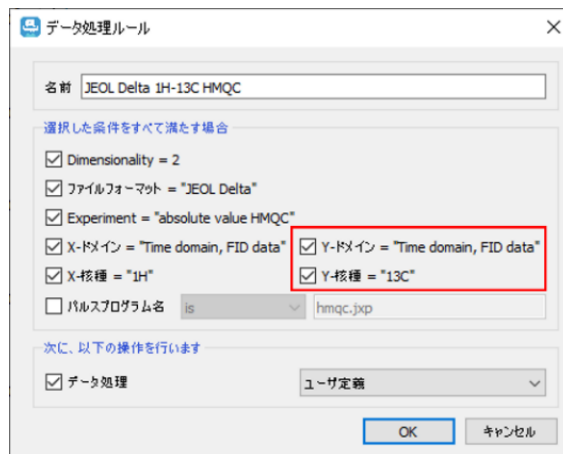


Figure 68: 2D データ処理ルールダイアログ

## 10.1 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。

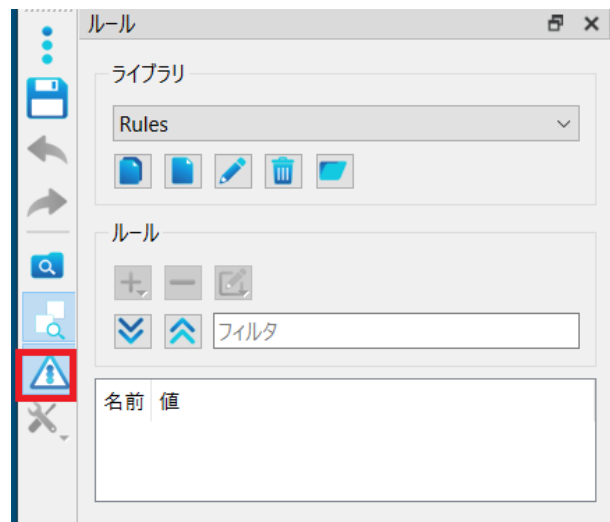


Figure 69: ルールパネルの管理

## 10.2 ルールライブラリ

ライブラリに各タイプのルールをグループ化して（ルールセット）保存することができ、ユーザーはアプリケーションごとに異なるルールセットを整理することができます。

新しいルールを追加する機能は、キャンバス上にアクティブなスペクトルがあるときに利用できます。



Figure 70: 新規ルールの追加

### 10.3 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。

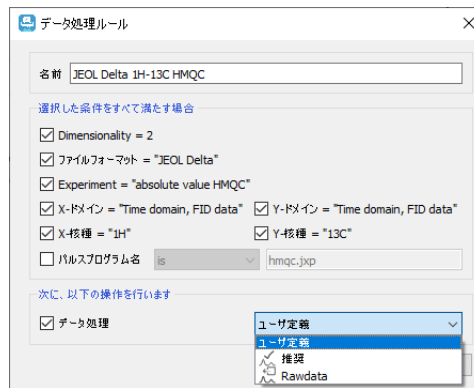


Figure 71: 「処理ルール」ダイアログ

### 10.4 解析ルール

解析ルールは自動ピークピッキング、マルチプレート解析、積分のいずれかを選択できます。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。

