

パソコンによる示範教育システム(7)

——核磁気共鳴スペクトルの学習——

笹 村 泰 昭*・橋 本 久 穂**

Teaching System using Personal Computer combined with Video Projector (7) —— Display of Nuclear Magnetic Resonance spectra ——

Yasuaki SASAMURA and Hisaho HASHIMOTO

要 旨

10 ケのマロン酸エステル合成関連化合物を例に NMR スペクトル学習用のプログラムを作成した。

Abstract

This report is a Personal Computer program to learn nuclear magnetic resonance spectra of 10 compounds related malonic ester synthesis.

1. は じ め に

今日 CAI (Computer Assisted Instruction) と称されている方法は大半が個別学習を志向している。本校では独自のパソコンを用いた一斉授業方式を考え¹⁾教育工学的見地からも検討が加えられている²⁾。すなわち CRT 上の画面をプロジェクターを介し大型スクリーンに映し出す方式で教師がスクリーンを黒板に見たてて学生に説明を加える。著者らはこの MIPP (Mass Instruction System by Personal Computer connecting with Projector) 方式に使用する化学用教材の作成を試行錯誤ながら行って来た³⁾。この方式の教材作りの有利な点として教師が画面表示に従って説明を加えることを前提としているのでプログラムの完成度が低くて許されることがあげられる。授業中に修正が可能である。

前報⁴⁾に引続きプロトン NMR スペクトルのデータのとり込みとそれらのスペクトルの解析のための学習用プログラムを作成した。

2. 使 用 機 器

NEC PC-9801E, 必要に応じ前記 MIPP を使用する。

3. プログラムの使い方

ファイル名 "MALON" を load, run すると表題が出る。スペースキーを押すと AUTO モードであることを示す画面表示があり、この AUTO モードの場合はスペースキーのみで順次マロン酸エステル合成関連化合物⁵⁾ 10 ケのスペクトルを見ることが出来る。↑キーで AUTO を MANUAL に切り変えると化合物名の表示が出る。0: プロピルアルコール, 1: 臭化プロピル, 2: ペンタノール, 3: マロン酸, 4: マロン酸ジエチル, 5: プロピルマロン酸, 6: プロピルマロン酸ジエチル, 7: ジプロピルマロン酸ジエチル, 8: 吉草酸, 9: 吉草酸エチルが出るので見たい化合物の番号キーを押す。二種までの化合物のスペクトルの重ね合わせが可能である。さらにスペクトルの簡単な学習用として脂肪族化合物の官能基に隣接した (α 位) 炭素原子と結合したプロトンの「化学シフト」⁶⁾を重ねることも出来る。化学シフトの表示は "K" キーにて行う。まずメチルプロントが

* 助教授 工業化学科

** 助 手 工業化学科

表示され、スペーススキの操作で順次メチレンプロトン、メチンプロトン、多重結合に結合したプロトン吸収位置をスペクトルに重ねることが出来る。このプログラムは臨機応変の対応が可能で初歩のNMRスペクトル学習用として役立つと考えている。画面表示の例を図に示した。図の一番上はプロピルマロン酸ジエチルの実測スペクトル(北大理学部 JOEL JNM FX-100 による)で次いで上からメチル、メチレン、メチンプロトンの代表的官能基に隣接した炭素原子と結合しているプロトンの「化学シフト」を重ね合せた CRT 画面表示のハードコピー例である。

4. ま と め

一般に核磁気共鳴スペクトルデータは大規模なデータベースとして利用されている。しかし近年のパーソナルコンピュータの機能の向上と普及は著しく身近なスペクトルデータの保存はフロッピーディスクでも可能である。本報では学生実験で取扱う化合物 10 ケのスペクトルを取込みそれらのスペクトルの帰属を学習する目的でプロトンの代表的官能基に隣接した炭素原子と結合しているプロトンの「化学シフト」を重ね合わせるプログラムを作成した。NMR スペクトルデータと「化学シフト」の重ね合せは初期の学習には有効である。

