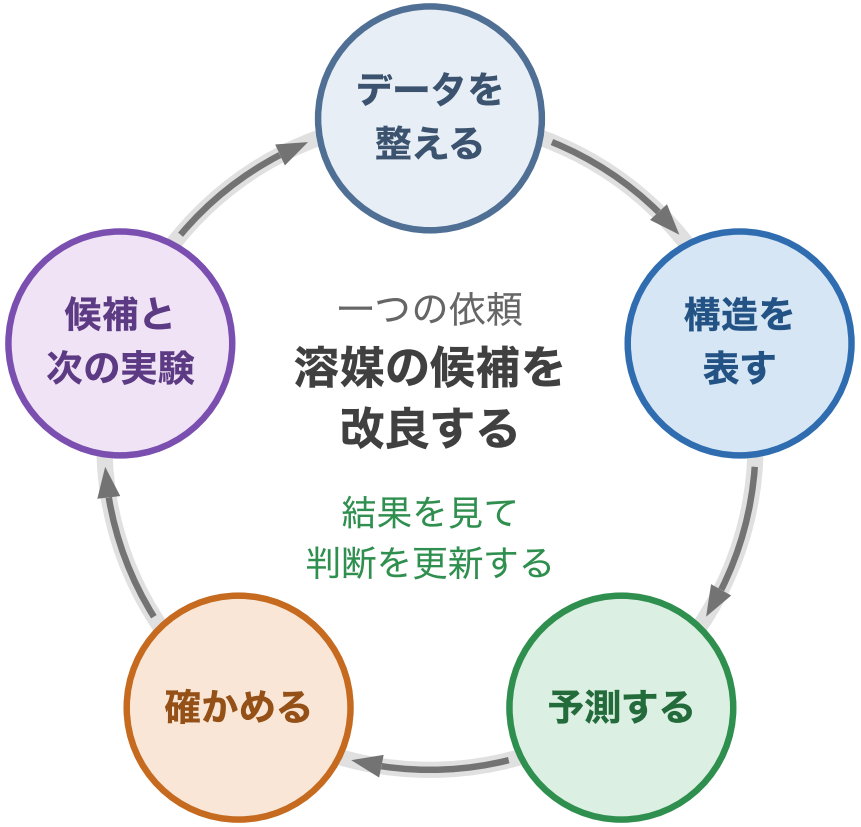
設計に使うデータを整える

分子設計 第 1 回 ｜ 教科書 序章・第 1 章

第 1 話　依頼が届く

出発候補の何が不足し、どのデータが必要か

科目ガイダンス（1）：この授業で学ぶこと



この流れで身につく力

研究室・企業の研究開発でも使う

比較できるデータを整える　データを整える
収率・物性の条件と出典をそろえる

分子・材料の特徴を表す　構造を表す
置換基・組成・調製条件を表の列にする

予測を評価する　確かめる
使っていないデータで確かめる

次の実験を根拠付きで選ぶ　候補と次の実験
限られた測定の機会を、何に使うか

- 一つの分子設計の依頼を 6 回かけて進め、データに基づいて判断する手順を学ぶ
- データを多く集めるだけでは、正解は自動では出ない

科目ガイダンス（2）：授業の目的と到達目標

目的　データに基づいて、分子設計の判断を合理的に行えるようになる
一つの分子設計を進めながら、基礎の解説と演習を行き来して学ぶ

❶ 比較できるデータを整える　第 1 回	❷ 分子の特徴を数の列（記述子）で表し、表現の限界を説明する　第 2 回	❸ 似た分子や簡単な式から予測する　第 3 回　第 4 回
❹ 式を作ったデータへの合い方（当てはまり）と、使っていないデータでの確かめを区別する　第 4 回　第 5 回	❺ 複数の要求と未確認事項から、候補と次の確認を提案する　第 6 回	❻ 同じ判断の流れを、自分の専門分野でも使う　毎回の最後　第 6 回

理解の 3 段　手順を実行できる → 理由と限界を説明できる → 別の題材に使える

科目ガイダンス（3）：授業のスケジュール

第 1 回	**設計に使うデータを整える** 今日 出発候補の何が不足し、どのデータが必要か	**演習**　散布図と記録の分類
第 2 回	**分子構造を数値で表す** 分子のどの特徴を、表の列にするか	**演習**　構造に印を付けて、特徴を数える
第 3 回	**似た分子から物性を予測する** 「似ている」をどう定義すると、予測がどう変わるか	**演習**　距離と重みを変えて予測する
第 4 回	**データから予測式を作る** 構造と沸点の傾向を、簡単な式にまとめられるか	**演習**　残差を見て、係数を選ぶ
第 5 回	**予測を確かめ、信用できる範囲を考える** 予測がよくなったことと、信用できることはどう確かめるか	**演習**　予測を残し、資料値と照らし合わせる
第 6 回	**分子候補と次の実験を提案する** 複数の要求と未確認事項を踏まえ、次に何を確かめるか	**演習**　候補の比較と最終提案
第 7 回	**定期試験（60 分・マークシート）** 共通の題材で、データ・予測・検証・提案を問う	

科目ガイダンス（4）：毎回の進め方と評価



授業で使うもの

- スライドの中のアプリ（ブラウザ）
- 手元のノート
- 電卓

プログラムは書かない

自分の答えを残す

応用演習の答え（候補分子・判断・根拠）は、手元に残す

第 6 回に、第 1 回の答えと見比べる

評価

- 定期試験（第 7 回）
  60 分・マークシート
- 小テスト（毎回、manaba）

小テストは何度でも受けられ、最高点が成績になる

分子をどう設計するか：3 つの進め方

教科書 序章

経験と試行錯誤

すること
合成して測る、を繰り返す

理論と計算

すること
計算で物性を求める

データ駆動　この授業

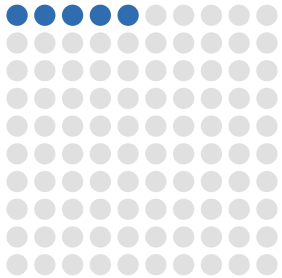
すること
データから予測して候補を絞る

組み合わせて使う　例：計算でデータを作る → データで候補を絞る → 実験で確かめる

データ駆動の例 1：抗菌薬の候補を探す

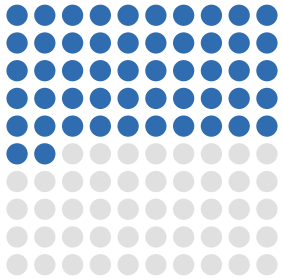
教科書 序章

片っ端から試すと



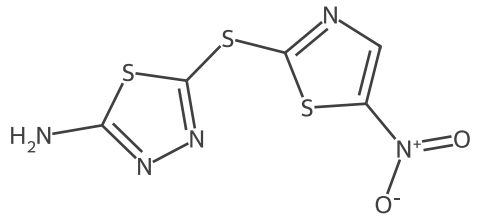
100 個中 **5** 個が当たり

予測の上位を試すと



100 個中 **52** 個が当たり

上位にあった分子



ハリシン：糖尿病の薬の候補だった分子

既存の抗菌薬と構造が似ていない

2,335 分子を実験
当たり **120**

→

コンピューターが
構造と効き目の関係を学ぶ

→

別の 6,111 分子に
「効きそう」の点数

→

上位 99 分子を実験
当たり **51**

左と右は別の分子の集まり。出典：Stokes ほか, Cell 180, 688（2020）

要点：予測の上位は約半分が当たった（片っ端からでは 5 %）。新しい候補も見つかった

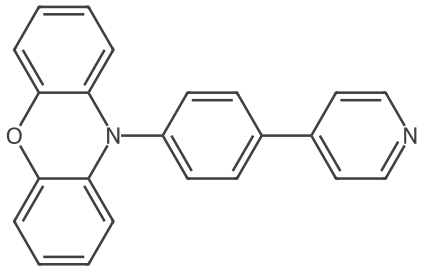
データ駆動の例 2：有機 EL の発光分子を探す

教科書 序章

進め方 **候補を絞っていく**

	160 万個		部品を組み合わせて作った候補
データ駆動 理論と計算	**40 万個**		予測で「よさそう」な順に計算
経験と試行錯誤	**約 2,500 個**		計算の結果で絞り、化学者が投票
経験と試行錯誤	**4 個**		画面の部品（素子）にして光らせた

