

核磁気共鳴スペクトルの基礎演習：エステル

橋本 典史*

Basic Exercises of Nuclear Magnetic Resonance Spectra : Esters

Norifumi HASHIMOTO

概要

これまでに発表した核磁気共鳴スペクトルの基礎演習の論文において、高等学校の化学で取り扱われるアルコール、エーテル、アルケン及びカルボニル化合物の核磁気共鳴(NMR)スペクトルデータの基本となる解説とそれらの化合物に関連する演習問題を示してきた。

NMR スペクトルデータに基づく一連の教育方法は、高等学校レベルでも十分理解できる内容であることも示した。

今回の論文では、ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルを取り扱う。ただし、演習問題において、不斉炭素原子を含む光学活性物質は取り扱わない。

この教育方法は、与えられたNMRのスペクトルデータを学生や生徒が分析して、有機化合物の構造を決定する一連の思考過程の形成に十分役立つ内容である。

Keywords : 高等学校の化学, 核磁気共鳴スペクトル, エステル

1. 緒言

有機化合物の構造解析において、単純な炭素骨格から形成された有機化合物の核磁気共鳴(NMR)スペクトルデータから得られる基本情報を理解することは重要であると考えている。

今までに報告した核磁気共鳴スペクトルの論文において、高等学校の化学で取り扱われるアルコール、エーテル、アルケン及びカルボニル化合物の核磁気共鳴スペクトルデータの基本となる解説とそれらの化合物に関連する演習問題を示した^{1) - 4)}。

香川高専の教育研究報告の今回の号では、ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルを取り扱う。演習問題では、分子式が $C_9H_{11}COOC_2H_5$ で表され、不斉炭素原子をもたない物質を取り扱う。

* 香川高等専門学校 一般教育科

核磁気共鳴(NMR)スペクトルにおいて、不斉炭素原子をもつ光学活性物質の各鏡像体を判別することは、一般的にはできない。このことから、今回の論文においても演習問題では取り扱っていない。

演習問題以外で、ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルを次に挙げる。ギ酸メチル、ギ酸エチル、酢酸メチル、酢酸エチル、プロピオン酸メチル、プロピオン酸エチル、フェニル酢酸メチル、フェニル酢酸エチル、2-フェニルプロピオン酸メチル、2-フェニルプロピオン酸エチル、3-フェニルプロピオン酸メチル、3-フェニルプロピオン酸エチルの各化合物の ^{13}C NMR スペクトルと 1H NMR スペクトルを示し、ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルの電子的特徴の解説を行った。

2. ^{13}C NMR 及び ^1H NMR の重要な化学シフト

表1 ^{13}C NMR スペクトルの化学シフト

^{13}C の種類	化学シフト/ppm
	5~45
	30~80
Z = N, O, X	
	65~100
	100~140
	120~150
	165~175
	175~185
	190~200
	205~220

エステルカルボニル部位の炭素の ^{13}C NMR スペクトルの化学シフトは、表1に示されている。この炭素のシグナルは、かなり低磁場側の165~175ppmに発現する。

また、ベンゼン環の ^{13}C NMR スペクトルの化学シフトは、表1から判断すると、シグナルは120~150ppmに現れる。

この論文では、高度なスペクトル解析を行うことが目的ではないため、エステルのアルコール由来の部位は、メタノールとエタノールまでとする。

この理由として、炭素数が多いカルボン酸と炭素数が多いアルコールから合成されるエステルの炭素のシグナルが重なる可能性が高くなるためである。

更に、ベンゼン環の置換様式は取り扱わない。つまり、 C_6H_5 基(Ph基)に留める。また、 ^{13}C NMR スペクトルにおいて、Ph基の全ての炭素の種類と化学シフトはスペクトル上に表記している。演習問題においても同様とする。

表2 ^1H NMR スペクトルの化学シフト

^1H の種類	化学シフト/ppm
	0.9~2
RCH_3	~0.9
R_2CH_2	~1.3
R_3CH	~1.7
	1.5~2.5
Z = C, O	
	~2.5
	2.5~4
Z = O, X	
	4.5~6
	6.5~8
	9~10
	10~12
RO-H	1~5
R-N-H	1~5

ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルの ^1H NMR スペクトルの化学シフトは、カルボン酸部位とアルコール部位の2カ所を考察する必要がある。それぞれの部位の水素のシグナルは、表2に示されている。

炭素数が多いカルボン酸と炭素数が多いアルコールから合成されるエステルの水素のシグナルが重なる可能性が高くなる。このことから、エステルのアルコール由来の部位は、メタノールとエタノールまでとする。

また、ベンゼンの ^1H NMR スペクトルの化学シフトは、表2から判断すると、シグナルは6.5~8ppmに発現する。ベンゼンのシグナルは複雑になりやすいので、シグナルの詳細な解析は行わない。

更に、光学異性体の取り扱いについても、今までと同様な取り扱いとする。

3. ベンゼン環をもつエステルとベンゼン環をもたないエステルのNMR スペクトルの解説

前回の論文と同様に NMR の専門書のような高度なスペクトル解析は行わない。

また、各 NMR スペクトルの化学シフト値の基準となる物質のシグナルは省略している。

①図1には、ギ酸メチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

ギ酸メチルには化学的環境が異なる炭素が2種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppm付近にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

②図2には、ギ酸メチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

ギ酸メチルには化学的環境が異なる水素が2種類存在する。表2に示されているように、ギ酸由来の水素原子は9~10ppm付近にシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppmにシグナルが発現している。

③図3には、ギ酸エチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

ギ酸エチルには化学的環境が異なる炭素が3種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppm付近にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

④図4には、ギ酸エチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

ギ酸エチルには化学的環境が異なる水素が3種類存在する。表2に示されているように、ギ酸由来の水素原子は9~10ppm付近にシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppm付近にシグナルが発現している。