本報告のプログラム作成は第 19 期生成田幸司君の尽力が大であった。記して感謝の意を表する。

文 献

- 1) 中津正志, 高橋達男, 精密機械, **51**, 1870(1985)
- 2) 中津正志, 藤島豊, 伊藤治男, 苫小牧高専紀要, 第 21 号, 276 (1986)
- 3) 笹村泰昭, 中津正志, 藤井清志, 宇野克志, 遠藤俊二, 川村静夫, 化学 PC 研究会会報, **7**, 41 (1985)
- 4) 橋本久穂, 成田幸司, 笹村泰昭, 化学 PC 研究会会報, **8**, 69 (1986)
- 5) 笹村泰昭, 森田修吾, 苫小牧高専紀要, 第 14 号, 83 (1979)
- 6) 竹内敬人訳「プログラム学習 NMR 入門」講談社サイエンティフィクの裏表紙を参照した。

(昭和 62 年 11 月 30 日受理)

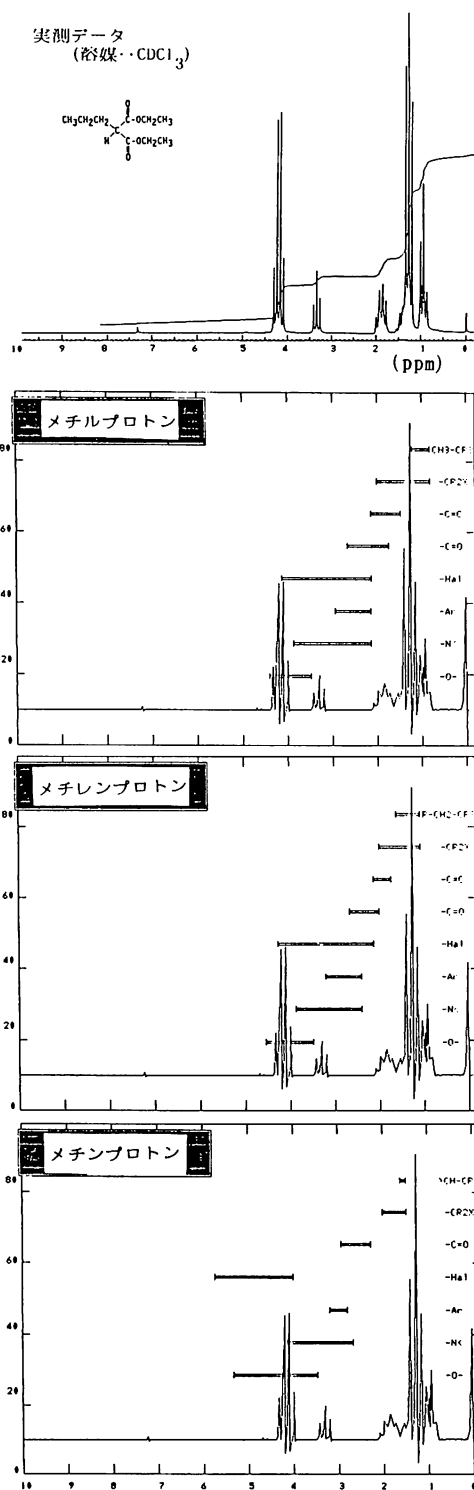


図 1 プロピルマロン酸ジエチルの NMR スペクトル

```

1000 CLEAR:SCREEN 3,0:11CONSOLE 0,25,0,1:FOR I=0 TO 7:COLOR (I+1)*NEXT I:COLOR 7,0,7:CLS 3:0:11:PRINT
1010 ON SCREEN 1200:GOTO 1000
1020 DEF FN(FXN1)=INT((X-100)/20):DEF FNY(Y)=INT((Y-100)/10):CLS 4
1030 RESTORE #MENUATA
1040 FOR I=0 TO 9
1050 READ MENU(I)
1060 NEXT I
1070 LOCATE 20, 5:PRINT "パソコンによるNMRR-スペクトル表示"
1080 LOCATE 10,10:PRINT "メニュー番号2から8までの表示"
1090 LOCATE 40,12:PRINT "X軸:化学シフト(ppm) Y軸:強度"
1100 GOSUB =SPACEKEY:CLS:GOSUB #M1:GOTO #HANDAN
1110 #M1 RESTORE #MDATA:M=1:FACT=0:GOTO #HALL
1120 #M2 RESTORE #MDATA:M=2:FACT=2058:GOTO #HALL
1130 #M3 RESTORE #MDATA:M=3:FACT=0:GOTO #HALL
1140 #M4 RESTORE #MDATA:M=4:FACT=0:GOTO #HALL
1150 #HALL
1160 READ X1,Y1,X2,Y2,X3,Y3,X4,Y4,XA,YA,XA2,A1S,A2S,A3S
1170 LINE (X1,Y1)-(X2,Y2):A1:FACT
1180 LINE (X1,Y1)-(X2,Y2):S,5,BF
1190 LINE (XA,Y1,Y1+1)-(X2,Y2+1),0,0
1200 LOCATE 20, 5:PRINT
1210 LOCATE XA1,YA1:PRINT A1S
1220 LOCATE XA2,YA1+1:PRINT A2S
1230 LOCATE XA2,YA1+2:PRINT A3S
1240 LINE (X3,Y3)-(X4,Y4),1,BF
1250 F=0
1260 IF #INKEY$
1270 IF #=CHR$(4) THEN LINE (X3,Y4)-(X4,Y4+17),5,BF:LINE (X3,Y3)-(X4,Y4),1
:BF:0
1280 IF #=CHR$(8) THEN LINE (X3,Y3)-(X4,Y4),5,BF:LINE (X3,Y4)-(X4,Y4+17),1
:BF:1
1290 IF #=CHR$(3) THEN #M1
1300 GOTO 1240
1310 #M1
1320 IF #M1 AND F=0 THEN LOCATE 16,6:PRINT SPC(8):LOCATE 16,7:PRINT SPC (12):GOS
UB #M2
1330 FOR I=YA1 TO YA1+2
1340 LOCATE XA1,I:PRINT SPC(22)
1350 NEXT I
1360 PUT (XA1,Y1),A1:FACT,1
1370 LOCATE XA1,Y1 THEN RESTORE #MDATA:READ X1,Y1,A,A,A,A,XA1,YA1:FACT=0
1380 RETURN
1390 #MENU
1400 FOR I=0 TO 4
1410 LOCATE 0,I+3:PRINT MENU(I)
1420 LOCATE 40,I+3:PRINT MENU(I)+5
1430 NEXT I
1440 DI=D:DI+1
1450 LOCATE 30,17:PRINT "データの読み出し完了 (Pass="P"Key"
1460 IF #INKEY$
1470 IF D="" THEN 1450 ELSE D=VAL(D)+1:IF D>9 THEN 1450
1480 IF D<"9" AND D<"0" AND D<"0" AND D<"0" THEN 1450
1490 IF D<"9" OR D<"0" THEN D=D+1:GOTO 3,0,0:11:RETURN
1510 DI=D:GOSUB #M4
1520 ON D GOTO #BP,#PENT,#HAL,#PMALON,#PMALON,#PMALON,#2IPHAL,#KISSOU,#KISSOU
1530 #BP
1540 #BP RESTORE #PPH:GOTO #PLOT
1550 #PENT RESTORE #PBB:GOTO #PLOT
1560 #PMALON RESTORE #PMTA:GOTO #PLOT
1570 #PMALON RESTORE #PMALON:GOTO #PLOT
1580 #KISSOU RESTORE #KISSOU:GOTO #PLOT
1590 #KISSOU RESTORE #KISSOU:GOTO #PLOT
1600 #PMALON RESTORE #PMALON:GOTO #PLOT
1610 #PMALON RESTORE #PMALON:GOTO #PLOT
1620 #2IPHAL RESTORE #2IPHAL:GOTO #PLOT
1630 #PLOT
1640 SCREEN 3,0:11:IF #2 THEN #M1 ELSE #M3
1650 READ X,Y:IF (MOD P,MOD 2)=0 THEN C=LINE (FN(X2),FNY(430))-(FN(X1019),FNY(4
573))
1660 IF C=0 THEN C=DI-D:DI=M1:GOTO 1660 ELSE #M1
1670 IF #M1 THEN C=C+DI:CH
1680 IF #M2 THEN C=C+DI:CH
1690 IF #M3 THEN #M2:DI=D:BI(0)=1:RESTORE #M1:GOSUB #ERRX:RETURN
1700 PSET (FN(X1),FNY(Y))
1710 K2=X1-Y1
1720 READ M1:IF X1<0 THEN ON ABS(X1) GOTO 1790,1730
1730 K2=X1
