

## 有機スペクトル解析

|                |      |                        |                  |
|----------------|------|------------------------|------------------|
| 責 任 者・コーディネーター |      | 薬科学講座創薬有機化学分野 河野 富一 教授 |                  |
| 担当講座・学科(分野)    |      | 薬科学講座創薬有機化学分野          |                  |
| 対象学年           | 2    | 区分・時間数<br>(1コマ2時間換算)   | 講義 26 時間 (13 コマ) |
| 期 間            | 後期   |                        |                  |
| 単 位 数          | 1 単位 |                        |                  |

・ねらい

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、医薬品のもつ化学的性質や薬効を理解する上で重要である。この講義では、質量分析法、赤外分光法、紫外可視分光法、核磁気共鳴法などの代表的な機器分析法の原理と測定法、および得られたデータ解析を学ぶことで、有機化合物のもつ構造的特徴を理解できるようになる。さらに、各種データからいろいろな情報を読み解く力を身につけることができる。

・学修目標

- 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) 質量分析法の原理および応用例を説明できる。
- 3) マススペクトルより得られる情報を概説できる。
- 4) マススペクトルに現れる種々のピーク（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）について説明できる。
- 5) 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。
- 6) 赤外吸収（IR）スペクトル測定法の原理を説明できる。
- 7) IR スペクトルより得られる情報を概説できる。
- 8) IR スペクトルに現れる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。
- 9) 紫外可視吸光度測定法の原理を説明できる。
- 10) 吸光度およびモル吸光係数を計算できる。
- 11) 核磁気共鳴スペクトル測定法の原理を説明できる。
- 12) 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。
- 13)  $^1\text{H}$  NMR スペクトルの積分値の意味を説明できる。
- 14)  $^1\text{H}$  NMR スペクトルに現れるシグナルの分裂（カップリング）様式について説明できる。
- 15) 代表的な化合物の部分構造を  $^1\text{H}$  NMR スペクトルから決定できる。
- 16)  $^1\text{H}$  NMR スペクトルから、有機化合物の構造を決定できる
- 17) 有機化合物の構造式から、 $^1\text{H}$  NMR スペクトルを予測できる。
- 18) 各種のスペクトルデータを用いて総合的に解析し、有機化合物の構造を決定できる。

・薬学教育モデル・コア・カリキュラム（令和4年度改訂版）対応項目

C-2-4 電磁波を用いる分析法、C-2-5 有機化合物の特性に基づく構造解析-原理-、C-3-4 有機化合物の特性に基づく構造解析

・学修事項

- (1) 質量分析法
- (2) 質量分析におけるイオン化法
- (3) マススペクトルに現れる各種のピーク
- (4) 赤外吸収分光法
- (5) 特性吸収帯
- (6) 紫外可視吸光度測定法
- (7) 共役
- (8) 吸光度とモル吸光係数
- (9) 核磁気共鳴分光法
- (10) 観測可能な核種
- (11) ゼーマン分裂
- (12) 化学シフトと積分値
- (13) カップリング (スピン-スピン結合定数)
- (14) 重水置換

・この科目を学ぶために関連の強い科目

はじめて学ぶ大学の有機化学、薬化学の基礎、物理化学1、分析化学2、有機薬化学1、有機薬化学2

・この科目を学んだ後につなげる科目

有機薬化学3、有機薬化学実習、有機生体制御化学、卒業研究

・講義日程

(矢) 西 106 1-F 講義室

| 月日   | 曜日 | 時限 | 講座・分野    | 担当教員     | 講義内容/到達目標                                                                                                                                                   |
|------|----|----|----------|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 9/4  | 金  | 1  | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>有機スペクトル解析とは</p> <p>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。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：上記の教育方針および教育成果を読んでおくこと。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p> |
| 9/11 | 金  | 1  | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>質量分析法 1</p> <p>1. 質量分析法の原理および応用例を説明できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p>                    |

|       |   |   |          |          |                                                                                                                                                                               |
|-------|---|---|----------|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 9/18  | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>質量分析法 2</p> <p>1.マスペクトルより得られる情報を説明できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p>                                       |
| 9/25  | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>マスペクトルの解析</p> <p>1.マスペクトルの基本的な解析ができる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p>                                        |
| 10/2  | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>赤外分光法</p> <p>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。</p> <p>2.赤外スペクトルの基本的な解析ができる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p>     |
| 10/9  | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>紫外可視分光法</p> <p>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。</p> <p>2.吸光度およびモル吸光係数を計算できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p>     |
| 10/16 | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | <p>これまで学んだことの復習</p> <p>1.マスペクトルの基本的な解析ができる。</p> <p>2.赤外スペクトルの基本的な解析ができる。</p> <p>3.吸光度およびモル吸光係数を計算できる。</p> <p>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。</p> <p>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。</p> |

