

การสั่ง เคราะห์สำราบประกอบแก้ไขที่นี่ ชัลเพ็ต เอสเทอร์ เพื่อใช้เป็นสารพิริยา



นายสุรัตน์ ประชุมกุล



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

วิทยานิพนธ์นี้ เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาด้านหลักสูตรบริษัทฯวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาเคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2534

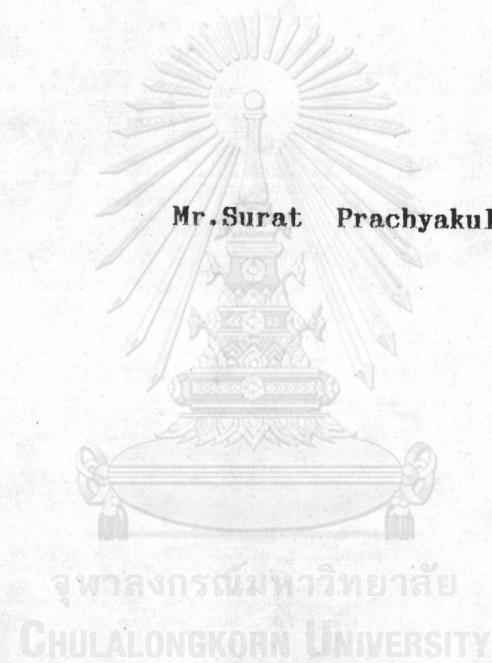
ISBN 974-579-775-8

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

工16944513

SYNTHESIS OF ORGANOTIN SULFATE ESTER COMPOUNDS AS FUNGICIDE

Mr. Surat Prachyakul



**จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY**

**A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science**

Department of Chemistry

Graduate School

Chulalongkorn University

1991

ISBN 974-579-775-8

เป้าที่อวิทยาภิเษก การสังเคราะห์สารประกอบออร์แกโนเพติค ชั้นเน็ต เอกสเทกโน เพื่อการ
เป็นสารฟารา

วิศว
นายสุรัตน์ ประชุมกุล

สาขาวิชา เศรษฐศาสตร์

อาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร.วิสกน เริงสารากุ



บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อัญมณีหัววิทยาภิเษกนี้เป็นส่วนหนึ่ง
ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

กรรมการสอบบัณฑิตวิทยาภิเษก

.....
(ศาสตราจารย์ ดร.ภาร วัชราภิญ)

.....
(ศาสตราจารย์ ดร.อุดม ถิกพล)

.....
(ศาสตราจารย์ที่ปรึกษา
รองศาสตราจารย์ ดร.วิสกน เริงสารากุ)

.....
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สมใจ พึงบริชา)

.....
(อาจารย์ ดร.ปรีชา ใจวิรัตน์ชัย)



พิเศษที่สุดก็คือห้องน้ำที่ติดต่อกันอยู่ในห้องนอนเดียวกัน

สุรัตน์ ประชุมากุล : การสังเคราะห์สารประกอบออร์แกโนทิน ซัลไฟต์ เออสเทอร์ เพื่อใช้เป็นสารฆ่ารา (SYNTHESIS OF ORGANOTIN SULFATE ESTER COMPOUNDS AS FUNGICIDE) อ.พีริกา : วศ.ตร. ไสยา เริงสำราญ, 101 หน้า.

ISBN 974-579-775-8

ได้ทำการสังเคราะห์สารประกอบออร์แกโนทิน ชัล เฟต เอสเทอร์ ได้แก่ ไตรบิวทิลทิน
โอลเดคิล ชัล เฟต, ไตรบิวทิลทิน เสกซะเดคิล ชัล เฟต และไตรบิวทิลทิน ออกตะเดคิล ชัล เฟต ที่นี่ จาก
ปฏิกิริยาแทนทีของ 1-โอลเดคานอล, 1-เสกซะเดคานอล และ 1-ออกตะเดคานอล กับกรดคลอโรชัลฟอนิก
จะได้ผลิตภัณฑ์แอลกิล ไฮโดรเจน ชัล เฟตของสารประกอบแอลกานอล เหล่านี้สามารถถ่ายดับ เมื่อนำมาสูญเสีย⁺
แอลกิล ไฮโดรเจน ชัล เฟต ไปทำปฏิกิริยากับ บีส-(ไตรบิวทิลทิน)ออกไซด์ ในสภาวะที่เหมาะสม จะได้รับ⁻
สารประกอบออร์แกโนทิน ชัล เฟต เอสเทอร์ ตั้งกล่าวข้างต้น