1740 READ Y1
1750 LINE -(FN(X1),FNY(Y1)):C
1760 LOCATE X2,5
1770 FOR X2 TO X3 STEP 2
1780 Y1+1:RND(1)+5-S/2
1790 LINE -(FN(X1),FNY(Y1)):C
1800 NEXT X
1810 LOCATE 10,1600
1820 IF #M1 AND #M1=H:GOSUB #CCAN:IF C1(C1)+2 THEN D=C1:GOSUB 1520 ELSE
D=C2:GOSUB 1520
1830 RETURN
1840 LOCATE 120,101-(632,368),7,0
1850 FOR I=0 TO 368 STEP 7
1860 LINE (20,Y1)-(30,Y1)
1870 LINE (Y2,Y1)-(630,Y1)
1880 NEXT Y
1890 FOR X=20 TO 420 STEP 7
1900 LINE (X,10)-(X,20):7
1910 LINE (X,320)-(X,360):7
1920 NEXT X
1930 COLOR 7
1940 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
1950 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
1960 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
1970 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
1980 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
1990 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2000 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2010 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2020 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2030 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2040 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2050 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2060 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2070 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2080 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2090 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2100 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2110 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2120 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2130 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2140 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2150 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2160 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2170 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2180 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2190 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2200 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2210 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2220 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2230 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2240 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2250 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2260 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2270 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2280 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2290 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2300 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2310 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2320 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2330 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2340 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2350 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2360 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2370 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2380 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2390 