⑤図5には、酢酸メチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

酢酸メチルには化学的環境が異なる炭素が3種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

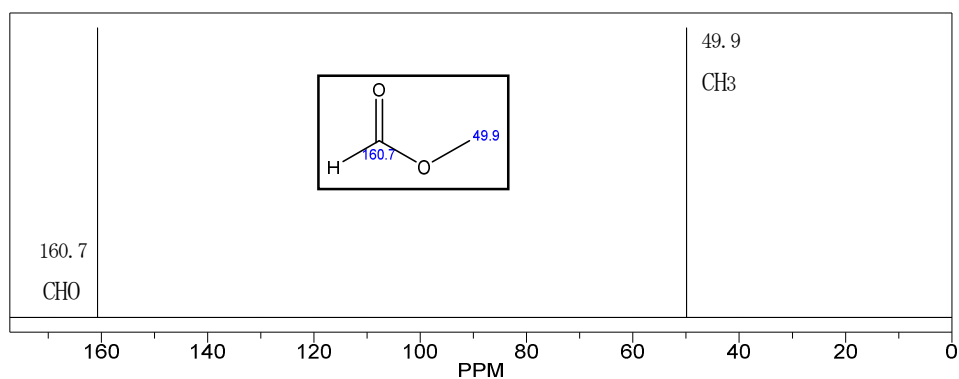


図1 ギ酸メチルの¹³C NMR スペクトル

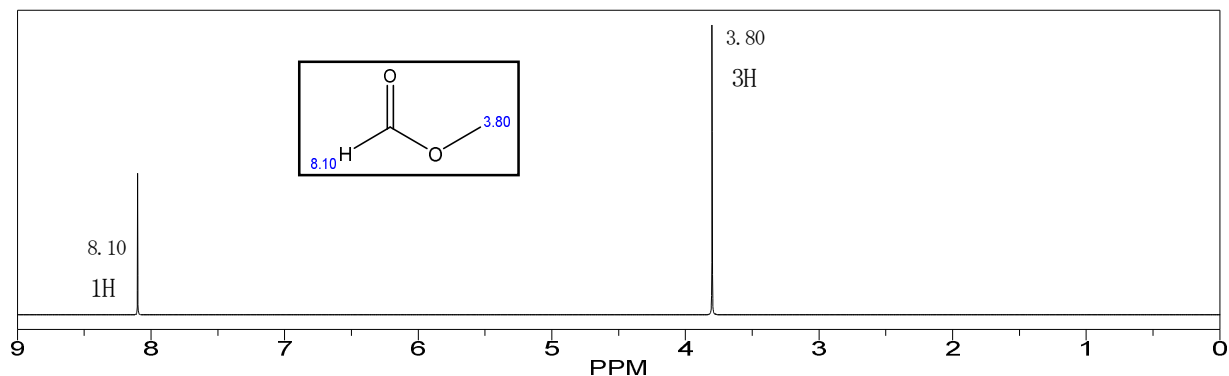


図2 ギ酸メチルの¹H NMR スペクトル

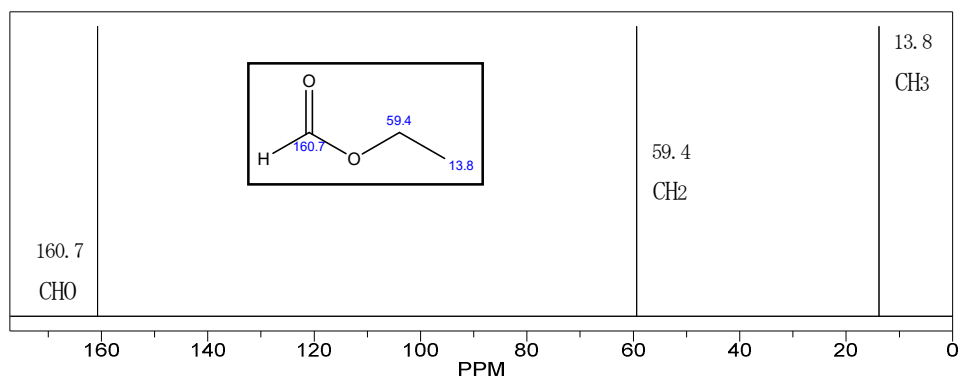


図3 ギ酸エチルの¹³C NMR スペクトル

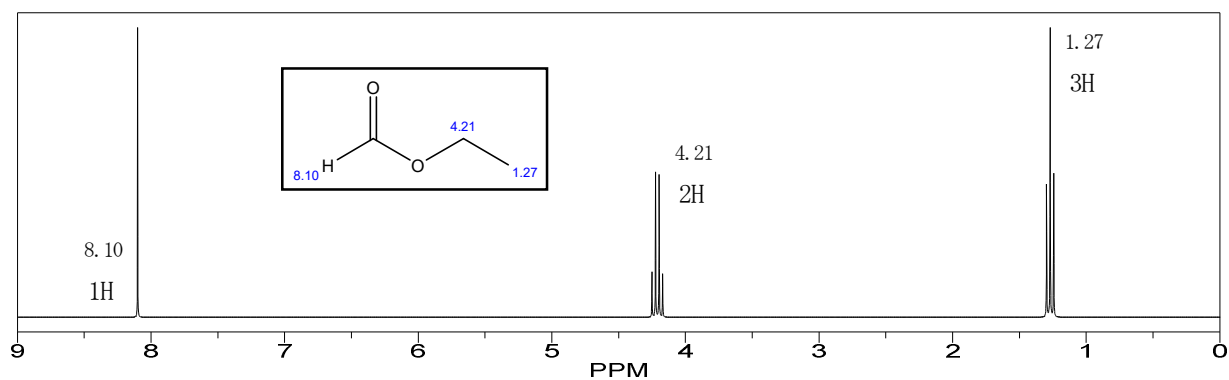


図4 ギ酸エチルの¹H NMR スペクトル

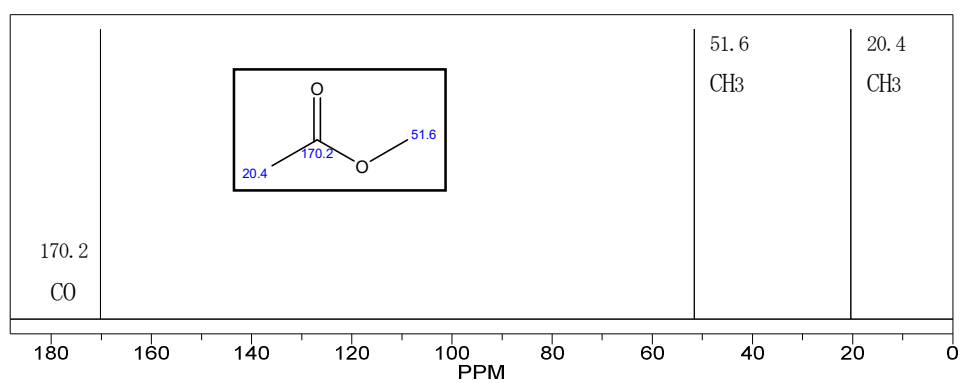


図5 酢酸メチルの¹³C NMR スペクトル

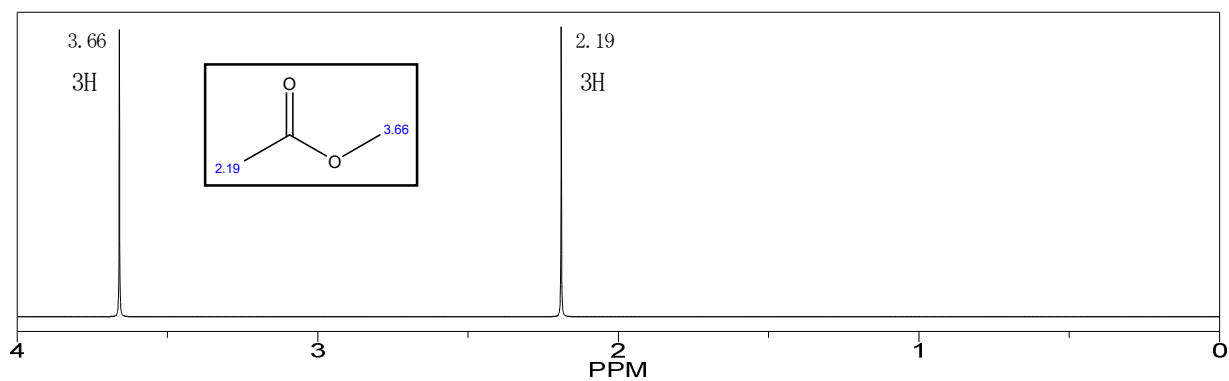


図6 酢酸メチルの¹H NMR スペクトル

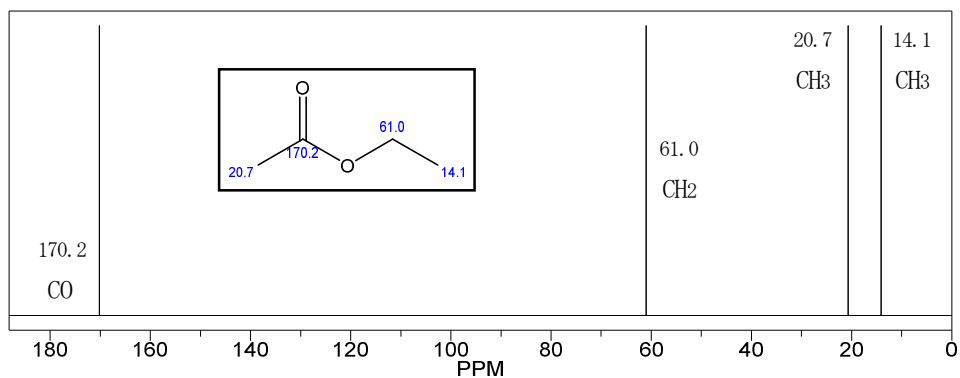


図7 酢酸エチルの¹³C NMR スペクトル

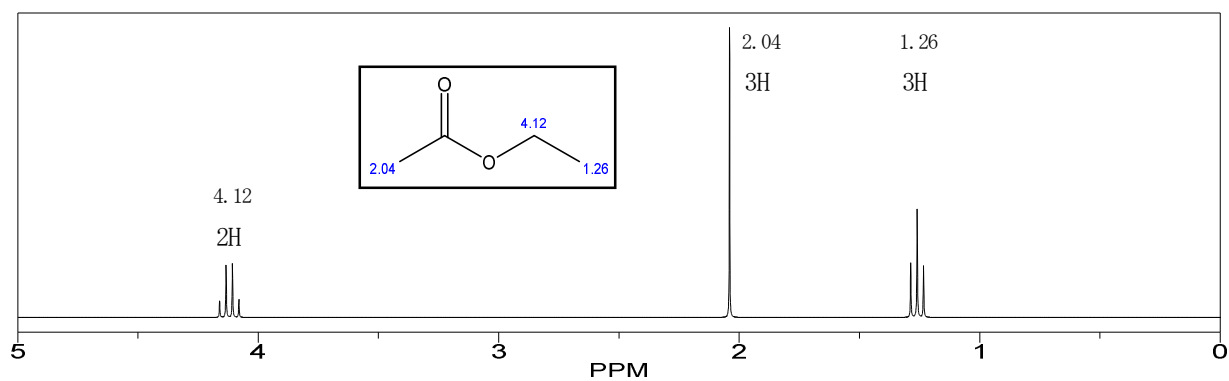


図8 酢酸エチルの¹H NMR スペクトル

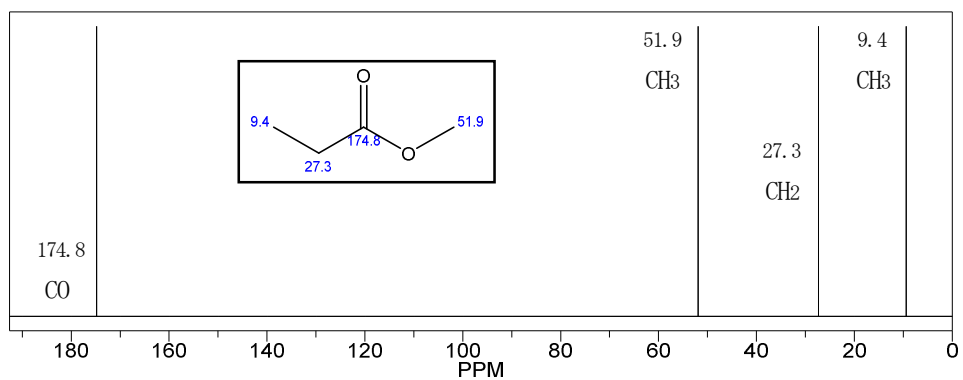


図9 プロピオン酸メチルの¹³C NMR スペクトル

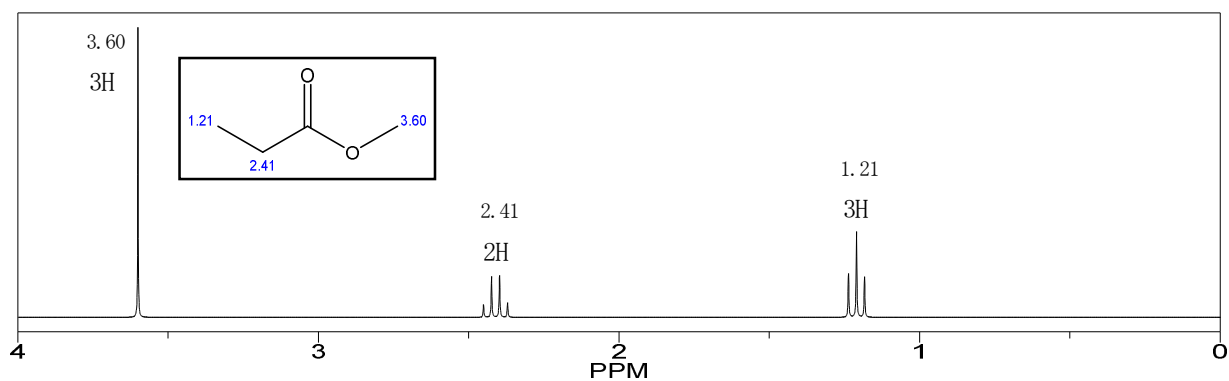


図10 プロピオン酸メチルの¹H NMR スペクトル

⑥図6には、酢酸メチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

酢酸メチルには化学的環境が異なる水素が2種類存在する。表2に示されているように、酢酸由来の水素原子は1.5~2.5ppm付近にシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppmにシグナルが発現している。

⑦図7には、酢酸エチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

酢酸エチルには化学的環境が異なる炭素が4種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

⑧図8には、酢酸エチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

酢酸エチルには化学的環境が異なる水素が3種類存在する。表2に示されているように、酢酸由来の水素原子は1.5~2.5ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppm付近にシグナルが発現している。

⑨図9には、プロピオン酸メチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

プロピオン酸メチルには化学的環境が異なる炭素が4種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

⑩図10には、プロピオン酸メチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

プロピオン酸メチルには化学的環境が異なる水素が3種類存在する。表2に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子は1.5~2.5ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppmにシグナルが発現している。

