分子構造を数値で表す

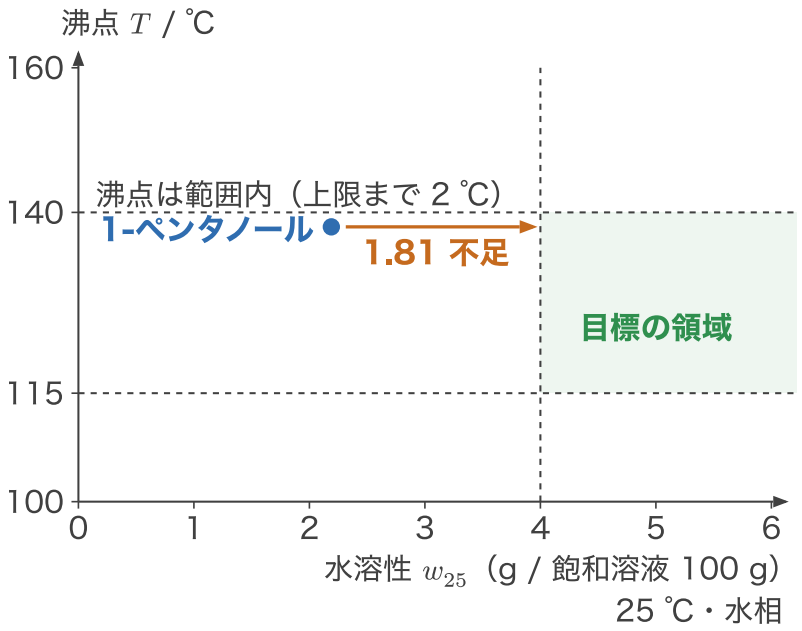
分子設計 第 2 回 ｜ 教科書 第 2 章

第 2 話　候補を数で並べる

分子のどの特徴を、表の列にするか

これまでの経過

第 1 回　出発候補の何が不足し、どのデータが必要か



今日できるようになったこと

- ○ 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
- ○ 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
- ○ 観察は確かめた範囲まで書き、候補分子は仮説として書く

まだ分からないこと

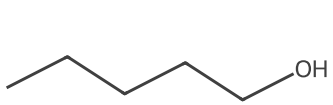
- ？ 構造の違い（OH の位置・枝分かれ）を、
  どう表して比べるか → 第 2 回
- ？ 候補分子の値
  沸点：第 3〜4 回に予測、第 5 回に資料値と照らし合わせる
  水溶性：第 6 回に資料値で確かめる

前回の確認 1　25 ℃・水相の「g / 水 100 g」と「g / 飽和溶液 100 g」の値は、そのまま比べられるか　（比べられる／比べられない）

問い 1　分子のどの特徴を、表の列にするか

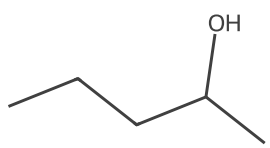


工程担当者　「候補の分子がいくつもあるね。比べられる形にしてくれる？」



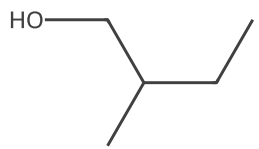
1-ペンタノール

$n = 5$



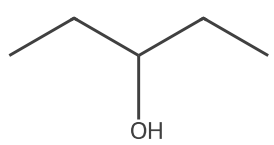
2-ペンタノール

$n = 5$



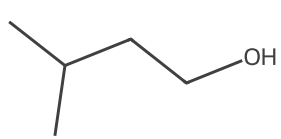
2-メチル-1-ブタノール

$n = 5$



3-ペンタノール

$n = 5$



3-メチル-1-ブタノール

$n = 5$

炭素数の列だけでは、5 つとも同じ値になる

今日の流れ

教科書 §2.1〜2.6

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

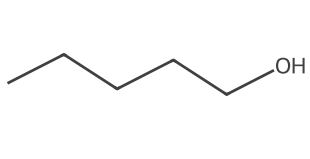
▲ 今日

1. **問い 1 ①** 構造のどこを、どう数にするか → 例題・基本演習 A
2. **問い 1 ②** その列で、何が区別でき、どの違いが表せないか → 基本演習 B・例題・応用演習

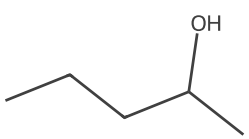
途中で理解確認。そのあと：問い 1 の答え → 実際のケモインフォでは → 自分の実験では