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2400 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2410 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2420 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2430 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2440 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2450 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2460 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2470 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2480 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2490 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2500 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2510 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2520 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2530 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2540 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2550 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2560 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2570 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2580 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2590 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2600 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2610 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2620 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2630 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2640 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2650 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2660 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2670 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2680 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2690 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2700 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2710 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2720 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2730 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2740 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2750 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2760 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2770 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2780 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2790 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2800 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2810 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2820 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2830 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2840 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2850 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2860 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2870 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2880 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2890 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2900 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2910 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2920 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2930 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2940 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2950 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2960 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2970 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2980 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
2990 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3000 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3010 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3020 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3030 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3040 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3050 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3060 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3070 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3080 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3090 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3100 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3110 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3120 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3130 LOCATE 0, 9:PRINT "00"
3140
```

```
11400 *KISSOUSAN
11410 DATA 2.450,-2.740,3.747,440,750,395,754,412,761,760,760,413,773,325,776,43
0.702,449,-2.806,3.010,420,015,429,021,305,027,415,030,335,041,361,040,307,049,3
60,031,314,055,350,057,337,062,395,066,375,060,300,070,375,071,405,073,407
11420 DATA 0.75,407,079,300,084,425,009,400,000,410,076,270,900,352,706,101,909,3
50,917,401,919,390,920,420,920,450,-2.990,3.100,335,1002,450,-2.1019,3,-1
11500 *HALONGAN
11510 DATA 2.450,-2.670,5.670,17.601,402,603,400,605,450,-2.735,5.740,425,752,45
0,-2.990,5.1001,342,1003,471,1005,435,1006,450,-2.1019,5,-1
11600 *PHALDIE
11610 DATA 2.450,-2.110,3.140,410,155,419,200,450,-2.270,3.273,20,276,450,-2.644
4.445,367,449,440,652,740,657,442,660,345,665,450,-2.700,3.701,440,705,450,790,
400,790,430,799,336,001,407,003,707,012,427,014,360,020,443
11620 DATA 0.00,447,030,430,040,443,042,303,047,359,050,390,055,350,066,435,072,4
14,000,450,070,450,093,100,097,394,901,0.705,401,910,312,916,450,-2.990,5,1000,2
,1002,450,-2.1019,4,-1
11700 *ZIPHALON
11710 DATA 2.450,267,450,260,440,273,450,570,450,571,363,572,440,575,162,579,430
,503,150,507,442,592,352,595,440,599,450,000,003,370,005,413,000,350,012,405
,014,372,016,370,010,794,020,040,025,465,050
11720 DATA 445,063,640,066,390,073,-2.070,300,001,102,000,410,090,372,094,423,099,
102,902,366,905,104,909,400,912,370,915,440,920,450,1000,450,1001,442,1002,450,1
019,450,-1
11800 *KISSOUEI
11810 DATA 2.440,-2.346,2.340,433,350,440,353,301,355,447,350,440,-2.620,2.625,3
62,427,444,431,196,435,447,620,700,442,440,447,363,449,400,-2.790,3.792,340,796,
416,799,242,003,422,006,297,009,433,-2.043,6.046,403,049,427,053,366,055,404
11820 DATA 0.050,306,050,405,060,344,065,396,067,331,071,395,074,337,077,404,080,3
65,004,391,005,06,090,360,091,2.090,403,099,177,904,432,900,424,910,426,916,225,
920,307,922,101,920,391,930,365,935,435,-2.999,10,1000,50,1007,440,-2.1019,4,-1
11900 *FEXTA
11910 DATA 2.450,-2.620,4.640,340,665,450,-2.710,4.725,355,740,450,-2.020,4.030