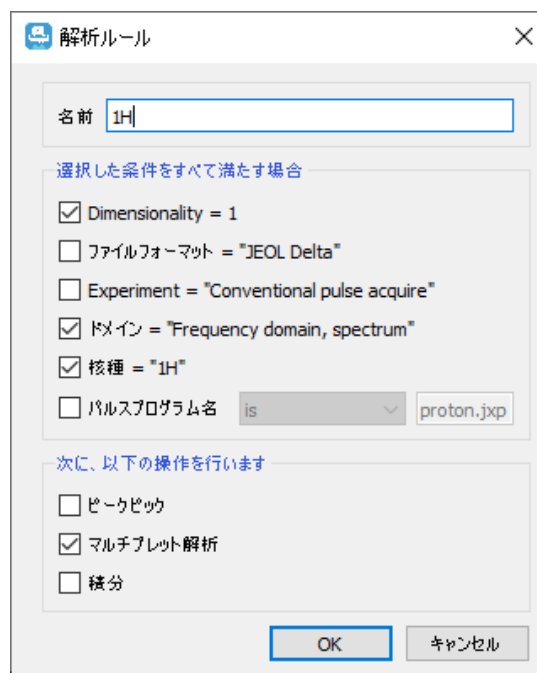


Figure 72: 「解析ルール」ダイアログ

## 10.5 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、リンクされたすべてのテーブル、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すべ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。

### 10.5.1 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すべ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。





Figure 73: レイアウトのルール ; 外観のオプション

## 10.6 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。

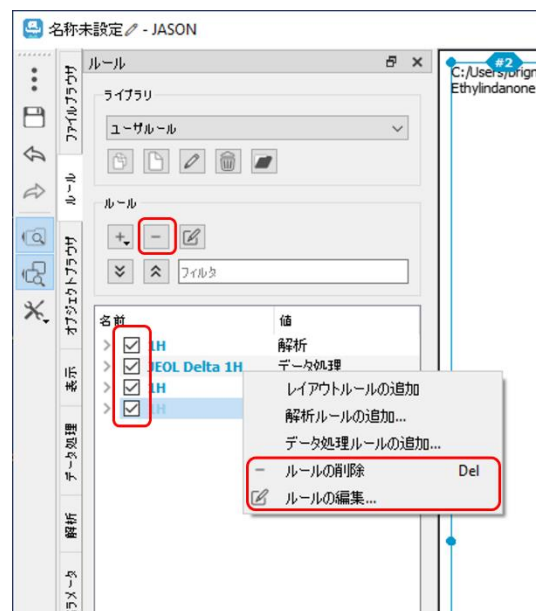


Figure 74: ルールの編集

アクティブスペクトルに適用されるルールは、ルールの一覧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。

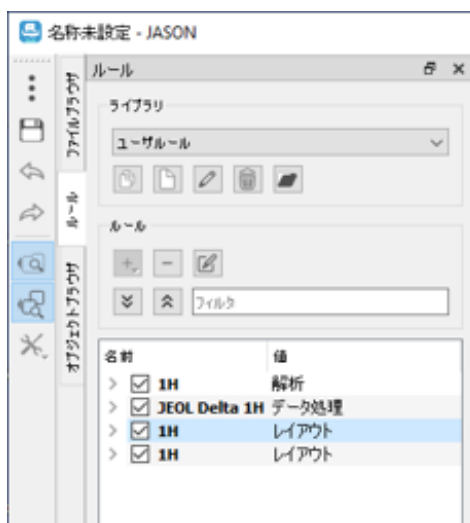


Figure 75: アクティブスペクトルに適用されるルールのハイライト表示

ルールは、[Update Rule]オプションを使用して更新できる。ルールの更新]オプションは、選択したルールが選択したスペクトラムに適用される場合にのみ有効になります。