考えてみる：沸点に関わりそうな違いはどこか

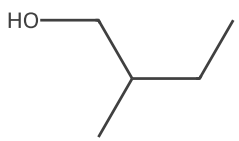
問い 1 ①　構造のどこを数にするか



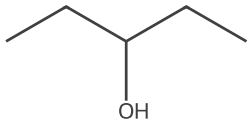
1-ペンタノール



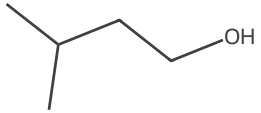
2-ペンタノール



2-メチル-1-ブタノール



3-ペンタノール



3-メチル-1-ブタノール

第 1 回の着目点：鎖の長さ、OH の位置、枝分かれ

手順 1　　5 分子を見比べ、炭素数のほかに違う所を 1 つ選ぶ

手順 2　　〔どこ〕が違うと、〔どの力〕が変わりそうか、1 文で

どの違いを、どの列にするか

問い 1 ① 構造のどこを数にするか

構造の特徴		関わりそうな力		列
炭素数（鎖の長さ）	→	分散力	→	n
OH の炭素の周りの立体障害（一級か二級か）	→	水素結合のつくりやすさ	→	s
枝分かれ	→	分子の形（接する面）→ 分散力	→	b
OH の位置（鎖の端か内側か）	→	水素結合のつくりやすさ	→	3 列では表せない（後で考える）
OH の数	→	水素結合	→	今日の 5 分子では全部 1 列にしても区別できない

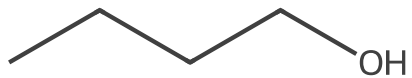
どれも仮説。影響するかどうかは第 4〜5 回にデータで見る

記述子とは：構造を、数の列にする

教科書 §2.1〜2.2

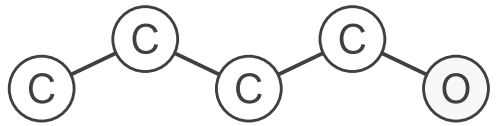
問い 1 ①　構造のどこを数にするか

骨格式



→

原子と結合のつながり（分子グラフ）



数える →

記述子（数）

炭素の数　$n = 4$
OH の炭素の級　一級 → $s = 0$
分岐点　$b = 0$

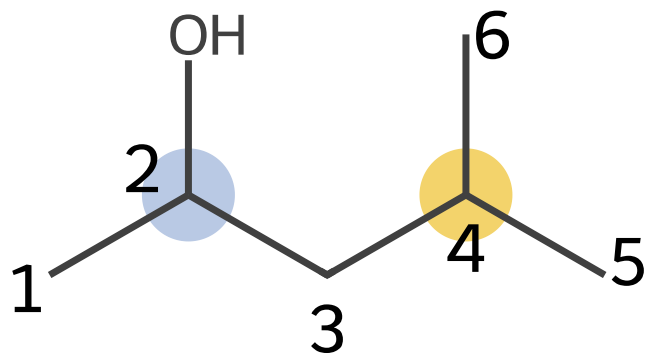
分子	n	s	b	沸点 T / ℃	水溶性 w_{25} g / 飽和溶液 100 g
1-ブタノール	**4**	**0**	**0**	**117**	—

記述子：分子の構造の特徴を数にしたもの。表の構造の列になる

n・s・b は、どう数えるか

教科書 §2.3

問い 1 ①　どう数えるか



4-メチル-2-ペンタノール

1… $n = 6$：**炭素の数**
番号を振って数える

- $s = 1$：**OH の炭素が二級なら 1**
  OH の炭素につく炭素は 2 個 → 二級
  位置番号ではない（2-・3-ペンタノールは同じ 1）
- $b = 1$：**分岐点の個数**
  炭素 3 個以上と結合する炭素
  OH との結合は数えない

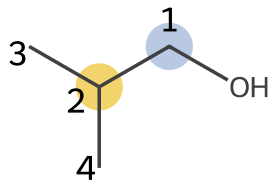
鎖状・単結合で OH を 1 つもつ一級・二級アルコールに使う（三級・エーテルには使わない）

例題：枝分かれと二級を見分ける

問い 1 ①　どう数えるか

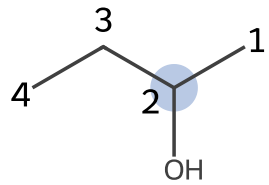
枝分かれしていれば、二級になるか

問題　2-メチル-1-プロパノールと
2-ブタノールの (n, s, b) を求めてください



2-メチル-1-プロパノール

(4, 0, 1)