,305,033,410,042,335,047,370,059,132,075,365,080,340,090,420,902,300,905,320,910
,120,915,355,920,374,924,950,-2.999,4,1000,300,1002,477,1004,450,-2.1019,4,-1
20000 *MEUDATA
20010 DATA 0:プロビアルコル 1:臭化プロビル
20020 DATA 2:ペンタノール 3:ブテン
20030 DATA 4:ロソニルエステル 5:プロビルマロニ
20040 DATA 0:プロビルマロニエステル 7:プロビルマロニ-ロソニルエステル
20050 DATA 0:ロソニル 0:ロソニルエステル
20100 *PHDATA
20110 DATA 200,40,2,"CH3CH2CH2OH"
20120 DATA "プロビルアルコル"
20130 *BRODATA
20140 DATA 104,40,2,"CH3CH2CH2B"
20150 DATA "臭化プロビル"
20160 *HMDATA
20170 DATA 200,112,6," O H O "
20180 DATA " I I I "
20190 DATA "EtO-C-C-C-C-OEt"
20200 DATA " I "
20210 DATA " H "
20220 DATA "マロニルエステル"
20230 *PHDATA
20240 DATA 200,112,6," O P "
20250 DATA " I I I "
20260 DATA "EtO-C-C-C-C-OEt"
20270 DATA " I "
20280 DATA " H O "
20290 DATA "プロビルマロニルエステル"
20300 *KIDATA
20310 DATA 250,00,4," O "
20320 DATA " I "
20330 DATA "CH3CH2CH2CH2-C-OH"
20340 DATA "古基"
20350 *MSDATA
20360 DATA 192,96,5," O H O "
20370 DATA " I I I "
20380 DATA "HO-C-C-C-C-OH"
20390 DATA " I "
20400 DATA " H マロニル"
20410 *PSDATA
20420 DATA 192,112,6," O P "
20430 DATA " I I I "
20440 DATA "HO-C-C-C-C-OH"
20450 DATA " I I I "
20460 DATA " H O "
20470 DATA "プロビルマロニル"
20480 *ZIDATA
20490 DATA 224,112,6," O P "
20500 DATA " I I I "
20510 DATA "EtO-C-C-C-C-OEt"
20520 DATA " I "
20530 DATA " P O "
20540 DATA "ソプロビルマロニルエステル"
20600 *PEDATA
20610 DATA 240, 40,2,"CH3CH2CH2CH2CH2OH"
20620 DATA "ペンタノール"
20700 *KEDATA
20710 DATA 200, 00,4," O "
20720 DATA " I "
20730 DATA "CH3CH2CH2CH2-C-OC2H5"
20740 DATA "臭化プロビル"
21000 *ERR1 DATA "3パターン以上のOVERLAPはできません"
21010 *ERR2 DATA "各値が1つだけPRINTOUTできません"
21020 *ERR3 DATA "連続したエラーが表示されています"
22000 *INFO
22010 DATA 21,0,"M:KEY...MODE CHANGE"
22020 DATA 39,9,"AUTO&MANUALを切り替えます"
22030 DATA 21,11,"P:KEY...PRINT OUT"
22040 DATA 39,12,"数値のCOPをPRINTOUTします"
22050 DATA 21,14,"N:KEY...NAME PRINT"
22060 DATA 39,15,"各数値を表示します"
22070 DATA 21,0,"R:KEY...数値を再入力"
22080 DATA 39,9,"代表的な化学式の構造を表示します"
22090 DATA 21,11,"CLR:KEY...構造をクリア"
22100 DATA 39,12,"構造をすべて消すボタンを押しします"
22110 DATA 21,14,"ESC:KEY...プログラムを終了します"
22120 DATA 39,15,"プログラムを終了します"
23000 *XYUSUTAI DATA
23010 *MECHIRUPURUTON
23020 DATA "メチルプロトン -CH3",72.60,4.2,CH3-CR3,73.62,6.0,-CR20,73.61,0.4,
-C-C,73.57,10.6,-C-O,73.46,12.14,-Ha1,73.55,14.5,-Ar,73.40,16.12,-NC,73.44,10.6,
-O,-1
23030 *MECHIRUPURUTON
23040 DATA "メチレンプロトン -CH2-",70.65,4.3,R-CH2-CR3,73.62,6.6,-CR2X,73.61,0.2,
-C-C,73.57,10.6,-C-O,73.45,12.15,-Ha1,73.53,14.5,-Ar,73.40,16.10,-NC,73.43,10.7,
-O,-1
23050 *MECHIRUPURUTON
23060 DATA "メチンプロトン -CH-",72.65,4.0,X-CH-CR3,73.62,6.3,-CR2X,73.55,0.4,-
C-O,73.34,10.12,-Ha1,73.53,12.2,-Ar,73.46,14.10,-NC,73.37,16.13,-O,-1
23070 *IAIYUKU ISUGOU
23080 DATA "多量に存在するプロトン",70.50,4.9,アルケン,70.20,6.12,アルケン,66.19,0.14,
芳香族,64.15,10.14,芳香族プロトン,50.0,12.25,アロマトン,60.2,14.4,アルヒド,
-1
24000 *MULTI UIHOW DATA
24010 *IOWDATA
24020 DATA 71,71,231,123,125,227,111,10,5,16,MODE7,AUTO,MANUAL
24030 *MSDATA
24040 DATA 135,103,279,167,203,127,259,143,10,7,26,OVERLAP?,YES,NO
24050 *HMDATA
24060 DATA 327,135,407,199,411,159,467,175,42,9,52,PRINTOUT?,YES,NO
24070 *PSDATA
24080 DATA 23,103,215,247,155,207,211,223,4,12,0,プログラム終了
24110 DATA "Sure? YES",NO
```