分子候補と次の実験を提案する

分子設計 第 6 回 ｜ 教科書 第 6 章

第 6 話　報告する

複数の要求と未確認事項を踏まえ、次に何を確かめるか

これまでの経過

第 5 回　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

使っていない 5 分子での MAE

予測の方法	MAE
M0	11.6 ℃
M1	2.4 ℃
最近傍（3 通り）	7.1〜15.0 ℃

今日できるようになったこと

- ○ 当てはまりと予測の確認を分け、記録してから使っていない分子で確かめる。MAE で要約し、平均で上限ではないと読む
- ○ 見た資料値で直した式（データ漏洩）や、合わせすぎた式（過学習）は、同じデータではよさを示せない。別のデータで確かめる
- ○ 言える範囲を限る：同じ記述子の異性体は区別できない。資料値のある組み合わせの外（適用範囲の外）は信用しにくい

まだ分からないこと

- ？ 確かめていない組み合わせの候補を、どう扱うか → 第 6 回
- ？ 水溶性も含めて、どの候補を選び、次に何を測るか → 第 6 回

M0（炭素数だけの式）$T = 20n + 38$　|　M1（補正式）$T = 20n + 38 - 17s - 10b$

n 炭素数　|　s 二級なら 1　|　b 分岐点の数　|　依頼沸点 115〜140 ℃・w_{25} 4.0 以上

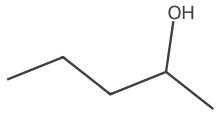
前回の確認 1　確かめた分子は n = 2〜6、s・b は 0 か 1（$s = b = 1$ の分子はない）。

(6, 1, 1) の予測は、各列とも範囲内だから信頼できるか　（できる／できない）

問い 1　複数の要求と未確認事項を踏まえ、次に何を確かめるか

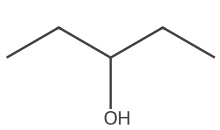


工程担当者　「水溶性の資料も届いたよ。で、どれを使えばいい？ 次に何を測る？」



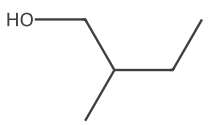
2-ペンタノール

沸点 119 ℃　w_{25} ？



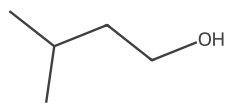
3-ペンタノール

沸点 116 ℃　w_{25} ？



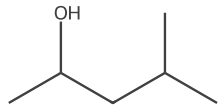
2-メチル-1-ブタノール

沸点 128 ℃　w_{25} ？



3-メチル-1-ブタノール

沸点 132 ℃　w_{25} ？



4-メチル-2-ペンタノール

$(6, 1, 1)$

沸点 ？　w_{25} —

報告するもの：既知の候補 1 つ、追加で調べる候補 1 つ、次に確かめる分子と物性

やってみる：第 1 回の応用演習の答えを出し、いま推すものを 1 語で書き足す

今日の流れ

教科書 §6.1〜6.7

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

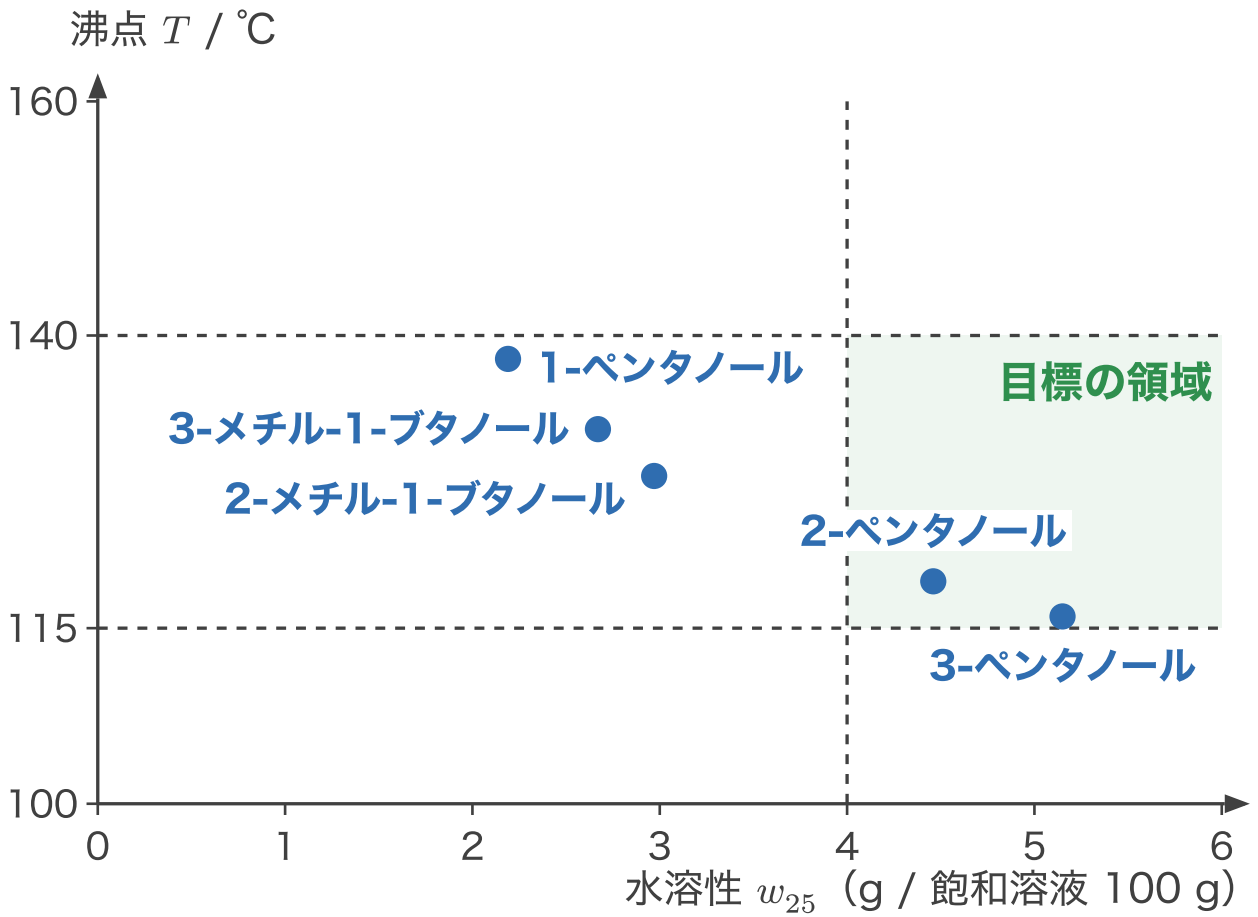
1. **問い 1 ①** 既知の候補から、どれを選ぶか → 例題・基本演習 A
2. **問い 1 ②** 新しい候補を、どう探すか → 考えてみる
3. **問い 1 ③** 次に何を確かめるか → 例題・基本演習 B・応用演習 1・2