2-ブタノール

(4, 1, 0)

枝分かれ（b）と二級（s）は別の列

解き方

① n　　炭素の数：どちらも 4

② s　　OH の炭素につく炭素：1 個（一級）／2 個（二級）

③ b　　炭素 3 個以上と結合する炭素：1 個／0 個（OH との結合は数えない）

答え　2-メチル-1-プロパノール (4, 0, 1)、2-ブタノール (4, 1, 0)

基本演習 A：5 分子を数える

問い 1 ①　どう数えるか

手で：1-ペンタノール、2-ペンタノール、3-メチル-1-ブタノール　残り 2 つはアプリで

手順 1　　OH の炭素を見つける

手順 2　　分岐点を見つける

手順 3　　(n, s, b) を数える　s：二級なら 1　b：分岐点の個数



1-ペンタノール

(, ,)



2-ペンタノール

(, ,)

2-メチル-1-ブタノール

(, ,)

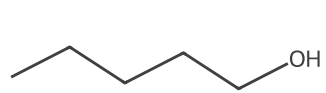
3-ペンタノール

(, ,)

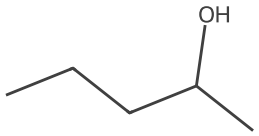
3-メチル-1-ブタノール

(, ,)

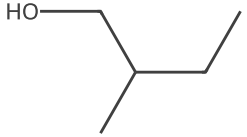
基本演習 A：残り 2 つをアプリで



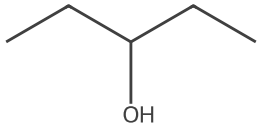
1-ペンタノール



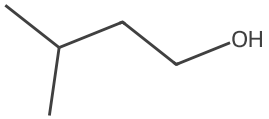
2-ペンタノール



2-メチル-1-ブタノール



3-ペンタノール



3-メチル-1-ブタノール

5 つの構造に、炭素の番号・OH の炭素・分岐点の印を書き込み、(n, s, b) を求める

基本演習 A の答え（1）

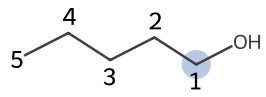
手で数えた 3 分子

① **1-ペンタノール** OH の炭素につく炭素は 1 個（一級）→ (5, 0, 0)

② **2-ペンタノール** 2 個（二級）→ (5, 1, 0)。s は位置番号の 2 ではない

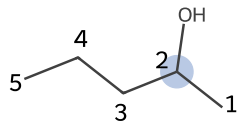
③ **3-メチル-1-ブタノール** 一級。3 番の炭素が分岐点 → (5, 0, 1)

答え　枝分かれは s ではなく b に出る



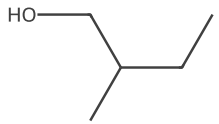
1-ペンタノール

$(5, 0, 0)$



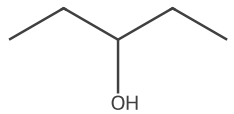
2-ペンタノール

$(5, 1, 0)$



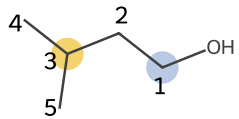
2-メチル-1-ブタノール

(, ,)



3-ペンタノール

(, ,)



3-メチル-1-ブタノール

$(5, 0, 1)$

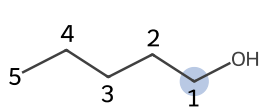
基本演習 A の答え（2）

アプリで確かめた 2 分子

① **3-ペンタノール** OH の炭素は炭素 2 個と結合（二級）、分岐点なし → (5, 1, 0)

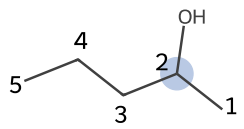
② **2-メチル-1-ブタノール** OH の炭素（CH_2）は一級、2 番の炭素が分岐点 → (5, 0, 1)

答え　(5, 1, 0) と (5, 0, 1)



