

<b>Title</b>	テキストを語る：『有機スペクトル解析：MS・IR・NMR データを読む』
<b>Author</b>	臼杵, 克之助 / 館, 祥光
<b>Citation</b>	大阪市立大学大学教育. 13 卷 1 号, p.73-74.
<b>Issue Date</b>	2015-10
<b>ISSN</b>	1349-2152
<b>Type</b>	Departmental Bulletin Paper
<b>Textversion</b>	Publisher
<b>Publisher</b>	大阪市立大学大学教育研究センター
<b>Description</b>	臼杵克之助、築部浩、西岡孝訓(共著)『有機スペクトル解析：MS・IR・NMR データを読む』：科目名：「機器分析法」(理学部化学科 3 回生)：担当教員:臼杵克之助、館祥光(大阪市立大学理学研究科)：特筆事項:大阪市立大学教育後援会顕彰平成 26 年度「優秀テキスト賞」受賞
<b>DOI</b>	10.24544/ocu.20171218-066

Placed on: Osaka City University

## ＝ テキストを語る Textbook Review ＝

臼杵克之助、築部浩、西岡孝訓（共著）『有機スペクトル解析 -MS・IR・NMRデータを読む』

科目名：「機器分析法」（理学部化学科3年生）

担当教員：臼杵克之助、館祥光（大阪府立大学理学研究科）

特筆事項：大阪府立大学教育後援会顕彰平成26年度「優秀テキスト賞」受賞

### 【本書執筆に至る経緯】

「茜さす 紫野行き 標野行き 野守は見ずや 君が袖振る」と万葉集に詠われているように、私たちは上代から植物がつくり出す有機化合物（炭素原子が共有結合で結びついた骨格をもった化合物）を染料や薬などとして利用してきました。19世紀頃には、多成分の混合物のなかから、純粋な（時として少量の）有機化合物を分離できるようになり、これらの化合物を同定し、その構造を明らかにする（構造解析）ことが求められるようになりました。また、時を同じくして、19世紀後半には、有機化合物の分子構造に関する概念、たとえば「分子式が同じでも、原子の配列により物質が異なる」、ケクレによる「ベンゼンの構造モデル」、ファントホッフヤル・ベルらによる「正四面体炭素原子の理論」などが確立されてきました。

有機化合物の分子構造を解析する手法として、当初、分解反応により既知物質に変換する（減成）というアプローチが取られていましたが、20世紀に入ってから、機器分析法が用いられるようになりました。それらの多くが、試料分子をいろいろなエネルギーをもった電磁波、すなわち波長の異なる光で探り、電磁波（光）に対する試料分子からの応答（相互作用）をスペクトルとして記録するものです。以下に代表的なものをあげます。

- \* 赤外吸収スペクトル（Infrared absorption spectroscopy）どんな官能基が存在するか？
- \* 紫外可視スペクトル（Ultraviolet-visible spectroscopy）共役 $\pi$ 電子系が存在するか？
- 旋光分散（ORD: Optical Rotatory Dispersion）・

円二色性（CD: Circular Dichroism）

\* 核磁気共鳴スペクトル

（Nuclear magnetic resonance spectroscopy）それぞれの炭素原子や水素原子がどのように結合し、どんな骨格を形成しているか？

\* 質量分析（Mass spectrometry）分子量はどれくらいで、分子式はどうあらわされるか？どのような部分構造が存在するか？

「機器分析法」は理学部学科再編にともなって、新化学科のカリキュラムにおいて2010年度から立ちあげられた科目です。再編前の旧化学科においては「化学情報とスペクトル演習」として、旧物質科学科においては「生物有機化学Ⅰ」（～2004年度）あるいは「分光物質学Ⅱ」（2005年度～）として、有機機器分析が講義されていました。私は1996年度からずっと旧物質科学科での講義担当でしたので、いろいろな書籍などから寄せ集めたものを講義資料として配布していました。

何かしらまとめたものを作りたいなあと思っていた2011年の秋、今回の編者の一人である築部浩先生からメールをいただきました。2004年に出版した「はじめての有機スペクトル解析」のバージョンアップを出版社に打診したいが、編者として参加してもらえないか…と。

ぜひ参画させていただきたいとお返事をし、本を手にした人に、このピーク／吸収があるから、この構造になるよね ということをはっきりと示してあげたい、IR、NMR、MSから、それぞれ得られる情報を結びつけて、いかに化学構造にたどり着けるのか かんたんな構造の化合物を例にして、考えていく道筋を解説したいとお話ししたことを覚えています。

