

分子構造解析

Spectrometric Identification of Molecular Structure

生命：C3-06312MS

基礎科目 3年／前期 1.5単位 必修科目

科目責任者 横屋 正志(薬化学研究室)

■教育目的

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。【卒業認定・学位授与の方針：SD-①、SD-⑤】

■学習到達目標

1. 各スペクトルの原理・装置を説明できる。(知識)
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。(知識、技能、態度)
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。(知識、技能)

■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。(1時間以上)

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。(30分以上)

■授業形態

講義

■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分子の構造を演習を通して導き出す。(PBL、ディスカッション、プレゼンテーション)

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	C2(4)-①-1 C2(4)-①-2 C2(4)-①-3 C2(4)-②-1 C2(4)-③-1
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	C2(4)-①-1 C2(4)-①-3
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	C2(4)-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	C2(4)-②-1
8	立体構造	旋光度、円二色性、X線結晶解析	C2(4)-①-5 C2(4)-④-1
9～15	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	C2(4)-①-3 C2(4)-②-1 C2(4)-③-1

■授業分担者

林 賢(No.1～8)、横屋 正志(No.9～15)

■課題（レポート、試験等）のフィードバック及び成績評価方法

期末試験の成績(100%)

No.9～15はあらかじめ練習問題を配布するのでまず自分で解き、講義中の解説で確認する。別の方法で解いた場合はその場で質問し、ディスカッションを行う。

■教科書

『有機スペクトル解析入門』 小林啓二、木原伸浩 著(裳華房)

■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)

■ その他

あらかじめ配布される練習問題は必ず自分で解くようにする事。