ここで、2種類のCH₃の水素原子の化学シフト値と分裂パターンは、明らかな差が生じている。

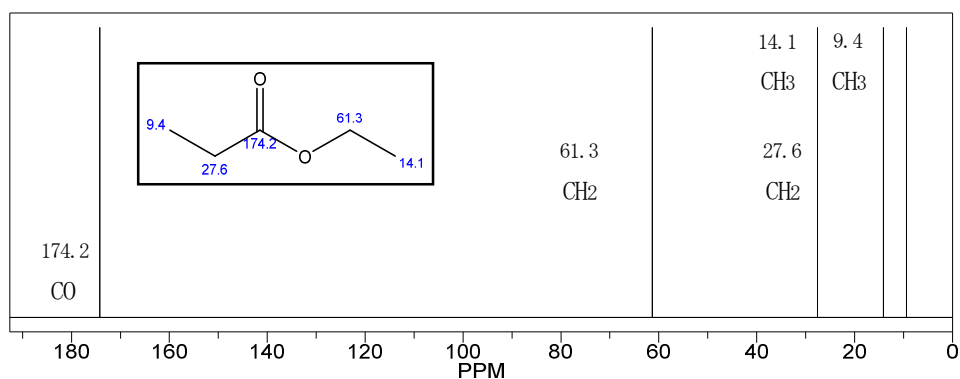


図11 プロピオン酸エチルの¹³C NMR スペクトル

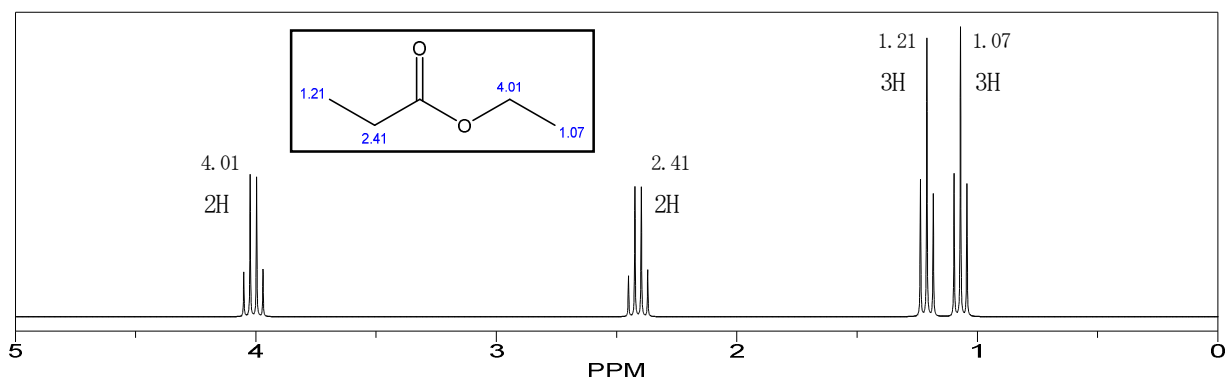


図12 プロピオン酸エチルの¹H NMR スペクトル

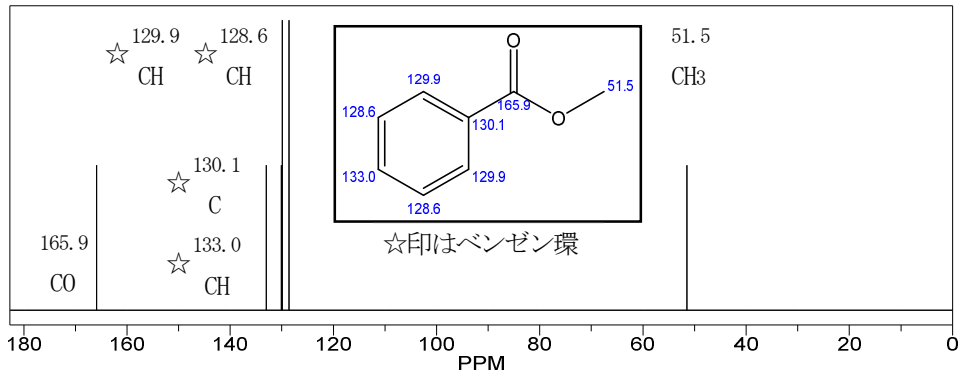


図13 安息香酸メチルの¹³C NMR スペクトル

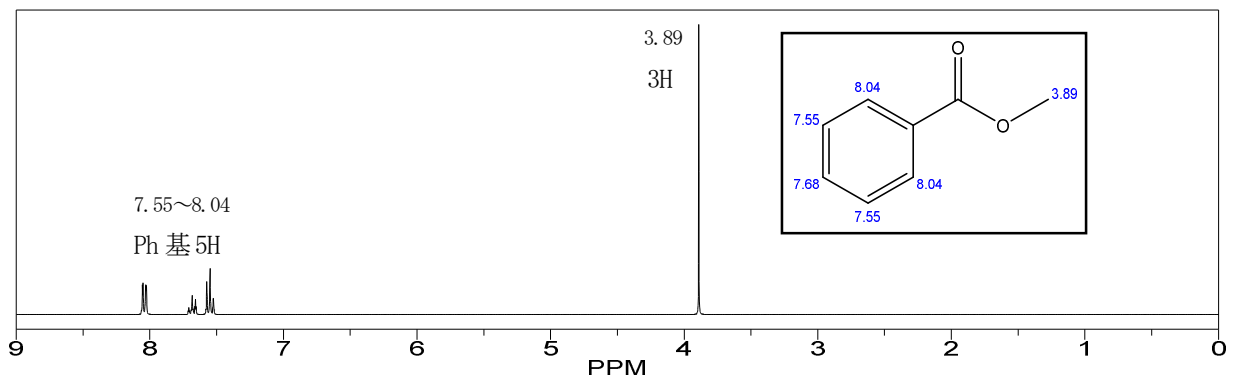


図14 安息香酸メチルの¹H NMR スペクトル

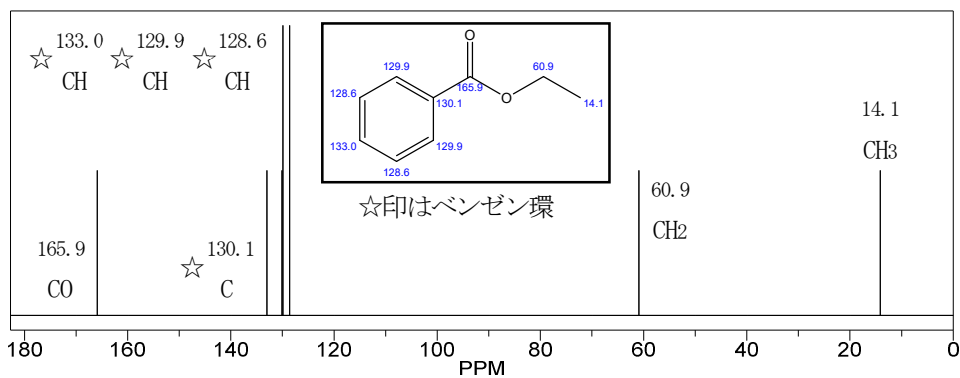


図15 安息香酸エチルの¹³C NMR スペクトル

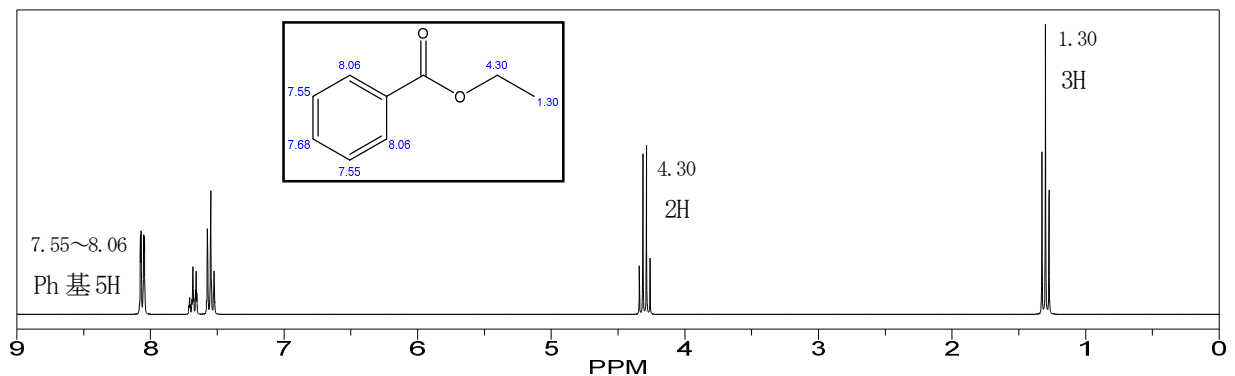


図16 安息香酸エチルの¹H NMR スペクトル

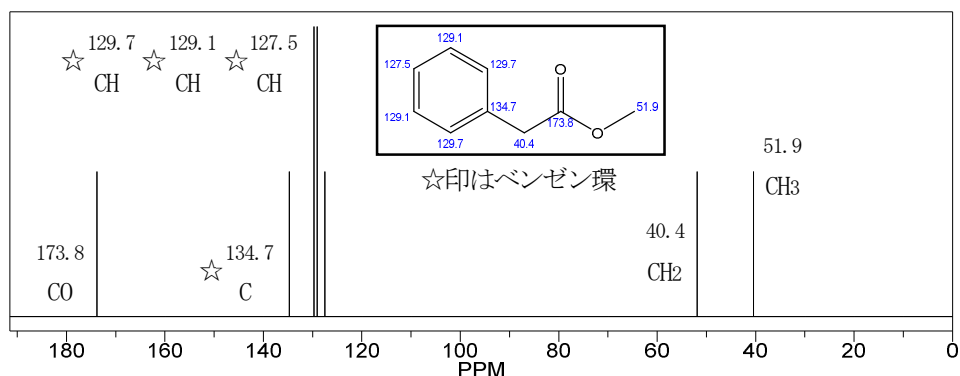


図17 フェニル酢酸メチルの¹³C NMR スペクトル

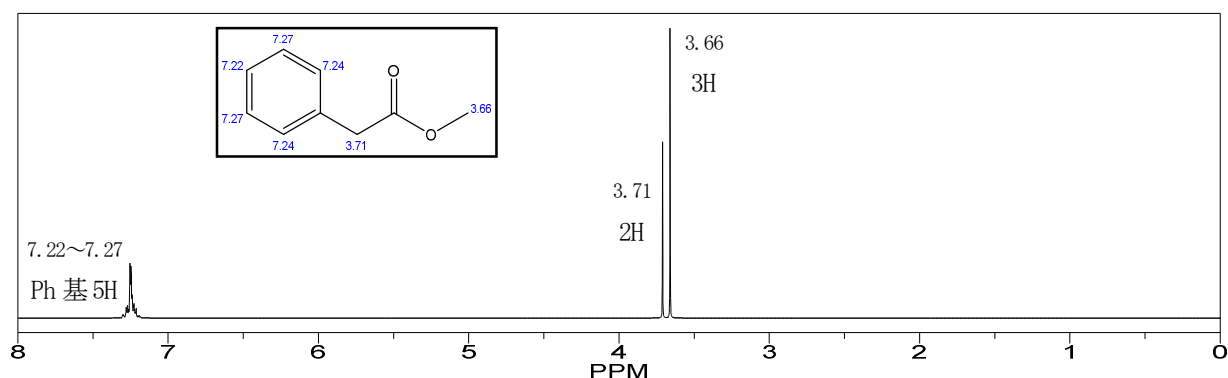


図18 フェニル酢酸メチルの¹H NMR スペクトル

⑪図11には、プロピオン酸エチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。

プロピオン酸エチルには化学的環境が異なる炭素が5種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

⑫図12には、プロピオン酸エチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。

プロピオン酸エチルには化学的環境が異なる水素が4種類存在する。表2に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子は1.5~2.5ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppm付近にシグナルが発現している。

ここで、2つのCH₃の水素原子の化学シフト値が近いことに注目してほしい。炭素の数が多くなるに従って、NMR スペクトル解析の困難度が上昇する。

⑬図13には、安息香酸メチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記載されている。Ph基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

安息香酸メチルは、Ph基以外で化学的環境が異なる炭素は2種類存在する。表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

⑭図14には、安息香酸メチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

安息香酸メチルは、Ph基以外で化学的環境が異なる水素は1種類存在する。表2に示されているように、アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppmにシグナルが発現している。

また、Ph基の水素原子の分裂はNMR スペクトル解析の困難度を上昇させていることが理解できる。

⑮図 15 には、安息香酸エチルの ^{13}C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記載されている。Ph 基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

安息香酸エチルは、Ph 基以外で化学的環境が異なる炭素は 3 種類存在する。表 1 に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は 165~175ppm にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 30~80ppm にシグナルが発現している。

⑯図 16 には、安息香酸エチルの ^1H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph 基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

安息香酸エチルは、Ph 基以外で化学的環境が異なる水素は 2 種類存在する。表 2 に示されているように、アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 2.5~4ppm 付近にシグナルが発現している。

また、Ph 基の水素原子の分裂は NMR スペクトル解析の困難度を上昇させていることが理解できる。

⑰図 17 には、フェニル酢酸メチルの ^{13}C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph 基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

