

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	土井正光 奥野祥治	5 年生 物質工学科	1	半年 週 2 時間							
授業概要	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	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	講義の概略・予定，取り扱う分析機器の種類と特徴， （1）原理と測定法，シーリング （2）化学シフト，誘起効果，共鳴効果，異方性効果 （3）スピン-スピン結合，デカップリング （1） <sup>1</sup> H-NMR との違い，化学シフト （2）多重度の決定，オフレゾナンスデカップリング 原理と種類，スペクトルの解析法			C-1							
第 2 週	<sup>1</sup> H-NMR				C-1							
第 3 週	<sup>1</sup> H-NMR				C-1							
第 4 週	<sup>1</sup> H-NMR				C-1							
第 5 週	<sup>13</sup> C-NMR				C-1							
第 6 週	<sup>13</sup> C-NMR				C-1							
第 7 週	2 次元NMR				C-1							
第 8 週	総合演習				C-1							
[前期中間試験]												
第 9 週	I R法	（1）原理と測定方法 （2）官能基と特性吸収帯 （1）原理と測定法，分子イオン，フラグメンテーション （2）フラグメンテーション （3）MS スペクトルの解析演習 （1）有機化合物の構造解析演習 （2）有機化合物の構造解析演習（X線構造解析）			C-1							
第 1 0 週	I R法				C-1							
第 1 1 週	MS法				C-1							
第 1 2 週	MS法				C-1							
第 1 3 週	MS法				C-1							
第 1 4 週	総合演習				C-1							
第 1 5 週	総合演習				C-1							
[前期期末試験]												
(特記事項)		JABEE との関連										
第14週および第15週は、非常勤講師 による講義の場合がある。		JABEE	a	b	c	d1	d2a) d)	d2b) c)	e	f	g	h
		本校の学習	A	A	C-1	C-1	C-2	B	B	D	C-3	B
		・教育目標				◎						

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

本講が取り扱うのは、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、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徴を理解する。

## 第2週～8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。 $^1\text{H}$ -NMR、 $^{13}\text{C}$ -NMRそして2次元NMRスペクトルのそれぞれの特長を学習する。 $^1\text{H}$ -NMRでは化学シフト、遮へい（シールドイング）、スピン-スピン結合、重水素交換現象そして核オーバーハウザー効果など、 $^{13}\text{C}$ -NMRではブロードバンド・デカップリングそしてオフレゾナンス・デカップリングなど、2次元NMRではCOSYやNOEYなどの測定法の違いを理解する。さらに、各スペクトルを利用して有機化合物の構造解析を実習する。

## 第9～10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11週～13週

MS法（質量分析法）は、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。分子のイオン化にはさまざまな方法がある、各方法の特徴、利点などについての理解する。また、EI-MSによるフラグメンテーションは分子の構造解析多くの情報をもたらしていく。マクラフアティー転位など代表的なフラグメンテーションを学んだのち、MSスペクトルの基本的な解釈法を習得する。

## 第14週～15週

IRスペクトル、NMRスペクトル、MSスペクトルの各スペクトルデータを読み取り、化合物の構造解析を演習形式で行う。また、X線構造解析について概要を説明する。