そのあと：問い 1 の答え → 実際のケモインフォでは → 自分の分野で考える

2 つの要求を、同時に見る

教科書 §6.1

問い 1 ①　どの分子が要求を満たすか



- 点はすべて資料値

w_{25}（g / 飽和溶液 100 g）：25 ℃ で 2 層に分かれたときの、水相 100 g 中の質量

この 5 分子で、沸点と水溶性を比べる

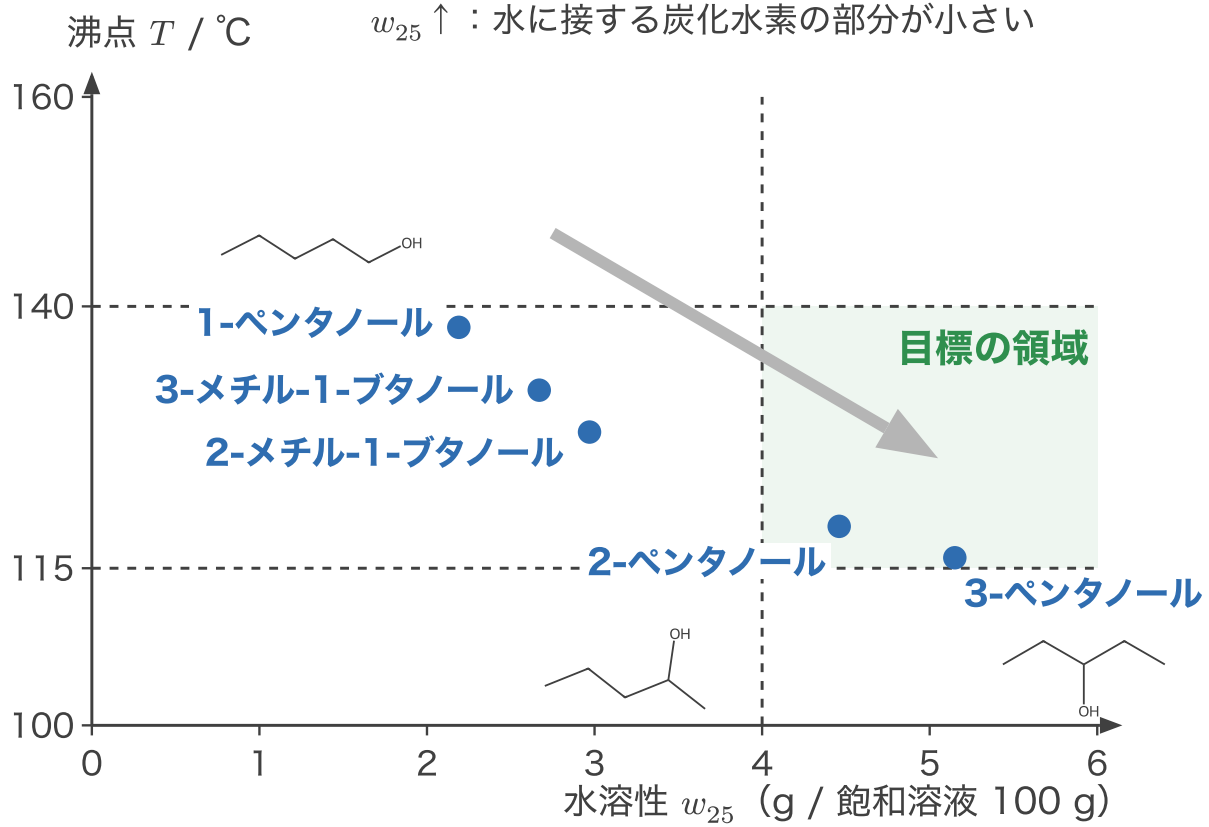
教科書 §6.1

問い 1 ① 沸点と水溶性は、どう関係するか

観察：この 5 分子では、沸点が低いほど w_{25} が大きい

仮説　沸点↓：接触が減る（分散力）・立体障害（水素結合）

w_{25}↑：水に接する炭化水素の部分が小さい



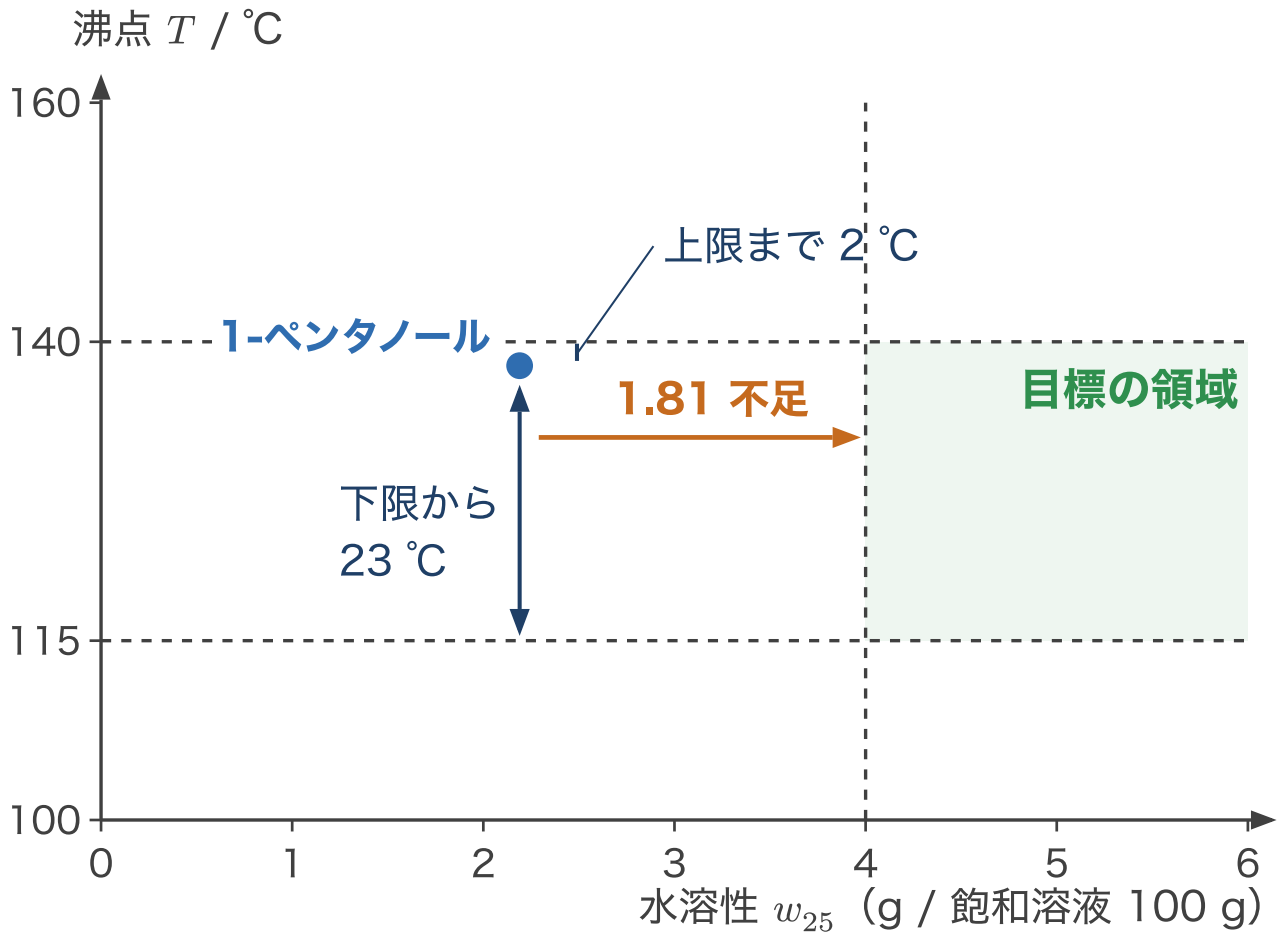
灰色の矢印は向きを示す模式。データに当てはめた直線ではない

考えてみる（1.5 分）：1-ペンタノール → 3-ペンタノールで OH が内側に移ると、沸点が下がる。その理由を、分子間力で 1 つ

要求の境界から、どれだけ離れているか：余裕

教科書 §6.2

問い 1 ①　境界からどれだけ離れているか



- **余裕**：要求の境界までの差

  境界の内側なら＋、外側なら −（不足）

- 沸点は下限から・上限までの両側

例題：3-メチル-1-ブタノールの余裕

問い 1 ①　境界からどれだけ離れているか

問題　3-メチル-1-ブタノール（沸点 132 ℃、w_{25} 2.67）の余裕を求め、2 つの要求を満たすか判定してください

解き方

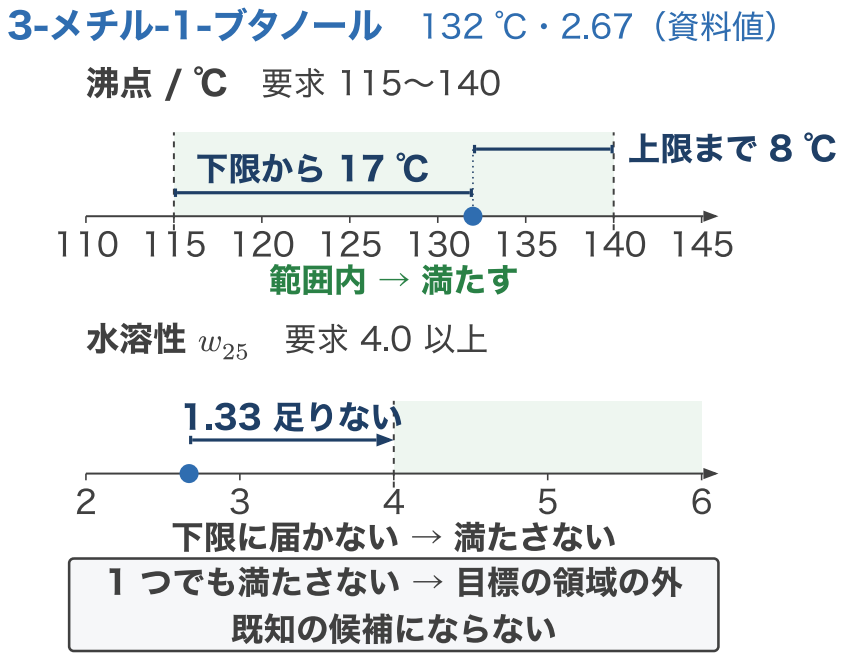
① 沸点　下限から $132 - 115 = 17$ ℃

上限まで $140 - 132 = 8$ ℃ → 範囲内

② w_{25}　$2.67 - 4.0 = -1.33$ → 1.33 足りない

③ 判定　満たさない要求が 1 つでもあれば、目標の領域の外

答え　沸点は満たすが、w_{25} が 1.33 足りない → 既知の候補にはならない



基本演習 A：既知の候補を比べる

問い 1 ①　2 つのどちらを選ぶか

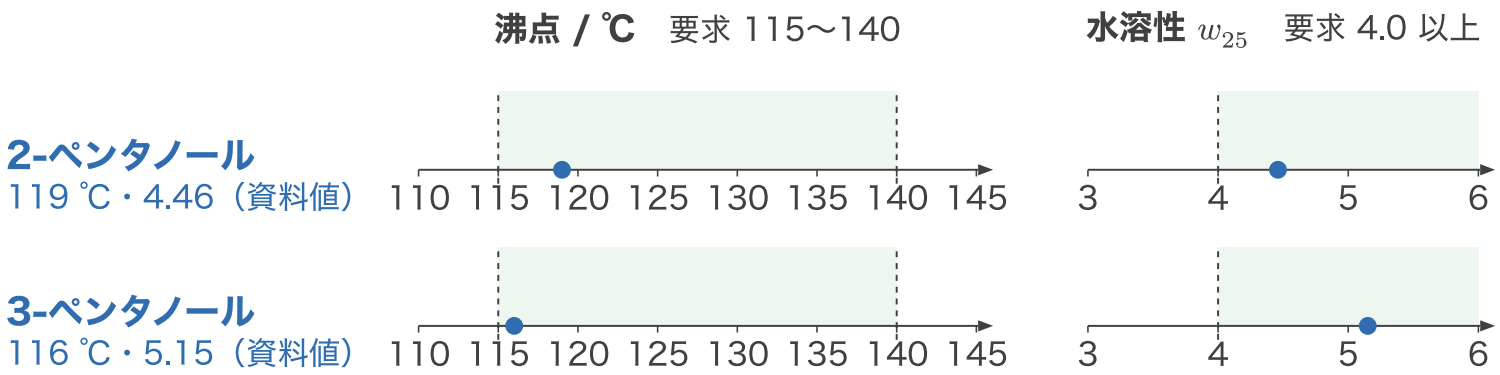
基準：沸点 下限 115 ℃・上限 140 ℃、w_{25} 4.0 以上

手順 1　2-ペンタノール（119 ℃、4.46）の余裕を 3 つ、手で求める

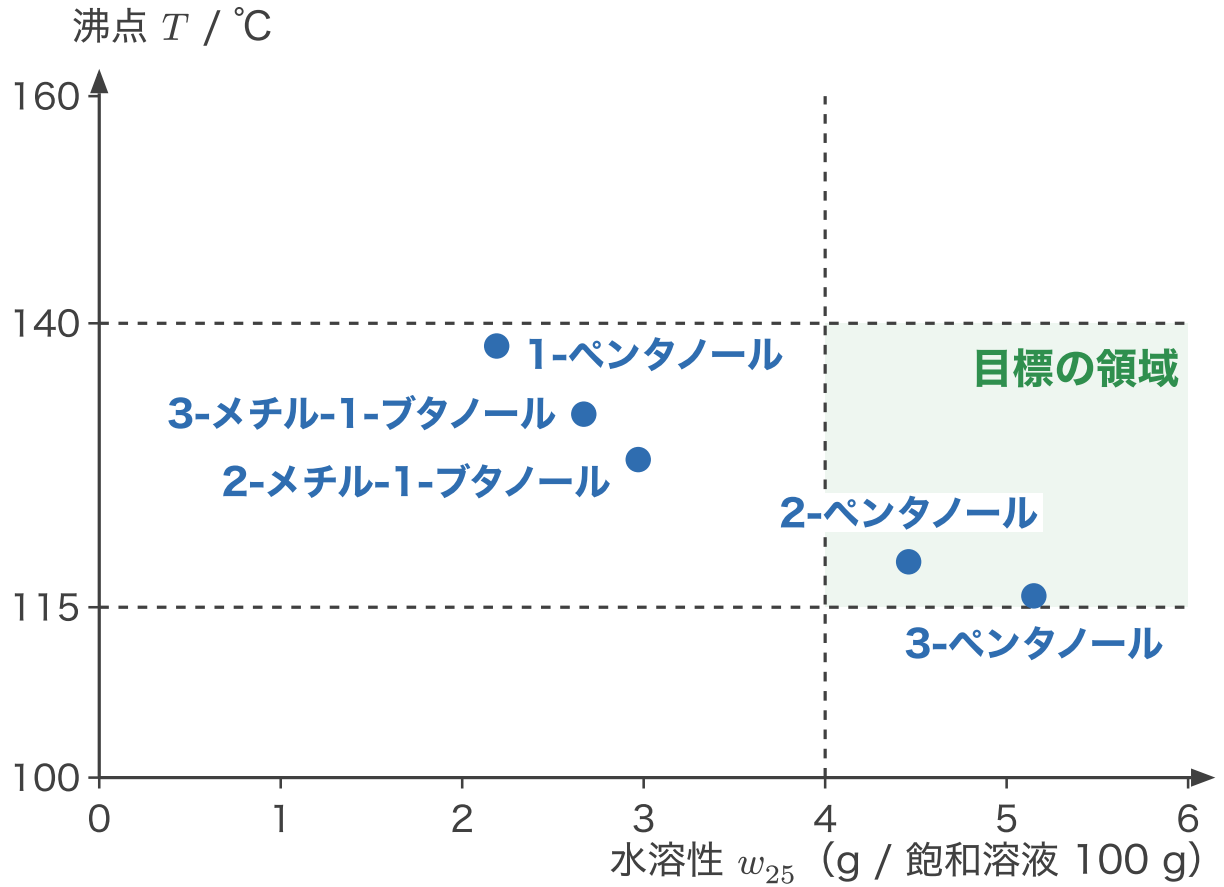
手順 2　3-ペンタノール（116 ℃、5.15）も求め、アプリで確かめる

手順 3　どちらを選ぶか。どの余裕を重く見たか、理由を 1 行で

問　「余裕を足して点数にすれば、よい方が決まる」と言えるか（言える／言えない）



