

食品衛生基準科学研究費補助金（食品安全科学研究事業）
食品添加物の試験法の向上及び摂取量に基づく安全性確保に関する研究
令和 7 年度分担研究報告書

NMR スピン情報を活用した規格試験の開発に関する研究

—¹H スピン情報を活用した確認試験の検討—

研究分担者 西崎雄三 東洋大学食環境科学部 准教授

研究要旨 核磁気共鳴分光法（NMR）により得られる ¹H スピン情報は、磁場強度に依存しない分子固有の物理量である。したがって、¹H スピン情報に基づいて、任意の磁場強度における参照 NMR スペクトルをシミュレーションすることが可能である。本研究では、食品添加物公定書に収載されている定量用標準品 8 種を対象に、¹H 共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz で得られたスペクトルに対して反復計算を実施し、¹H スピン情報を精確に決定した。600 MHz と 400 MHz で得られたスピン情報には一部差が認められたが、化学シフトの差は最大でも 0.1% 程度、スピン結合定数の差も絶対値としては小さいものであった。600 MHz で得られた ¹H スピン情報を用いて参照 NMR スペクトルをシミュレーションし、400 MHz 及び 60 MHz で得られた実測スペクトルと比較した結果、化学シフト、多重度及び信号強度比はいずれも良好に一致した。このことから、600 MHz と 400 MHz の間で確認された ¹H スピン情報の差は、参照 NMR スペクトルをシミュレーションする上で無視できる程度に小さいと判断した。以上より、本研究で決定した ¹H スピン情報は参照 NMR スペクトルをシミュレーションするに十分な精確性を有し、食品添加物公定書の確認試験として利用可能であることを示した。

A. 研究目的

核磁気共鳴分光法（NMR）は ¹H などの原子核を直接観測する分析手法であり、主に化学構造解析に用いられてきた。化学物質の ¹H 信号は、その分子内に存在する ¹H 核の化学的環境に応じて特定の位置に観測され、これは化学シフトと呼ばれる。また、隣接核とのスピン—スピン相互作用により分裂し、その分裂幅はスピン結合定数（*J* 値）として表される。これらの化学シフト及びスピン結合定数からなる ¹H スピン情報は、量子力学に基づく分子固有の物理量であり、理論的には NMR 装置の磁場強度に依存しない。

したがって、¹H スピン情報が規定されていれば、分析者が使用する NMR 装置の磁場強度に対応した参照 NMR スペクトルをシミュレーションすることができ、この参照 NMR スペクトルと実測スペクトルの照合により精確な確認試験が可能となる。

この特性を踏まえ、第十九改正日本薬局方では「ヘスペリジン、定量用」に対して、ヘスペリジンの ¹H スピン情報を規定し、参照 NMR スペクトルとの照合を確認試験として採用している。¹⁾ また、USP においても抗ウイルス薬レムデシビルに対し同様の確認試験が採用されてい

る。²⁾

¹H スピン情報は、反復計算を介して精確に求めることができる。最近では、NMR solutions 社が開発した『Cosmic Truth』をはじめとする反復計算ソフトウェアの進展により、高性能な計算環境を必要とせず、汎用的な PC 環境においても安定して動作し、短時間での収束計算が可能となった。このように、反復計算を介して ¹H スピン情報を求める手法は HiFSA (¹H iterative Full Spin Analysis) と呼ばれる。³⁾

本研究では、食品添加物公定書に収載されている定量用試薬 8 種 (アゾキシストロビン、カフェイン、ジフェニルアミン、*p*-ヒドロキシ安息香酸、*p*-ヒドロキシ安息香酸メチル、ピリメタニル、フルジオキシソニル、ロスマリン酸) を対象に、¹H スピン情報を求め、この ¹H スピン情報に基づく参照 NMR スペクトルをシミュレーションし、確認試験としての利用可能性を評価することを目的とする。

B. 研究方法

B-1) 装置

高磁場 NMR 装置として、日本電子(株) 製 JNM-ECZL600G (600.17 MHz) 及び Bruker 社 製 AVANCE NEO 400 Nanobay (400.13 MHz) を用いた。卓上 NMR は、マグリテック社製の Spinsolve 60ULTRA Carbon (62.38 MHz) を用いた。化学シフトは内部標準物質：1,4-BTMSB-*d*₄ または DSS-*d*₆ のピークを 0 ppm に合わせた。

B-2) 試薬類

アゾキシストロビン (Cat No. 010-

24281)、ジフェノコナゾール (Cat No. 042-25241)、*p*-ヒドロキシ安息香酸メチル (Cat No. 138-02632)、ピリメタニル (Cat No. 164-21753)、フルジオキシソニル (Cat No. 064-06001)、プロピコナゾール (Cat No. 169-16771) 及びロスマリン酸 (Cat No. 182-02691) は富士フィルム和光純薬(株) から購入した。カフェイン (Cat No. 56396-100MG) は Sigma-Aldrich 社、ジフェニルアミン (Cat No. D0872) は東京化成工業(株)、*p*-ヒドロキシ安息香酸 (Cat No. 18508-62) はナカライテスク社製を用いた。

重アセトン (Cat No. 012-26681)、重アセトニトリル (Cat No. 019-26691)、重ジメチルスルホキシド (Cat No. 048-34251)、重水 (Cat No. 047-34243) 及び重メタノール (Cat No. 138-18703) は富士フィルム和光純薬(株) から購入した。

qNMR 用基準物質である 1,4-ビス(トリメチルシリル)ベンゼン-*d*₄ (1,4-BTMSB-*d*₄) 認証標準物質 (Cat No. 024-17031) 及び 3-(トリメチルシリル)-1-プロパン-1,1,2,2,3,3-*d*₆-スルホン酸ナトリウム (DSS-*d*₆) 認証標準物質 (Cat No. 044-31671) は富士フィルム和光純薬(株) から購入した。

B-3) 試料調製

冷蔵庫から取り出した試薬を室温に戻すまでデシケーターの中で静置させた。続いて、試薬の蓋を開封し、ウルトラミクロ天秤の側に 30 分以上静置させた。食品添加物公定書の試薬規格に倣い、試料を精密に量りとり、重水素化溶媒を加えて溶解させた。この液 0.6 mL を外径

5 mm の NMR 試料管に移して封管し、qNMR 測定に付した。

B-4) NMR 測定条件

高磁場 NMR、卓上 NMR とともに定量的な測定条件にしたがった。すなわち、遅延時間は 60 秒に設定した。また、食品添加物公定書にしたがって、サンプルの回転は止めて、かつ ^{13}C デカップリングを有効にした。取り込み時間は、高磁場 NMR で 4 秒、卓上 NMR で 3.2 秒に設定した。なお、卓上 NMR で ^{13}C デカップリングを有効にすると、取り込み時間は 3.2 秒に固定される。