นอกจากนั้นยังได้ทำการทดสอบฤทธิ์ในการข่า เชื้อราของสารประกอบออร์แกโนทิน ชัล เฟต เอส เทอร์ เหล่านี้ ชี้งพบว่าสารประกอบทั้ง ๓ ชนิด สามารถข่า เชื้อรา *Trichoderma* sp., *Penicillium* sp., *Syncephalustums* sp. และ *Aspergillus* sp. ได้ฤทธิ์ในการข่า เชื้อรา ของสารแต่ละชนิดมีความแตกต่างกัน ขึ้นอยู่กับชนิดของ เชื้อราและความเข้มข้นของสารประกอบ ออร์แกโนทิน ชัล เฟต เอส เทอร์ที่ใช้นั้น

ภาควิชา เคมี
สาขาวิชา เคมีอินทรีย์
ปีการศึกษา 2534

ลายมือชื่อนิสิต
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

หนังสือที่ได้รับการอนุมัติให้เป็นที่อยู่ในการนำเสนอวิทยานิพนธ์ของ

SURAT PRARCHYAKUL : SYNTHESIS OF ORGANOTIN SULFATE ESTER COMPOUNDS AS FUNGICIDE. THESIS ADVISER : ASSO. PROF. SOPHON ROENGSAMRAN, Ph.D
101 PP. ISBN 974-579-775-8

Organotin sulfate ester compounds such as tributyltin dodecyl sulfate, tributyltin hexadecyl sulfate and tributyltin octadecyl sulfate were synthesized from nucleophilic substitution reaction of 1-dodecanol, 1-hexadecanol and 1-octadecanol with chlorosulfonic acid to give alkyl hydrogen sulfate products of these alkanol compounds respectively. The alkyl hydrogen sulfate products were treated with bis-(tributyltin)oxide in the suitable condition to give the above said organotin sulfate ester compounds.

These organotin sulfate ester compounds were also tested on fungicidal activity. The compounds exhibit killing Trichoderma sp., Penicillium sp., Syncephalustum sp. and Asperillus sp. The fungicidal activity of each compound depends upon type of fungus and concentration of the organotin sulfate ester compounds.



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

ภาควิชาเคมี
สาขาวิชาเคมีอินทรีย์
ปีการศึกษา 2534

ลายมือชื่อนิสิต

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

กิตติกรรมประกาศ



วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความช่วยเหลือ แนะนำ และให้
ข้อคิดเห็นต่าง ๆ จาก รองศาสตราจารย์ ดร. ไสเกษ เริงสารากุ ซึ่ง เป็นอาจารย์ที่ปรึกษา
ที่ดีมากยตลอด และได้รับความช่วยเหลือ แนะนำบางส่วนจาก ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.
อมร เพชรสุน และ อาจารย์ ดร.ปรีชา วงศ์วัฒน์ชัย ซึ่ง เป็นอาจารย์ในครองการวิจัย
ศึกษาในทรัพย์ ซึ่งต้องขอขอบพระคุณค่าอาจารย์ดังกล่าวเป็นอย่างสูง ก ที่นี้

ขอขอบพระคุณ พันเอก ดร. วีระ พลวัฒน์ แห่งศูนย์วิจัยและพัฒนาการทหาร ซึ่ง
เป็นผู้บังคับบัญชาที่ให้ความกรุณาสนับสนุนและอำนวยความสะดวกในการทำวิทยานิพนธ์
และขอขอบคุณอาจารย์, เพื่อนและน้องนิสิตปริญญาโท, ผู้ช่วยวิจัย ตลอดจน
บุคลากรในภาควิชาเครื่องทุกท่านที่ให้กำลังใจ ความร่วมมือและความช่วยเหลือ ในการวิจัย
และวิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงโดยสมบูรณ์