基本演習 A：押して、余裕を見る



2-ペンタノール (4.46, 119)、3-ペンタノール (5.15, 116)。下限 115 ℃・上限 140 ℃・w_{25} 4.0 からの差を求める

終わったら：前の枚の手順 3 と問へ

基本演習 A の答え（1）

手順 1・2　2 つの候補の余裕

① **2-ペンタノール** 沸点 下限から 4 ℃・上限まで 21 ℃、w_{25} +0.46

② **3-ペンタノール** 沸点 下限から 1 ℃・上限まで 24 ℃、w_{25} +1.15

答え　2 つとも満たす。2-は沸点の下限に、3-ペンタノールは w_{25} に余裕がある

手順 3　どちらを既知の候補に選ぶか

答え　どちらも選べる：沸点の下限が心配なら 2-、w_{25} 重視なら 3-ペンタノール

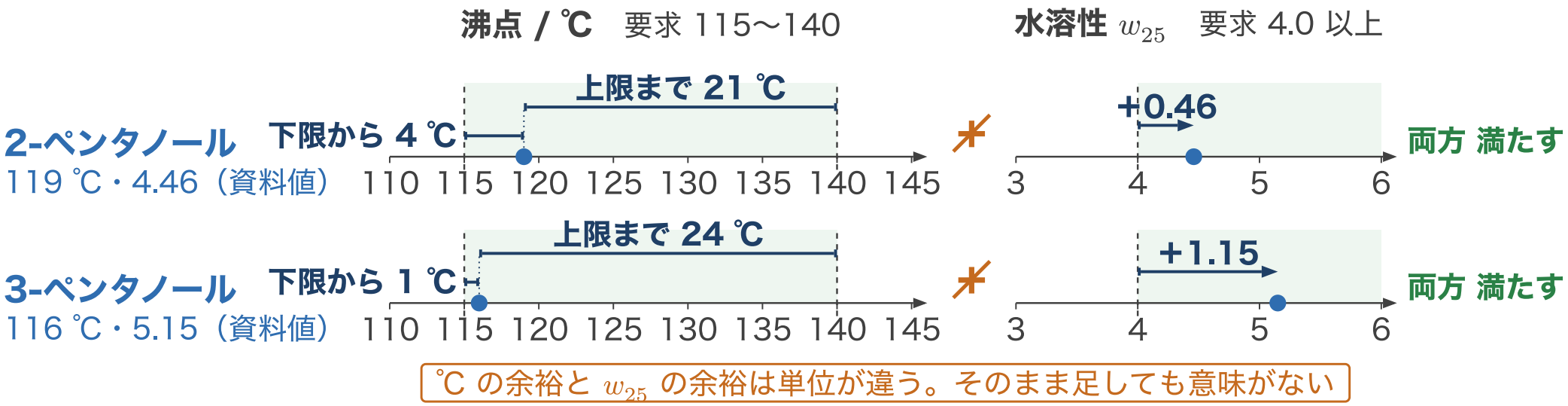


基本演習 A の答え（2）

問　余裕を足し合わせて点数にすれば、決まるか

考え方　℃ の差と w_{25} の差は単位が違う。そのまま足しても意味がない。
点数にするなら、尺度と重みを目的から決める

答え　言えない。そのまま足した点数では決まらない。重みは目的で決める



要点：資料値で要求を判定し、余裕は物性ごとに見る。選んだ理由を書いておく

構造から、候補を探す：逆設計

教科書 §6.3

問い 1 ② 資料値のない分子から、どう探すか

n	(s, b)	M1 の予測	115〜140 ℃ か	今日の分子
5	$(0, 0)$	138 ℃	入る △	1-ペンタノール
5	$(0, 1)$	128 ℃	入る	2-・3-メチル-1-ブタノール
5	$(1, 0)$	121 ℃	入る	2-・3-ペンタノール
5	$(1, 1)$	111 ℃	入らない △ ＊	
6	$(0, 0)$	158 ℃	入らない	
6	$(0, 1)$	148 ℃	入らない	
6	$(1, 0)$	141 ℃	入らない △	
6	$(1, 1)$	131 ℃	入る ＊	
6	$(0, 2)$	138 ℃	入る △ ＊	

△ 境界から 5 ℃ 以内（確かめた 5 分子での M1 の誤差の大きさ）
＊ 確かめた範囲の外

- **逆設計**：ほしい沸点から (n, s, b) を探す
  M1 で沸点だけを予測する
- (6, 1, 1)：各列は確かめた値で、組み合わせだけ未確認 → こちらを調べる

考えてみる：(6, 1, 1) になる分子を、構造式で挙げる

問い 1 ②　(6, 1, 1) はどんな分子か

- C6 の二級アルコールで、分岐点が 1 つのもの。4 つある。できるだけ挙げる（2 分）

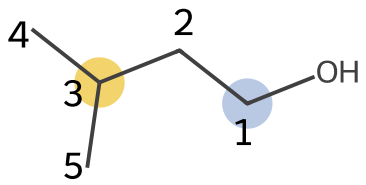
  同じ炭素に枝 2 つ（炭素 4 個と結合する炭素）も、分岐点 1 つ

- どれを先に調べたいか、理由を 1 行で