棒の長さは桁（対数目盛り）

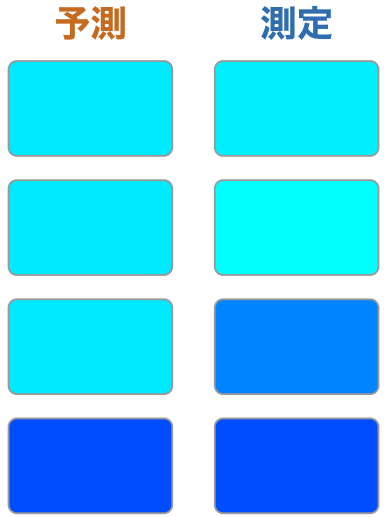


選んだ 4 分子の 1 つ（F1）

左の 3 環（フェノキサジン）が電子を出し、
右端の環（ピリジン）が電子を受け取る
予測 485 nm、測定 486 nm（トルエン溶液）

予測した色と、
測った色はほぼ同じ

選んだ 4 分子



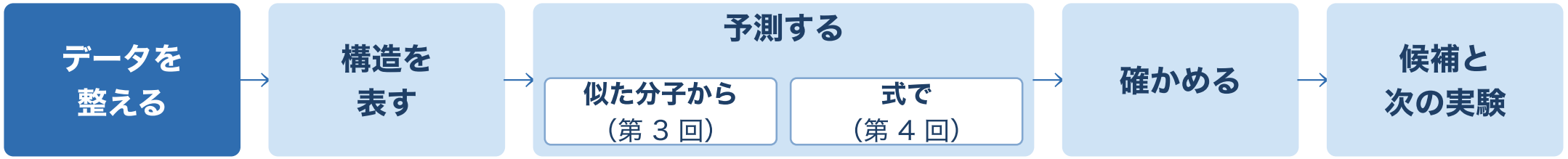
3 個はほぼ同じ色。
1 個は少し青い

測った色はトルエン溶液での発光。色は波長からの目安。Gómez-Bombarelli ほか, Nat. Mater. 15, 1120（2016）

ケモインフォマティクスとは：分子をデータとして扱う

教科書 序章

ケモインフォマティクス：分子の構造や物性などの化学の情報をデータとして集め、計算機で表し、比べ、予測して、分子や実験の設計に使う分野



データを整える	構造を表す	予測する：似た分子から（第 3 回）	予測する：式で（第 4 回）	確かめる	候補と次の実験
データベース、データの整理	記述子、SMILES、フィンガープリント	類似構造検索、k 近傍法	QSPR、機械学習	学習用と検証用に分ける	予測と実験のサイクル、逆設計

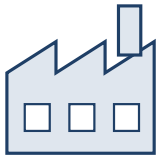
灰の字：実際の研究で使う手法の名前（覚えなくてよい）

この授業で手を動かす範囲

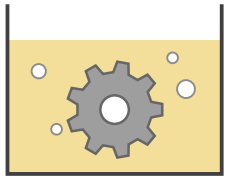
第 1 回	第 2 回	第 3 回	第 4 回	第 5 回	第 6 回
4 分子の表を作る	炭素数などを数える	似た分子の値を使う	傾向を式にする	誤差の平均で確かめる	次に確かめる 1 つを選ぶ

依頼の背景：部品を洗う工程

教科書 序章



場面（架空）　小さな部品メーカー。機械部品についた油を溶媒で洗い落としている。
いまの溶媒は 1-ペンタノール



① 溶媒で洗う
部品についた
油を落とす

→



② 水ですすぐ
溶媒を
水で流す

→



③ 乾かす
残った溶媒を
飛ばす



困りごと：溶媒が部品に残る

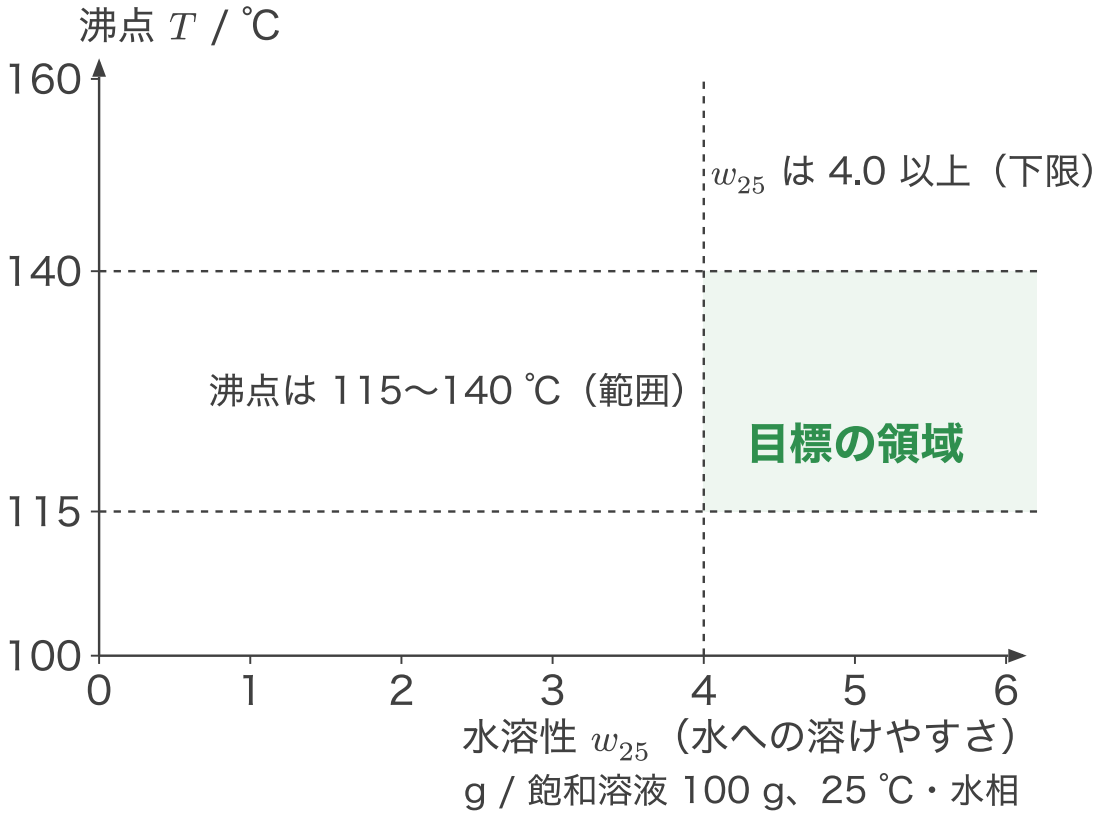
今回の依頼：溶媒の候補を改良する

教科書 序章



依頼メモ　工程担当者より

「洗ったあと水ですすぎたいが、1-ペンタノールは水に溶けにくく、残りやすい」



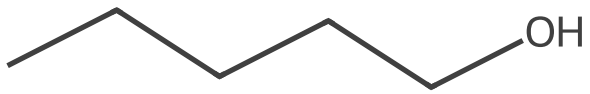
候補は C5〜C6 の一級・二級アルコール。第 6 回に報告する

問い 1　出発候補の何が不足し、どのデータが必要か



工程担当者　「1-ペンタノールの、どこが足りないの？ 代わりを探すには、何を調べる？」

1-ペンタノール　資料値



沸点　138 ℃
w_{25}　2.19
出典　ICSC 0535、IUPAC SDS 15

予想　目標に近づけるなら、構造のどこを変えるか

1. 鎖の長さ
2. OH の位置
3. 枝分かれ

正しさは問わない。今の直感で

今日の流れ

教科書 序章・§1.1〜1.6

依頼：1-ペンタノールを改良し、候補と次の実験を提案する（第 1〜6 回）

データを整える	構造を表す	予測する		確かめる	候補と次の実験
第 1 回 データ	**第 2 回** 記述子	**第 3 回** 似た分子	**第 4 回** 予測式	**第 5 回** 検証	**第 6 回** 提案