フェニル酢酸メチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる炭素が 3 種類存在する。表 1 に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は 165~175ppm にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 30~80ppm にシグナルが発現している。

⑱図 18 には、フェニル酢酸メチルの ^1H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph 基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

フェニル酢酸メチルには化学的環境が異なる水素が 5 種類存在する。表 2 に示されているように、酢酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子はベンゼン環の電子的な影響で 3.71ppm に現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 2.5~4ppm にシグナルが発現している。

⑲図 19 には、フェニル酢酸エチルの ^{13}C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph 基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

フェニル酢酸エチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる炭素が 4 種類存在する。表 1 に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は 165~175ppm にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 30~80ppm にシグナルが発現している。

⑳図 20 には、フェニル酢酸エチルの ^1H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph 基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

フェニル酢酸エチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる水素が 3 種類存在する。表 2 に示されているように、酢酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子はベンゼン環の電子的な影響で 3.71ppm に現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 2.5~4ppm 付近にシグナルが発現している。

㉑図 21 には、3-フェニルプロピオン酸メチルの ^{13}C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph 基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

3-フェニルプロピオン酸メチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる炭素が 4 種類存在する。表 1 に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は 165~175ppm にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 30~80ppm にシグナルが発現している。

㉒図 22 には、3-フェニルプロピオン酸メチルの ^1H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph 基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

3-フェニルプロピオン酸メチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる水素が 3 種類存在する。表 2 に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子は 1.5~2.5ppm に現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 2.5~4ppm にシグナルが発現している。

㉓図 23 には、3-フェニルプロピオン酸エチルの ^{13}C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph 基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

3-フェニルプロピオン酸エチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる炭素が 5 種類存在する。