もうお一人の編者である宇野英満先生（愛媛大学）とも議論をして、以下の4点を本書のセールスポイントとすることになりました。

- \* 新たに化合物70～80種程度について各種スペクトルを収録する。DEPTなどのNMRデータも充実させる。
- \* 収録した化合物を、旧作のeasy, moderate, difficultの3段階であったのを、Step A, B, C, Dの4段階に

分類し、Step Dを大学院入試レベルとして、読者層を初心者から大学院生にまでとする。

- \* 「第2部 各種スペクトルデータスペクトルの読み方と解析結果」の冒頭に、スペクトルデータから構造決定に至る具体的なプロセスを例示して、実際に解析する際のノウハウを解説する。
- \* 「第1部 スペクトル解析に必要な基礎知識」の質量スペクトルの解析部分にソフトイオン化法 (FAB-MSやEI-MS) の解説を、核磁気共鳴スペクトル解析部分に2次元NMRの解析をそれぞれ加えて、内容をアップデートする。

### 【本書の内容】

本書は、学部生でもかんたんに取り組めて、有機構造解析の基礎から実践までを学習できる有機化合物のスペクトル解析に関する入門書をめざしました。本書の概要は以下の通りです。

#### 第1部 スペクトル解析に必要な基礎知識

質量分析 (MSスペクトル) の解析

概略・原理・イオン化・質量分離・MSスペクトル・解析法・キーワード

赤外スペクトル (IRスペクトル) の解析

概略・原理・IRスペクトル・解析法・キーワード

核磁気共鳴スペクトル (NMRスペクトル)

概略・原理・測定・解析法・キーワード

もっと勉強したい人のために

#### 第2部 各種スペクトルデータスペクトルの読み方と解析結果

スペクトルの読み方の例1~10

Step A-01~17 / Step B-01~22 / Step C-01~18 / Step D-01~14

このように71種の化合物の解析結果を掲載しただけでなく、さらに、新たな試みとしてインターネットの専用サイト (URL, ユーザーID, パスワードを本書内に記載) から各化合物の $^{13}\text{C}$  NMR,  $^1\text{H}$  NMR, MS, IRの各種スペクトルをすべてダウンロードできるようにしました。web上でスペクトルデータを検討し、分子構造の決定、スペクトルデータの読み方を実践的に学ぶことができるようになったのではないかと考えていますが、これは、ぜひ読者のみなさんからの忌憚

のないご意見やご感想を伺いたいところです。

また、本書を電子書籍へと展開すべく、現在、出版社サイドで検討を行っているようです。タブレットなどをうまく活用できるようになれば、新しい学習スタイルが提供できるのではないかと期待しています。

### 【あとがき】

複数の機器分析を用いて、スペクトル測定を行い、その何れをも矛盾なく、合理的に説明できる構造を見つけ出す構造解析には、ジグソーパズルを解くような楽しみがあります。講義を重ねるにつれて、受講カードにも、「むずかしいけど、解けたら楽しい!」といったコメントを見つけることが多くなります。また、化学科では、3回生向けの専門実験で「混合未知試料の分離・精製とスペクトル演習」というテーマを提供しています。講義と実験が表裏一体となることで、機器分析を用いた構造解析への理解がより深まっています。

本書は2013年夏出版予定のスケジュールで作業を進めていました。あるとき、築部先生からメールをいただきました。「どんな痛み止めより仕事のメールの方が効きますね」と妻から笑われる私ですので、この本の件を含めて化学に関する「終活」は、私に多くの元気を与えてくれております…

闘病中であったのに、朱を入れて真っ赤になった原稿をメールや郵便で送ってこられるなど、奥様の力も借りて、本書の完成に最後の力を振り絞られました。

築部先生は2012年12月にご逝去なされました。先生の朱筆に込められた思いを受け継いで、残りの部分を査読し、全体の統一性をはかりましたが、いろいろと手間取り、予定より約半年遅れの出版となりました。なくなられる2ヶ月前、築部先生から、本書が完成したら、ぜひ「優秀テキスト賞」に応募してくださいとメールをいただいていたので、こうして受賞することができ、宿題の一つを果たせた気がしています。

最後になりましたが、共同執筆者の皆さんには、それぞれの化合物のスペクトル収集から解析結果の相互チェックまでしていただきました。皆さんのお力添えに心より御礼申しあげます。