▲ 今日

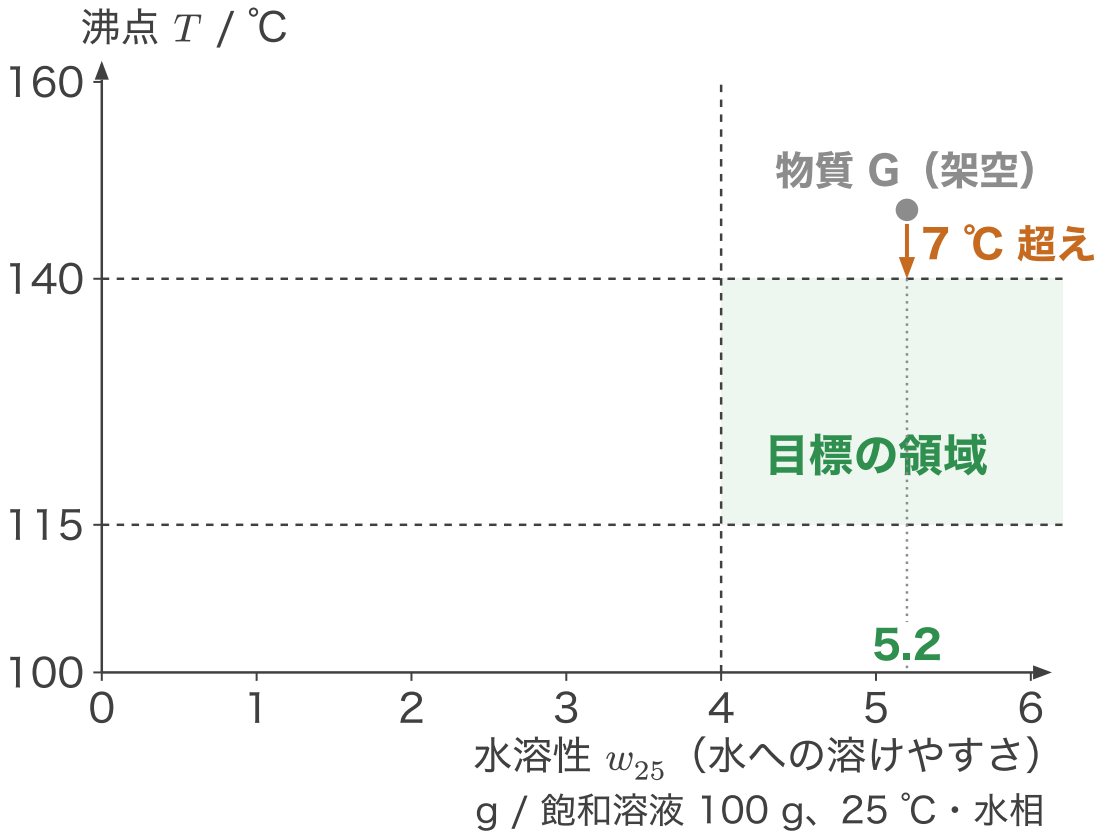
1. **問い 1 ①** 目標と比べると、どれだけ足りないか → 例題・やってみる
2. **問い 1 ②** 構造を変えると、物性はどう変化しそうか → 基本演習 A
3. **問い 1 ③** 資料の記録は、目標と比べられるか → 例題・基本演習 B