  使ってよい仮説：枝が多い、OH が内側 → 水に溶けやすい

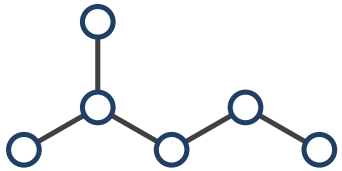
既知：3-メチル-1-ブタノール

$(5, 0, 1)$



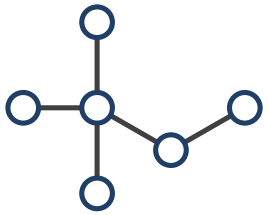
- OH の炭素：炭素 1 個 → 一級 $s = 0$
- 炭素 3：炭素 3 個 → 分岐点 $b = 1$

型 1：主鎖 5+枝 1



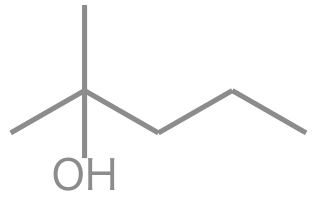
枝は主鎖の
2 番目か 3 番目

型 2：主鎖 4+枝 2



枝 2 つが同じ炭素
→ 分岐点は 1 つ

対象外の例



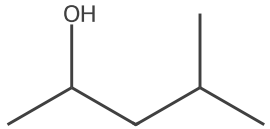
OH の炭素に
炭素 3 個 → 三級

○：OH を置ける炭素。OH の炭素が炭素 2 個と結合する（二級）置き方だけを数える

(6, 1, 1) の 4 つ：M1 では区別できない

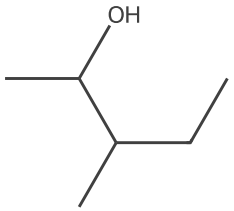
教科書 §6.3

問い 1 ② どの分子を調べるか



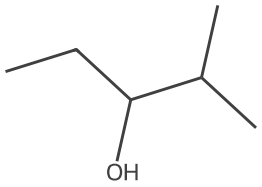
4-メチル-2-ペンタノール

教材の資料に沸点あり



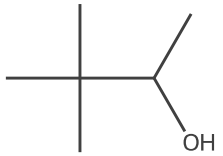
3-メチル-2-ペンタノール

教材の資料なし



2-メチル-3-ペンタノール

教材の資料なし



3,3-ジメチル-2-ブタノール

教材の資料なし

4 つとも $(6, 1, 1)$ → M1 の予測はどれも **131 ℃**

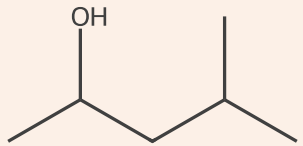
3,3-ジメチル-2-ブタノールの分岐点は、炭素 4 個と結合する炭素（四級炭素）。この形の分岐は確かめた範囲の外

- 同じ記述子なので、M1 では同じ予測。どれを調べるかは別の根拠で決める。理由が書ければ、どれを選んでもよい
- 授業の練習は 4-メチル-2-ペンタノールで（研究なら、測るまで値は分からない）

新しい候補の、何が分かっていないか

教科書 §6.2・6.4

問い 1 ③　何が分かっていないか



4-メチル-2-ペンタノール

$(6, 1, 1)$　二級＋分岐

	問 A　値はどこから来たか 資料値／予測／欠測	問 B　予測の前提を確かめたか 確かめた範囲／未確認
沸点	**予測 131 ℃** M1 の値。測っていない	**未確認** 二級＋分岐（$s = b = 1$）では M1 を確かめていない
水溶性 w_{25}	**欠測** 条件のそろった値（25 ℃・水相・飽和溶液 100 g あたり）が教材にない	— 予測しないので、問 B は当てはまらない

