

《担当者名》講師 / 金 尚永

【概 要】

医薬品や生体成分の作用および反応性を理解する上で、その化学構造を知することは非常に重要である。有機化合物の構造決定には様々な機器分析法が利用されているが、本講義では代表的な分析法である核磁気共鳴（NMR）スペクトル測定法、赤外吸収（IR）スペクトル測定法、および質量分析法（MS）について、その原理と応用について学ぶ。さらに典型的な有機化合物のスペクトルデータから部分構造を推定、確認しながら化学構造を決定する技術を修得するとともに研究分野での応用力も養う。

【学修目標】

有機化合物の構造決定に用いられる代表的な機器分析法の原理とその応用例を説明できる。

各種スペクトルを読み解くうえで必要な指標となる数値を説明できる。

各種スペクトルデータから典型的な化合物の化学構造を決定できる。

【学修内容】

回	テーマ	授業内容および学修課題	担当者
1	構造分析法の概要 教科書：p1～10 NMRスペクトル 1H NMR；化学シフトと置換基効果 教科書：p35～47	● 構造分析法に関して、物理的基礎ならびにスペクトルの特徴を説明できる。 ● 核磁気共鳴（NMR）スペクトル測定法の原理を説明できる。 ● おおよその化学シフト値（芳香族、二重結合、脂肪族等）を示すことができる。 ● 化学シフトに影響を及ぼす置換基や構造上の要因（誘起効果、異方性効果等）を概説でき、おおよその化学シフト値（芳香族、二重結合、脂肪族等）を示すことができる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1 C3-(4)- -1	金 尚永
2	積分値 教科書：p48 H NMR；カップリング、重水素置換 教科書：p49～57	● 積分値から得られる情報を説明できる。 ● 近接プロトンによるカップリングについて説明でき、分裂様式から化合物の部分構造を示すことができる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1 C3-(4)- -1	金 尚永
3	1H NMR；カップリング定数 教科書：p49～57	● 近接プロトンによるカップリングについて説明でき、分裂様式から化合物の部分構造を示すことができる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1 C3-(4)- -1	金 尚永
4	13C NMR；化学シフトと置換基効果 教科書：p57～61 IRスペクトル；官能基と特性吸収 教科書：p9～29	● 化学シフトに影響を及ぼす置換基や構造上の要因（誘起効果、異方性効果等）を概説でき、おおよその化学シフト値を示すことができる。 ● 赤外（IR）吸収の原理を説明できる。 ● 測定に用いる装置の概略と測定上の注意点を説明できる。 ● 官能基（OH、NH、CN、カルボニル、NO₂等）の特性吸収について示すことができ、その波数に影響を及ぼす要因について説明できる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1～2 C3-(4)- -1～2	金 尚永

回	テーマ	授業内容および学修課題	担当者
5	NMRスペクトル解析演習 教科書：p35-74	● NMRスペクトルに関する知識を活用して分子の部分構造を決定できる。 ● NMRスペクトルを用いた構造決定の手順について概説できる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1 C3-(4)- -1	金 尚永
6	MSスペクトル 教科書：p75～84	● 質量分析法の原理を説明できる。 ● 測定に用いる装置の概略と測定上の注意点を説明できる。 ● スペクトル上のピークの種類（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。 ● 代表的なフラグメンテーションについて説明できる。 ● フラグメンテーションの情報から部分構造を推定できる。 ● 同位体ピークから化合物の部分構造を示すことができる。 ● 高分解能マススペクトルの情報から分子量を決定できる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -3 C3-(4)- -3	金 尚永
7 { 8	構造解析演習 教科書：p109～128	● スペクトルに関する知識を活用して分子の部分構造を決定できる。 ● スペクトルを用いた構造決定の手順について概説できる。 関連するモデルコアカリキュラムの到達目標 C3-(4)- -1～3 C3-(4)- -1～3	金 尚永

【授業実施形態】

面接授業

授業実施形態は、各学部（研究科）、学校の授業実施方針による

【評価方法】

期末定期試験（60％）と出席（40％）により評価する。

期末定期試験に置いて、正答率の低い問題に関しては、後日、GoogleDriveに解説をアップロードする。

【教科書】

「innovated 構造解析プラクティス」第2版 京都廣川書店

【参考書】

「わかりやすい機器分析」 廣川書店

【学修の準備】

3年前期「機器分析学」の関連する範囲を複習し、毎講義時に行う練習問題に備える。専門用語や図解について理解しておく。指示された演習問題を解いておく。（100分）

【関連するモデル・コアカリキュラムの到達目標】

C3 薬学の中の有機化学

C3-(4) 有機化合物の特性に基づく構造解析

有機化合物の構造解析のための機器分析法を説明する。

1 核磁気共鳴（NMR）スペクトル

2 赤外吸収（IR）スペクトル

3 マススペクトル（MS）

分析スペクトルから有機化合物の構造を推定する。

- 1 核磁気共鳴（NMR）スペクトル
- 2 赤外吸収（IR）スペクトル
- 3 マススペクトル（MS）

【薬学部ディプロマ・ポリシー(学位授与方針)との関連】

2．有効で安全な薬物療法の実践、ならびに人々の健康な生活に寄与するために必要な、基礎から応用までの薬学的知識を修得している。

【その他】

この科目は主要授業科目に設定している