そのあと：理解確認 → 応用演習（どの候補分子の、どのデータを集めるか）→ 問い 1 の答え

例題：目標を満たすかを判定する

教科書 序章

問い 1 ① 目標と比べると、どれだけ足りないか



問題 架空の物質 G
沸点 147 ℃、w_{25} 5.2

解き方

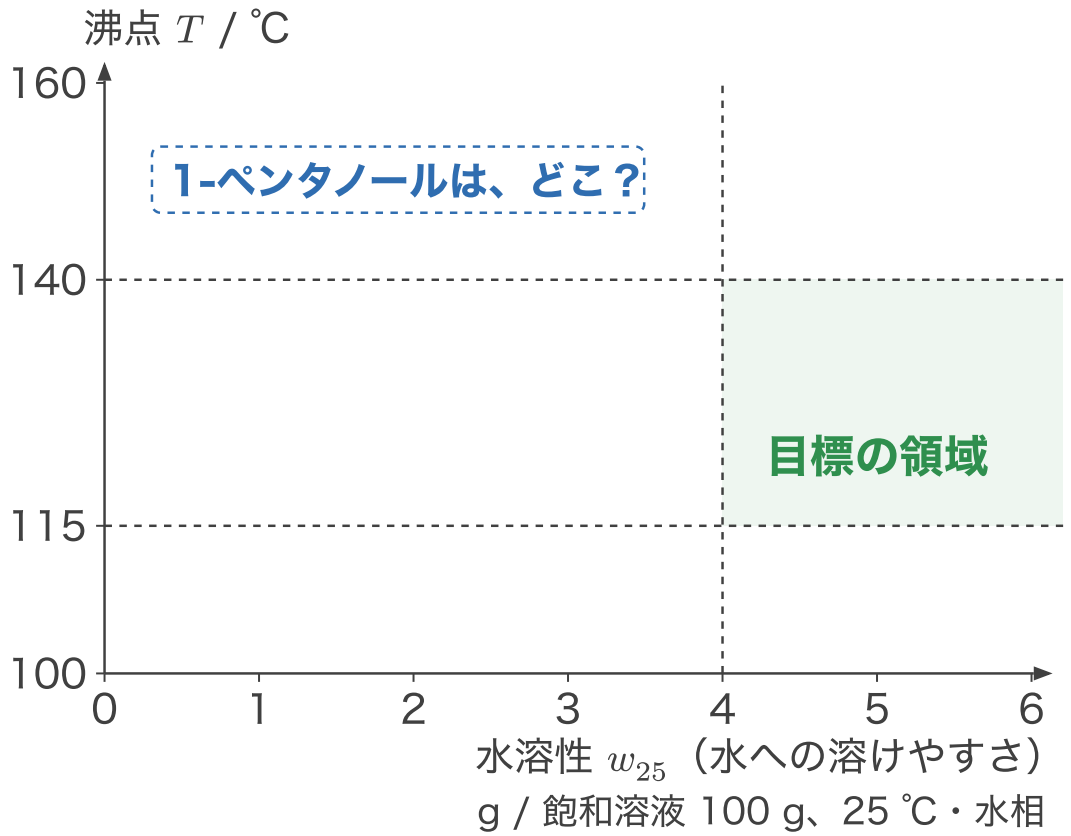
① 沸点 範囲：両側と比べる
140 を 7 超える

② w_{25} 下限：片側と比べる
5.2 ≧ 4.0

答え 沸点は満たさない
w_{25} は満たす

やってみる：1-ペンタノールは目標を満たすか

問い 1 ①　目標と比べると、どれだけ足りないか

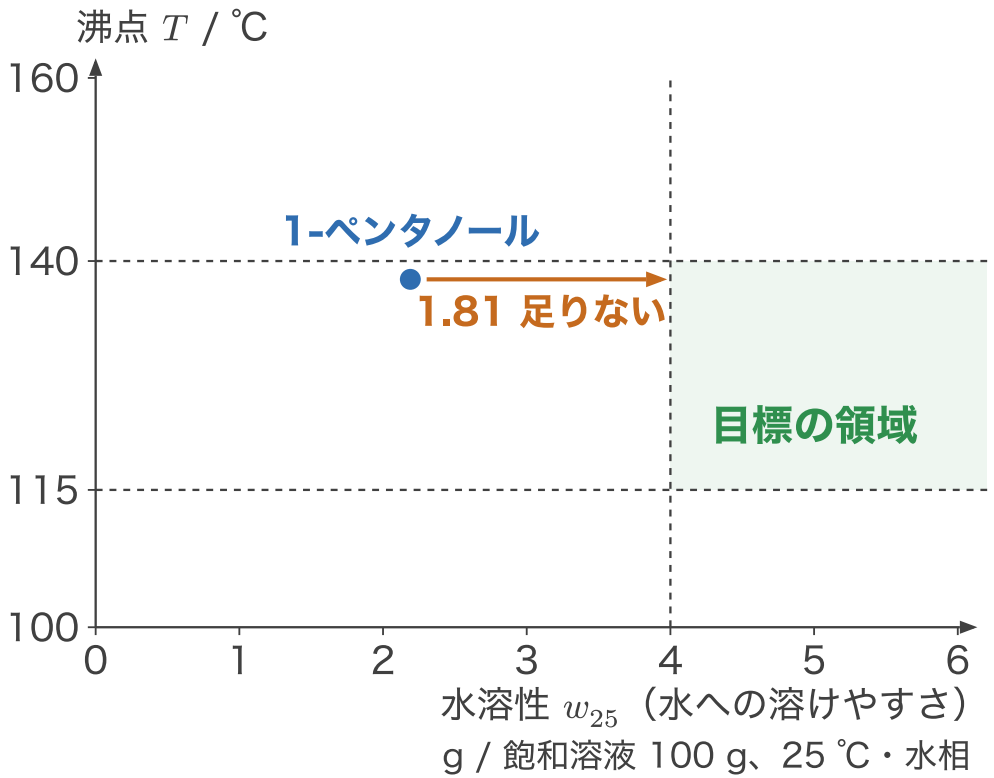


1-ペンタノール

沸点 138 ℃、w_{25} 2.19

1. 沸点は目標を
   （満たす／満たさない）
2. w_{25} は目標を
   （満たす／満たさない）
3. 満たさない方は、いくつ足りないか

答え：足りないのは水溶性



やってみる　目標を満たすか

① 沸点　138 は範囲の内側
上限まで 2 ℃

② w_{25}　2.19 < 4.0
差は 1.81

答え　沸点は満たす
不足は水溶性（1.81）

要点：範囲は両側、下限は片側で判定する

構造のどこに着目するか

教科書 §1.2

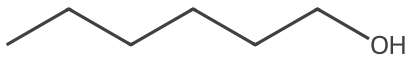
問い 1 ② 構造を変えると、物性はどう変化しそうか

炭素の鎖
水となじみにくい
分子どうしは分散力

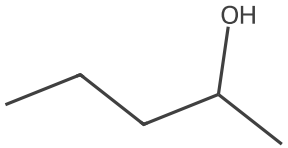


OH
水となじむ
水素結合

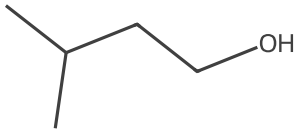
着目点 1：鎖の長さ



着目点 2：OH の位置



着目点 3：枝分かれ



仮説の書き方：〔どこ〕を変えると、〔どの力〕が変わり、〔どの物性〕は〔上がり／下がり〕そう

例：OH を OCH_3 にする（エーテル。依頼の条件の外）→ 水素結合の H が無くなる → 沸点は下がりそう

基本演習 A：4 分子で確かめる

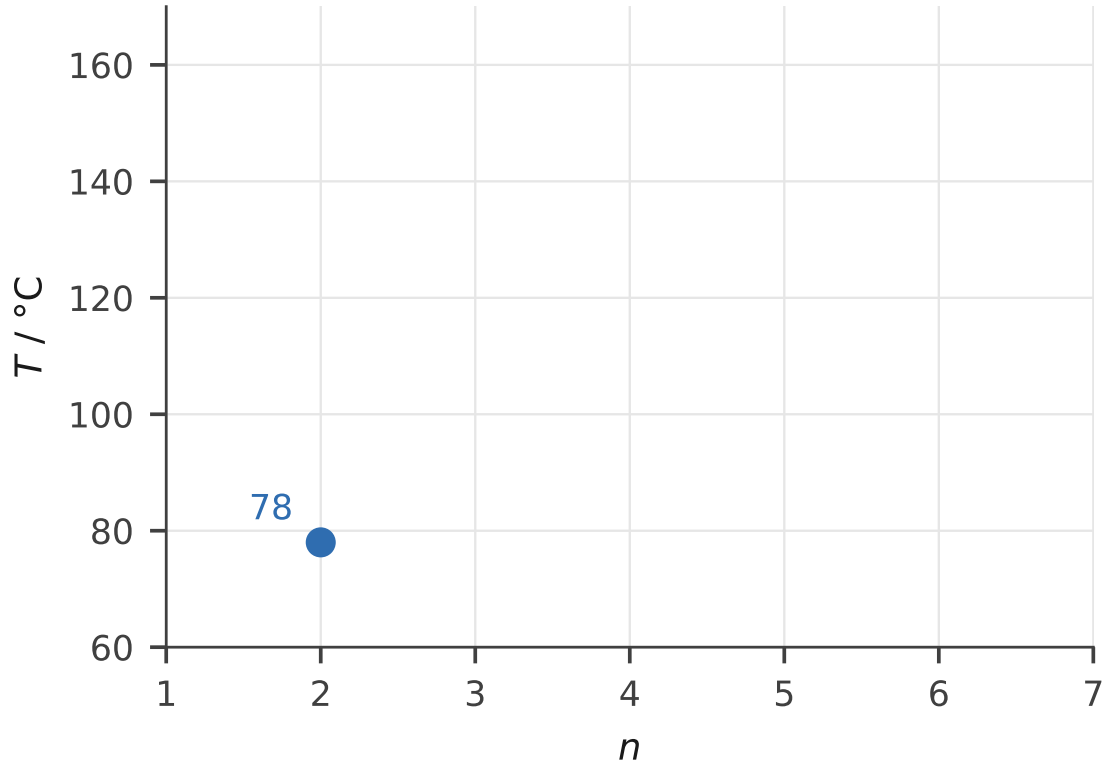
問い 1 ②　構造を変えると、物性はどう変化しそうか

手元の値は、依頼に添えて届いた 4 分子のカードだけ。次のスライドのアプリで、炭素数と沸点の関係を確かめる

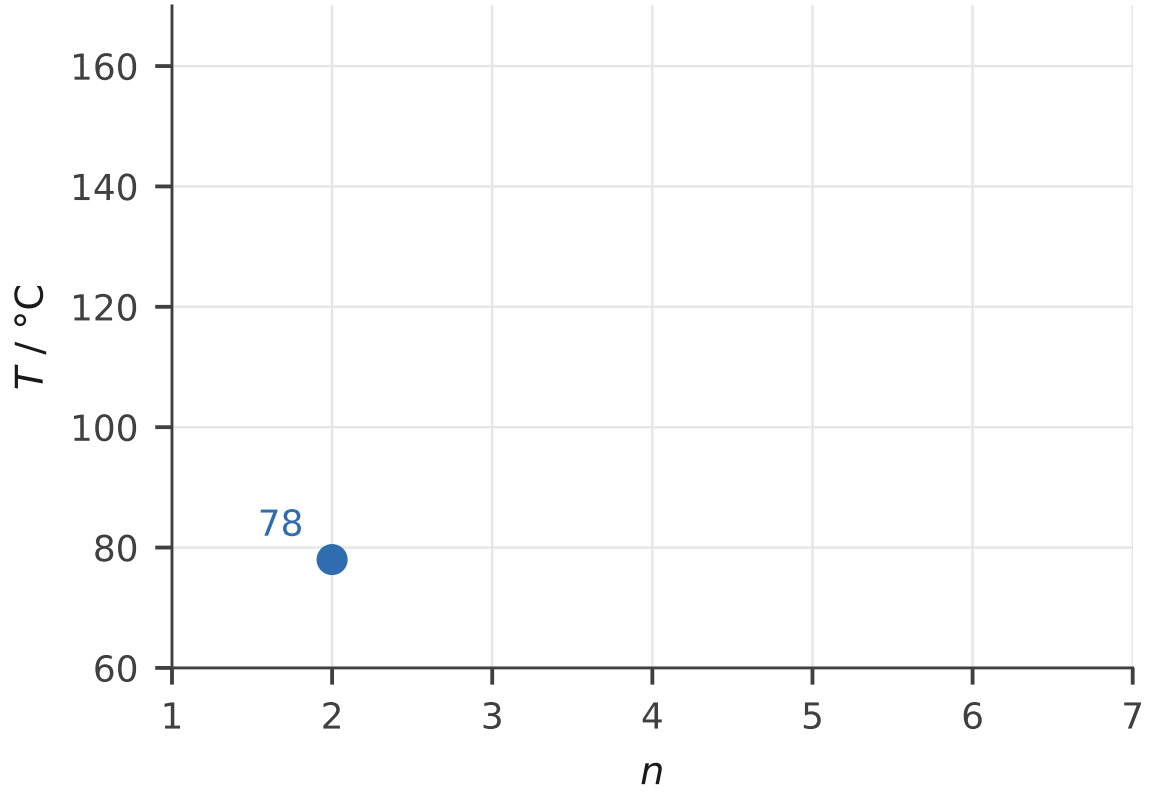
手順 1　予想のボタンを押す

手順 2　カードを押して点を打つ

手順 3　確かめられた文を選ぶ



基本演習 A：予想を押して、カードを押す



エタノール (2, 78)、1-ブタノール (4, 117)、1-ペンタノール (5, 138)、1-ヘキサノール (6, 157)。残りの 3 点を書き込む。確かめられた文はどれか：この 4 例では、炭素数が多いほど沸点が高い／枝分かれしても、炭素数が多いほど沸点が高い／水溶性も、炭素数と同じ向きに変わる