B-5) HiFSA

反復計算は、NMR Solutions 社製の Cosmic Truth (CT) を用いた。「B-4) NMR 測定条件」で得られた FID (free induction decay) を、MestReNova software v14.2.1 (Mestrelab 社) で処理した。具体的には、窓関数は適用せず、ゼロフィルでポイント数を 512K まで増やした。フーリエ変換を行った後、位相とベースラインを補正し、JCAMP ファイルに変換した。この JCAMP ファイルと定量用試薬の mol ファイルを CT にアップロードし、計算スペクトルが実測スペクトルと一致するまで、化学シフト及びスピン結合定数を最適化した。

B-6) 参照 NMR スペクトルのシミュレーション

「B-5) HiFSA」で得られた ^1H スピン情報を、MestReNova software v14.2.1 の「Spin Simulation」を用いて参照 NMR スペクトルをシミュレーションし、実測スペクトルと照合させた。なお、第十九改正日本薬局方 (日局 19) の「ヘスperi

ジン、定量用」に倣い、 ^1H 信号の半値幅が著しく異なる場合は、実測スペクトル及び参照スペクトルに対して、1Hz のブロードニングファクターを適用した。

(倫理面への配慮)

本研究は、倫理面にかかわる事項はない。

C. 結果

定量用試薬 8 種について、日本電子 (株) 製 JNM-ECZL600G (600.17 MHz) 及び Bruker 社 製 AVANCE NEO 400 Nanobay (400.13 MHz) を用いて NMR 測定を行った。得られた各 NMR スペクトルに対して HiFSA を実施した。HiFSA の結果の妥当性については、CT において計算スペクトルと実測スペクトルとの一致度を示す Root Mean Square (RMS) が指標として用いられており、RMS 0.1 以下が推奨されている。本研究では、すべての HiFSA の結果について RMS 0.1 以下であることを確認した。

^1H スピン情報を整理するにあたり、日局 19「ヘスperiジン、定量用」に倣い、観測された ^1H 信号は高磁場側から A、B、C とした。

化学シフト及びスピン結合定数の有効桁数は、CT の結果をそのまま採用した。すなわち、化学シフトは小数点以下 5 桁、スピン結合定数は小数点以下 3 桁とした。

一般に、スペクトル分解能の高い高磁場 NMR に由来するスペクトルの方が、より精度の高い ^1H スピン情報が得られる。このため、600 MHz で得られた ^1H スピン情報を基準とし、400 MHz で得られた ^1H スピン情報との差についても整

理した。

以降は、試料毎に HiFSA の結果について考察する。

C-1) アゾキシストロビン

重水素化アセトニトリルにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 1 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトの差は 0.0%以下、スピン結合定数では最大 2.4%の差が認められた (D-F)。

C-2) カフェイン

重水における共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 2 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトの差は 0.0%以下であった。カフェインにおいて有効なスピン結合定数は、C-D 間の一つのみであり、その差は 2.2%であった。

C-3) ジフェニルアミン

重水素化メタノールにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 3 に示す。

ジフェニルアミンで観測される ^1H 信号は 3 つの領域に分かれ、これは分子内の ^1H 核が対称性により 3 種類の化学的に等価なグループに分類されるためである (例: A・B/C・D・E・F/G・H・I・J)。しかし、後述するスペクトルのシミュレーションでは、ソフトウェア上ですべての ^1H 核を個別に入力する必要があるため、スピン情報も個別に整理した。

両者のスピン情報が完全には一致せず、

化学シフトの差は 0.0%以下、スピン結合定数では最大 1.6%の差が認められた (C-D/E-F)。

C-4) *p*-ヒドロキシ安息香酸

重水素化アセトンにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 4 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトの差は 0.0%以下、スピン結合定数では最大 0.6%の差が認められた (A-B)。

C-5) *p*-ヒドロキシ安息香酸メチル

重水素化アセトンにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 5 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトの差は 0.0%以下、スピン結合定数では最大 14.9%の差が認められた (D-E)。

C-6) ピリメタニル

重水素化メタノールにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 6 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトの差は 0.0%以下、スピン結合定数では最大 2.6%の差が認められた (E-H/F-G)。

C-7) フルジオキシソニル

重水素化ジメチルスルホキシドにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 7 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、

化学シフトの差は最大で 0.1% (F)、スピン結合定数では最大 2.7%の差が認められた (C-F)。

C-8) ロスマリン酸

重水素化ジメチルスルホキシドにおける共鳴周波数 600 MHz 及び 400 MHz の NMR スペクトルから求めた ^1H スピン情報を図 8 に示す。

両者のスピン情報が完全には一致せず、化学シフトでは 0.1%の差が散見された。スピン結合定数では 69.2% (I-K)、45.7% (J-K)、41.4% (F-G) といった大きな差が認められた。

D. 考察

定量用標準品 8 種の ^1H スピン情報を整理した。600 MHz と 400 MHz との間で、化学シフトの差が明確であったのは、フルジオキソニルとロスマリン酸であった。フルジオキソニルでは窒素に直接結合した ^1H 核、ロスマリン酸では酸素に直接結合した ^1H 核を中心に化学シフトの差が認められた。600MHz と 400MHz で用いた試料は異なる時期に調製したものであり、試料調製から NMR 測定までの時間は厳密に統一されていなかったため、その間に部分的な重水素置換が生じ、化学シフトの差が生じた可能性がある。ただし、今回確認された化学シフトの差は最大でも 0.1%程度であり、スペクトルの外観に与える影響は小さいと考えられる。

スピン結合定数については、化合物によって差の程度は異なった。最大のものではロスマリン酸において 69.2%の差が認められた。一方で、差が認められたス

ピン結合定数の絶対値は最大でも約 2.5 Hz であり、先のロスマリン酸では 1 Hz 以下であった。スピン結合定数の絶対値が小さい場合、その差がスペクトルの外観に与える影響は小さいと考えられる。

そこで、600 MHz で得られた ^1H スピン情報を基に参照 NMR スペクトルをシミュレーションし、400 MHz 及び 60 MHz で得られた実測スペクトルとの照合を行った (図 9～図 16)。すべての化合物において、参照スペクトルと実測スペクトルは良好に一致し、同一の化学シフトに同様の多重度の ^1H 信号が観測され、各 ^1H 信号の面積強度比も一致した。以上の結果から、本研究で求めた定量用標準品 8 種の ^1H スピン情報は、参照 NMR スペクトルをシミュレーションするにあたり十分な精確性を有するものと判断した。

E. 結論

食品添加物公定書に収載されている定量用標準品 8 種の ^1H スピン情報を精確に決定し、これに基づく参照 NMR スペクトルをシミュレーションした。

参照 NMR スペクトルは、600、400 及び 60 MHz で得られた実測スペクトルと良好に一致し、確認試験として利用可能であることを示した。

F. 参考文献

- 1) 西崎雄三, 田中誠司. 参考情報「 ^1H スピン情報に基づいた参照 NMR スペクトルと日本薬局方試薬への応用」の新規作成について. 日本薬局方フォーラム (2024) 33(2), 189-192.
- 2) USP Methods to Assist in

Detecting Falsified Remdesivir.