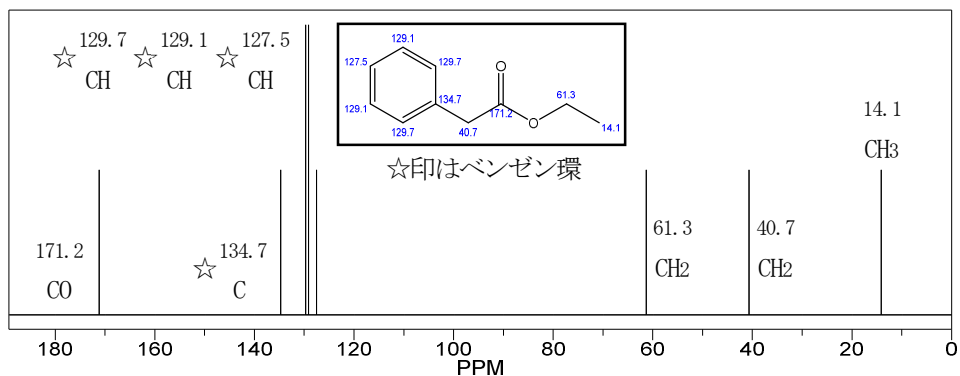


図19 フェニル酢酸エチルの¹³C NMR スペクトル

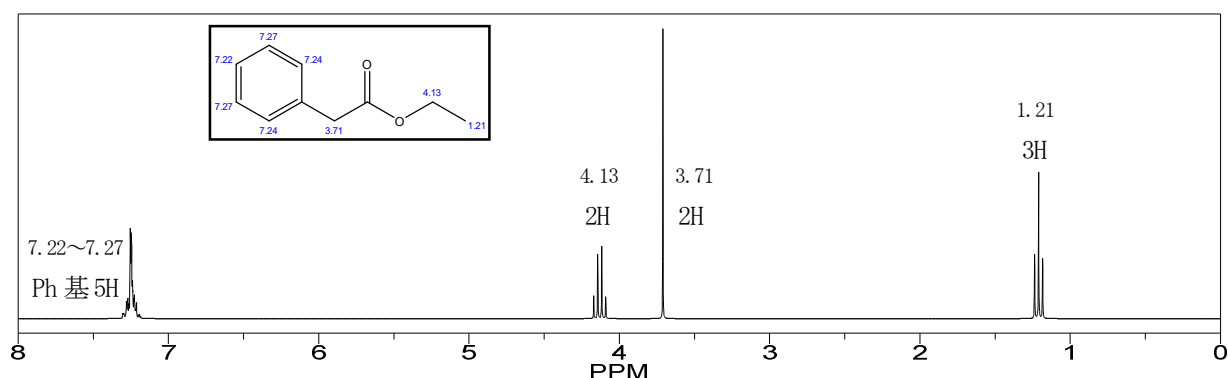


図20 フェニル酢酸エチルの¹H NMR スペクトル

表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

②4図24には、3-フェニルプロピオン酸エチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

3-フェニルプロピオン酸エチルには、Ph基以外で化学的環境が異なる水素が4種類存在する。表2に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子は1.5~2.5ppm付近に現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppm付近にシグナルが発現している。

②5図25には、2-フェニルプロピオン酸メチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

2-フェニルプロピオン酸メチルには、Ph基以外で化学的環境が異なる炭素が4種類存在する。

表1に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は165~175ppmにシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で30~80ppmにシグナルが発現している。

②6図26には、2-フェニルプロピオン酸メチルの¹H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

2-フェニルプロピオン酸メチルには、Ph基以外で化学的環境が異なる水素が3種類存在する。表2に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子はベンゼン環の電子的な影響で3.71ppmに現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で2.5~4ppmにシグナルが発現している。

②7図27には、2-フェニルプロピオン酸エチルの¹³C NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と炭素の種類が記入されている。Ph基に所属する炭素のシグナルの情報は全て示している。

