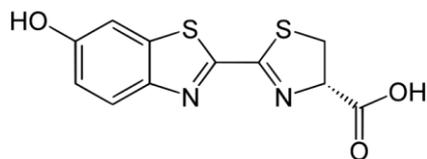


蛍生物発光基質の合成と機器分析(5月23日) 東6-737室

ルシフェリンの構造式



フーリエ変換型赤外分光 (FT-IR)



講師: 丹羽教授, 軽部さん

分子の構造を決めるには?
構成原子の種類、数、繋がり方、空間的な配置を決める。

●機器分析法で何が解るか

- ・X線結晶構造解析: 構造(結晶)
- ・核磁気共鳴分光法: 構造(固体, 溶液)
- ・赤外線分光法: 官能基の種類(固体, 溶液, 気体)
- ・紫外-可視分光法: 芳香系の種類(固体, 溶液, 気体)
- ・質量分析法: 分子の質量(分子量), 組成, ある程度は構造情報(固体, 溶液, 気体)

官能基・物理的・化学的性質を決める原子あるいは原子団
-I, -Br, -CO, -H, -CHO, -OH, -NH₂, -NO₂

生成物の構造分析, 質量分析, 赤外分光法 (NMR, ESI, FT-IR)

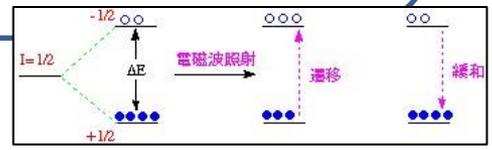
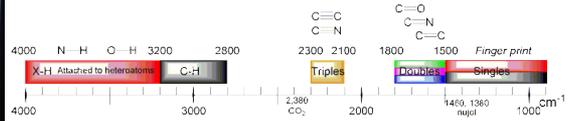


合成したルシフェリン試料

核磁気共鳴分光法(NMR)



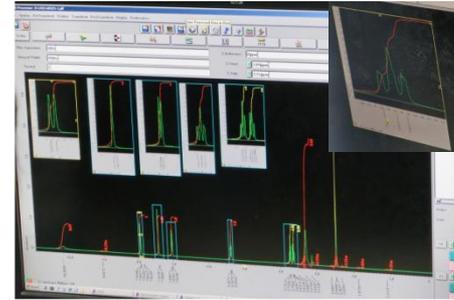
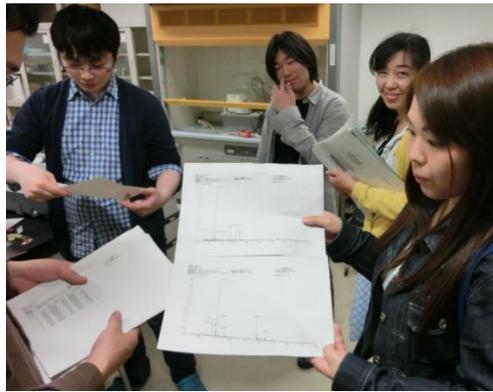
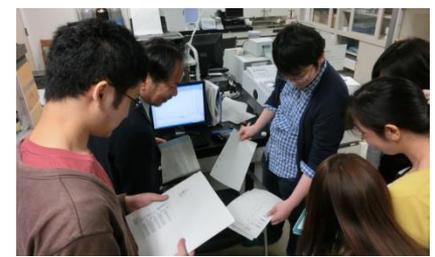
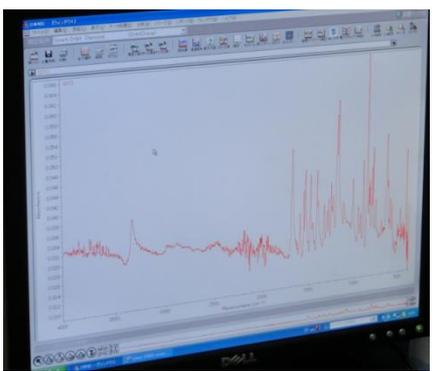
赤外分光法は構造を調べるために用いられる。それぞれの官能基は特徴的な吸収強度・吸収エネルギー(波数)を持つ。



磁場中での I = 1/2 核のエネルギー準位

¹³C 構造の種類(メチル, メチレン, メチンなど)のいずれに由来するものかを見分ける

核種	11.74 T での共鳴周波数 (MHz)	スピン量子数	天然存在比 (%)	相対感度
¹ H	500	1/2	99.9	
² H (D)	77	1	0.01	
¹¹ B	160	3/2	80	
¹³ C	125	1/2	1.1	
¹⁴ N	35	1	99.6	0.001
¹⁵ N	50	1/2	0.14	0.001
¹⁷ O	68	5/2	0.038	0.001
¹⁹ F	470	1/2	100	
³¹ P	202	1/2	100	



R. J. Abraham, J. Fisher, P. Loftus, "Introduction to NMR Spectroscopy," John Wiley & Sons Ltd, Sussex, 1988; 邦訳, 「¹H および ¹³C NMR 概説」, 竹内敬人訳(化学同人).