<https://www.usp.org/covid-19/remdesivir>

- 3) Achanta, P.S., Jaki, B.C.,
McAlpine, J.B., Friesen, J.B.,
Niemitz, M., Chen, S.-N., Pauli,
G.F. Quantum Mechanical NMR
Full Spin Analysis in
Pharmaceutical Identity Testing
and Quality Control. *J. Pharm.
Biomed. Anal.* (2021) 192, 113601.

G. 研究発表

1) 論文発表

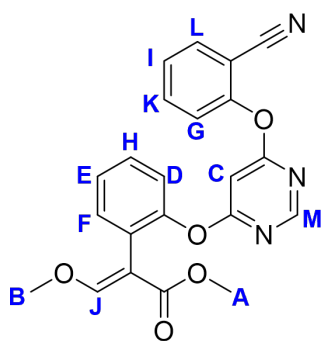
なし

2) 学会発表

なし

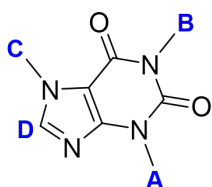
H. 知的財産権の出願・登録状況

なし



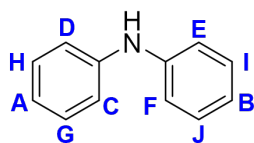
化学シフト [ppm]				スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	Difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	3.29752	3.29717	0.0%	³ J	D-H	8.172	8.183	0.1%
B	3.47320	3.47336	0.0%	³ J	E-F	7.675	7.699	0.3%
C	6.19463	6.19637	0.0%	³ J	E-H	7.435	7.444	0.1%
D	6.99327	6.99367	0.0%	³ J	G-K	8.365	8.372	0.1%
E	7.05903	7.05946	0.0%	³ J	I-K	7.581	7.587	0.1%
F	7.07862	7.07893	0.0%	³ J	I-L	7.778	7.781	0.0%
G	7.10660	7.10691	0.0%	⁴ J	D-E	1.214	1.204	-0.8%
H	7.16859	7.16900	0.0%	⁴ J	F-H	1.709	1.704	-0.3%
I	7.19625	7.19684	0.0%	⁴ J	G-I	1.046	1.038	-0.8%
J	7.22774	7.22878	0.0%	⁴ J	K-L	1.672	1.667	-0.3%
K	7.49757	7.49814	0.0%	⁵ J	C-M	0.856	0.848	-0.9%
L	7.56317	7.56401	0.0%	⁵ J	D-F	0.418	0.408	-2.4%
M	8.05158	8.05152	0.0%	⁵ J	G-L	0.460	0.465	1.1%

図1 アゾキシストロビンの NMR スピン情報



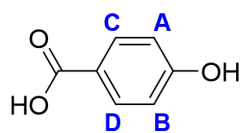
	化学シフト [ppm]			スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	Difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	3.29801	3.29626	-0.1%	4J	C-D	-0.680	-0.665	-2.2%
B	3.47209	3.47006	-0.1%					
C	3.91819	3.91697	0.0%					
D	7.87903	7.87913	0.0%					

図 2 カフェインの NMR スピン情報



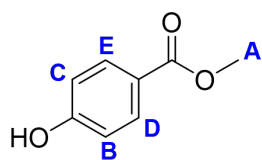
化学シフト [ppm]				スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	Difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	6.57372	6.57312	0.0%	³ J	A-G	7.353	7.366	0.2%
B	6.57372	6.57312	0.0%	³ J	A-H	7.353	7.366	0.2%
C	6.81404	6.81386	0.0%	³ J	B-I	7.353	7.366	0.2%
D	6.81404	6.81386	0.0%	³ J	B-J	7.353	7.366	0.2%
E	6.81404	6.81386	0.0%	³ J	C-G	8.144	8.160	0.2%
F	6.81404	6.81386	0.0%	³ J	D-H	8.144	8.160	0.2%
G	6.94884	6.94868	0.0%	³ J	E-I	8.144	8.160	0.2%
H	6.94884	6.94868	0.0%	³ J	F-J	8.144	8.160	0.2%
I	6.94884	6.94868	0.0%	⁴ J	A-C	1.107	1.102	-0.5%
J	6.94884	6.94868	0.0%	⁴ J	A-D	1.107	1.102	-0.5%
				⁴ J	B-E	1.107	1.102	-0.5%
				⁴ J	B-F	1.107	1.102	-0.5%
				⁴ J	C-D	2.491	2.450	-1.6%
				⁴ J	E-F	2.491	2.450	-1.6%
				⁴ J	G-H	1.669	1.660	-0.5%
				⁴ J	I-J	1.669	1.660	-0.5%
				⁵ J	C-H	0.483	0.483	0.0%
				⁵ J	D-G	0.483	0.483	0.0%
				⁵ J	E-J	0.483	0.483	0.0%
				⁵ J	F-I	0.483	0.483	0.0%

図 3 ジフェニルアミンの NMR スピン情報



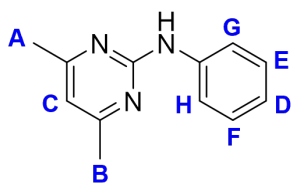
	化学シフト [ppm]			スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	6.66617	6.66629	0.0%	³ J	A-C	8.542	8.559	0.2%
B	6.66617	6.66629	0.0%	³ J	B-D	8.542	8.559	0.2%
C	7.66400	7.66387	0.0%	⁴ J	A-B	2.598	2.582	-0.6%
D	7.66400	7.66387	0.0%	⁴ J	C-D	2.216	2.225	0.4%
				⁵ J	A-D	0.384	0.383	-0.3%
				⁵ J	B-C	0.384	0.383	-0.3%