基本演習 A の答え

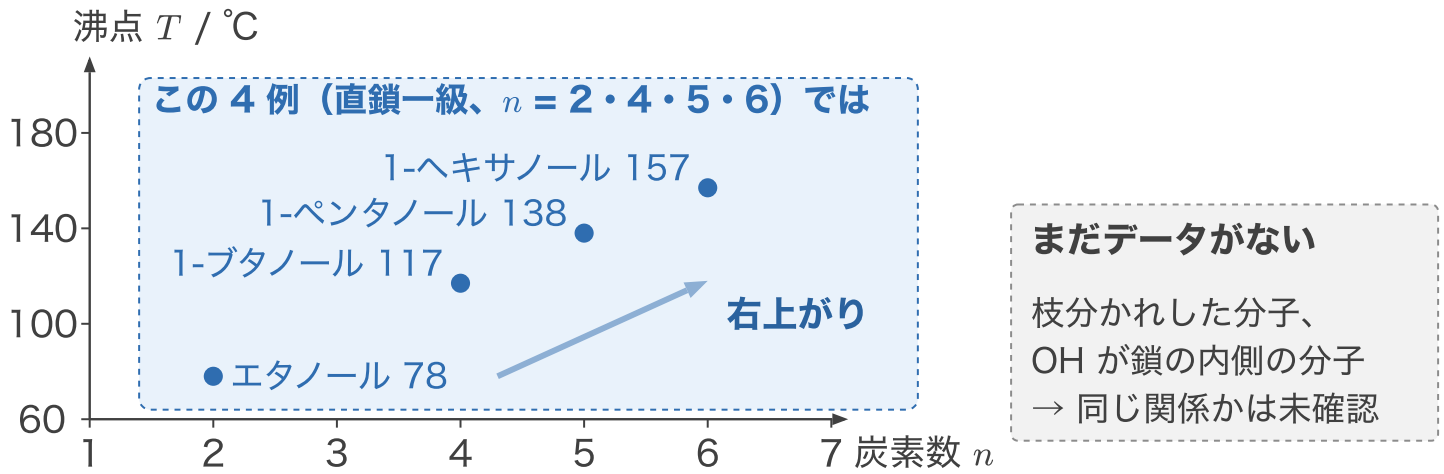
基本演習 A　確かめられた文はどれか

① 読む　点は右上がり（78 → 117 → 138 → 157 ℃）

考えられる理由：鎖が長いほど、分子間の分散力が大きい（くわしくは第 4 回）

② 範囲　4 分子はどれも直鎖一級。枝分かれと水溶性は確かめていない

答え　この 4 例では、炭素数が多いほど沸点が高い（観察）



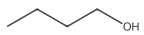
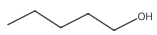
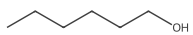
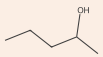
要点：観察は確かめた範囲まで。まだ確かめていないことは仮説

候補分子を比べるには、どんな表が必要か

教科書 §1.1

問い 1 ③　資料の記録は、目標と比べられるか

構造の列 → 第 2 回 構造を数の列にする	沸点：第 3〜4 回 予測する	水溶性：第 6 回 資料で確かめる	出典 → 今日 そろえて残す

分子		炭素数 n	沸点 T / ℃ 常圧（101.3 kPa）	水溶性 w_{25} g / 飽和溶液 100 g 25 ℃・水相	出典
	エタノール	2	**78**	混和	ICSC 0044
	1-ブタノール	4	**117**	—	ICSC 0111
	1-ペンタノール	5	**138**	**2.19**	ICSC 0535、 IUPAC SDS 15
	1-ヘキサノール	6	**157**	—	ICSC 1084
	候補分子（例）	5	**?**	**?**	

青 資料値（資料集や論文に載った測定値）　緑 見出しで固定した条件
— まだ集めていない（0 ではない。この授業で順に集める）
混和 2 層に分かれない（w_{25} は定義されない）　**?** 知りたい値（予測するか、確かめる）