資料値：条件のそろった測定値（この候補にはまだない）

- 余裕（下限から 16 ℃・上限まで 9 ℃）は、第 5 回の 5 分子での M1 の誤差（0〜5 ℃）より大きい。それでも組み合わせは未確認
- **「沸点の要求には入りそうだが、未確認」と書く**

例題：境界に近い候補の、測り直しの計画

問い 1 ③　何を確かめるか

> **問題**　3-ペンタノール（沸点 116 ℃、w_{25} 5.15）を候補に残すか決めたい。1 つ測れるとき、何を確かめるか。確認の計画を立ててください

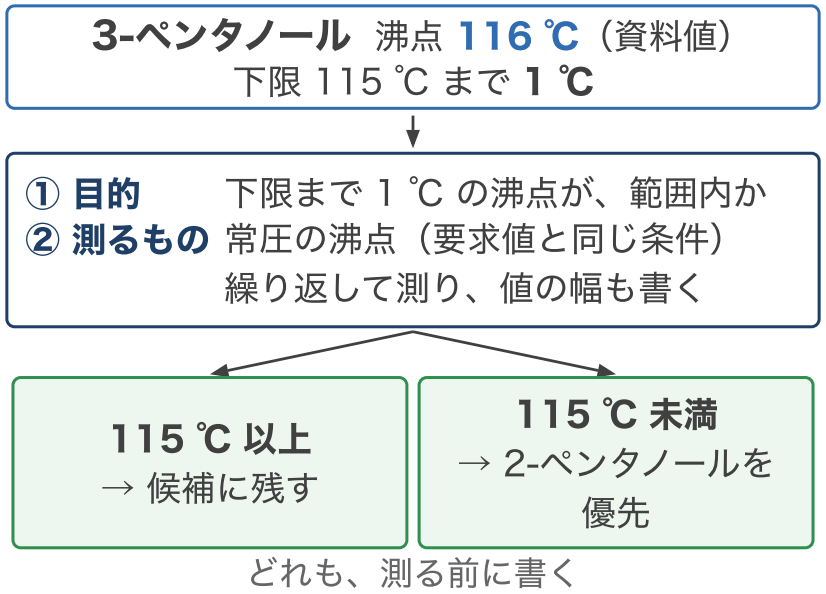
解き方

① 選ぶ　判断が変わりそうなのは、下限まで 1 ℃ の沸点（w_{25} は +1.15）。目的：測り直しても範囲内か

② 測るもの　要求値と同じ常圧で繰り返して測り、値の幅も書く

③ 結果ごとの行動　115 ℃ 以上 → 候補に残す
115 ℃ 未満 → 2-ペンタノールを優先

答え　目的・測るもの・結果ごとの行動を、測る前に書く



基本演習 B：次に確かめる 1 つを決める

問い 1 ③　何を確かめるか

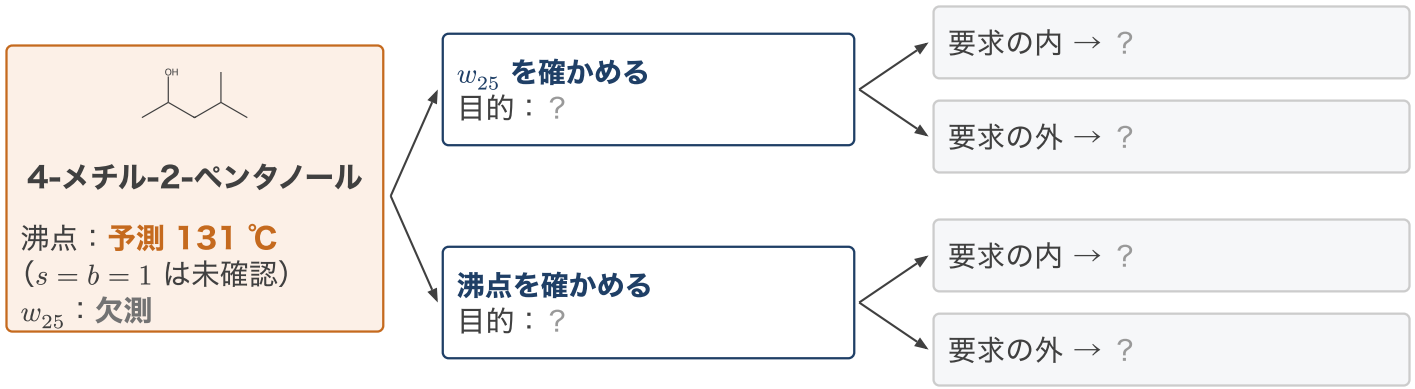
4-メチル-2-ペンタノール：沸点 予測 131 ℃（余裕 9 ℃ 以上、未確認）、w_{25} 欠測（基準 4.0）

手順 1　1 つだけ確かめる。残すか外すかの判断が変わる方を選び、目的を 1 行で

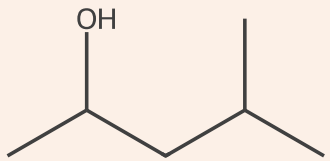
手順 2　結果が要求を満たす場合と、満たさない場合の行動を、先に書く

手順 3　アプリで結果を見る

問　「1 つ確かめたので、この候補は確かめたことになる」と言えるか（言える／言えない）



基本演習 B：選んで、行動を書いてから、結果を見る



4-メチル-2-ペンタノール

$(6, 1, 1)$　二級＋分岐

物性	いまの値	未確認の点
沸点	**予測 131 ℃**	資料値ではない。二級＋分岐の組み合わせで M1 を確かめていない
水溶性 w_{25}	**？(欠測)**	25 ℃・水相・飽和溶液 100 g あたりの値が教材にない。別条件の値を w_{25} に使わない

