

## 有機スペクトル解析

責任者・コーディネーター	創薬有機化学分野 河野 富一 教授		
担当講座・学科(分野)	創薬有機化学分野		
対象学年	2	区分・時間数	講義 18 時間
期 間	後期		
単 位 数	1 単位		

### ・学修方針（講義概要等）

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、医薬品の持つ化学的性質や薬効を理解する上で重要である。有機化合物の構造解析は、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。この講義では、質量分析法と核磁気共鳴法を中心として、その原理と測定法、基本的事項を解説した後、実際のスペクトルデータを用いてその解析法を学ぶ。

### ・教育成果（アウトカム）

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基礎と、得られたスペクトル解析を学ぶことで、有機化合物の持つ構造的特徴を理解できるようになるとともに、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。（ディプロマ・ポリシー：2,7）

### ・到達目標（SBO）

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。（200）
3. マススペクトルより得られる情報を概説できる。（269）
4. マススペクトルピークの種類（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）
5. 代表的な化合物のマススペクトルを解析できる。（272）
6. 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。（195）
7. IR スペクトルより得られる情報を概説できる。（267）
8. 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）
9. 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。（193）
10. 核磁気共鳴スペクトル測定法の原理および応用例を説明できる。（199）
11. 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。（263）
12.  $^1\text{H}$  NMR の積分値の意味を説明できる。（264）
13.  $^1\text{H}$  NMR の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）
14. 代表的な化合物の部分構造を  $^1\text{H}$  NMR から決定できる。（266）
15. 有機化合物の基本的な構造解析ができる。（273）
16. 各種のスペクトルデータを用いて総合解析を実施し、有機化合物の構造を決定できる。（☆）

月日	曜日	時限	講座・分野	担当教員	講義内容/到達目標
9/6	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	有機スペクトル解析とは 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。 【ICT (moodle)】 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。 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。
9/13	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	質量分析法（1） 1. 質量分析法の原理および応用例を説明できる。 【ICT (moodle)】 事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。 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。
9/20	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	質量分析法（2） 1. マススペクトルより得られる情報を説明できる。 【ICT (moodle)】 事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。 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。
10/4	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	マススペクトルの解析 1. マススペクトルの基本的な解析ができる。 【ICT (moodle)】 事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。 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。
10/11	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	赤外分光法 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。 【ICT (moodle)】 事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。 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。

10/18	金	2	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>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。</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>
10/25	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	<p>核磁気共鳴法（1）</p> <p>1. 核磁気共鳴スペクトル測定法の原理を説明できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。</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>
11/8	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	<p>核磁気共鳴法（2）</p> <p>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。</p> <p>2. 代表的な化合物の部分構造を <math>^1\text{H}</math> NMR から決定できる。</p> <p>3. <math>^1\text{H}</math> NMR の積分値の意味を説明できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。</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>
11/15	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	<p>核磁気共鳴法（3）</p> <p>1. 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>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。</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>
11/22	金	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	<p>核磁気共鳴スペクトルの解析（1）</p> <p>1. <math>^1\text{H}</math> NMR スペクトルから有機化合物の構造を決定できる。</p> <p>【ICT (moodle)】</p> <p>事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。</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>

12/6	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 (2) 1. 有機化合物の構造式から $^1\text{H}$ NMR スペクトルを予測する。 【ICT (moodle)】 事前学修：配布資料の該当箇所を最低限読んでくる。 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。
12/11	水	1	創薬有機化学分野	河野 富一 教授	まとめと総合演習 1. これまでに学んだ各種分析法により得られたスペクトルデータを総合解析し、有機化合物の構造を決定できる。 【ICT (moodle)】 事前学修：関連する全範囲の講義ノートやプリントを見直してくる。 事後学修：関連する全範囲を見直し、それぞれの分析法の理解度を確認する。

・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

・成績評価方法

定期試験（約 85 %）および自主的取り組み（約 15 %）で評価する。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。

・特記事項・その他

授業に対する事前学修および事後学修の時間はそれぞれ 30 分を要する。さらに、定期試験前には少なくとも 10 時間程度の総復習の時間を確保する必要がある。詳細な予習・復習の方法を初回講義時に説明する。定期試験後に、フィードバックとして補講等を実施する。

・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	パソコン	1	デジタル板書およびスライド投影のため