目的変数

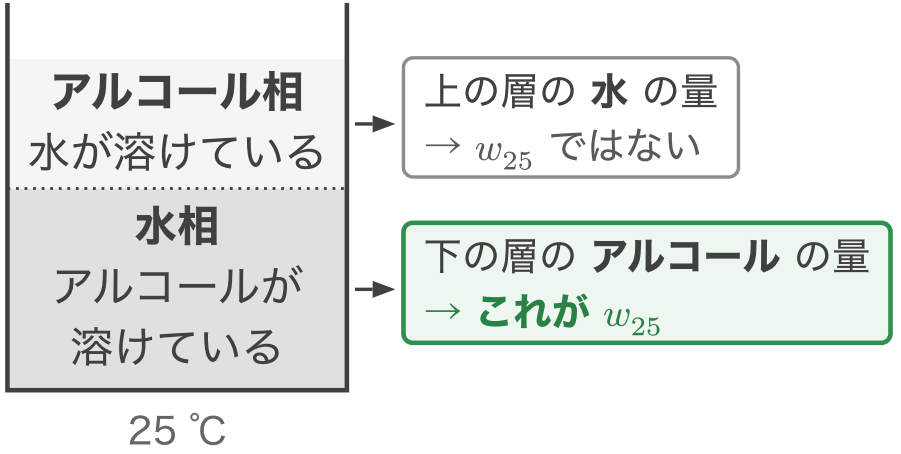
予測したい物性の列

同じ「溶解度」でも、そのまま比べてよいか

教科書 §1.3

問い 1 ③　資料の記録は、目標と比べられるか

上の層にも、水が少し溶けている



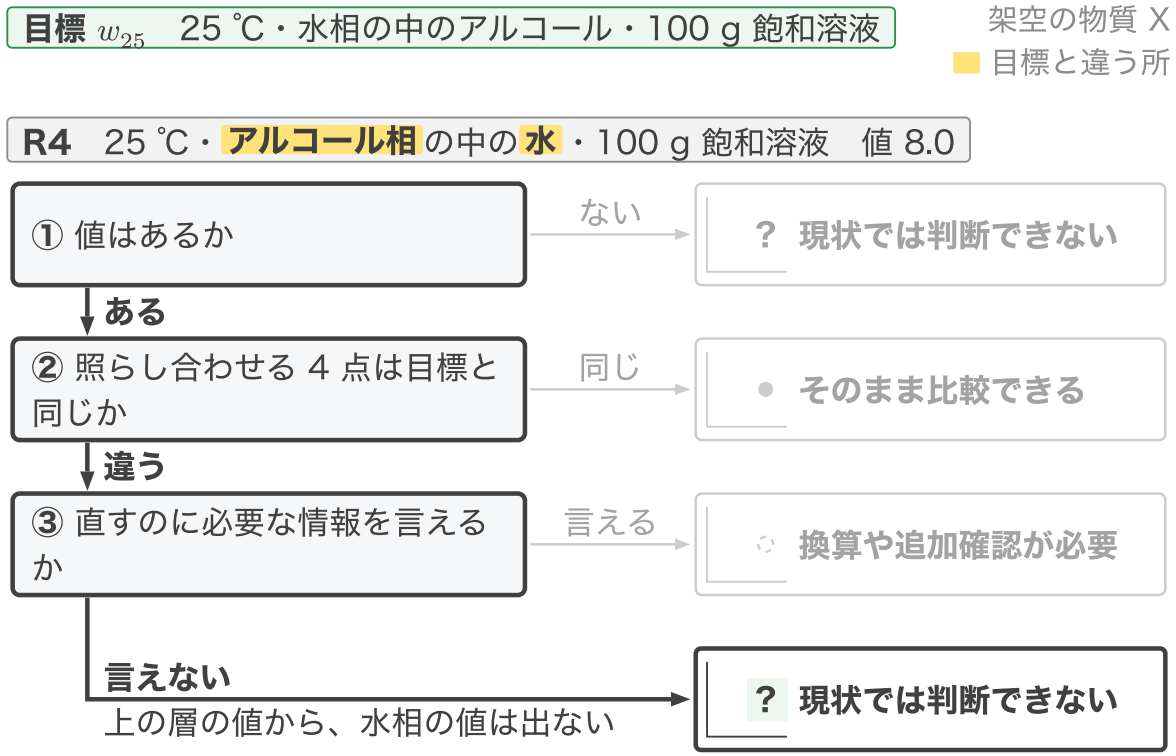
資料の「溶解度」には、上の層の値も載る

目標と照らし合わせる 4 点：温度・相・溶質・分母

例題：記録を 3 つに分類する

問い 1 ③　資料の記録は、目標と比べられるか

問題　記録 R1・R4（架空の物質 X）を 3 つに分類する



解き方

① R1　4 点とも同じ
→ ②「同じ」

② R4　相と溶質が違う
→ ③「言えない」

答え　R1 はそのまま比較できる
R4 は現状では判断できない

基本演習 B：記録を分類する

問い 1 ③　資料の記録は、目標と比べられるか

次のスライドのアプリで、R5（値が空欄）→ R2 → R6 の順に

手順 1　目標の行と 1 列ずつ見比べ、違う所を探す

手順 2　3 つの問いで分類を決める：値はあるか → 4 点は同じか → この値に情報を足して直せるか

手順 3　R2・R6 は、比べるのに必要な情報を書く

記録	温度	相 どの層	溶質 何の量	分母 何あたり	値	分類と、比べるのに必要な情報
目標	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	w_{25}	この定義とそろえて比べる
R5	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	空欄	?
R2	30 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	3.8	?
R6	25 ℃	水相	アルコール	100 mL 飽和溶液	4.2	?

架空の物質 X の練習記録（実在の値ではない）　違う所は自分で探す（答えでは黄の印）

基本演習 B：カードを押して、分類を押す

目標の定義　25 ℃・水相・g アルコール／100 g 飽和溶液（w_{25}）

そのまま比較できる	換算や追加確認が必要	現状では判断できない
R1　25 ℃・水相 4.2 g アルコール／100 g 飽和溶液		**R4**　25 ℃・アルコール相 8.0 g 水／100 g 飽和溶液

未分類（基本演習で分ける）

R2　30 ℃・水相
3.8 g アルコール／100 g 飽和溶液

R5　25 ℃・水相
空欄 g アルコール／100 g 飽和溶液

R6　25 ℃・水相
4.2 g アルコール／100 mL 飽和溶液

架空の物質 X の練習記録（実在の値ではない）

基本演習 B の答え（1）

R5　値が空欄。どの分類に入るか

考え方　空欄は、測っていないか値が分からないという意味。0 ではない

0 として平均すると、値が小さく出る

答え　現状では判断できない（保留する）

記録	温度	相 どの層	溶質 何の量	分母 何あたり	値	分類と、比べるのに必要な情報
目標	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	w_{25}	この定義とそろえて比べる
R5	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	空欄	**現状では判断できない** → 欠測。0 にせず保留
R2	30 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	3.8	?
R6	25 ℃	水相	アルコール	100 mL 飽和溶液	4.2	?

架空の物質 X の練習記録（実在の値ではない）　■ 目標と違う所

基本演習 B の答え（2）

R2・R6　分類と、比べるのに必要な情報

① R2　30 ℃ → 25 ℃ の値か、温度による変わり方。「3.8 < 4.0 で満たさない」は ×

② R6　分母 100 mL → 飽和溶液の密度。「4.2 で満たす」は ×（100 mL ≠ 100 g）

答え　2 つとも、換算や追加確認が必要

記録	温度	相 どの層	溶質 何の量	分母 何あたり	値	分類と、比べるのに必要な情報
目標	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	w_{25}	この定義とそろえて比べる
R5	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	空欄	**現状では判断できない** → 欠測。0 にせず保留
R2	30 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	3.8	**換算や追加確認が必要** → 25 ℃ の値か、温度による変わり方
R6	25 ℃	水相	アルコール	100 mL 飽和溶液	4.2	**換算や追加確認が必要** → 同じ温度の飽和溶液の密度

架空の物質 X の練習記録（実在の値ではない）　目標と違う所

要点：比べる前に、温度・相・溶質・分母をそろえる。欠測は 0 にしない

発展 1：体積あたりの値を、質量あたりに直すには →

理解確認（個人・3 分）

目標：25 ℃・水相・g アルコール／100 g 飽和溶液。架空の物質 Y の記録 P・Q（下の表）

記録	温度	相 どの層	溶質 何の量	分母 何あたり	値
目標	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	w_{25}
P	25 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	4.1
Q	35 ℃	水相	アルコール	100 g 飽和溶液	3.7

架空の物質 Y の練習記録（実在の値ではない）　違う所は自分で探す

1. 目標と直接比べられるのは、P と Q のどちらか　（P／Q）
2. Y の w_{25} の記録（同じ条件）が別に 3 つあり、平均を出したい。うち 1 つが空欄。0 として平均に入れてよいか　（入れてよい／入れてはいけない）
   理由を 1 文で

