

# 分子構造解析

Spectrometric Identification of Molecular Structure

基礎科目 3年／前期 1.5単位 必修科目

科目責任者 小山 清隆 (生薬学教室)

## ■ 教育目的

医薬品の開発研究、製造、品質評価において、従来の化学分析法に比べ、試料量が少量で行なえる機器分析は必要不可欠なものである。そのため、使用する機器類のハード面及びソフト面における進歩も著しい。田中耕一博士が質量分析法の脱離イオン化法の開発が評価され、2002年にノーベル化学賞を受賞したことから、機器分析の重要性が理解できる。本講義では、各種機器分析法の原理・装置、測定法および構造解析への応用について学習する。また、構造解析の一部は演習形式で行なう。

(構造解析演習の一部でパワーポイントを使用します)

## ■ 学習到達目標

1. 各スペクトルの原理・装置を説明できる。
2. 各スペクトルから得られる構造に関する情報を説明できる。
3. 簡単な構造式をMS, IR, NMRのデータから導くことが出来る。

## ■ 準備学習 (予習・復習)

予習：原理に関しては、良く調べてから講義にのぞむ事。構造解析に関しては自分で解いてみる事。

復習：原理を簡潔にまとめ、構造に関するどのような情報が得られるかもまとめておく。練習問題を複数回解く。

## ■ 授業内容

前半は、各スペクトルの原理、装置及びそれらから構造に関してどのような事が判るかを講義する。後半は、MS, IR, NMRのスペクトルデータからどのようにして構造(小分子)を導き出すのかを説明する。さらに演習問題も行う。

No.	項目	授業内容	SBOコード
1	概論	紫外・可視分光法 (UV-VIS)、赤外分光法 (IR)、質量分析法 (MS) 及び核磁気共鳴分光法 (NMR) の概略	C4 (4) -1-1
2~3	紫外・可視分光法、赤外分光法	原理、装置：電子の遷移、励起、一重項、三重項、吸収体、発色団と助色団、分子吸光係数、ランベルト・ベールの法則、電子スペクトルと化学構造	C4 (4) -5-1 C4 (4) -4-1 C4 (4) -4-2 C3 (1) -1-1~3、-5
4	質量分析法	原理、装置：イオン化(種類)、分子式の決定、スペクトル解析	C4 (4) -6-1~6 C3 (1) -3-1
5~7	核磁気共鳴分光法	原理、装置：原子核とスピン運動、磁場とスピン運動、化学シフト、積分値、カップリングとカップリング定数、デカップリング、重水置換	C4 (4) -2-1~7 C4 (4) -3-1~2 C3 (1) -2-1
8	立体構造	旋光度、円二色性、X線結晶解析	C4 (4) -7-1~4 C3 (1) -4-1
9~11	演習・構造解析	IR、UV-VIS、MS、1D-NMRを用いての構造解析及び演習、2D NMRデータの読み方	C4 (4) -2-8 C4 (4) -6-7 C4 (4) -8-1
12~15	演習・構造解析	IR、UV-VIS、MS、1D および 2D-NMRを用いての構造解析及び演習	C4 (4) -8-1

## ■ 授業分担者

No.2~8：野地 匡裕、No.1、No.9~15：小山 清隆

## ■ 成績評価方法

期末試験の成績(80%)と授業・演習への参加態度(20%)

## ■ 教科書

『構造解析プラクティス(解説と演習により深まる理解)』 桑島 博 編著(京都廣川書店)

## ■ 参考書

『有機化合物のスペクトルによる同定法(第7版)』 R. M. Silverstein, F. X. Webster (東京化学同人)

『機器分析のてびき(第2版)』 泉、小川、加藤、塩川、芝(監修) (化学同人)

『有機化学のためのスペクトル解析法』 M. Hesse ほか (化学同人)

『スタンダード薬学シリーズ2 物理系薬学Ⅲ 生体分子・化学物質の構造決定』 日本薬学会 編 (東京化学同人)

『スタンダード薬学シリーズ2 物理系薬学Ⅰ 物質の物理的性質』 日本薬学会 編 (東京化学同人)