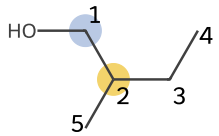
1-ペンタノール

$(5, 0, 0)$



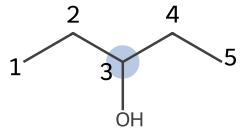
2-ペンタノール

$(5, 1, 0)$



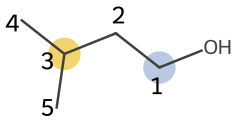
2-メチル-1-ブタノール

$(5, 0, 1)$



3-ペンタノール

$(5, 1, 0)$



3-メチル-1-ブタノール

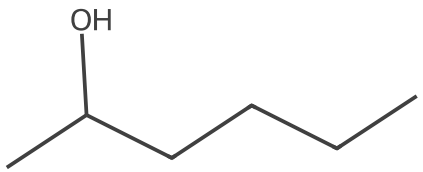
$(5, 0, 1)$

要点：s は OH の炭素の級、b は炭素骨格の分岐。OH との結合は数えない

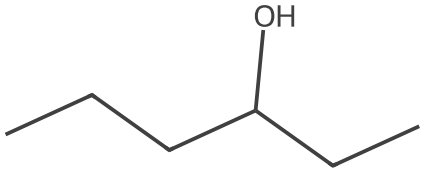
(n, s, b) が同じ 2 分子

教科書 §2.4

問い 1 ② 同じ行になると、どうなるか



2-ヘキサノール → $(6, 1, 0)$



3-ヘキサノール → $(6, 1, 0)$

→ 予測の方法
n・s・b の 3 列だけを使う
例：同じ値の分子の沸点（第 3 回）
式に入れる（第 4 回）
→ **同じ予測値**

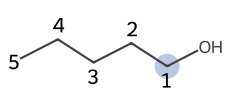
基本演習 B：同じ行を探す

問い 1 ②　5 分子で、同じ行はどれか

手順 1　同じ (n, s, b) の組を探す

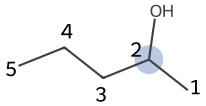
手順 2　2-ペンタノールと 3-ペンタノールの予測値は　（同じ／違う）

手順 3　実際の沸点も同じと言えるか　（言える／言えない）



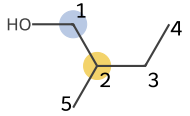
1-ペンタノール

$(5, 0, 0)$



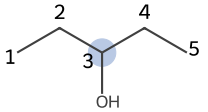
2-ペンタノール

$(5, 1, 0)$



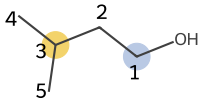
2-メチル-1-ブタノール

$(5, 0, 1)$



3-ペンタノール

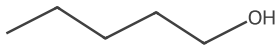
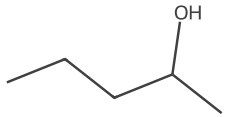
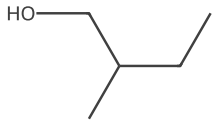
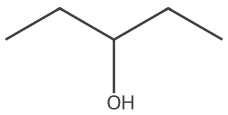
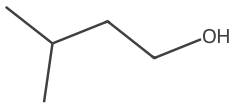
$(5, 1, 0)$



3-メチル-1-ブタノール

$(5, 0, 1)$

基本演習 B：アプリで確かめる

構造	分子	n	s	b
	1-ペンタノール	5	0	0
	2-ペンタノール	5	1	0
	2-メチル-1-ブタノール	5	0	1
	3-ペンタノール	5	1	0
	3-メチル-1-ブタノール	5	0	1