理解確認の答え

問 1　目標と直接比べられるのは、P と Q のどちらか

考え方　Q は 35 ℃ で温度が違う。P は 4 点とも目標と同じ

よくある誤り　Q の 3.7 を使い、Y は「4.0 に届かない」と判定する（25 ℃ の P は 4.1）

答え　P

問 2　空欄を 0 として平均に入れてよいか

考え方　空欄は、測っていないか値が分からないという意味。
測って 0 だったこととは違う

よくある誤り　「平均が下がるから」だけでは理由が足りない（それは結果）。
理由は、測って 0 だったのではないこと

答え　入れてはいけない

応用演習：候補分子を 1 つ選ぶ

問い 1　どの候補分子を調べるか

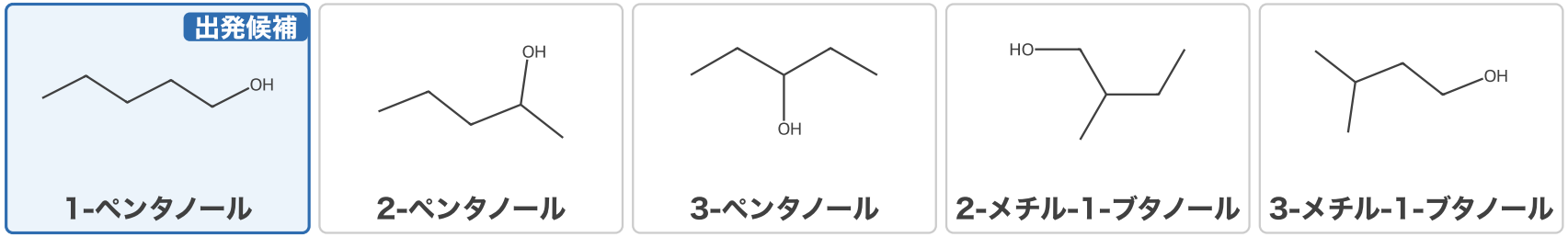
手順 1　候補分子を 1 つ選ぶ（下の 4 つのほか、自分の候補分子でもよい）

依頼の条件：C5〜C6 の一級・二級

手順 2　1 文で：〔どこ〕を変えると〔どの力〕が変わり、w_{25} は〔上／下〕がりそう

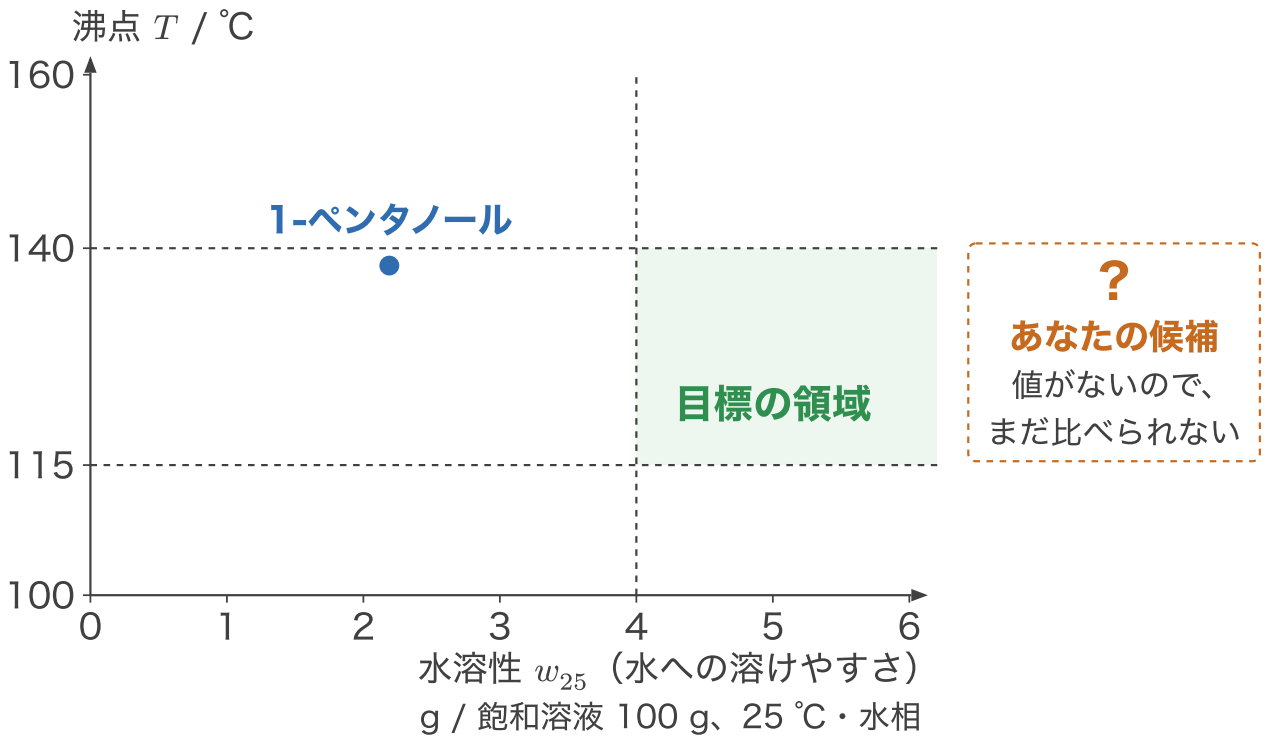
着目点：鎖の長さ・OH の位置・枝分かれ。w_{25} は、水となじむ OH と、なじみにくい鎖のかねあい。向きは自分の予想でよい

手順 3　沸点についても 1 文（時間があれば）



応用演習：必要なデータを挙げる

問い 1　どのデータを集めるか



1. 目標と比べるには、何が必要か
   どの分子の、どの物性を、どの条件で
2. 直鎖一級の 4 分子だけで、その候補分子がよいと言えるか
   （言える／言えない）
3. 理由を一言

応用演習の答え（1）

候補分子を 1 つ選ぶ　1-ペンタノールの構造をどう変えるか

候補分子の例　2-ペンタノール。理由（仮説）：OH の位置で、水との水素結合が変わりそう

向きは自分の予想でよい（第 6 回に確かめる）

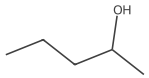
外れる例　1-ヘキサノール：沸点 157 ℃ で上限を超える（基本演習 A のカードの値）

成立しない例　「炭素数を 3 にする」：C5〜C6 の外

答え　よい答えの 3 条件：依頼の条件に合う／4 分子の値で外れない／理由（仮説）がある

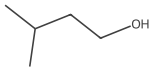
依頼の条件　C5〜C6 の一級・二級アルコール、沸点 115〜140 ℃、w_{25} 4.0 以上　**出発候補 1-ペンタノール**

2-ペンタノール
OH を鎖の内側へ



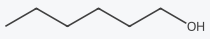
条件の内。値はまだ知らない
→ 候補分子になる

3-メチル-1-ブタノール
枝分かれを付ける



条件の内。値はまだ知らない
→ 候補分子になる

1-ヘキサノール
炭素を 1 つ足す



C6 の一級だが、
沸点 **157 ℃** が上限を超える
→ 外れる

炭素数 3 の候補分子
炭素を 2 つ減らす

C_3

依頼の条件（C5〜C6）の外
→ 成立しない

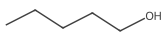
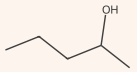
応用演習の答え（2）

必要なデータ　候補分子を目標と比べるには

① 物性　w_{25} と沸点（構造を変えると、沸点も変わりうる）

② 測る条件　25 ℃・水相・飽和溶液 100 g あたり

答え　候補分子の w_{25}（条件つき）と沸点

分子	沸点 T / ℃ 常圧	水溶性 w_{25} g / 飽和溶液 100 g 25 ℃・水相
 **1-ペンタノール** 出発候補	138	2.19
 **候補分子（例）** 2-ペンタノール：OH を鎖の内側へ	？ 必要	？ 必要