図 4 *p*-ヒドロキシ安息香酸の NMR スピン情報



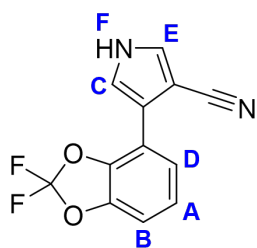
	化学シフト [ppm]			スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	3.56514	3.56528	0.0%	3J	B-D	8.564	8.573	0.1%
B	6.66204	6.66307	0.0%	3J	C-E	8.564	8.573	0.1%
C	6.66204	6.66307	0.0%	4J	B-C	2.582	2.259	-12.5%
D	7.63105	7.63186	0.0%	4J	D-E	2.237	2.571	14.9%
E	7.63105	7.63186	0.0%	5J	B-E	0.390	0.396	1.5%
				5J	C-D	0.390	0.396	1.5%

図5 *p*-ヒドロキシ安息香酸メチルの NMR スピン情報



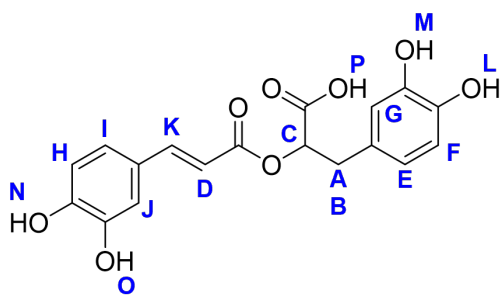
	化学シフト [ppm]			スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	2.09064	2.09061	0.0%	³ J	D-E	7.372	7.390	0.2%
B	2.09064	2.09061	0.0%	³ J	D-F	7.372	7.390	0.2%
C	6.33297	6.33302	0.0%	³ J	E-G	8.209	8.228	0.2%
D	6.71526	6.71487	0.0%	³ J	F-H	8.209	8.228	0.2%
E	7.01783	7.01765	0.0%	⁴ J	A-C	-0.489	-0.485	-0.8%
F	7.01783	7.01765	0.0%	⁴ J	B-C	-0.489	-0.485	-0.8%
G	7.42575	7.42654	0.0%	⁴ J	D-G	1.130	1.120	-0.9%
H	7.42575	7.42654	0.0%	⁴ J	D-H	1.130	1.120	-0.9%
				⁴ J	E-F	1.651	1.639	-0.7%
				⁴ J	G-H	2.399	2.388	-0.5%
				⁵ J	E-H	0.493	0.480	-2.6%
				⁵ J	F-G	0.493	0.480	-2.6%

図6 ピリメタニルの NMR スピン情報



化学シフト [ppm]				スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	7.32916	7.32928	0.0%	³ J	A-B	8.061	8.088	0.3%
B	7.36147	7.36237	0.0%	³ J	A-D	8.139	8.162	0.3%
C	7.38131	7.38163	0.0%	³ J	C-F	2.758	2.683	-2.7%
D	7.56120	7.56072	0.0%	³ J	E-F	3.118	3.120	0.1%
E	7.84736	7.84853	0.0%	⁴ J	B-D	1.075	1.075	0.0%
F	12.21425	12.22118	0.1%	⁴ J	C-E	1.992	1.992	0.0%

図 7 フルジオキシニルの NMR スピン情報



化学シフト [ppm]				スピンスピン結合定数 [Hz]				
	600 MHz	400 MHz	difference			600 MHz	400 MHz	difference
A	2.93911	2.93672	-0.1%	² J	A-B	-14.386	-14.338	-0.3%
B	3.01577	3.01348	-0.1%	³ J	A-C	8.574	8.559	-0.2%
C	5.06233	5.05896	-0.1%	³ J	B-C	4.162	4.112	-1.2%
D	6.27285	6.27219	0.0%	³ J	D-K	15.894	15.886	-0.1%
E	6.55908	6.55723	0.0%	³ J	E-F	8.022	8.017	-0.1%
F	6.66720	6.66518	0.0%	³ J	H-I	8.173	8.179	0.1%
G	6.70783	6.70574	0.0%	⁴ J	E-G	2.101	2.067	-1.6%
H	6.80018	6.79829	0.0%	⁴ J	I-J	2.120	2.077	-2.0%
I	7.04132	7.04058	0.0%	⁴ J	I-K	-0.312	-0.528	69.2%
J	7.08650	7.08562	0.0%	⁴ J	J-K	-0.278	-0.405	45.7%
K	7.49610	7.49412	0.0%	⁵ J	F-G	0.162	0.229	41.4%
L	8.75267	8.76079	0.1%	⁵ J	H-J	0.197	0.200	1.5%
M	8.81201	8.81975	0.1%					
N	9.17581	9.18353	0.1%					
O	9.66056	9.66892	0.1%					
P	13.04587	13.04865	0.0%					

