

まえがき

近年、有機化合物のスペクトルによる同定法についての著書は、非常にたくさん出版されている。著者らの学生時代には、R. M. Silverstein・G. C. Bassler 著；荒木 峻・益子洋一郎 訳『有機化合物のスペクトルによる同定法 第1版』（1965年）が、多くの有機化学の学生達に教科書的かつ辞書的に用いられ、日々の研究に役立てられていた。

この第1版には—MS, IR, NMR, UVの併用—という副題が付いていた。1960～1970年代には、これらの4方法がいずれも有機化合物の同定にきわめて有効な手段であった。当時はまだ現在ほどにMSやNMRが発展していなかった。NMRはプロトン核 ($^1\text{H-NMR}$) のみであり、MSはおもに分子イオンを求めるか、フラグメントイオンや再配列イオンなどについての簡単な解析にとどまっていた。その後、装置のソフトおよびハードの進歩に伴い、上記の参考書は、年々版を重ねるたびに修正を加え、現在の第7版では、UVが除かれ、NMRの章が炭素核 ($^{13}\text{C-NMR}$)、相関NMR (2次元測定)、その他の重要な核種 (おもに $I=1/2$ 核： ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P) というように増えている。同書は今でもすばらしいスペクトル同定法の1冊であると著者は思っている。しかしながら、同書は、はじめて有機構造解析をする学生にとっては、時間と根気が必要なために、参考書として利用するにはよいが教科書的にはもう少し、簡単なわかりやすい有機構造解析の解説書が必要なのではないかと思っていた。今回、分析化学実技シリーズ、応用分析編3として、有機分析について執筆する機会を頂いたので、Silversteinらの著書とは少し違う観点から、『有機構造解析』として、本書をまとめてみることにした。

分析化学実技シリーズ、機器分析編には、有機元素分析が入っていない。近年は高分解能質量分析によって精密な分子量を決定し、分子式を導く流れにあるが、有機化合物の解析・同定のプロセスにおいて、物質の元素組成を定量する有機元素分析が基本的に重要な分析手法であることは間違いない。そこで本書では、他の章と同等のページ数を割いて、少し詳しく説明することにした。

本書では、有機化合物を構造解析する手段のひとつとして、その重要度が増

してきている単結晶 X 線構造解析について、必要と思われるポイントの解説を加えることにした。以前は、単結晶 X 線構造解析が必要な場合には専門家に依頼して、解析結果のみを受け取るのが一般的であった。ところが、近年では、装置およびソフトの進歩により、よい単結晶さえ得ることができれば、そのまま自動解析するプログラムで容易に結果を得られるようになってきており、一般の有機機器分析法として、特別の訓練なしに利用されるようになってきている。そこで著者は、ユーザーとして、単結晶 X 線構造解析についての基礎知識を多少でも知っておく必要が出てきていると考えた次第である。

有機元素分析や単結晶 X 線構造解析は MS や NMR ほど一般的ではないと思われ、近寄り難いと考えられることを防ぐために、また、それぞれのデータから導いた解析の結果を相補的に活用するプロセスを理解していただけるように、すべての章に共通の化合物を例にして、解析の手順を解説することで、読者の理解を深めやすくするよう、努力したつもりである。

『有機構造解析』で対象とする領域は非常に広く、一人ひとりが捉える意味が非常に異なっている。今回、分析化学実技シリーズのひとつとして、有機微量および有機構造解析に特化した内容で、有機分析についてまとめた。本書で記述する機器による解析の手法が、天然物や医薬品のみならず、有機金属やアミノ酸・核酸・タンパク質などの領域、あるいは農業、食品、環境の領域などの分析に応用・展開されることを願っている。

近年どの大学においても分析化学専門の授業が減少してきている。しかしながら、分析はすべての科学の基礎であり、重要であることは誰しものが認めているところである。本書が少しでも有機機器分析のおもしろさを知る一助となれば幸いである。

最後にお忙しいなか、共同執筆者として各章の執筆に加え、編集の作業にご協力いただいた石田嘉明氏、関 達也氏、前橋良夫氏、また、本書の原稿を読んで貴重なご助言をいただいた明星大学・田代 充先生、日本電子・加藤敏代氏、千葉大学・吉田 誠氏、山崎 徹氏、共立出版・酒井美幸氏に深く感謝致します。

2010年7月

関 宏子