2-フェニルプロピオン酸エチルには、Ph基以外で化学的環境が異なる炭素が5種類存在する。

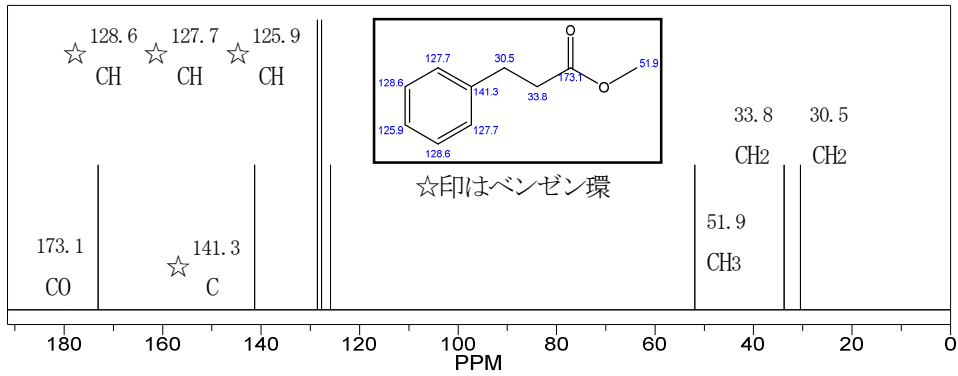


図21 3-フェニルプロピオン酸メチルの¹³C NMR スペクトル

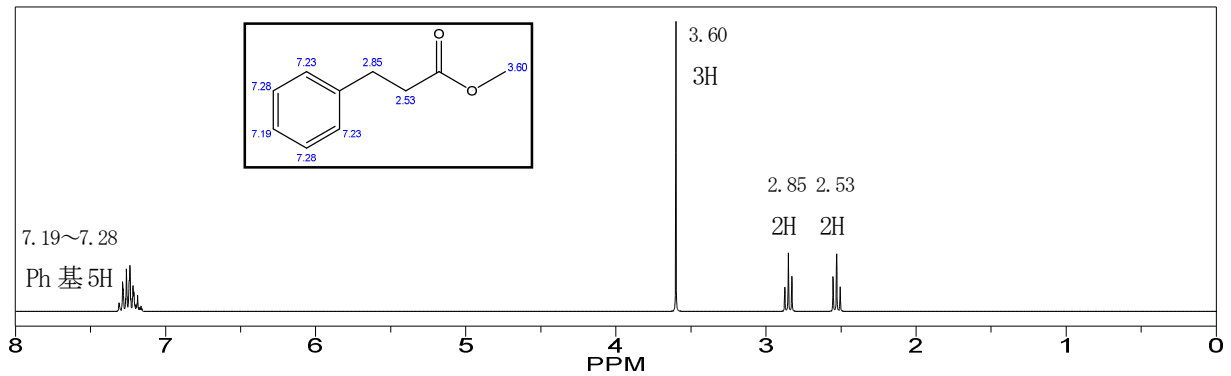


図22 3-フェニルプロピオン酸メチルの¹H NMR スペクトル

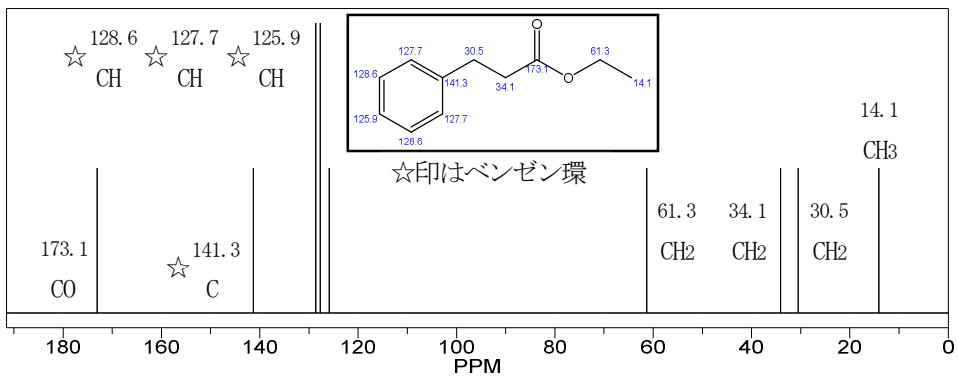


図23 3-フェニルプロピオン酸エチルの¹³C NMR スペクトル

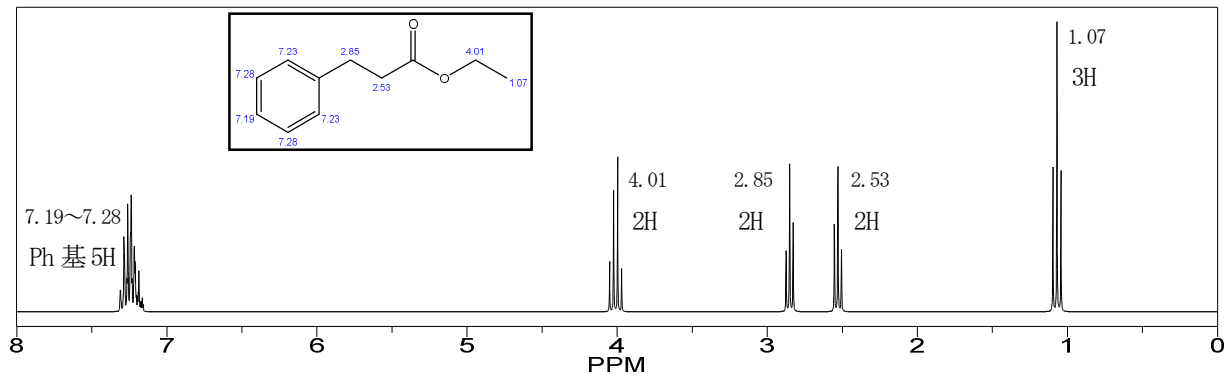


図24 3-フェニルプロピオン酸エチルの¹H NMR スペクトル

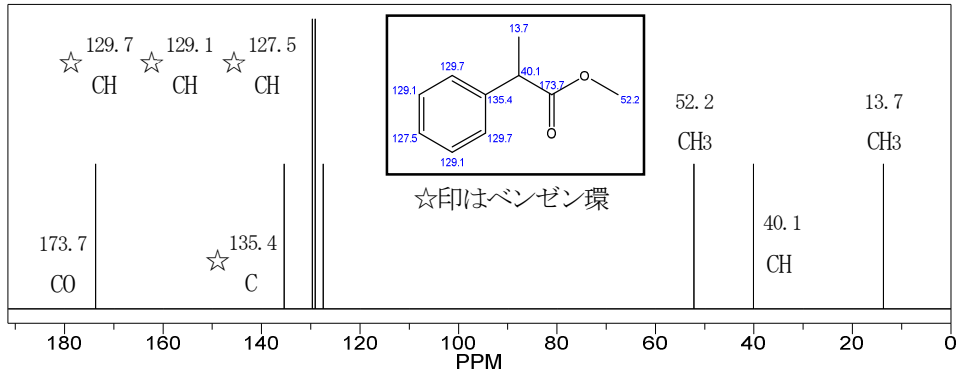


図25 2-フェニルプロピオン酸メチルの¹³C NMR スペクトル

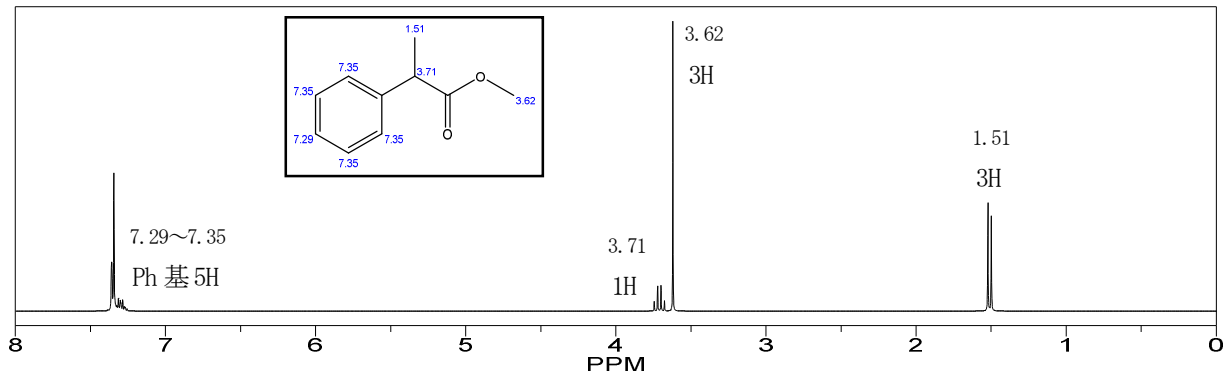


図26 2-フェニルプロピオン酸メチルの¹H NMR スペクトル

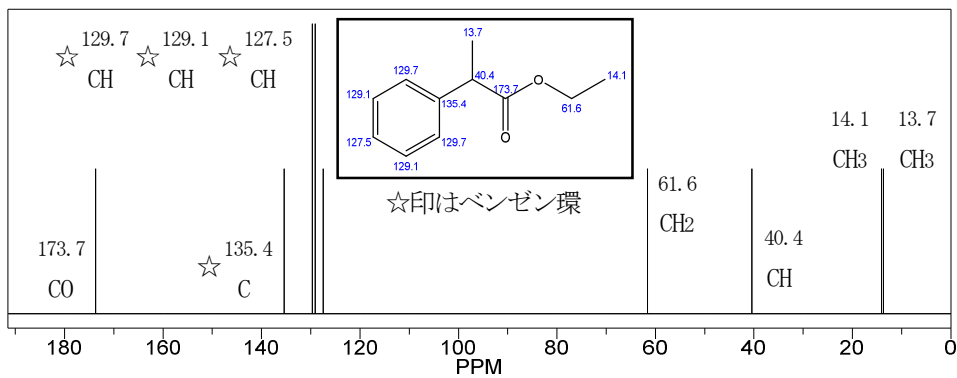


図27 2-フェニルプロピオン酸エチルの¹³C NMR スペクトル

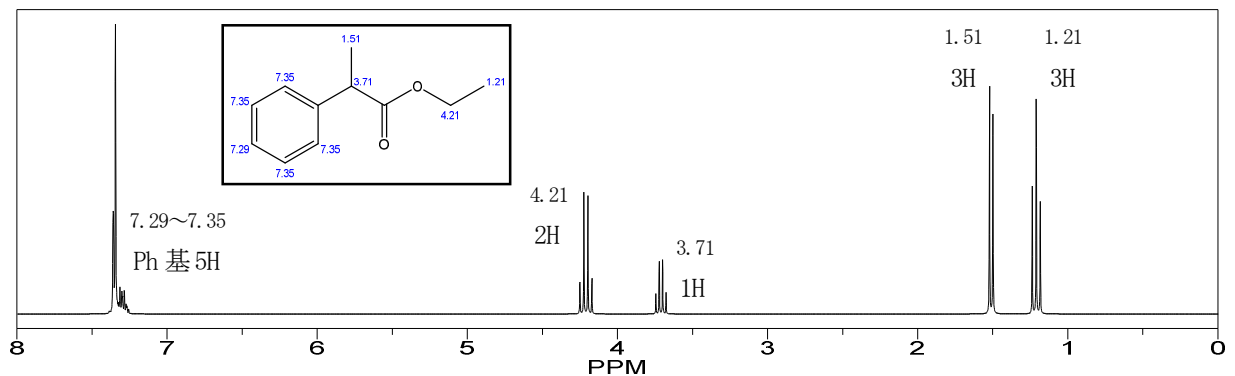


図28 2-フェニルプロピオン酸エチルの¹H NMR スペクトル

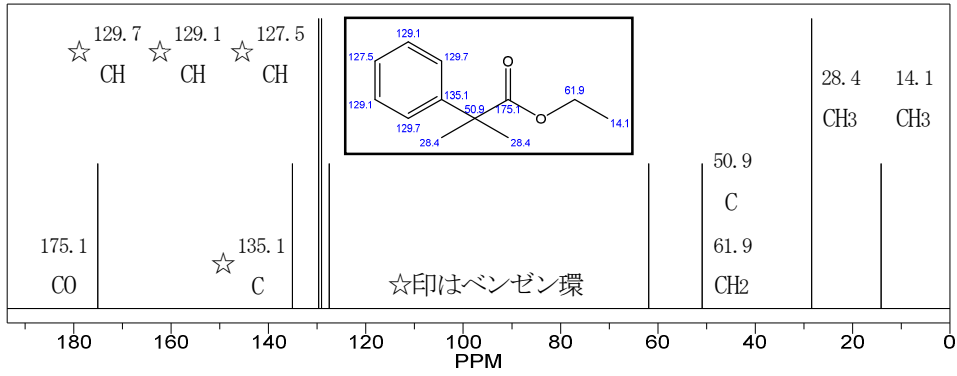


図 29 A ¹³C NMR スペクトル 2-メチル-2-フェニルプロピオン酸エチル

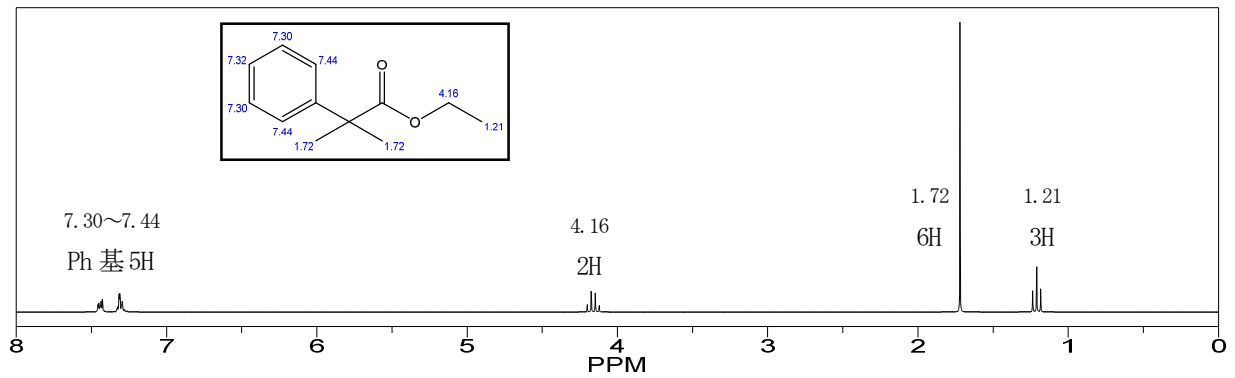


図 30 A ¹H NMR スペクトル 2-メチル-2-フェニルプロピオン酸エチル

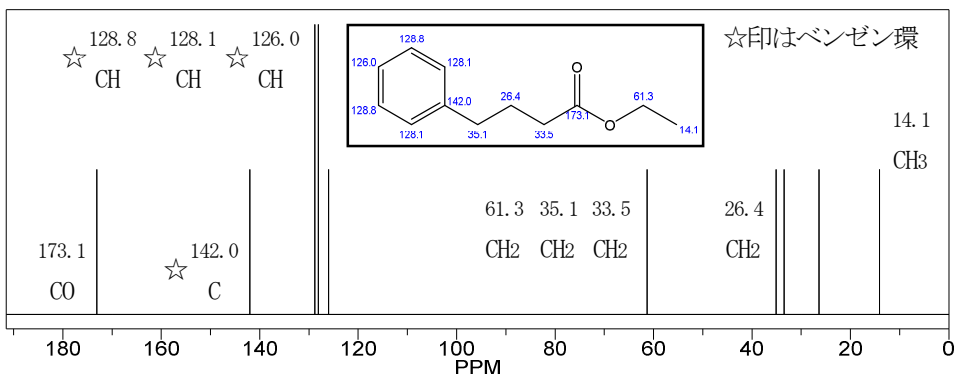


図 31 B ¹³C NMR スペクトル 4-フェニルブタン酸エチル

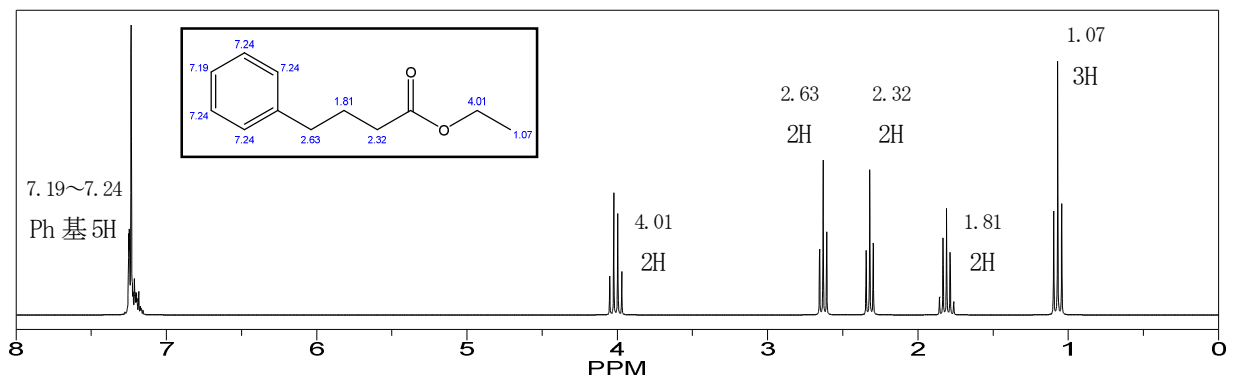


図 32 B ¹H NMR スペクトル 4-フェニルブタン酸エチル

表 1 に示されているように、カルボニル由来の炭素原子は 165~175ppm にシグナルが発現している。アルコール由来の炭素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 30~80ppm にシグナルが発現している。

⑳図 28 には、2-フェニルプロピオン酸エチルの ^1H NMR スペクトルのシグナルに化学シフト値と水素の種類が付記されている。Ph 基に所属する水素のシグナルの情報は全て示している。