図8 ロスマリン酸の NMR スピン情報

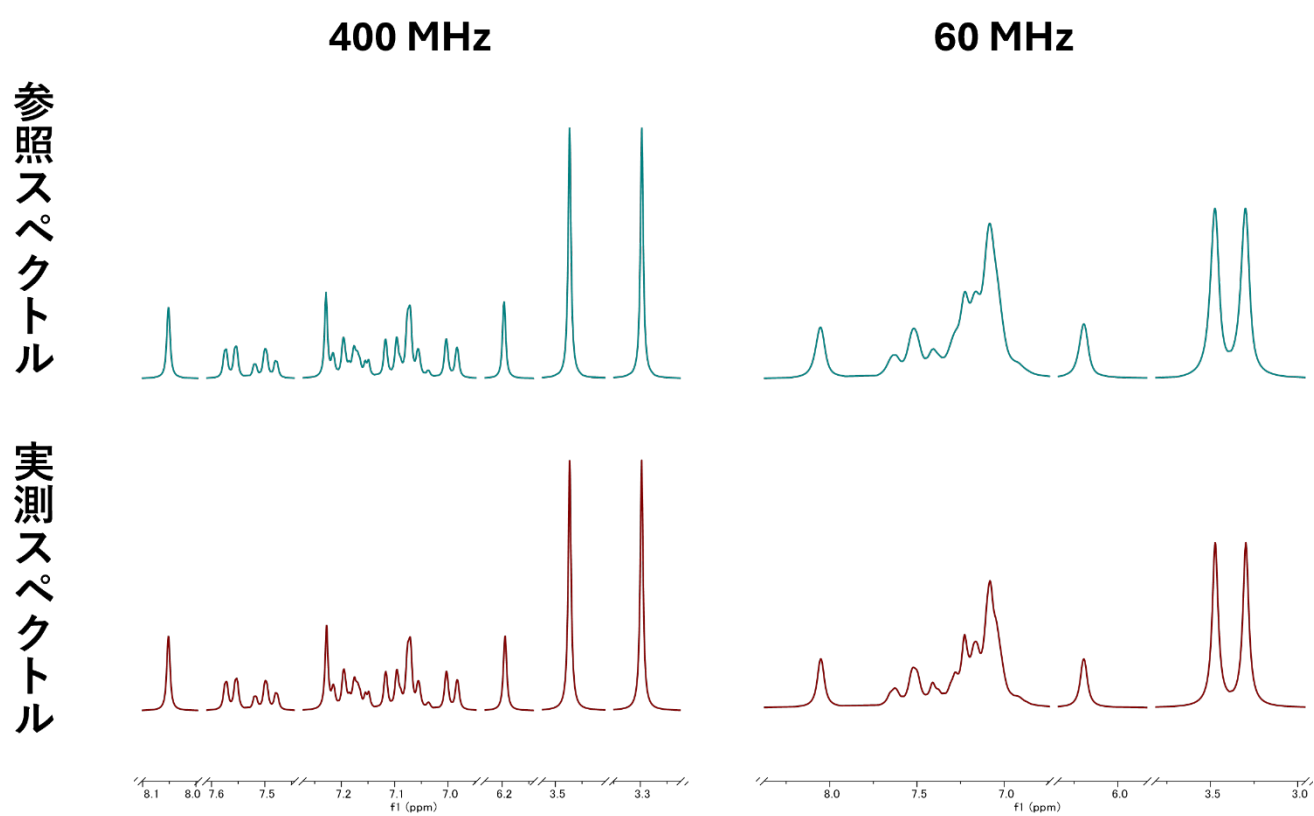


図9 アゾキシストロビンの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

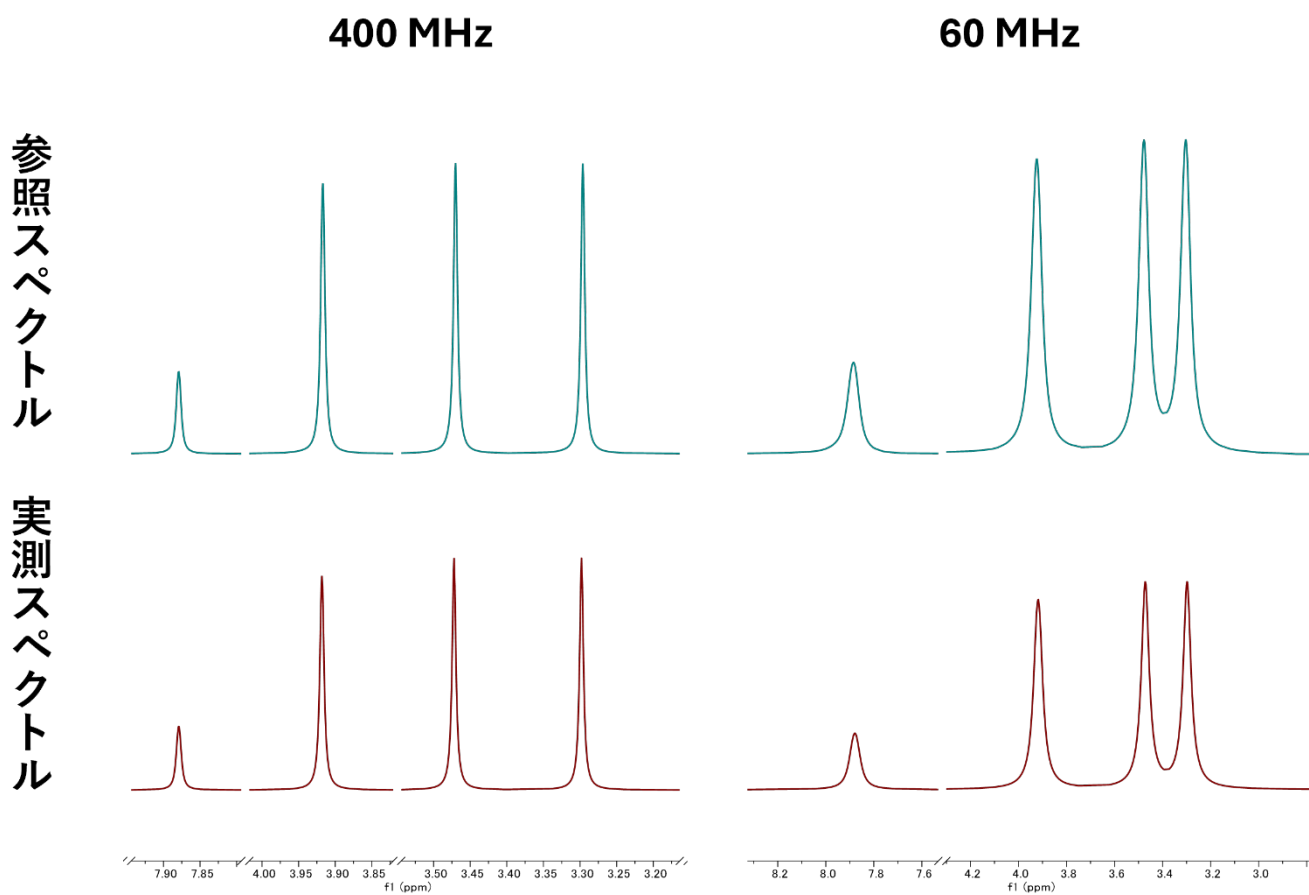


図 10 カフェインの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

