

科 目	必・選	担 当 教 員	学年・学科	単位数	授 業 形 態							
機器分析II (Instrumental analysis II)	選	田中和彦	5 年生 物質工学科	1	半年 週 2 時間							
授業概要	紫外・可視光吸収分光法 (UV-vis) , 赤外分光法 ( I R) , 核磁気共鳴分光法 ( NMR) , 質量分析法 ( MS) の原理と測定法を学び, ついでこれらのスペクトルを用いた有機化合物の構造解析法を学ぶ。											
到達目標	紫外・可視光吸収分光法 (UV-vis) , 赤外分光法 ( I R) , 核磁気共鳴分光法 ( NMR) , 質量分析法 ( MS) のスペクトルから有機化合物の構造解析ができる能力を養う。											
評価方法	中間・期末の試験 ( 6 0 %) と小テスト, レポート ( 4 0 %) で評価する。											
教科書等	教科書: 小川桂一郎他著「基礎から学ぶ有機化合物のスペクトル解析」 (東京化学同人) 参考書: 泉 美治他著「第2版 機器分析の手引き 第1集」 (化学同人) L. M. ハーウッド他著, 岡田恵次他訳「有機化合物のスペクトル解析」 (化学同人)											
内 容					学習・教育目標							
第 1 週	ガイダンス, 復習	講義の概略・予定, 取り扱う分析機器の種類と特徴, 電磁波の振動数, 波長, 波数, 組成式の求め方			C-1							
第 2 週	有機分子の構造	不飽和度, 8 電子則, Lewis 構造式, 共鳴構造式			C-1							
第 3 週	UV-vis 法	(1) 原理と測定法			C-1							
第 4 週	UV-vis 法	(2) 電子遷移と溶媒効果			C-1							
第 5 週	I R 法	振動励起の種類, 官能基と特性吸収帯 [小テスト-1]			C-1							
第 6 週	<sup>1</sup> H-NMR	(1) 原理と測定法, シィールディング			C-1							
第 7 週	<sup>1</sup> H-NMR	(2) 化学シフト, 誘起効果, 共鳴効果, 異方性効果			C-1							
第 8 週	<sup>1</sup> H-NMR	(3) スピン-スピン結合, デカップリング [前期中間試験]			C-1							
第 9 週	<sup>13</sup> C-NMR	(1) <sup>1</sup> H-NMR との違い, 化学シフト			C-1							
第 1 0 週	<sup>13</sup> C-NMR	(2) 多重度の決定, オフレゾナンスデカップリング			C-1							
第 1 1 週	MS 法	(1) 原理と測定法, 分子イオン, フラグメンテーション			C-1							
第 1 2 週	MS 法	(2) MS スペクトルの解析演習 [小テスト-2]			C-1							
第 1 3 週	総合演習	(1) 有機芳香族化合物の構造解析演習			C-1							
第 1 4 週	総合演習	(2) 有機脂肪族化合物の構造解析演習			C-1							
第 1 5 週	総合演習	(3) 有機エステル類の構造解析演習 [前期期末試験]			C-1							
第 1 6 週												
第 1 7 週												
第 1 8 週												
第 1 9 週												
第 2 0 週												
第 2 1 週												
第 2 2 週												
第 2 3 週												
第 2 4 週												
第 2 5 週												
第 2 6 週												
第 2 7 週												
第 2 8 週												
第 2 9 週												
第 3 0 週												
(特記事項)		JABEE との関連										
		JABEE	a	b	c	d1	d2a) d)	d2b) c)	e	f	g	h
		本校の学習・教育目標	A	A	C-1	C-1	C-2	B	B	D	C-3	B

1. 合格ラインについて, 特に記載の無いものは, 60 点以上を合格とします。

2. 定期試験について, 特に記載の無いものは, 評価配分を均等とします。(【例】年4回定期試験を実施した場合の各定期試験の評価配分は, 特に記載の無いものは, 25%ずつとなります。)

## 第1週～2週

本講が取り扱うのは、紫外・可視光吸収分光法 (UV-vis)、赤外分光法 (IR)、核磁気共鳴分光法 (NMR)、質量分析法 (MS) の四種の分析法である。これらのうち、UV-vis法、IR法、NMR法は、電磁波の吸収による分子の励起に基づく分析法である。MS法は電磁波の吸収によるものではなくて、高エネルギーの電子を照射し、正に帯電したイオン種を検出するものであり、分子量を求めることができる。これらの測定法の特色を理解する。有機分子の構造解析の第一歩は不飽和度を知ることである。不飽和度の意味とその算出法を学び、分子内に存在する不飽和結合の種類を推定することから始める。

## 第3週～4週

UV-visでは、分子が電磁波を吸収したときにどのような励起 (電子遷移) が起こるか、その電子遷移の特長を理解することが大切である。結合性軌道、反結合性軌道、発色団、助色団、最高被占軌道、最低空軌道、極大吸収波長などの概念を学習する。さらに、ランベルト・ベールの法則、フランク・コンドンの原理を学び、基底状態と励起状態との溶媒効果の違いや吸収波長シフトなどの現象を理解する。

## 第5週

IR法は、原子間結合の振動励起に基づく赤外領域の波長吸収に基づくものであり、IRスペクトルの振動数は有機化合物の官能基の振動と対応している。IR測定装置と測定法を学習し、有機化合物のスペクトル解析法を学習する。

## 第6週～10週

NMR法の物理的基礎知識を学習したのち、装置の概略、試料の調整法、測定法を学ぶ。<sup>1</sup>H-NMRと<sup>13</sup>C-NMRスペクトルの特長や化学シフト、遮へい (シールドディング)、非遮へい (デシールドディング)、スピンスピン結合、ブロードバンド・デカップリング、オフレゾナンス・デカップリング、異方性効果などの意味を理解する。さらに、核オーバーハウザー効果、多重度の決定法 (DEPT) についても学習し、これらを利用して有機化合物の構造解析をおこなう。

## 第11週～12週

MS法は、UV-vis法やIR法やNMR法などの吸収分光法と異なって、電子衝撃により分子をイオン化し、そのイオンを検出する分析法であり、分子量が決定できるという特長をもっている。分子のイオン化の種類、フラグメンテーション、マクラファティータン位などを学んだのち、MSスペクトルの基本的な解釈法を習得する。

## 第13週～15週

有機化合物の分子式から不飽和度を算出し、UVスペクトル、IRスペクトル、NMRスペクトル、MSスペクトルを読み取り、化合物の構造解析を演習形式 (プリントを配布) でおこなう。