同じ (n, s, b) の行を線で囲む

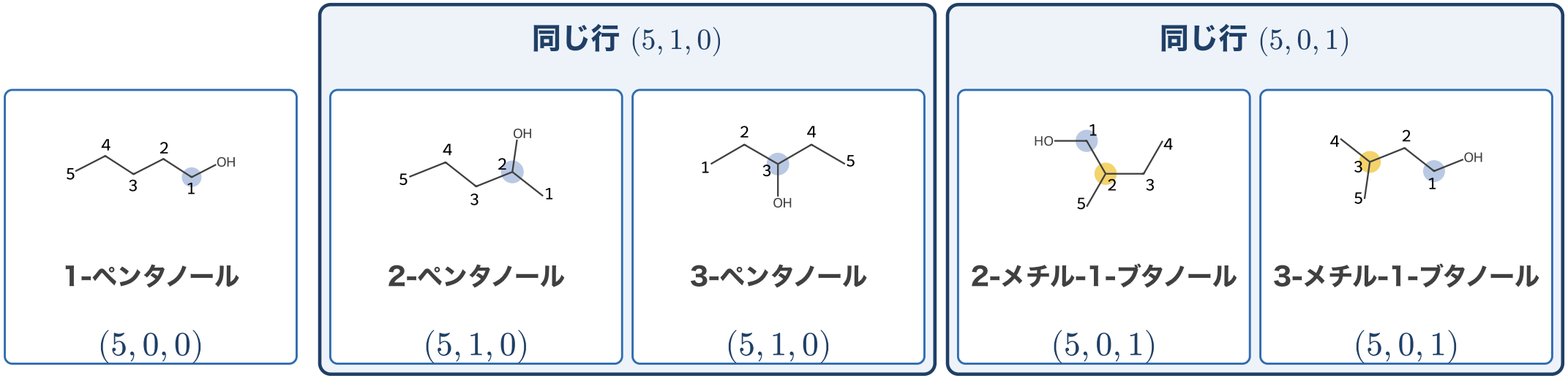
基本演習 B の答え（1）

同じ行になる分子の組

① **(5, 1, 0)**　2-ペンタノールと 3-ペンタノール

② **(5, 0, 1)**　2-メチル-1-ブタノールと 3-メチル-1-ブタノール

答え　2 組（5 分子 → 3 種類の行）



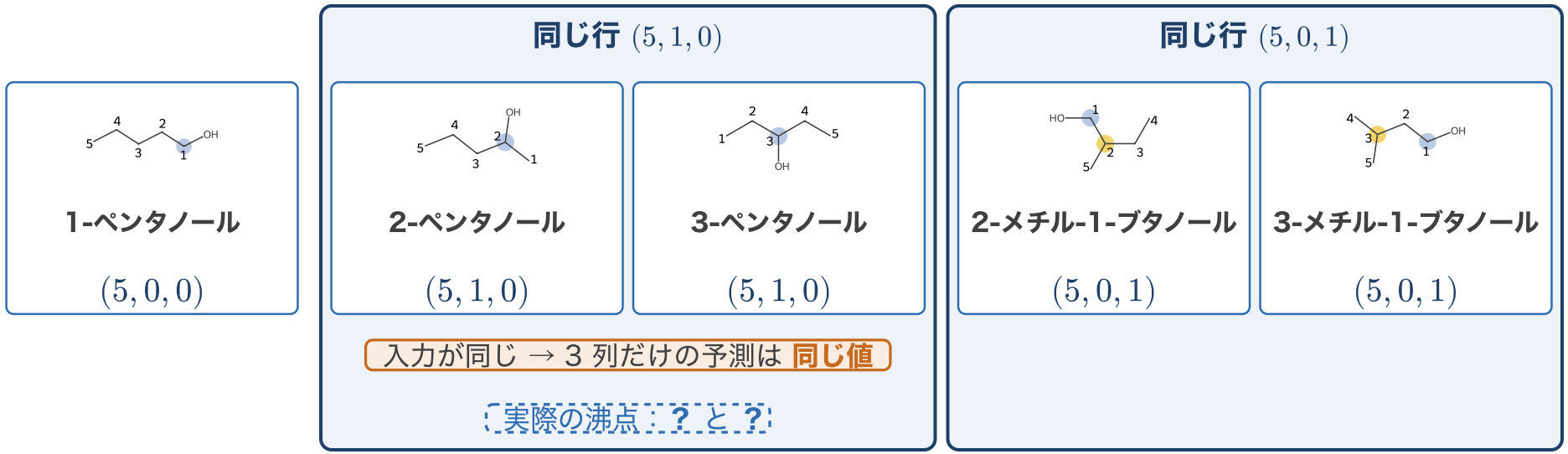
基本演習 B の答え（2）

2-ペンタノールと 3-ペンタノールの予測値

① 予測値　　入力がどちらも (5, 1, 0) → 同じ値

② 実際の沸点　OH の位置の違いは 3 列に入っていない → 同じとは言えない

答え　予測値は同じ。実際の沸点が同じとは言えない



要点：同じ行の分子には、同じ予測値。物性が同じという意味ではない

理解確認（個人・3 分）

n：炭素数　s：OH の炭素が二級なら 1、一級なら 0　b：分岐点の個数

1. $CH_3CH(OH)CH(CH_3)CH_3$ の (n, s, b) を求める
2. 2 つの分子で (n, s, b) が同じだった。同じ分子だと言えるか　（言える／言えない）
   3 列に入っていない情報の例を 1 つ挙げる

理解確認の答え

問 1　$CH_3CH(OH)CH(CH_3)CH_3$ の (n, s, b)