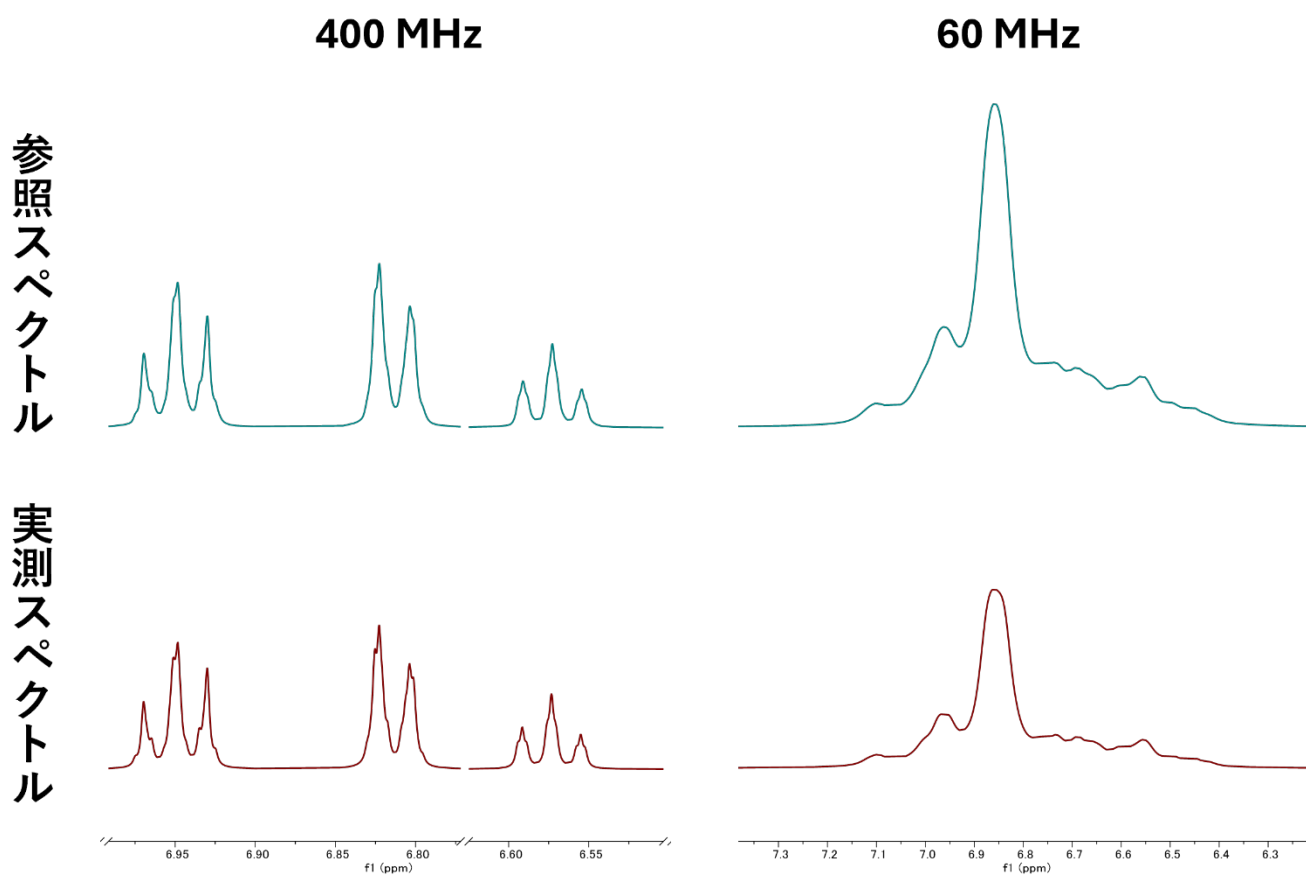


図 11 ジフェニルアミンの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

参照
スペクトル

実測
スペクトル

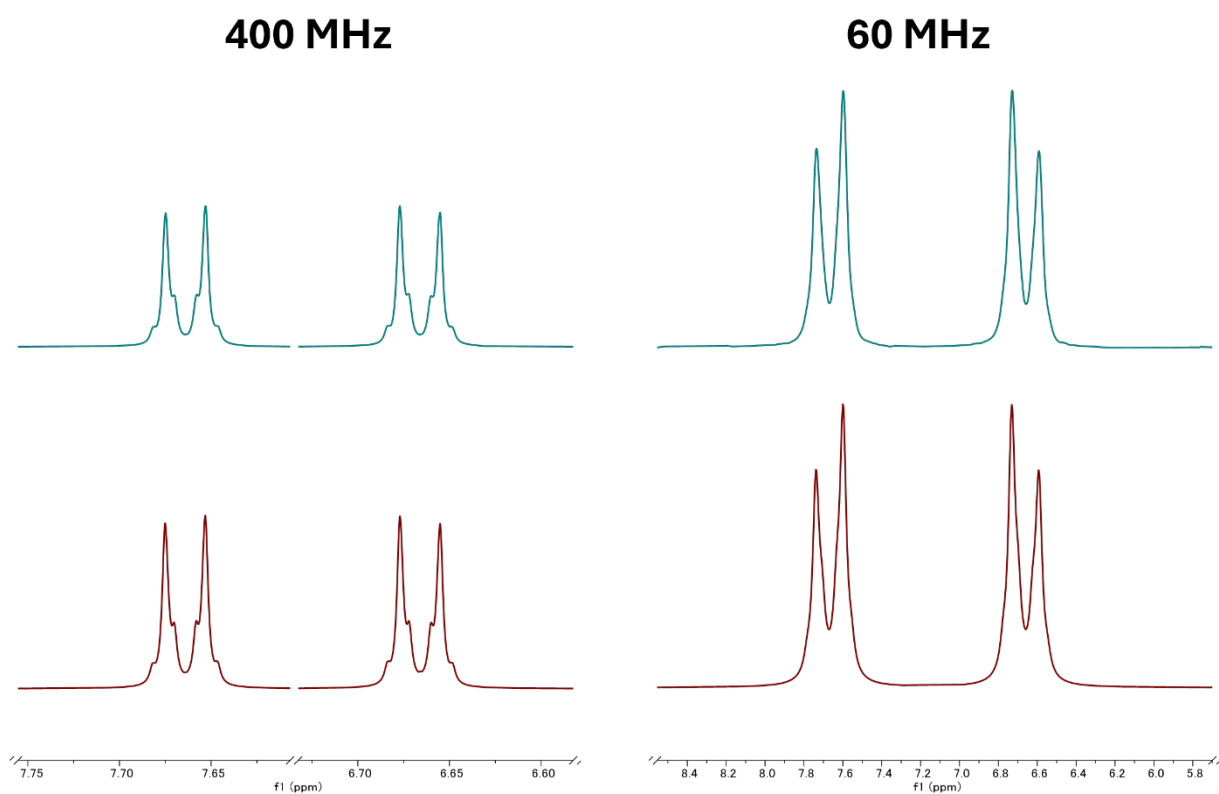


図 12 *p*-ヒドロキシ安息香酸の参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