สารบัญ



หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ข
กิตติกรรมประกาศ	ค
รายการตารางประกอบ	ง
รายการรูปประกอบ	ด
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำอ่าก	ฉ
บทที่	
1 บทนำและทฤษฎี	1
1.1 ประเททของสารประกอบดีบุกอินทรีย์	2
1.2 โครงสร้างและคุณสมบัติของสารประกอบดีบุกอินทรีย์	6
1.3 ประโยชน์ของสารประกอบดีบุกอินทรีย์	9
1.4 ความเป็นพิษของสารประกอบดีบุกอินทรีย์	12
1.5 ปฏิกิริยาเติมหมู่ชั้นเพต	16
1.6 ปฏิกิริยาเคมีของพันธะระหว่างดีบุก-ออกไซเจน	20
2 อุปกรณ์และการทดลอง	25
2.1 เครื่องมือที่ใช้ในการทดลอง	25
2.2 อุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลอง	26
2.3 สารเคมีที่ใช้ในการทดลอง	26
2.4 วิธีการทดลอง	27
2.4.1 สังเคราะห์สารประกอบแอลกิล ไยาราเจน ชัลเพต	
จากปฏิกิริยาระหว่างแอลกอฮอล์กับกรดคลอรัสลไฟฟิก	27
2.4.1.1 สังเคราะห์ไดเดคิล ไยาราเจน ชัลเพต	29
2.4.1.2 สังเคราะห์เออกซ์เดคิล ไยาราเจน ชัลเพต ..	30

2	2.4.1.3 สังเคราะห์ออกตะ เดคิล ไย่าดรเจน ชัลเพต ..	31
	2.4.2 สังเคราะห์สารประกอบไตรออร์แกโนทิน ชัลเพต เอสเทอร์ จากปฏิกิริยาการห่วงสารประกอบแอลกิล ไย่าดรเจน กับบีส-(ไตรบิวทิลทิน) ออกไซซ์ ..	33
	2.4.2.1 สังเคราะห์ไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ..	34
	2.4.2.2 สังเคราะห์ไตรบิวทิลทิน เอิกซ์เดคิล ชัลเพต ..	34
	2.4.2.3 สังเคราะห์ไตรบิวทิลทิน ออกตะ เดคิล ชัลเพต ..	35
3	วิเคราะห์ผลการทดลอง	36
3.1	การวิเคราะห์ผลการทดลองด้วยยืนพราเรด สเปกตросโคป	36
3.2	การวิเคราะห์ผลการทดลองด้วย เย็นเย็มอาร์	41
3.3	การวิเคราะห์ผลการทดลองด้วย แมส สเปกตросโคป	46
3.4	การวิเคราะห์ผลการทดลองด้วย อะตอมฟิฟ แอบซอร์บชั่น	49
3.5	การวิเคราะห์ผลการทดลองด้วย เอ็กซ์-เรย์ ฟลูออเรสเซนต์	49
3.6	สรุปการวิเคราะห์ผลการทดลอง	50
3.7	การทดสอบประสิทธิภาพในการผ่าเชื้อรา	52
3.7.1	การเติร์ยมสารละลายตัวอย่าง	52
3.7.2	การทดสอบการผ่าเชื้อราของสารละลายตัวอย่าง	53
3.7.3	ผลการทดสอบการผ่าเชื้อรา	53
4	สรุปผลการทดลองและวิจารณ์	56
	เอกสารอ้างอิง	62

ภาคผนวก

รูปที่ 3.1	แสดงอินพราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิฟ ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	67
รูปที่ 3.2	แสดงอินพราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิฟ เยกซ์เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	68
รูปที่ 3.3	แสดงอินพราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิฟ ออกตะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	69
รูปที่ 3.4	แสดงโปรตอง-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	70
รูปที่ 3.5	แสดงส่วนขยายเคมีคัลชิพท์ ช่วง $\delta = 0.6 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.4	71
รูปที่ 3.6	แสดงโปรตอง-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ เยกซ์เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	72
รูปที่ 3.7	แสดงส่วนขยายเคมีคัล ชิพท์ ช่วง $\delta = 0.6 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.6	73
รูปที่ 3.8	แสดงโปรตอง-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ ออกตะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	74
รูปที่ 3.9	แสดงส่วนขยายเคมีคัล ชิพท์ ช่วง $\delta = 0.2 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.8	75
รูปที่ 3.10	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	76
รูปที่ 3.11	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ เยกซ์เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	77
รูปที่ 3.12	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิฟ ออกตะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	78