w_{25} か沸点のどちらかを選び、目的と、結果ごとの行動を書く

終わったら：前の枚の問へ

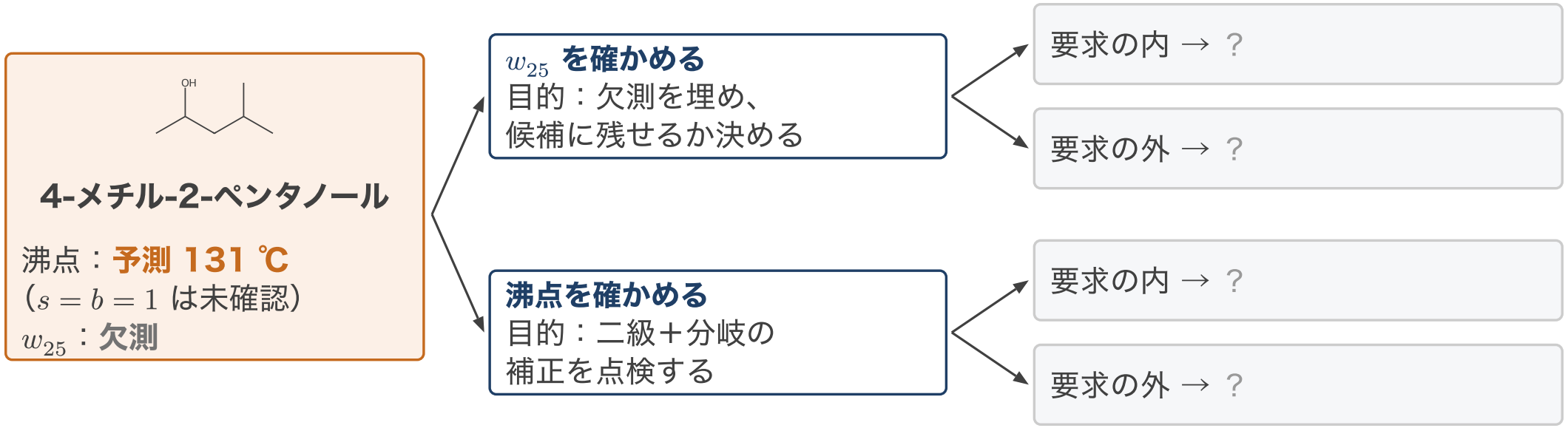
基本演習 B の答え（1）

手順 1　確かめる物性と目的（成立する例）

w_{25} を選ぶ　欠測で、4.0 以上か未満かで残すか外すかが変わる

沸点を選ぶ　未確認の予測が外れていれば外す。二級＋分岐の補正を点検する

答え　どちらも成立する。目的を書く



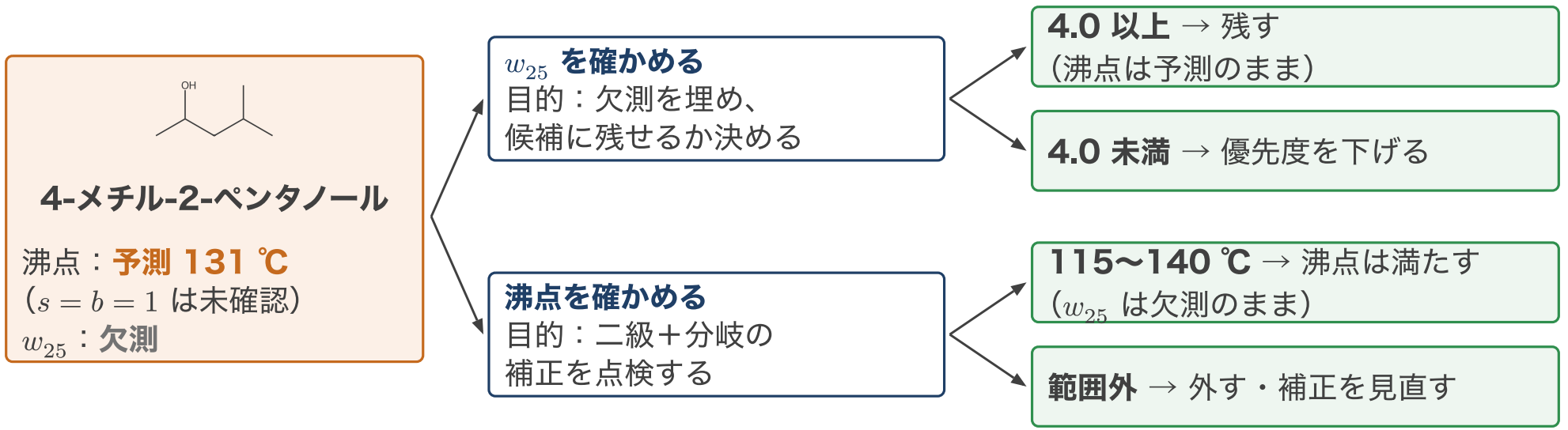
基本演習 B の答え（2）

手順 2　結果ごとの行動（成立する例）

w_{25} なら　4.0 以上 → 残す（沸点は予測のまま）／ 4.0 未満 → 優先度を下げる

沸点なら　115〜140 ℃ → 満たす（w_{25} は欠測のまま）／ 範囲外 → 外す・補正を見直す

言葉　優先度を下げる＝今の目標では候補にしないが、記録は残す



基本演習 B の答え（3）

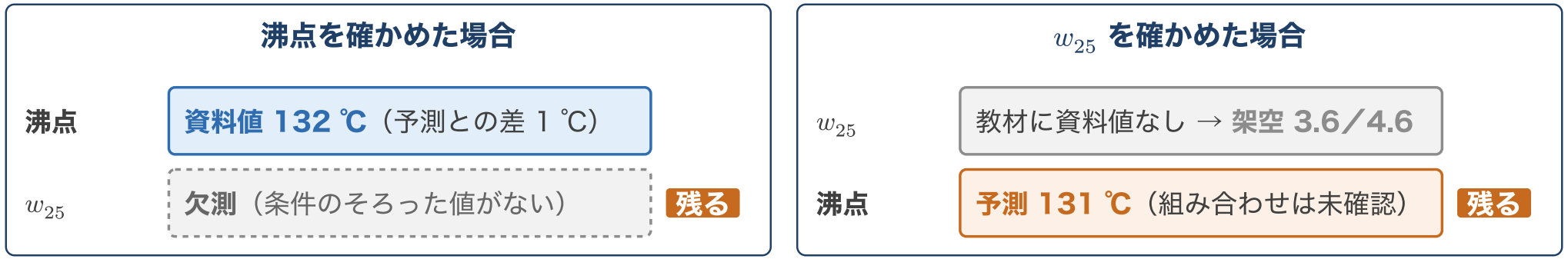
問　結果を見て、確かめたことになると言えるか

沸点を選んだ　資料値 132 ℃（予測との差 1 ℃）。w_{25} は欠測のまま

1 分子で合っても、二級＋分岐の補正が一般に正しいとは言えない（第 5 回）

w_{25} を選んだ　教材に資料値なし。架空 3.6 → 優先度を下げる／架空 4.6 でも沸点は予測

答え　どちらの場合も言えない。採用は確定しない



どちらの場合も、1 つの物性は分からないまま → 「確かめた」とは言えない

要点：1 つ確かめたら、何が分かり、何が残ったかを書く

応用演習 1：最終提案をまとめる

問い 1　報告をどう書くか



工程担当者　「報告は 1 枚で。結果が違ったときの方針も書いておいて」

1. 既知の候補と、根拠の資料値
2. 追加で調べる候補の、構造の特徴・予測（M1）・未確認の点
   基本演習 B で沸点を確かめた人は、資料値も書く
3. 次に調べる物性・条件と、優先する理由
4. 結果が要求を満たす場合／満たさない場合の判断

最終提案（1 枚）

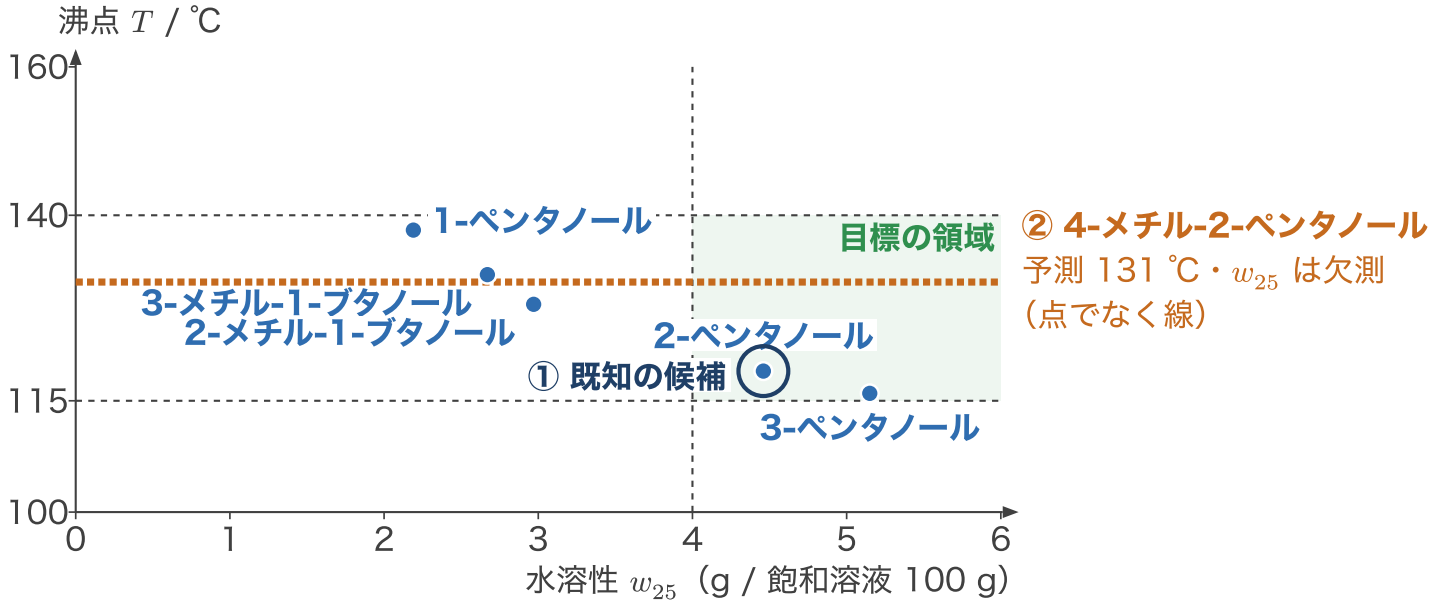
- **1 既知の候補と資料値**　基本演習 A
- **2 追加の候補：構造の特徴・予測（M1）・未確認の点**　逆設計・基本演習 B
- **3 次に調べる物性・条件と理由**　基本演習 B
- **4 結果が要求を満たす／満たさないときの判断**　基本演習 B

