



ORIST

# Technical Sheet

No. 26-02

## NMR に対応した多変量解析ソフトの紹介

キーワード：NMR、多変量解析、主成分分析

### はじめに

核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance: NMR) 装置は、強い磁場内に試料を置き、核スピンの向きを整えた分子にパルス状のラジオ波を照射し、核磁気共鳴を引き起こします。その後、分子が元の安定状態に戻る際に発生する信号を検知し、分子構造の解析に利用します。このため、分離精製を行った化合物に対して NMR 測定を実施し、構造解析に使用されます。

一方で、NMR の大きな特徴は、複雑な前処理が不要であり、検体をそのままの状態を観察できる点です。このため、最近では混合物の分析にも NMR が広く使用されるようになってきました。その分析方法の一つが多変量解析です。混合物を単離せず、スペクトルの解析も行わずに、全体を一度に観察するパターン認識法です。パターン認識には、主成分分析 (PCA) や、分類法の一つである SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) 法などが有効とされています。これらの手法により、多検体の測定データを統計的に処理し、検体の特徴を抽出・分類することが可能です。

NMR を用いた多変量解析の応用範囲は、混合物系全般にわたります。以前は主に医学・薬学分野で使用されてきましたが、最近では材料系への適用も広がっています。

当研究所森之宮センターでは、 $^1\text{H}$  の共鳴周波数が 600 MHz および 400 MHz の NMR 装置を保有しており、溶液および固体状態での測定が可能です<sup>1)</sup>。また、最近 NMR での利用に特化した多変量解析ソフトを導入しました。ここでは、ソフトの紹介と解析例を示します。

### 仕様

今回導入したソフトウェアは、バイオネット研究所製の「ALICE10MLbn」です。同社の NMR 解析用ソフト「ALICE シリーズ」の多変量解析 (メタボロミクス) 用ソフトウェアとなります。

「ALICE10MLbn」は、NMR メーカーが提供するスペクトルデータを扱うことができ、多変量解析 (PCA、SIMCA 法) が実施可能です。

使い方については、測定データ (フーリエ変換の前後どちらでも可) を選択し、(必要に応じて) フーリエ変換、処理する範囲の選択、と順次選択していただくだけで、PCA 解析が行えます。

### 測定例

今回の測定・解析には、家庭用洗剤をサンプルとして使用しました。各洗剤は  $\text{D}_2\text{O}$  で 3.5 倍に希釈し、 $^1\text{H}$ -NMR 測定用の試料としました。測定には、JNM-ECZ400R/S1 (日本電子社製) の装置を使用し、測定温度 25°C、積算回数 8 回で測定を行いました。「ALICE10MLbn」での処理では、溶媒 (水) のシグナルを 4.75 ppm とし、4.00 ~ 1.50 ppm の範囲を 0.04 ppm の間隔で機械的に積分しました (これを「バケット積分」と呼びます)。その後、規格化処理を行い、PCA 解析を実施しました。図 1 には、家庭用洗剤 (身体用、衣類用、食器用) の  $^1\text{H}$ -NMR スペクトルに基づく PCA 解析の結果を示しています。

図 1 からわかるように、本ソフトではスコアプロット、NMR スペクトル、ローディングプロット、寄与率、第一主成分 (PC1) を 1 つの画面上で確認できます。また、この NMR スペクトルについては、図 2 に示すように、任意のサンプルを複数選択することで、スコアプロットとチャートの色がリンクし、その違いを比較・確認することができます。さらに、基準合わせなどの NMR の通常解析も同じ画面上で行えます。

本解析の結果、約 40% の寄与率がある PC1 の正側に衣類用洗剤が、負側に身体用洗剤が分類され、その間に食器用洗剤が位置していることがわかりました (図 1 スコアプロット参照)。なお PC2 は、各種別を分類する特徴を有していませんでした。図 2 に示したように、各種洗剤の NMR スペクトルを比較すると、4.00 ~ 3.40 ppm の範囲 (図 2 右の点線部分) においては、衣類用洗剤では 3.68 ppm のピークが目立ちます (図 2 右の赤矢印)。身体用洗剤や食器用洗剤にも含まれているものの、衣類用洗剤と比べ、周辺のピークも大きく確認できます。どの成分がグループ化に寄与しているのかを詳しく解

析するためには、各洗剤に含まれる化合物を網羅的に調べる必要があります。

### まとめ

「ALICE10MLbn」では、NMR スペクトルを確認しながら多変量解析を実施できます。また、バケット積分の結果は CSV ファイルとして出力可能であり、そのデータは他の多変量解析ソフトでも利用することができます。

また、森之宮センターにおける NMR に関する支援業務では、多変量解析だけでなく、構造解

析をはじめとする溶液・固体の各種 NMR 測定を行っています。詳細は担当者までお気軽にお問い合わせください。

### 参考文献

- 1) 岩井利之、隅野修平、三原正稔、静間基博：固体・液体試料測定用核磁気共鳴(NMR)システム—400 MHz NMR—、ORIST テクニカルシート、No. 20-16 (2021).