① 骨格式に直す　主鎖の炭素 4 個＋枝の CH_3 → $n = 5$

② 印を付ける　OH の炭素（2 番）は二級、3 番の炭素は分岐点

よくある誤り　枝の CH_3 を落として $n = 4$／OH の炭素も分岐点に数える

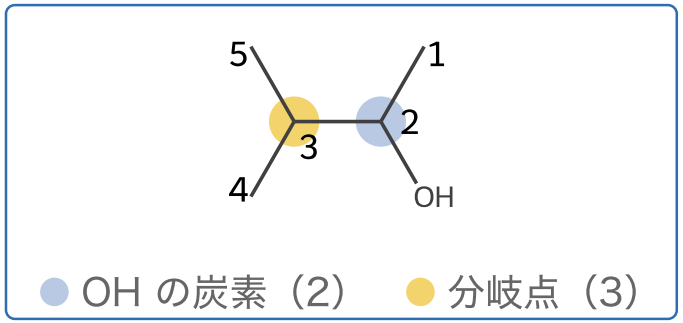
答え　(5, 1, 1)。s と b の両方が 1 になる例

問 2　(n, s, b) が同じなら、同じ分子と言えるか

答え　言えない。OH の位置・分岐の位置は 3 列にない（例：2-/3-ペンタノール）

縮合構造式
$CH_3CH(OH)\mathbf{CH(CH_3)}CH_3$
枝の CH_3 も炭素に数える

→



→

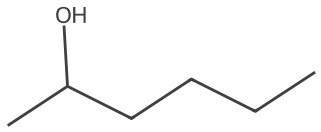
(5, 1, 1)
二級（$s = 1$）で、
分岐点も 1 個（$b = 1$）

例題：列を足せば、区別できるか

問い 1 ②　列を足せば、区別できるか

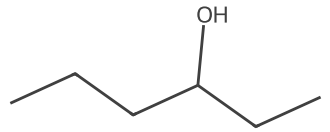
分子量と OH の数を列に足せば、区別できるか

問題　2-ヘキサノールと 3-ヘキサノールで、
分子量と OH の数を比べてください



2-ヘキサノール

分子式　$C_6H_{14}O$
OH の数　**1 個**



3-ヘキサノール

分子式　$C_6H_{14}O$
OH の数　**1 個**

この 2 列では区別できない

解き方

① 分子式　　どちらも $C_6H_{14}O$（異性体）→ 分子量は同じ

② OH の数　　どちらも 1 個

③ 判定　　どちらの列も、2 つで同じ値になる

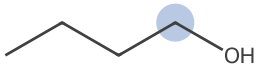
答え　区別できない。分子量も OH の数も、2 つで同じ

応用演習：OH の位置を列にする

問い 1 ②　OH の位置を、列にできるか

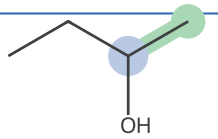
末端までの距離：OH の炭素から
最も近い末端までの C–C 結合の数

末端：ほかの炭素と 1 本だけ結合する炭素
（OH の炭素も含む）



1-ブタノール

末端まで **0**
CH_2OH の炭素が、そのまま末端

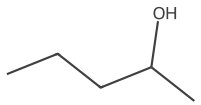


2-ブタノール

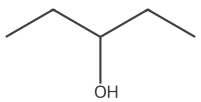
末端まで **1**
OH の炭素から C–C 結合 1 本

手順 1　5 分子それぞれで、OH の炭素から末端まで線をたどって数える

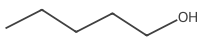
手順 2　2-/3-ペンタノールは区別できるか　（できる／できない）
2-/3-メチル-1-ブタノールは区別できるか　（できる／できない）