หน้า

รูปที่ 3.13 แสดงการแบ่งแยกระหว่างหมู่เมทิลกับหมู่เมทีนของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	79
รูปที่ 3.14 แสดงแมสสเปกตรารของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	80
รูปที่ 3.15 แสดงแมสสเปกตรารของไตรบิวทิลทิน เอิกซ์ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	81
รูปที่ 3.16 แสดงแมสสเปกตรารของไตรบิวทิลทิน ออกตุ๊ะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	82
รูปที่ 3.17 แสดงข้อมูลของอะตอนมิก แอบชอร์บชั่นของไตรบิวทิลทิน แอลกิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1 – 2.4.2.3	83
รูปที่ 3.18 แสดงเอ็กช-เรย์ พลูออเรสเซนต์ของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	84
รูปที่ 3.19 แสดงเอ็กช-เรย์ พลูออเรสเซนต์ของไตรบิวทิลทิน เอิกซ์ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	85
รูปที่ 3.20 แสดงเอ็กช-เรย์ พลูออเรสเซนต์ของไตรบิวทิลทิน ออกตุ๊ะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	86
ประวัติผู้เขียน	87

รายการตารางประกอบ

	หน้า
ตารางที่ 1.1 แสดงการใช้สารประกอบดีบุกอินทรีย์ในอุตสาหกรรม	10
ตารางที่ 1.2 แสดงความเป็นพิษต่อสิ่งมีชีวิตของสารประกอบ ไตรออร์แกโนทินที่มีหมู่อินทรีย์ต่าง ๆ กัน	13
ตารางที่ 1.3 แสดงการใช้งานงานด้านฝ่ายภาพของสารประกอบ ไตรออร์แกโนทิน	14
ตารางที่ 3.1 แสดงข้อมูลการคุณกลืนรังสีอินฟราเรดของไตรบิทธิล ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวชือ 2.4.2.1	37
ตารางที่ 3.2 แสดงข้อมูลการคุณกลืนรังสีอินฟราเรดของไตรบิทธิน เยกซ์ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวชือ 2.4.2.2	38
ตารางที่ 3.3 แสดงข้อมูลการคุณกลืนรังสีอินฟราเรดของไตรบิทธิน ออกตะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวชือ 2.4.2.3	40
ตารางที่ 3.4 แสดงข้อมูลของคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของสารประกอบ ไตรออร์แกโนทิล ชัลเพต เอสเทอร์ ซึ่งได้จากหัวชือ ^{2.4.2.1-2.4.2.3}	45
ตารางที่ 3.5 แสดงข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์โครงสร้างโดยเครื่องมือต่าง ๆ ของไตรบิทธิล ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวชือ 2.4.2.1	50
ตารางที่ 3.6 แสดงประสิทธิภาพในการฟื้นร่างของไตรบิทธิน ไดเดคิล ชัลเพต	54
ตารางที่ 3.7 แสดงประสิทธิภาพในการฟื้นร่างของไตรบิทธิน เยกซ์ เดคิล ชัลเพต	54
ตารางที่ 3.8 แสดงประสิทธิภาพในการฟื้นร่างของไตรบิทธิน ออกตะ เดคิล ชัลเพต	54

ตารางที่ 4.1 แสดงปริมาณต่อสุกของสารประกอบดีบุกอินทรีย์ในระบบยับยั้ง
การออกของสปอร์ต ที่ทำผลยับยั้งการออกของสปอร์ตแบบช้าคร่าว.... 61



