

目 次

第 1 章 有機構造解析とは	1
第 2 章 質量分析スペクトル	5
2.1 分子関連イオンピークの見分け方	5
2.2 特殊な同位体分布をもつ元素の検出	10
2.3 高質量の化合物の分子量を求めるときの注意点	11
2.4 高分解能質量測定	16
第 3 章 NMR スペクトル	17
3.1 NMR を使うときに	17
3.2 NMR 測定試料の調製	20
3.3 炭素骨格構造の決定	23
3.4 異常な NMR データ	30
3.5 立体配置の決定	33
3.5.1 NOE を用いた立体配置の決定	34
3.5.2 スピン結合定数を用いた立体配置の決定	38
3.5.3 ユニバーサル NMR データベース法 —もう一つの立体配置決定法—	49
3.6 絶対立体配置の決定	53
3.7 立体配座 (コンフォメーション) の推定	56

第4章 UV, CD, IR スペクトル	61
4.1 UV スペクトル	61
4.2 CD スペクトル	63
4.3 IR スペクトル	65
第5章 構造解析に必要な化学反応	69
5.1 誘導化反応	70
5.1.1 全アセチル化	70
5.1.2 MTPA エステル化	70
5.1.3 メチル化	71
5.2 分解反応	71
5.2.1 加水分解	71
5.2.2 二重結合の開裂	72
5.2.3 1,2-ジオールの開裂	73
第6章 実際の構造解析上の注意点	75
6.1 NMR 試料の最終精製	75
6.2 構造解析の前にやっておくべきこと	76
6.3 NMR の測定と解析	77
6.4 その他スペクトルの測定	80
6.5 含有元素の推定	80
6.6 分子式の推定	83
6.7 平面構造の決定	84
6.8 立体構造の推定	86
6.9 化学誘導	87

6.10 得られた構造の確認と公表	90
第7章 おわりに	95
参考になる文献, 著書	97
索引	99

コラム目次

1. CID MS/MS による構造解析例—イェットキシンの構造解析
..... 14
2. NMR を用いた糖鎖のタンパク質との結合配座解析 36
3. 新しい手法による立体配置の予測—残余双極子を利用する
..... 52
4. 結晶スポンジ法による天然有機化合物の X 線結晶構造解析
..... 58
5. 計算化学による NMR 化学シフトの予測 88