

有機構造解析 2

| | | | |
|--------------|-----------------|--------|----------|
| 責任者・コーディネーター | 天然物化学分野 藤井 勲 教授 | | |
| 担当講座・学科(分野) | 天然物化学分野 | | |
| 対象学年 | 3 | 区分・時間数 | 講義 15 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。有機構造解析 2 では、2 年で履修した有機構造解析 1 の学習内容を基礎とし、各種分析法の原理と測定方法、データの解析方法を復習するとともに、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。(262)
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。(263)
3. ^1H NMR の積分値の意味を説明できる。(264)
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。(265)
5. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。(266)
6. IR スペクトルより得られる情報を概説できる。(267)
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。(268)
8. マススペクトルより得られる情報を概説できる。(200、269)
9. 測定化合物に適したイオン化法を選択できる。(270)
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。(271)
11. 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。(272)
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。(193)
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。(197)
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。(198)
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。(273)
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。(☆)

| 月日 | 曜日 | 時限 | 講座・講座 | 担当教員 | 講義内容/到達目標 |
|------|----|----|---------|------------|---|
| 10/2 | 金 | 3 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>構造解析の基礎</p> <p>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。</p> <p>事前学習：2年次の有機構造解析1の定期テスト問題を復習しておくこと。</p> <p>事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関して理解すること。</p> |
| 10/2 | 金 | 4 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>核磁気共鳴 化学シフト</p> <p>1. ^1H NMR スペクトルより得られる情報を概説できる。</p> <p>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。</p> <p>事前学習：2年次の有機構造解析1の際に習った化学シフトに関する事項を復習しておくこと。</p> <p>事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関して理解すること。</p> |
| 10/9 | 金 | 3 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>核磁気共鳴 スピン結合</p> <p>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。</p> <p>事前学習：2年次の有機構造解析1の際に習ったスピン総合に関する事項を復習しておくこと。</p> <p>事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関して理解すること</p> |
| 10/9 | 金 | 4 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>核磁気共鳴 ^{13}C NMR、二次元 NMR、核磁気共鳴による構造解析</p> <p>1. ^{13}C NMR スペクトルより得られる情報を概説できる。</p> <p>2. 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。</p> <p>3. 代表的な化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。</p> <p>事前学習：教科書の指定する部分を復習しておくこと。</p> <p>事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関して理解すること</p> |

| | | | | | |
|-------|---|---|---------|------------|---|
| 11/27 | 金 | 3 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>質量スペクトル（1）</p> <ol style="list-style-type: none"> 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。 <p>事前学習：教科書のマススペクトルの部分を熟読すること。 事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関しては暗記すること。</p> |
| 11/27 | 金 | 4 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>質量スペクトル（2）</p> <ol style="list-style-type: none"> 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、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。 <p>事前学習：教科書のマススペクトルの部分を熟読すること。 事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関しては暗記すること。</p> |
| 12/4 | 金 | 3 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>赤外吸収スペクトル</p> <ol style="list-style-type: none"> 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。 <p>事前学習：教科書の赤外吸収スペクトルの指定部分を熟読すること。 事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関しては暗記すること。</p> |
| 12/4 | 金 | 4 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>紫外可視吸収スペクトル</p> <ol style="list-style-type: none"> 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。 <p>事前学習：教科書の紫外可視吸収スペクトルの指定部分を熟読すること。 事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関しては暗記すること。</p> |
| 12/11 | 金 | 3 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | <p>旋光度と円二色性</p> <ol style="list-style-type: none"> 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。 <p>事前学習：教科書の指定部分を熟読すること。</p> |

| | | | | | |
|-------|---|---|---------|------------|--|
| | | | | | 事後学習：確認試験の内容に関して再確認するとともに、重要事項に関しては暗記すること。 |
| 12/11 | 金 | 4 | 天然物化学分野 | 林 宏明 非常勤講師 | 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。(☆) 事前学習：これまでの内容を復習しておくこと。 事後学習：演習の問題に関して、構造解析の過程を理解すること。 |

・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。各回講義の中で、教員とのディスカッションの機会を設ける。
事前・事後学習として、指定された事項を予習するとともに、実施した確認テストを再度解くこと。これらの学習には、各コマに対して、事前に 50 分、事後に 60 分程度を要する。更に、定期試験前には 7 時間程度の総復習の時間を確保する必要がある。

・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 |