

科 目 名
有機化学Ⅲ (化学物質の構造決定)
Organic Chemistry III
(Structural Elucidation of Organic Compound)

2年 後期 1単位 必修

吉 満 齊

概 要

動植物の体内に一般的に存在する、炭素・水素・窒素・酸素を主な構成元素とする有機化合物（生体機能物質）は生体が日常的な活動をする上で重要な役割を担っており、その各種の生体機能物質の存在と化学構造は各種の生物体内の代謝および活性発現において密接な関係を示している。そこで、この生体機能分子の研究する上で欠くことの出来ない、有機化合物の構造決定に必須な核磁気共鳴（NMR）、赤外吸収（IR）およびマスペクトルなどの代表的な機器分析法の基本的な知識が求められている。

一般目標

基本的な化学物質の構造決定ができるようになるために、核磁気共鳴（NMR）、赤外吸収（IR）およびマ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修得する。

授業計画

1. MS と IR スペクトル
2. ^1H -と ^{13}C -NMR スペクトル
3. アルカンとアルケン化合物の構造解析
4. 芳香族化合物の構造解析 1
5. 芳香族化合物の構造解析 2
6. アミン、アルコール、ハロゲン化物、ニトロ化合物の構造解析
7. カルボン酸とカルボニル化合物の構造解析

薬学教育カリキュラムおよび到達目標

C4 化学物質の性質と反応

(4) 化学物質の構造決定

【 ^1H NMR】

- 2) 化学シフトに及ぼす構造的要因を説明できる。
- 3) 有機化合物中の代表的水素原子について、おおよその化学シフト値を示すことができる。
- 4) 重水添加による重水素置換の方法と原理を説明できる。
- 5) ^1H NMR の積分値の意味を説明できる。
- 6) ^1H NMR シグナルが近接プロトンにより分裂（カップリング）する理由と、分裂様式を説明できる。
- 7) ^1H NMR のスピン結合定数から得られる情報を列挙し、その内容を説明できる。
- 8) 代表的化合物の部分構造を ^1H NMR から決定できる。

【 ^{13}C NMR】

- 1) ^{13}C NMR の測定により得られる情報の概略を説明できる。
- 2) 代表的な構造中の炭素について、おおよその化学シフト値を示すことができる。

【IR スペクトル】

- 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。

【マスペクトル】

- 2) イオン化の方法を列挙し、それらの特徴を説明できる。
- 3) 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。
- 4) 塩素原子や臭素原子を含む化合物のマスペクトルの特徴を説明できる。
- 5) 代表的なマスフラグメンテーションについて概説できる。
- 7) 基本的な化合物のマスペクトルを解析できる。

授業方法

通常の講義形態をとるが、適宜、プリントを配付し補足する。

評価方法

定期試験で評価する。

教 材

泉 美治 他監修「第2版 機器分析のてびき1」(化学同人)