## 10.7 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。

## 11 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。

### 11.1 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скар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。

### 11.2 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：

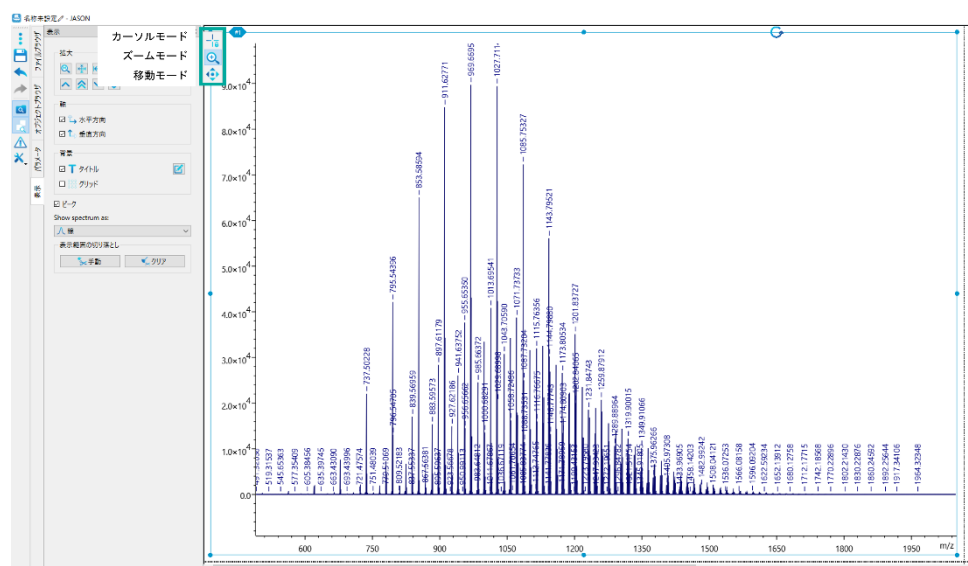


Figure 76: Mass Spectrometry context menu

## 11.2.1 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。

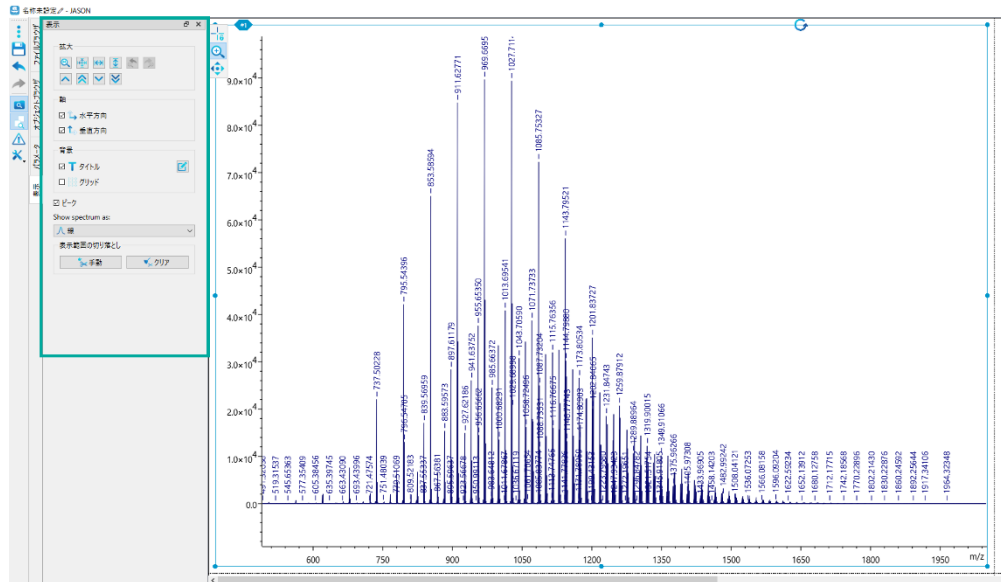


Figure 77: View Panel; Mass Spectrometry data

**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。

**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。

## 11.2.2 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。

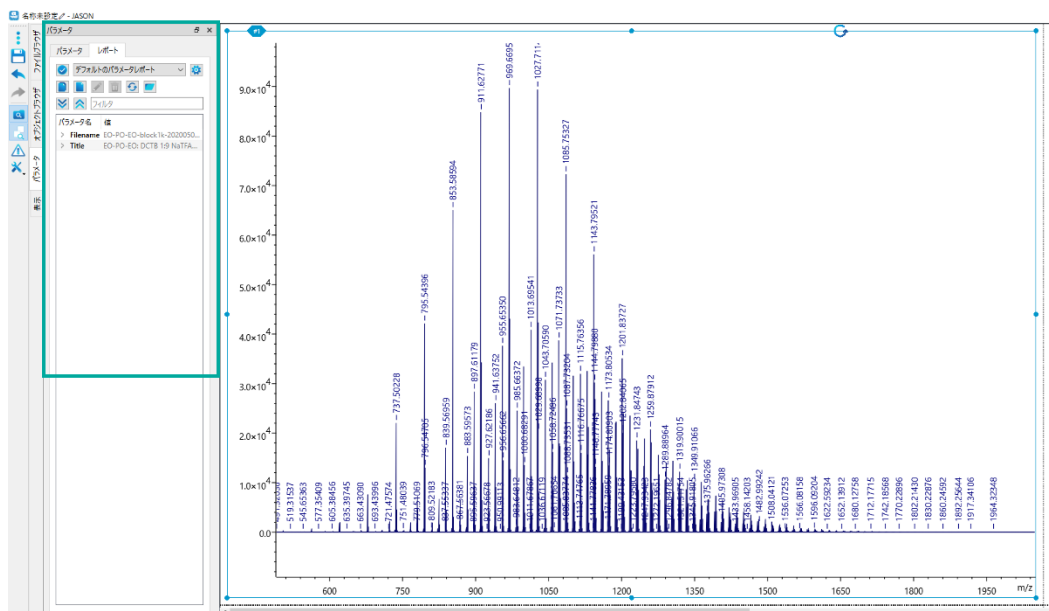


Figure 78: Parameters Panel; Mass Spectrometry data

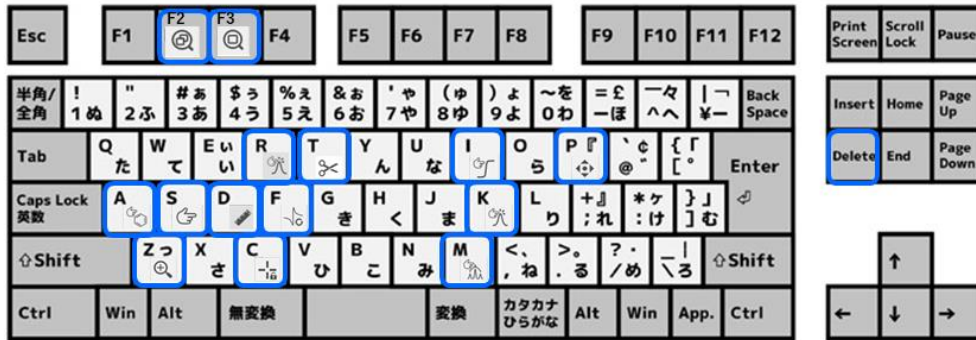
## 11.3 MS データの保存

キャンバス上の MS データは、JASON の jjh5、jjj フォーマット、JCAMP-DX ファイル、PDF、jpeg、png、svg などの標準的な JASON オプションで保存することができます。

データを保存するには、JASON メニューバーの保存ボタンに移動するか、Ctrl + S (Mac では Cmd) を使用します。「名前を付けて保存」オプションは、JASON の 3 つのドットのメインメニューボタンの下にあります。

## 12 Appendix

### 12.1 Windows ショートカットキー



ウィンドウズ（OS）で使用するその他のショートカットキーを下の表に示します。

Key	Functionality
Del	Delete selected item
<b>Ctrl+A</b>	Select all
<b>Ctrl+Z</b>	Undo
<b>Ctrl+X</b>	Cuts selected items to clipboard
<b>Ctrl+C</b>	Copy selected item
<b>Ctrl+V</b>	Paste item
<b>Ctrl+S</b>	Save

「Cmd+[ ]」では、[Ctrl]キーを押しながら 2 番目のキーを押して使います。

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。



## 12.2 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
- JEOL Alice 2: 1D and 2D data



- Magritek:
  - SpinSolve: 1D, 2D, and 2D DOSY
  - SpinSolve Expert: 1D, 2D
- RS2D SPINit:
  - 1D and 2D including versions both before and after 2022.06
- SIMPSON (free plugin): 1D
- TECMAG/TNMR (free plugin): 1D, 2D
- Varian/Agilent VnmrJ:
  - Raw (fid): conventional 1D, 2D; 2D NUS and DOSY