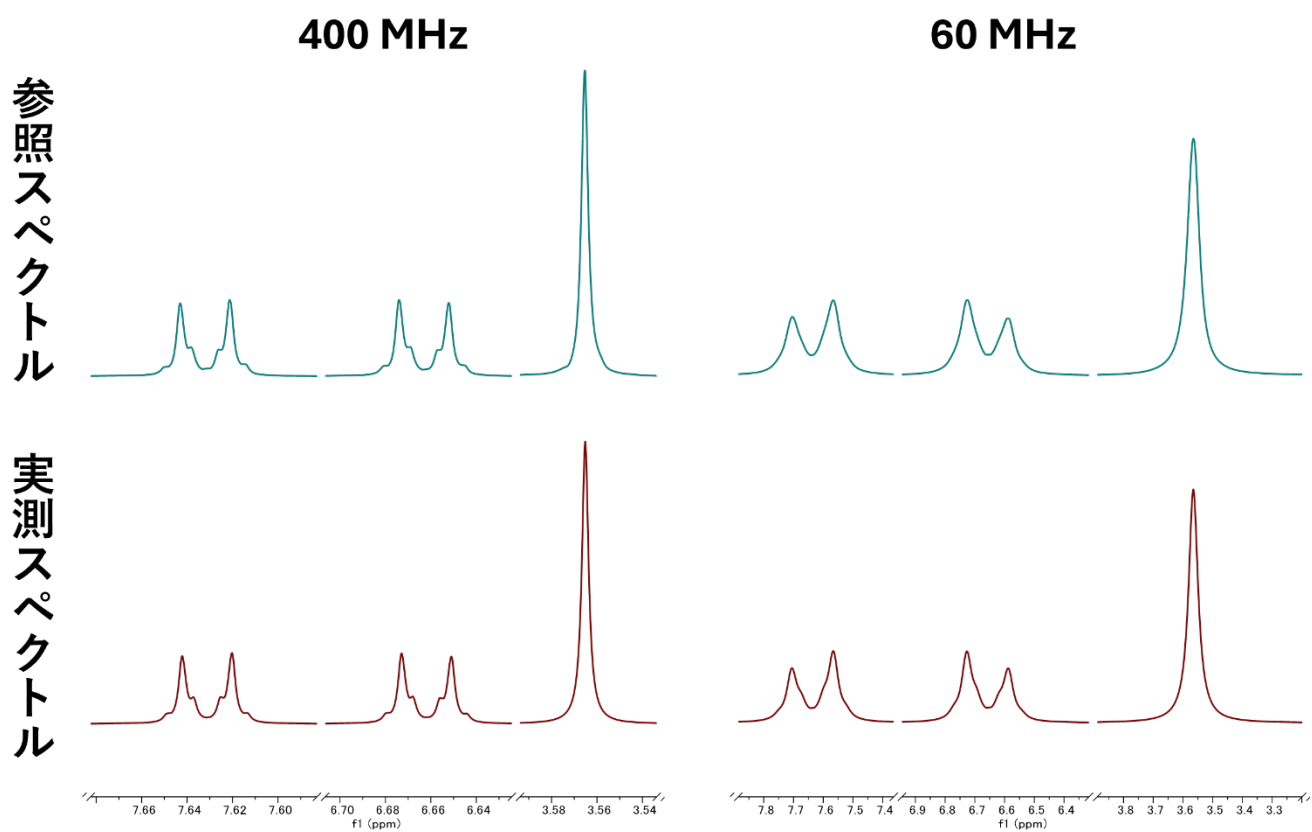


図 13 *p*-ヒドロキシ安息香酸メチルの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

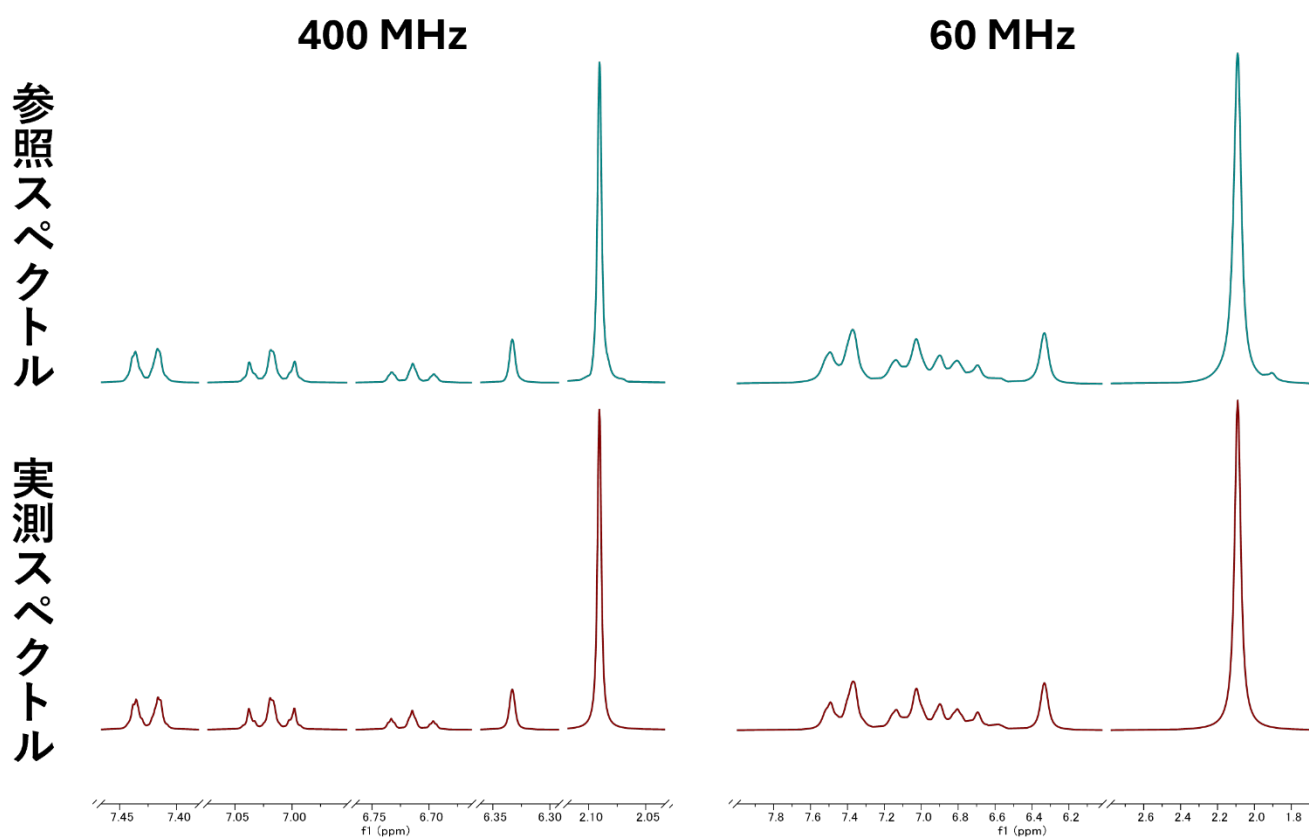


図 14 ピリメタニルの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

