

まえがき

化学は分子を扱う。したがって、化学の研究を行うには分子の構造を正確に知っておく必要がある。本書では、NMRを中心に有機化合物の構造解析を行うときのコツを伝えることを主目的とした。構造解析が必要となる場面は意外と多く、化学反応によって生成物が得られたときや、新しい生物活性物質を発見したときには、分子構造を決めなければならない。また、生物学においても、構造生物学の発展によって、分子構造を議論する機会が増えている。このように構造決定は有機化学のみならず、生物化学や生物物理学などの基礎となっており、さまざまな分野の研究者に必要とされる基本技術となってきた。

実際に化学や生物化学分野の大学研究室では、有機化合物や生体分子の構造解析を行う機会は多い。また、化学系企業や製薬企業における研究開発でも、化合物の同定は重要な技術となっている。したがって、構造解析の基礎を身につけておくことは、研究者としての将来にプラスになる。これら実用面での利点に加えて、構造解析を行う過程で有機化合物の立体構造や反応性についての構造に根ざした考え方を身につけることができる。たとえば、 ^1H NMR スペクトルで NOE を使って立体配置を決定するためには、立体配座が予測できなければならないし、第二、第三の立体異性体についても推定しておかなければならない。また、 ^{13}C NMR 化学シフトは立体障害やカルボニル化合物の親電子性の指標となることがある。

本書は、実際に天然有機化合物などの構造解析を行う折の指針になることを目的とした。また、化学の要点シリーズの趣旨に添うように、構造解析に必要なデータを示すのではなく、それらを総合し

で解釈するときの要点を記すように心がけた。構造解析になじみの少ない読者が、これら要点を身につけるためには、同時にスペクトル解析の参考書や問題集を読み進むようにするとよい。

本書を執筆するに当たり、共立出版の酒井美幸氏、山本藍子両氏には大いにご迷惑をおかけしたことをまずはお詫びする。また、本書執筆の機会を与えて下さり、貴重なアドバイスを頂戴した本シリーズ編集委員・上村大輔先生に感謝したい。加えて、本書を査読してくださった、岩下 孝博士、松岡 茂博士、松岡めぐみ氏に深謝する。最後に、多忙中コラムを執筆して頂いた同僚の松森信明博士、花島慎弥博士にお礼を申し上げる。

2013 年初冬

村田道雄
待兼山にて