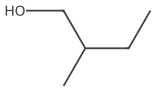
2-ペンタノール



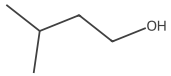
3-ペンタノール



1-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

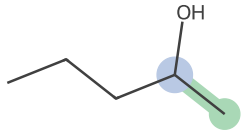
応用演習の答え（1）

末端までの距離　OH の位置の違いを数にした列

① 二級の 2 つ 2-ペンタノールは 1、3-ペンタノールは 2 → 区別できる

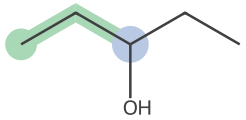
② ほかの 3 つ OH の炭素が末端そのもの → どれも 0

答え　同じ行の 2 組のうち、この列で区別できるのは 2-/3-ペンタノールの組だけ



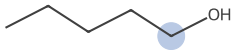
2-ペンタノール

末端まで **1**



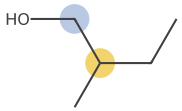
3-ペンタノール

末端まで **2**



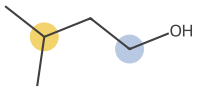
1-ペンタノール

末端まで **0**



2-メチル-1-ブタノール

末端まで **0**

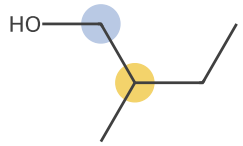


3-メチル-1-ブタノール

末端まで **0**

応用演習：残った組を区別する

問い 1 ②　残った組を区別する列は何か



2-メチル-1-ブタノール

末端まで **0**

＝
末端までの距離では区別できない



3-メチル-1-ブタノール

末端まで **0**

手順 1　2 分子で違う所を指す

手順 2　その違いを「〔どこ〕から〔どこ〕までの〔何〕の数」で定義する

手順 3　2 分子で数え、値が違うことを確かめる

最後に　通し番号（1〜5）の列でも区別できる。予測は必ずよくなるか（よくなる／とは限らない）

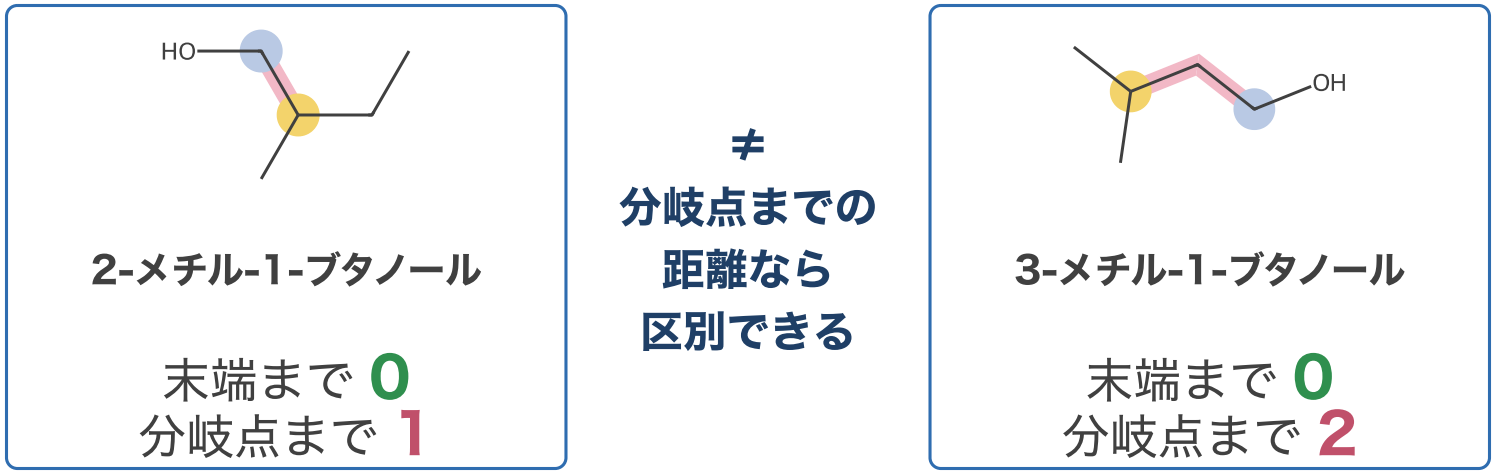
応用演習の答え（2）

残った組　2-メチル-1-ブタノールと 3-メチル-1-ブタノール

考え方　違うのは分岐点の位置。末端までの距離は、どちらも 0

成立しない例　「末端までの距離を足せば 5 つとも区別できる」
→ 2-/3-メチル-1-ブタノールはどちらも 0

答え　OH の炭素から分岐点までの結合の数（1 と 2）など、別の列が必要



応用演習の答え（3）

区別できれば、予測は必ずよくなるか

考え方　区別できても、沸点の違いに合うかは、資料値で確かめるまで分からない

答え　必ずよくなるとは限らない

3 列だけ：区別できない

2-ペンタノール $(5, 1, 0)$ → **予測 ア**

3-ペンタノール $(5, 1, 0)$ → **予測 ア**

同じ入力 → **同じ予測値**

通し番号の列を足す：区別はできる

分子	(n, s, b)	番号
1-ペンタノール	$(5, 0, 0)$	**1**
2-ペンタノール	$(5, 1, 0)$	**2**
2-メチル-1-ブタノール	$(5, 0, 1)$	**3**
3-ペンタノール	$(5, 1, 0)$	**4**
3-メチル-1-ブタノール	$(5, 0, 1)$	**5**