|       |   |   |          |          |                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-------|---|---|----------|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 10/23 | 金 | 2 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | 核磁気共鳴法 1<br>1.核磁気共鳴スペクトル測定法の原理を説明できる。<br>【ICT (moodle)】<br>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。<br>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。                                                                                                                                                     |
| 11/6  | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | 核磁気共鳴法 2<br>1.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。<br>2.代表的な化合物の部分構造を $^1\text{H}$ NMR から決定できる。<br>3. $^1\text{H}$ NMR の積分値の意味を説明できる。<br>【ICT (moodle)】<br>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。<br>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。                                                 |
| 11/13 | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | 核磁気共鳴法 3<br>1.シグナルの分裂（カップリング）様式について説明できる。<br>【ICT (moodle)】<br>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。<br>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。                                                                                                                                                 |
| 11/20 | 金 | 1 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | 核磁気共鳴法 4（ここまでのまとめ）<br>1.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。<br>2.代表的な化合物の部分構造を $^1\text{H}$ NMR から決定できる。<br>3.シグナルの分裂（カップリング）様式について説明できる。<br>4. $^1\text{H}$ NMR の積分値の意味を説明できる。<br>【ICT (moodle)】<br>事前学修：事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。<br>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。 |
| 11/27 | 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<br>1. $^1\text{H}$ NMR スペクトルから有機化合物の構造を決定できる。                                                                                                                                                                                                             |

|       |   |   |          |          |                                                                                                                                        |
|-------|---|---|----------|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|       |   |   |          |          | <b>【ICT (moodle)】</b><br>事前学修：配布資料の上記該当部分を読んでくる。<br>事後学修：演習問題に取り組み、講義内容の理解度を確認する。                                                      |
| 12/10 | 木 | 4 | 創薬有機化学分野 | 河野 富一 教授 | 講義総括<br>1.各種のスペクトルデータを用いて総合的に解析し、有機化合物の構造を決定できる<br><b>【ICT (moodle)】</b><br>事前学修：これまでの講義ノート等を見直してくる。<br>事後学修：演習問題を利用して、それぞれの分析法を総復習する。 |

・ディプロマポリシーとこの科目の関連

|                                                                        |   |
|------------------------------------------------------------------------|---|
| 1. 薬剤師として医療に携わる職業であることを理解し、高い倫理観と豊かな人間性、及び社会の変化に柔軟に対応できる能力を有しているもの。    |   |
| 2. 地域における人々の健康に関心をもち、多様な価値観に配慮し、献身的な態度で適切な医療の提供と健康維持・増進のサポートに寄与できるもの。  |   |
| 3. チーム医療に積極的に参画し、他職種の相互の尊重と理解のもとに総合的な視点をもってファーマシューティカルケアを実践する能力を有するもの。 |   |
| 4. 国際的な視野を備え、医療分野の情報・科学技術を活用し、薬学・医療の進歩に資する総合的な素養と能力を有するもの。             | ○ |

・評価事項とその方法

総括評価：定期試験(論述式 80%) および自主的取り組み(論述式 20%)

自主的取り組みについては、事前に公開した評価基準をもとに提出毎に評価し、その結果を学生に伝える。

| 学修事項 | DP | 中間試験 | レポート | 小テスト | 定期試験 | 発表 | その他 | 合計  |
|------|----|------|------|------|------|----|-----|-----|
| 1～14 | 4  |      |      |      | 80   |    | 20  | 100 |
| 合計   |    |      |      |      | 80   |    | 20  | 100 |

・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  |
|---|---------------------|---------------------|--------|------|
| 参 | 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 | 2008 |

|   |                          |                  |        |      |
|---|--------------------------|------------------|--------|------|
| 参 | innovated 構造解析プラクティス 第2版 | 川崎郁勇、森川敏生、田邊元三 著 | 京都廣川書店 | 2018 |
|---|--------------------------|------------------|--------|------|

・ 特記事項 ・ その他

- 1) 【重要】市販の教科書を使用せず、講義担当者が作成した資料を用いて講義するため、資料を初回講義の前日までに moodle サイトより必ずダウンロードしておくこと。
- 2) 各コマに対する事前・事後学修には、それぞれ 30 分程度を要する。詳細な事前・事後学修の方法を初回講義時に説明する。また、定期試験前には少なくとも 6 時間程度の総復習の時間を確保する必要がある。定期試験後にはフィードバックとして補講を実施する。
- 3) 講義情報については、moodle サイトにも公開しているので必ず確認しておくこと。
- 4) 当該科目に関連する実務経験の有無 無

・ 授業に使用する機器・器具と使用目的

| 使用区分 | 機器・器具の名称 | 台数 | 使用目的               |
|------|----------|----|--------------------|
| 講義   | パソコン     | 1  | デジタル板書およびスライド投影のため |