

有機構造解析 2

責任者・コーディネーター	天然化学分野 林 宏明 准教授		
担当講座・学科(分野)	天然化学分野		
対象学年	3	区分・時間数	講義 16.5 時間 演習 1.5 時間
期 間	後期		
単 位 数	1 単位		

・学習方針（講義概要等）

天然、合成品に関わらず医薬品の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。有機化合物の構造決定は、核磁気共鳴法、質量分析法、赤外分光法や紫外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が、各種分析法の原理と測定方法、データの解析方法を解説し、また、スペクトルデータを実際に解析することにより、基本的な有機化合物の構造決定に習熟することを目指す。

・教育成果（アウトカム）

核磁気共鳴（NMR）スペクトル、赤外吸収（IR）スペクトル、質量スペクトルなどの代表的な機器分析法の基本的知識と、データ解析のための基本的技能を習得して、基本的な化学物質の構造決定が出来るようになる。
(ディプロマ・ポリシー：2,7)

・到達目標（SBO）

1. ^1H および ^{13}C NMR スペクトルより得られる情報を概説できる。
2. 有機化合物中の代表的プロトンとカーボンについて、おおよその化学シフト値を示すことができる。
3. ^1H NMR の積分値の意味を説明できる。
4. ^1H NMR 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。
5. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。
6. IR スペクトルより得られる情報を概説できる。
7. 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。
8. マススペクトルより得られる情報を概説できる。
9. 測定化合物に適したイオン化法を選択できる。
10. 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。
11. 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。
12. 化学物質の構造決定における紫外可視吸収スペクトルの役割を説明できる。
13. 旋光度測定法(旋光分散)の原理および応用例を説明できる。
14. 分光分析法を用いて、日本薬局方収載の代表的な医薬品の分析を実施できる。
15. 代表的な機器分析法を用いて、代表的な化合物の構造決定ができる。
16. 各種機器分析法を用いて、簡単な天然有機化合物の構造決定ができる。(☆)

【講義】

クラス	月日	曜日	時限	講座・講座	担当教員	講義内容/到達目標
	9/20	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	構造解析の基礎 1. 代表的な機器分析法を用いて、代表的な化合物の構造決定ができる。
	10/11	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	核磁気共鳴 化学シフト 1. ^1H NMR スペクトルより得られる情報を概説できる。 2. 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。
	10/18	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	核磁気共鳴 スピン結合 1. ^1H NMR 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。
	10/30	火	2	天然物化学分野	林 宏明 准教授	核磁気共鳴 ^{13}C -NMR と二次元 NMR 1. ^{13}C NMR スペクトルより得られる情報を概説できる。 1. 有機化合物中の代表的カーボンについて、おおよその化学シフト値を示すことができる。
A	11/8	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	核磁気共鳴による構造解析 1. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。
B	11/15	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	核磁気共鳴による構造解析 1. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。
	11/20	火	2	天然物化学分野	林 宏明 准教授	質量スペクトル (1) 1. マススペクトルより得られる情報を概説できる。 2. 測定化合物に適したイオン化法を選択できる。
	11/22	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	質量スペクトル (2) 1. 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)

						ク、フラグメントピーク)を説明できる。 2. 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。
	11/27	火	2	天然物化学分野	林 宏明 准教授	赤外吸収スペクトル 1. IR スペクトルより得られる情報を概説できる。 2. 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。
	11/29	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	紫外可視吸収スペクトル 1. 化学物質の構造決定における紫外可視吸収スペクトルの役割を説明できる。
	12/4	火	2	天然物化学分野	林 宏明 准教授	旋光度と円二色性 1. 旋光度測定法(旋光分散)の原理および応用例を説明できる。
	12/6	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	総合演習 1. 代表的な機器分析法を用いて、代表的な化合物の構造決定ができる。 2. 各種機器分析法を用いて、簡単な天然有機化合物の構造決定ができる。(☆)

【演習】

クラス	月日	曜日	時限	講座・分野	担当教員	講義内容/到達目標
	12/13	木	3	天然物化学分野	林 宏明 准教授	まとめ

・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	ベーシック有機構造解析	森田博史、石橋正己	化学同人	2011
参	ビギナーズ有機構造解析	川端 潤	化学同人	2005
参	わかる有機化学シリーズ 3 有機スペクトル解析	齋藤勝裕	東京化学同人	2008

・成績評価方法

課題（10%）、定期試験（90%）を総合的に評価する。

・特記事項・その他

授業では毎回、確認テストを実施するので、それを復習すること。確認テストの結果に関しては、授業内で解説する。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。

・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	ノート型パソコン	1	講義プレゼン用