構造を変えると沸点も変わりうる → 両方の値が必要

条件を見出しに固定する。「水溶性のデータ」だけでは、比べられるか分からない

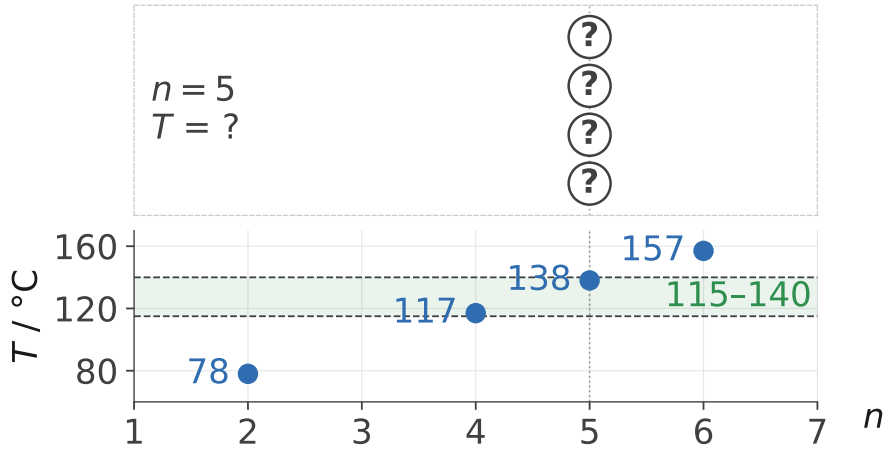
応用演習の答え（3）

4 分子で言えるか　4 分子だけで、その候補がよいと言えるか

考え方　4 分子は直鎖一級だけで、w_{25} の値は 1-ペンタノールだけ。
OH の位置や枝分かれが違う $n = 5$ の分子は、値がない

成立しない例　「この候補は w_{25} が 4.0 以上になる」：確かめていない値を結論にしている

答え　言えない。候補分子は仮説として書く

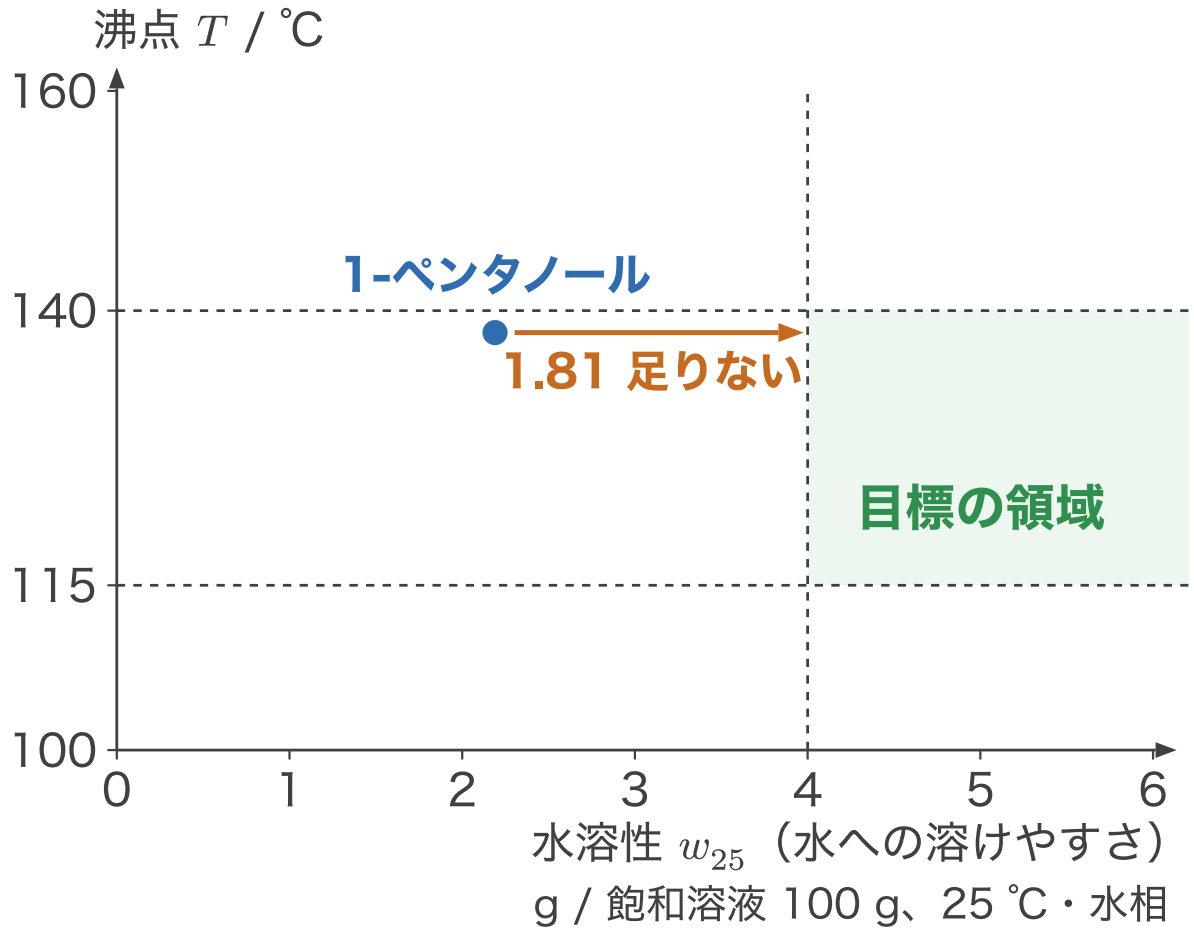


$n = 5$ の「?」は上から 2-ペンタノール・3-ペンタノール・2-メチル-1-ブタノール・3-メチル-1-ブタノール

要点：候補分子は仮説。確かめるデータは、物性と条件まで書く

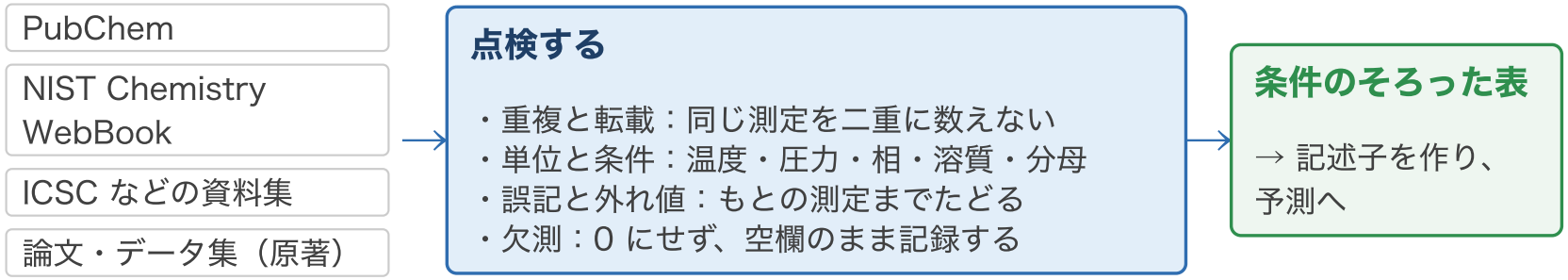
問い 1 の答え 不足は水溶性。必要なのは、候補分子の w_{25} と沸点

問い 1：出発候補の何が不足し、どのデータが必要か



- 沸点 138 ℃ は範囲内。w_{25} 2.19 は 4.0 に 1.81 足りない
- 必要なデータ：
  候補分子の w_{25} と沸点
  w_{25} は 25 ℃・水相・
  飽和溶液 100 g あたりの値

実際のケモインフォでは：データを集めて、そろえる



データが大きくても、最初の仕事は列と条件をそろえること



もとの測定は **1 つ**（確かめた数は増えない）

自分の実験では、何をそろえて比べるか

合成：収率

記録 1　架空

収率	82 %
条件	60 ℃・2 時間
求め方	NMR で定量

記録 2　架空

収率	90 %
条件	80 ℃・4 時間
求め方	単離して秤量

材料：電気伝導度

記録 1　架空

伝導度	3.1×10^{-3} S/cm
試料	400 ℃ 焼成・粉末を圧粉
測定	室温・2 端子

記録 2　架空

伝導度	8.4×10^{-3} S/cm
試料	600 ℃ 焼成・薄膜
測定	80 ℃・4 端子

問い　記録 2 の方が収率（伝導度）が高い。記録 2 の条件の方がよいと言えるか

答え　言えない。求め方（調製・試料・測定）がそろっていない → 追加確認が必要

自分の研究（まだなら学生実験）で記録しておくべき条件を 1 つ考えておく（宿題でよい）

まとめ：今日できるようになったこと

今日できるようになったこと（到達目標 ①）

1. 要求値を範囲と下限で判定し、不足を数で言える
   1-ペンタノール：w_{25} が 1.81 足りない
2. 記録の温度・相・溶質・分母を目標と照らし合わせ、3 つに分類する。欠測は 0 にしない
3. 観察は確かめた範囲まで、候補は仮説として書く

まだ分からないこと

- 構造の違い（OH の位置・枝分かれ）を、どう表して比べるか → 第 2 回
- 候補分子の値
  沸点：第 3〜4 回に予測、
  第 5 回に資料値と照らし合わせる
  水溶性：第 6 回に資料値で確かめる

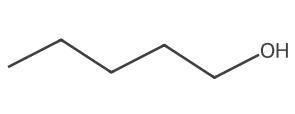
次回予告：第 2 回 分子構造を数値で表す

教科書 第 2 章

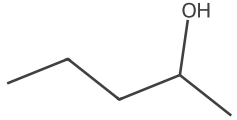
第 2 話　候補を数で並べる



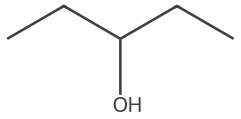
工程担当者　「候補の分子がいくつもあるね。比べられる形にしてくれる？」



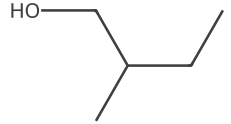
1-ペンタノール



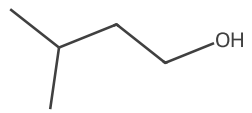
2-ペンタノール



3-ペンタノール



2-メチル-1-ブタノール



3-メチル-1-ブタノール

次回の問い：分子のどの特徴を、表の列にするか

- まだ分からないこと：構造の違いを、どう表して比べるか
- 沸点：第 3〜4 回に予測 → 第 5 回に資料値と照らし合わせる。水溶性：予測せず、第 6 回に資料値で確かめる

今日の復習 小テスト第 1 回（manaba）・基本演習を解き直す　**教科書で読む** 序章・§1.1〜1.6　**次回の予習** §2.1〜2.2

発展：時間があれば・自習用

1. 体積あたりの値を、質量あたりに直すには

発展 体積あたりの値を、質量あたりに直すには

教科書 §1.3 の発展

溶液 100 mL あたり c g のアルコール、溶液の密度 ρ g/mL

$$w = \frac{c}{100\rho} \times 100 = \frac{c}{\rho}$$

c 溶液 100 mL 中のアルコールの g　ρ 同じ温度の飽和溶液の密度（g/mL）

- 100 mL の溶液の質量は 100ρ g
- ρ は、その温度の飽和溶液の値を使う。水や純アルコールの密度では代えない
- 計算の例：$c = 2.0$、$\rho = 0.98$ なら 2.0 / 0.98 = 2.04（どちらも仮の値）

← 本編 p.27 に戻る