5 つとも別の入力
→ 別の予測値

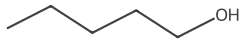
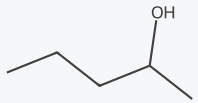
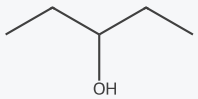
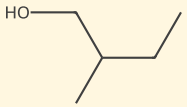
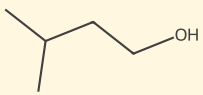
番号は沸点と関係ない
→ 予測がよくなる
理由はない

予測がよくなるのは、沸点の違いに関わる列を足したとき。どれが関わるかは資料値と比べる（第 5 回）

要点：末端までの距離では、全部は区別できない。区別できても、予測が合うとは限らない

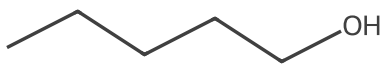
問い 1 の答え　n・s・b を列にする。同じ行の分子は区別できない

問い 1：分子のどの特徴を、表の列にするか

構造	分子	n	s	b	同じ行
	1-ペンタノール	5	0	0	**(5, 0, 0) 1 分子**
	2-ペンタノール	5	1	0	**(5, 1, 0) 2 分子**
	3-ペンタノール	5	1	0	
	2-メチル-1-ブタノール	5	0	1	**(5, 0, 1) 2 分子**
	3-メチル-1-ブタノール	5	0	1	

- 列：(n, s, b)＝炭素数・OH の炭素の級・分岐点の数。第 3〜5 回の予測もこの 3 列で進める
- C5 の 5 分子は 3 種類の行になる。表せない違い：OH の位置、分岐の位置

実際のケモインフォでは：分子を数の並びにする



1-ペンタノール

文字列（SMILES）

CCCCCO

H は書かない約束

分子グラフ

原子＝点、結合＝線のつながり

記述子

分子量、環の数、水素結合をつくる原子の数 …

フィンガープリント（部分構造があれば 1）

構造キー型の模式図

1	1	0	0	0	…
OH	一級 OH	二級 OH	分岐	環	

一級・二級 OH のビット ＝ 今日の s と同じ考え方

この授業：(n, s, b) の 3 列（手で数える）

実際の研究：多数の列（プログラムで数える）

どちらも、分子を比べられる数の並びにする

自分の実験では、何を表の列にするか

合成：置換基を変えた基質と収率

列にした	置換基の種類（Me・OMe・Cl）、位置（o・m・p）
省いた	反応温度・時間、溶媒、仕込みの規模

材料：組成を変えた試料と電気伝導度

列にした	組成比、焼成温度、焼成時間
省いた	粒の大きさ、試料の形、調製の手順の細部

- 列にした情報と、省いた情報を、表の横に書いておく
- 自分の研究（まだなら学生実験）で、結果に関わりそうなのに列にしていない情報を 1 つ書く

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 ②）

1. 骨格式・縮合構造式から (n, s, b) を数えられる
2. 同じ (n, s, b) の分子を見つけ、
   表せない違い（OH の位置・分岐の位置）を言える
3. 「区別できる」と「予測が合う」を分けて言える

まだ分からないこと

- 記述子の近い分子の沸点から、
  候補分子の沸点を予測できるか
  → 第 3 回
- 同じ行の分子の沸点は、
  同じか違うか → 第 5 回

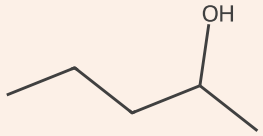
次回予告：第 3 回 似た分子から物性を予測する

教科書 第 3 章

第 3 話　似た分子から見積もる



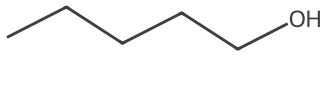
工程担当者　「構造を変えると、沸点も範囲から外れないか心配。
資料が届く前に、2-ペンタノールの沸点を見積もれる？」



2-ペンタノール

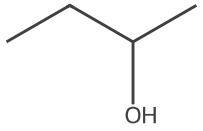
$(5, 1, 0)$　沸点 ？

似ているのは？



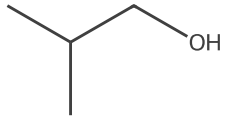
1-ペンタノール

$(5, 0, 0)$



2-ブタノール

$(4, 1, 0)$



2-メチル-1-プロパノール

$(4, 0, 1)$

次回の問い：「似ている」をどう定義すると、予測がどう変わるか

今日の復習 小テスト第 2 回（manaba）・基本演習を解き直す　**教科書で読む** §2.1〜2.6（§2.6 の発展も）　**次回の予習** §3.1〜3.2