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

รายการรูปประกอบ

หน้า

รูปที่ 1.1	แสดงโครงสร้างของสารประกอบออร์แกโนทินที่มีหมู่อินทรีย์ เกาส์ที่ดีบุก 4 หมู่ แบบ เทไตรีซิตรอล (sp^3)	7
รูปที่ 1.2	แสดงโครงสร้าง ไตรีกโนล ไบพิรามิด, ไดเมอร์ และ พอลิเมอร์ของสารประกอบออร์แกโนทินที่ดีบุก เกาส์กับหมู่ที่มีสีภาพ ไฟฟ้าลงมากกว่า	7
รูปที่ 1.3	แสดงแผนภูมิการแตกสลายของสารประกอบไตรออร์แกโนทิน	15
รูปที่ 1.4	แสดงโครงสร้าง เรโซแนนซ์ของสารประกอบแอลคิล ชั้น เพต เอสเทอร์	16
รูปที่ 2.1	แสดงการจัดเครื่องมือสังเคราะห์สารประกอบแอลคิล ไฮโดรเจน ชั้น เพต	28
รูปที่ 2.2	แสดงการจัดเครื่องมือสังเคราะห์สารประกอบไตรออร์แกโนทิน ชั้น เพต เอสเทอร์	33
รูปที่ 3.1	แสดงอินฟราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชั้น เพต ชิ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	67
รูปที่ 3.2	แสดงอินฟราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิน เยกซ์ เดคิล ชั้น เพต ชิ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	68
รูปที่ 3.3	แสดงอินฟราเรด สเปกตรัมของไตรบิวทิลทิน ออโกลະ เดคิล ชั้น เพต ชิ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	69
รูปที่ 3.4	แสดง一波ตอน-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชั้น เพต ชิ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	70
รูปที่ 3.5	แสดงส่วนขยายเดกิคัล ริพ์ ห่วง $\delta = 0.6 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.4	71

รูปที่ 3.6	แสดงปรอตตอน-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน เสกชะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	72
รูปที่ 3.7	แสดงส่วนขยายเคมีคัล ชิพที่ ช่วง $\delta = 0.6 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.6	73
รูปที่ 3.8	แสดงปรอตตอน-เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน ออกตะ เเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	74
รูปที่ 3.9	แสดงส่วนขยายเคมีคัล ชิพที่ ช่วง $\delta = 0.2 - 2.2$ PPM ของรูปที่ 3.8	75
รูปที่ 3.10	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	76
รูปที่ 3.11	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน เสกชะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	77
รูปที่ 3.12	แสดงคาร์บอน-13 เอ็นเอ็มอาร์ ของไตรบิวทิลทิน ออกตะ เเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	78
รูปที่ 3.13	แสดงการแบ่งแยกระหว่างหมุ่เมทิลกับหมุ่เมทิลีนของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	79
รูปที่ 3.14	แสดงแมสสเปกตรของไตรบิวทิลทิน ไดเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1	80
รูปที่ 3.15	แสดงแมสสเปกตรของไตรบิวทิลทิน เสกชะ เดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.2	81
รูปที่ 3.16	แสดงแมสสเปกตรของไตรบิวทิลทิน ออกตะ เเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.3	82
รูปที่ 3.17	แสดงข้อมูลของอะตอมมิก แอกซอร์บชันของไตรบิวทิลทิน แอลเดคิล ชัลเพต ซึ่งได้จากหัวข้อ 2.4.2.1 - 2.4.2.3	83



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

คำอธิบายสัญลักษณ์และค่าปัจจัย

Og	= องศาเซลเซียส
พ.ร.ช.	= ไฟล์ไวนิลคลอไครต์ หรือ พ.ร.ช.
Me	= หมู่เมทิล
Et	= หมู่เอทิล
Bu	= หมู่บิวทิล
Bu ^t	= หมู่บิวทิลติดกุญแจ
Ph	= หมู่เฟนิล
nm	= นาโนเมตร
ml.	= มิลลิลิตร
%	= เปอร์เซ็นต์
km ⁻¹	= ต่อเซนเติมตร (อินฟราเรด สเปกטרสโคป)
PPM	= หน่วยเคมีคัลชิพท์ของ เอ็นเอ็มอาร์
δ	= ตำแหน่งของ เคมีคัล ชิพท์ (เอ็นเอ็มอาร์)
ppM	= ส่วนในล้านส่วน (ความเข้มข้น)
m/e	= มวลต่อประจุ (แมส สเปกตรสโคป)

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY