

有機スペクトル解析

責任者・コーディネーター	創薬有機化学分野 河野 富一 教授		
担当講座・学科(分野)	創薬有機化学分野		
対象学年	2	区分・時間数	講義 18 時間
期 間	後期		
単 位 数	1 単位		

・学習方針（講義概要等）

医薬品成分のほとんどは有機化合物であり、その分子構造を明らかにすることは、化学的性質や生理作用を理解する上で極めて重要である。有機化合物の構造解析は、核磁気共鳴法、質量分析法、赤外分光法や紫外可視分光法などの物理的手法により得られたスペクトルデータを解析することにより行われる。本講義では、核磁気共鳴法と質量分析法を中心として、その原理と測定法、データ解析法について解説し、有機化合物の構造解析の基本を身につけることを目指す。

・教育成果（アウトカム）

紫外可視分光法、赤外分光法、質量分析法、核磁気共鳴法などの代表的な機器分析法についてその基礎を学ぶことで、スペクトルデータに基づく有機化合物の構造解析に関する基本的知識と技能を習得する。
(ディプロマ・ポリシー：2,7)

・到達目標（SBO）

1. 有機化合物の構造解析に用いられる機器分析法の特徴を説明できる。
2. 紫外可視吸光度測定法の原理および応用例を説明できる。(193)
3. 赤外吸収スペクトル測定法の原理および応用例を説明できる。(195)
4. IR スペクトルより得られる情報を概説できる。(267)
5. IR スペクトル上の基本的な官能基の特性吸収を列挙し、帰属することができる。(268)
6. 質量分析法の原理および応用例を説明できる。(200)
7. マススペクトルより得られる情報を概説できる。(269)
8. マススペクトルピークの種類（基準ピーク、分子イオンピーク、同位体ピーク、フラグメントピーク）を説明できる。(271)
9. 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。(272)
10. 核磁気共鳴スペクトル測定法の原理および応用例を説明できる。(199)
11. 有機化合物中の代表的プロトンについて、おおよその化学シフト値を示すことができる。(263)
12. ^1H NMR の積分値の意味を説明できる。(264)
13. ^1H NMR のシグナルが近接プロトンにより分裂（カップリング）する基本的な分裂様式を説明できる。(265)
14. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。(266)
15. 有機化合物の基本的な構造解析ができる。(273)

月日	曜日	時限	講座・分野	担当教員	講義内容/到達目標
9/10	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	有機スペクトル解析とは 1. 有機化合物の構造解析に用いられる機器分析法の特徴を説明できる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
9/17	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	質量分析法（1） 1. 質量分析法の原理および応用例を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
9/24	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	質量分析法（2） 1. マススペクトルより得られる情報を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
10/1	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	マススペクトルの解析 1. マススペクトルの基本的な解析ができる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
10/8	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	赤外分光法 1. 赤外吸収スペクトル測定法の原理および応用例を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
10/15	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	紫外可視分光法 1. 紫外可視吸光度測定法の原理および応用例を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。

10/22	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	核磁気共鳴法（１） 1. 核磁気共鳴スペクトル測定法の原理を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
11/5	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	核磁気共鳴法（２） 1. 有機化合物中の代表的プロトンについて、おおその化学シフト値を示すことができる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
11/12	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	核磁気共鳴法（３） 1. ^1H NMR の積分値の意味を説明できる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
11/26	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	核磁気共鳴スペクトルの解析（１） 1. 化学シフトに基づいて ^1H NMR スペクトルの解析ができる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
12/1	水	4	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	核磁気共鳴スペクトルの解析（２） 1. スピンスピン結合に基づいて ^1H NMR スペクトルの解析ができる。 事前学習：教科書の該当箇所を最低限読んでくる。 事後学習：講義で取り扱った演習問題を中心に本日の講義内容を復習する。
12/13	月	3	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	まとめと総合演習 1. 有機化合物の基本的な構造解析ができる。 事前学習：関連する全範囲の講義ノートやプリントを見直してくる。 事後学習：関連する全範囲の宿題および教科書の章末問題を利用して復習する。

・教科書・参考書等（教：教科書 参：参考書 推：推薦図書）

	書籍名	著者名	発行所	発行年
教	ビギナーズ有機構造解析	川端 潤 著	化学同人	2005
参	基礎から学ぶ有機化合物のスペクトル解析	小川 桂一郎、榊原 和久、 村田 滋 著	東京化学同人	2018
参	innovated 構造解析プラクティス 第2版	川端 郁勇、森川 敏生、田邊 元三 著	京都廣川書店	2018

・成績評価方法

定期試験（約 80%）、レポートおよび自主的取り組み（合わせて約 20%）をもとに総合的に評価する。

・特記事項・その他

授業に対する事前学修（予習・復習）の時間は最低 30 分を要する。さらに、定期試験前には少なくとも 10 時間程度の総復習の時間を確保する必要がある。詳細な予習・復習の方法を初回講義時に説明する。

講義内容の理解度を確認するためにレポート等の課題提出を求めることがある。提出された課題については採点后に返却し、次回講義時にフィードバックするか、moodle の講義サイトに解説等をアップする。