参照
スペクトル

400 MHz

60 MHz

実測
スペクトル

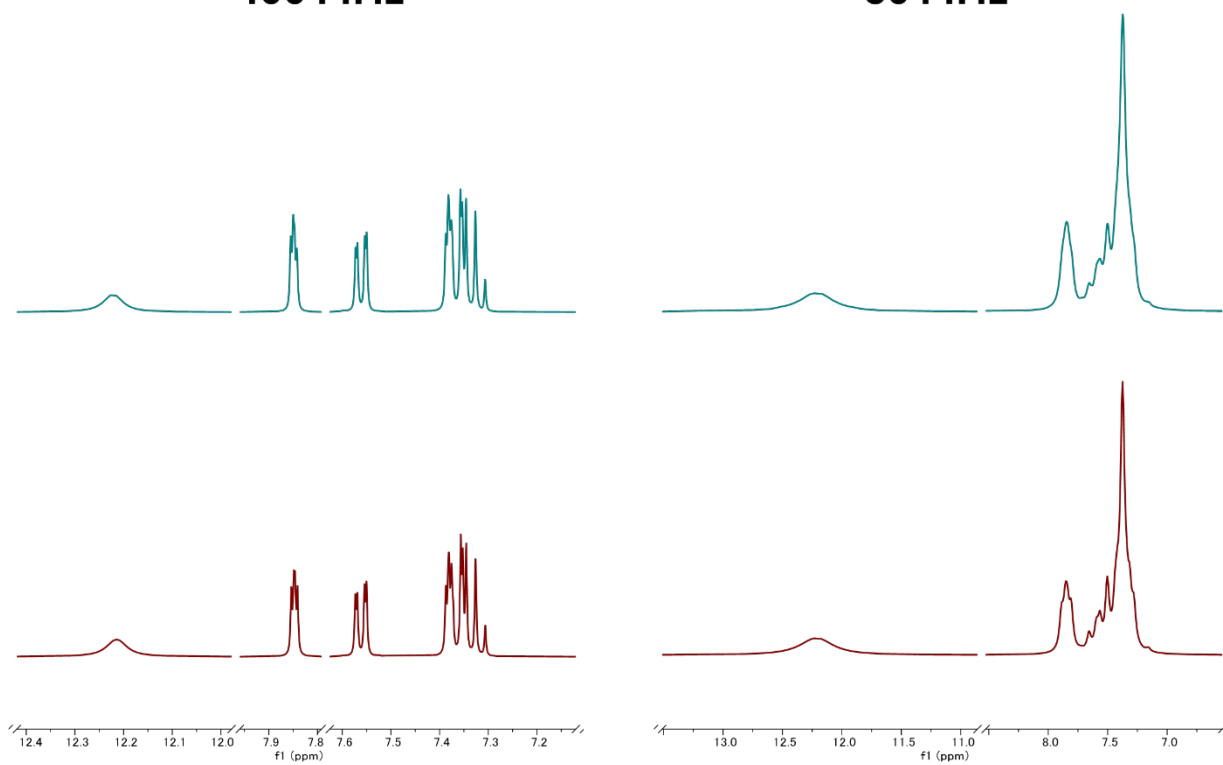


図 15 フルジオキサニルの参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル

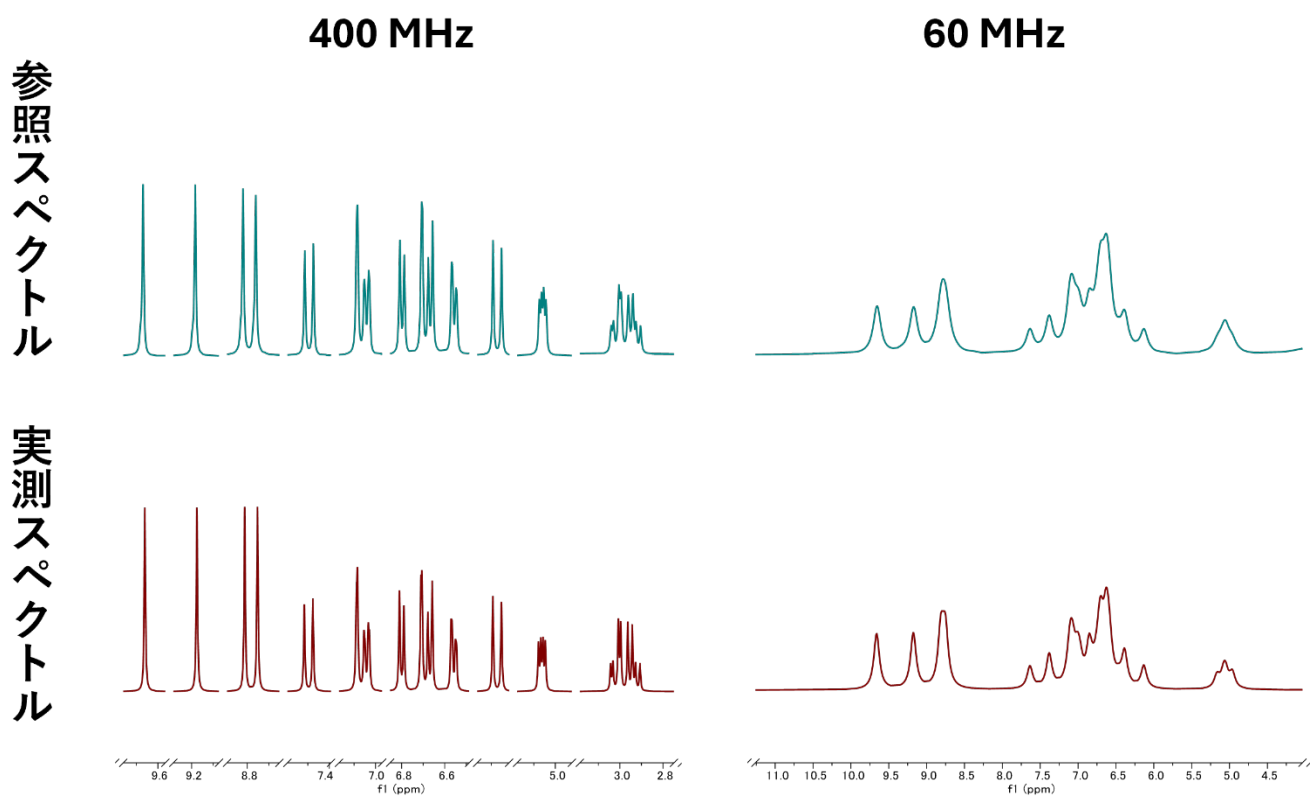


図 16 ロスマリン酸の参照 NMR スペクトル及び実測スペクトル