2-フェニルプロピオン酸エチルには、Ph 基以外で化学的環境が異なる水素が 4 種類存在する。表 2 に示されているように、プロピオン酸由来のカルボニル部位の隣の炭素に結合している水素原子はベンゼン環の電子的な影響で 3.71ppm に現れている。アルコール由来の水素原子は、酸素原子の電気陰性度が原因で 2.5~4ppm 付近にシグナルが発現している。

4. 演習：分子式 $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{COOC}_2\text{H}_5$ であり、不斉炭素原子をもたない各異性体の特定

①各 NMR スペクトルにおいて、四角に囲まれた分子式と名称は、当然隠した状態で学生に問題を提示する。

$\text{C}_9\text{H}_{11}\text{COOC}_2\text{H}_5$ の分子式で表され、不斉炭素原子をもたないエステルとして、2 種類が導出される。

②エステルの候補は、2-メチル-2-フェニルプロピオン酸エチルと 4-フェニルブタン酸エチルである。

③ ^{13}C NMR スペクトルにおいて、最初に化学的環境が異なる CH_3 の数から容易に 2 種類のエステルを特定できる。つまり、 CH_3 が 2 種類のエステルは、2-メチル-2-フェニルプロピオン酸エチルである。一方、 CH_3 が 1 種類のエステルは、4-フェニルブタン酸エチルである。

^{13}C NMR スペクトルの CH_3 以外の情報も 2 種類のエステルの構造に矛盾しない。

更に、 ^1H NMR スペクトルの情報もまた、これらのエステルの構造を補完する。

5. 結言

今までに発表した論文と同様に、この教育方法によって、学生や生徒は、核磁気共鳴スペクトルの基本的な内容と代表的な有機化合物のスペクトルデータを理解し、未知の有機化合物の構造を決定する手順を習得できる。

今後は、塩素原子を含む有機化合物の NMR スペクトルの教材を開発していきたい。

参考文献

- 1) 橋本典史, 高等学校の化学への核磁気共鳴スペクトルの導入-1, 香川高等専門学校研究紀要, 13, 135-144, 2022.
- 2) 橋本典史, 核磁気共鳴スペクトルの基礎演習: アルケンとベンゼン, 香川高等専門学校教育研究報告, 1, 115-125, 2025.
- 3) 橋本典史, 核磁気共鳴スペクトルの基礎演習: アルデヒドとケトン及びカルボン酸, 香川高等専門学校教育研究報告, 1, 127-138, 2025.
- 4) 橋本典史, 核磁気共鳴スペクトルの基礎演習: 分子式 $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$ の異性体の特定, 香川高等専門学校教育研究報告, 1, 139-149, 2025.
- 5) 各 NMR スペクトルは, PerkinElmer の ChemBioDraw を用いて作成した。