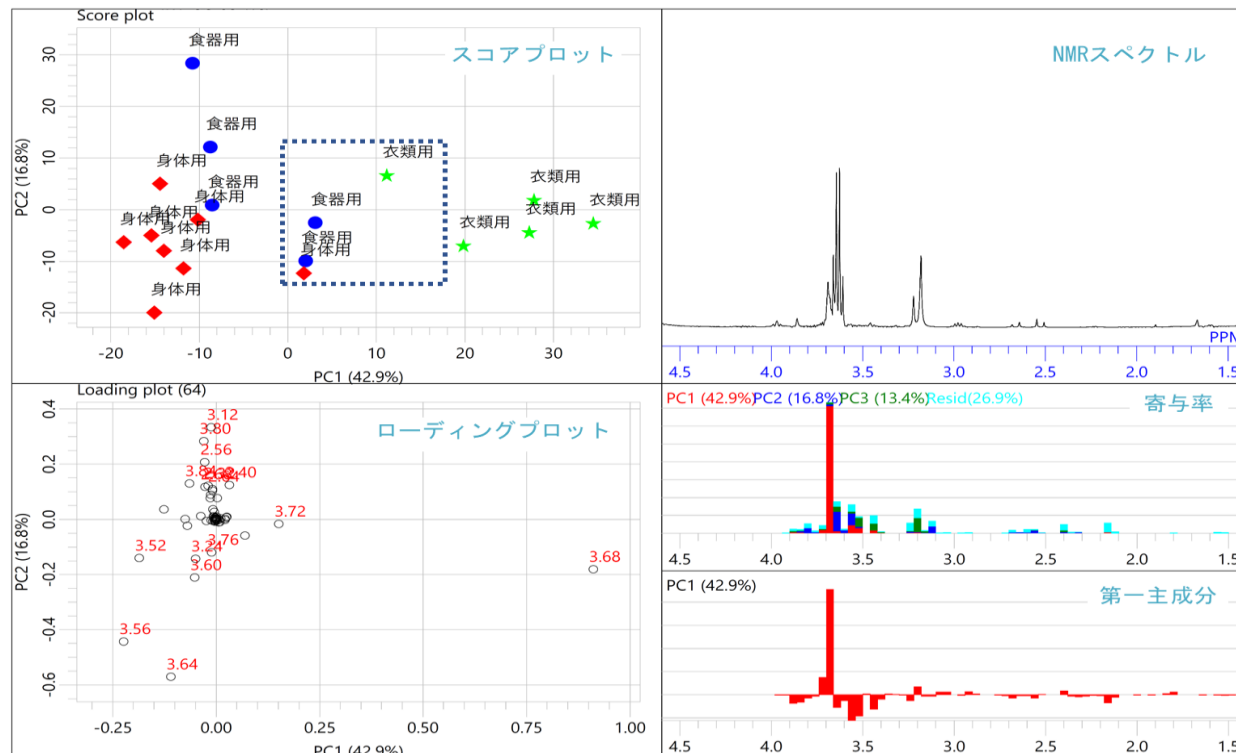


図 1. ALICE10MLbn の PCA 解析の様子：家庭用洗剤(身体用(◆)・衣類用(★)・食器用(●))の <sup>1</sup>H-NMR スペクトルにおける PCA 解析画面

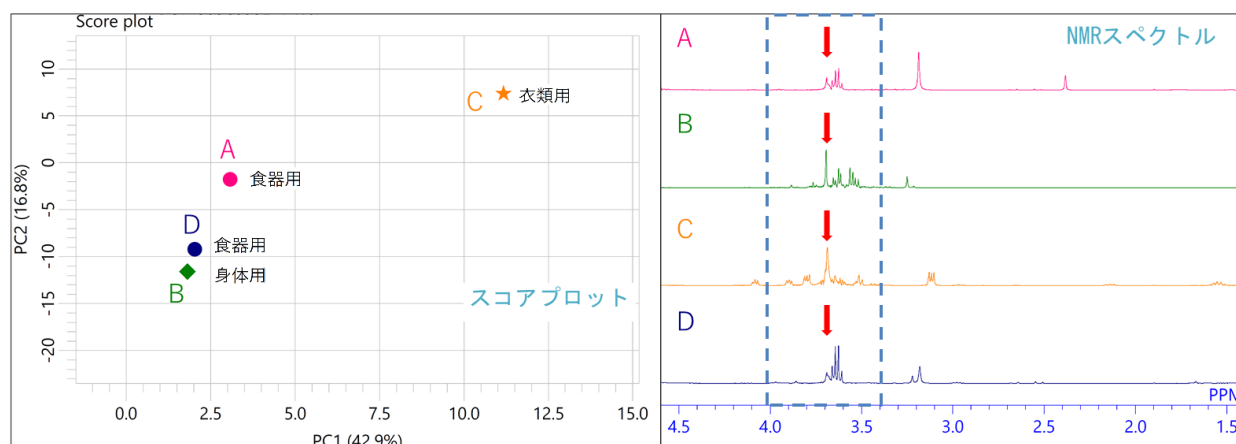


図 2. 図 1 のスコアプロットにおいて、点線で囲った範囲の 4 点(A~D)の NMR チャート

※ テクニカルシートの内容の一部または全部を転載する場合には、前もって大阪技術研に連絡の上、了解を得てください。

発行日 2026年4月1日  
 作成者 有機材料研究部 機能性材料合成研究室 隅野 修平、岩井 利之  
 Phone: 06-6963-8057 E-mail: sumino@orist.jp