応用演習 1 の答え（1）

最終提案の例（成立する例の 1 つ）

① 既知の候補　2-ペンタノール（沸点 119 ℃、w_{25} 4.46。どちらも資料値）

② 追加の候補　4-メチル-2-ペンタノール (6, 1, 1)、二級＋分岐
予測 131 ℃（$s = b = 1$ は未確認）、w_{25} は欠測

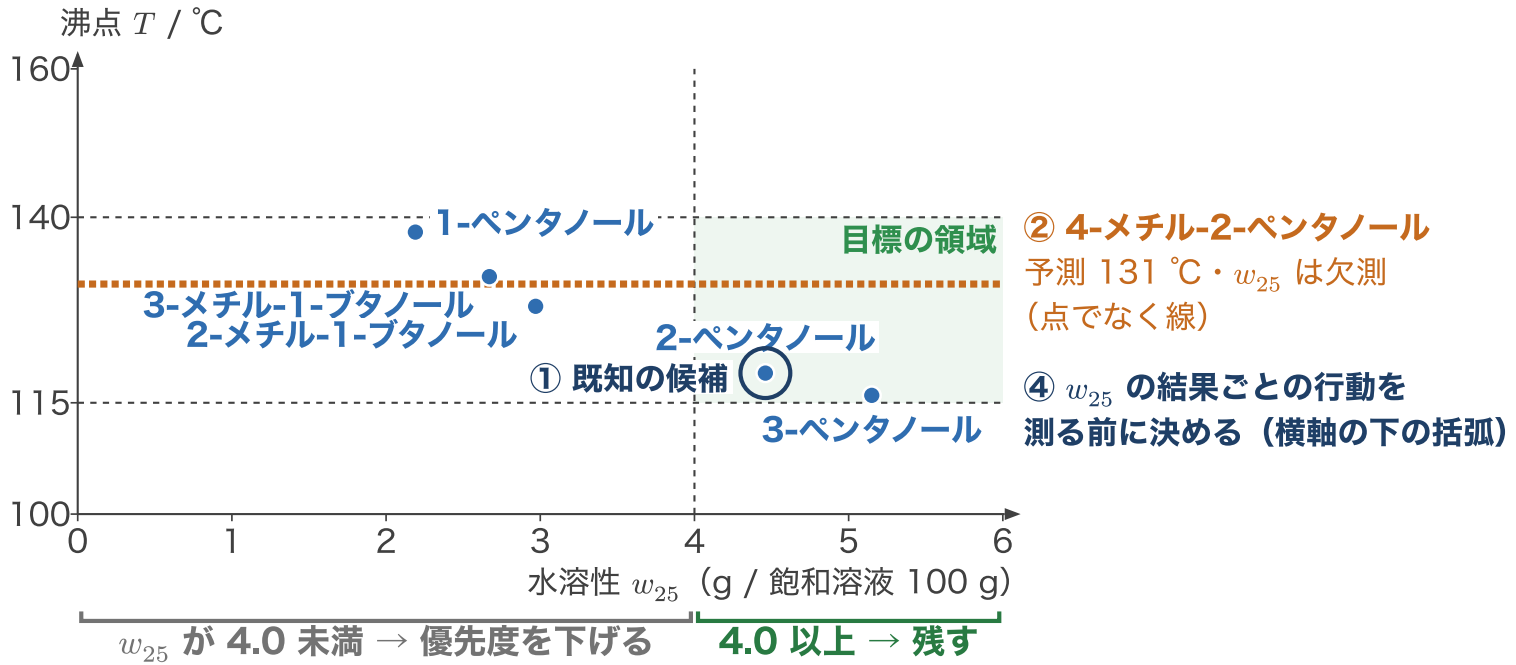


応用演習 1 の答え（2）

最終提案の例（続き）

③ 次に調べる　その w_{25}（25 ℃・水相・飽和溶液 100 g あたり）。残すかを決める値

④ 結果ごと　4.0 以上 → 候補に残す ／ 4.0 未満 → 優先度を下げ、既知の候補で進める

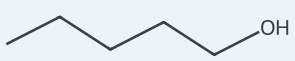
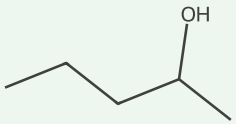
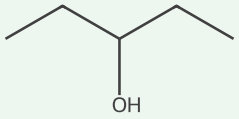
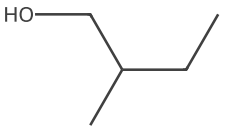
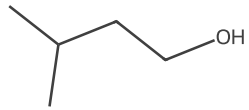


応用演習 2：第 1 回の答えと比べる

問い 1　何が変わったか

手順 1　第 1 回の応用演習の自分の答えを出す

手順 2　何を根拠に判断を変えたか（変えなかったか）を 1 行で。根拠の語（資料値、予測、未確認）を使う

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
出発候補				
				
138 ℃ • 2.19	119 ℃ • 4.46	116 ℃ • 5.15	128 ℃ • 2.97	132 ℃ • 2.67

値は資料値（沸点 ℃・w_{25}）。**緑の枠**：目標の領域（115〜140 ℃・w_{25} 4.0 以上）に入った 2 つ

応用演習 2 の答え

第 1 回の自分の答えと比べて

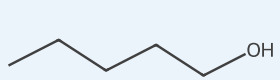
第 1 回　4 分子のデータだけ。構造を変えた候補分子は仮説で、確かめられなかった

今日　資料値・予測・未確認を分けて書ける。次に確かめる 1 つと、その理由を言える

例　第 1 回：OH を内側に移せば溶けそう（仮説）→ 今日：2-ペンタノールの資料値 4.46 で確かめた（この 5 分子で）

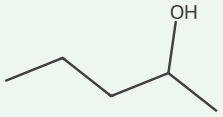
答え　根拠：条件をそろえた資料値、確かめた予測と、その範囲

出発候補



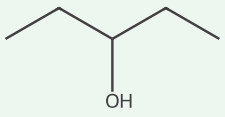
1-ペンタノール

138 ℃・2.19



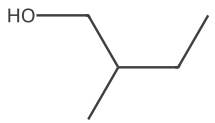
2-ペンタノール

119 ℃・4.46



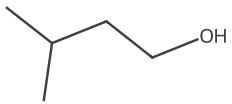
3-ペンタノール

116 ℃・5.15



2-メチル-1-ブタノール

128 ℃・2.97



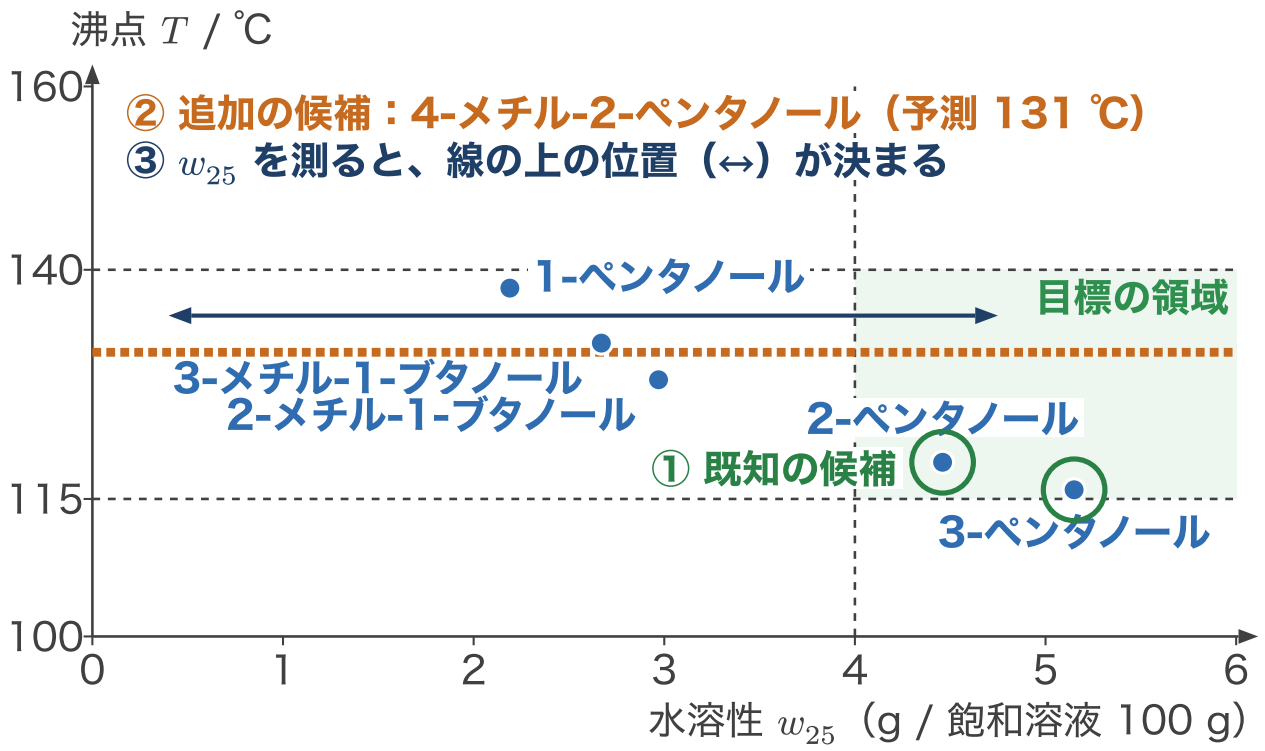
3-メチル-1-ブタノール

132 ℃・2.67

値は資料値（沸点 ℃・w_{25}）。**緑の枠**：目標の領域（115〜140 ℃・w_{25} 4.0 以上）に入った 2 つ

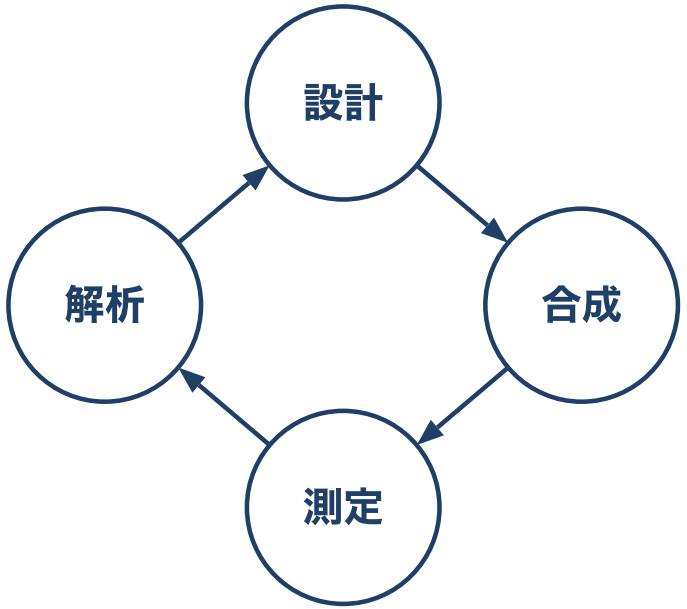
問い 1 の答え 資料値で候補を選び、判断を変える値を 1 つ確かめる

問い 1：複数の要求と未確認事項を踏まえ、次に何を確かめるか



- ① 既知の候補：
  2-ペンタノールか 3-ペンタノール
- ② 追加の候補：
  4-メチル-2-ペンタノール
- ③ 次に確かめる（例）：その w_{25}
  結果しだいで、残すか外すかが変わる値。
  沸点を選ぶ答えも成立

実際のケモインフォでは：予測と実験を繰り返す



- 予測と実験を繰り返す（創薬の Design–Make–Test–Analyze など）
- 能動学習：予測が不確かな所を測り、予測をよくする
- ベイズ最適化：予測のよさと不確かさの釣り合いで、
  よい候補を早く見つける
- ほしい物性から、条件を満たす構造を探す（逆設計）

この授業：次に確かめる 1 つを、判断を変える値から選んだ

限られた実験の機会を、判断を変える値に使う

- 第 1 回の有機 EL の例も同じ：予測で絞り、計算と実験で確かめ、次を選ぶ

自分の分野で考える（個人・2 分）

項目	この授業では	自分の分野では
1. 良くしたい物性・収率など	沸点を保ちながら、水溶性を上げる	
2. 変えられる構造・組成・条件	OH の位置、分岐、炭素数	
3. そろえる条件と、記録する条件	25 ℃・水相・飽和溶液 100 g あたり、出典	
4. 役立つ既知データと、不足情報	似た分子の資料値。新しい候補の w_{25} が欠測	
5. 次の確認実験と、結果に応じた判断	4-メチル-2-ペンタノールの w_{25}。 4.0 未満なら優先度を下げる	

- 右の列を 2〜3 項目。残りは宿題（manaba の質問・コメント欄に任意で）
- 自分の研究か、学生実験や身近な例で書く（研究室の未公開データは書かない）

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

1. 資料値で 2 つの要求を判定し、
   余裕を物性ごとに見て候補を選べる
   2-ペンタノールか 3-ペンタノール
2. 逆設計で構造を挙げ、新しい候補を
   資料値・予測・欠測・未確認に分けて書ける
3. 目的と結果ごとの行動を先に決めて、
   次の確認を 1 つ選べる

まだ分からないこと

- 4-メチル-2-ペンタノールの w_{25} → 次の実験
- 二級＋分岐の補正は 1 分子だけ
  ほかの (6, 1, 1) も、実際の工程
  （混合物・温度）での性能も、別に確かめる

6 回でしたこと



返信メモ　工程担当者より

「報告ありがとう。資料値のある候補で進めつつ、追加の候補は次の測定の結果で決めよう」

回		問い	答え
第 1 回	データ	出発候補の何が不足し、 どのデータが必要か	不足は水溶性。必要なのは、候補分子の w_{25} と沸点
第 2 回	記述子	分子のどの特徴を、表の列にするか	n・s・b を列にする。同じ行の分子は区別できない
第 3 回	似た分子	「似ている」をどう定義すると、 予測がどう変わるか	記述子と重みの決め方で、最近傍も予測値も変わる
第 4 回	予測式	構造と沸点の傾向を、 簡単な式にまとめられるか	炭素数の直線＋二級と分岐の補正（M1）に まとめられる
第 5 回	検証	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	使っていないデータで確かめ、言える範囲を限る
第 6 回	提案	複数の要求と未確認事項を踏まえ、 次に何を確かめるか	資料値で候補を選び、 判断を変える値を 1 つ確かめる

- 3 つの進め方（第 1 回）：データ駆動で絞り（M1・逆設計）、計算の代わりに分子間力の説明で仮説を立て、経験（実験・資料値）で確かめる

次回：第 7 回 定期試験

- 60 分・マークシート形式（答えは選択肢から選ぶ。計算した値も選択肢から選ぶ）
- 共通の題材で出題する。必要な情報と式（M0・M1 の式、MAE の定義など）は問題に示す
- データの比較、記述子と類似性、予測と検証、候補の選択、確認計画を問う
- 電卓・持ち込みなどは manaba で知らせる

今日の復習 小テスト第 6 回（manaba）・基本演習を解き直す　**教科書で読む** 第 6 章　**試験の準備** 付録 C の総合問題（試験と同じ 5 つの型。記述で解く練習）、各回の小テスト