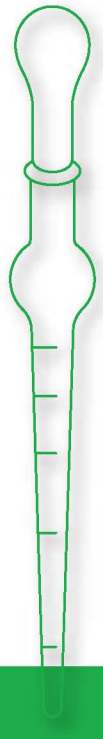
理工系のための化学実験

基礎化学からバイオ・機能材料まで

Undergraduate Experiments in Chemistry

from Basic Chemistry to Biochemistry and Functional Materials

岩村　秀・角五正弘　監修
大月　穣・青山　忠・浮谷基彦・遠山岳史・松田弘幸　編



共立出版

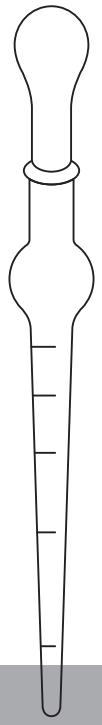
理工系のための化学実験

基礎化学からバイオ・機能材料まで

Undergraduate Experiments in Chemistry

from Basic Chemistry to Biochemistry and Functional Materials

岩村　秀・角五正弘　監修
大月　穣・青山　忠・浮谷基彦・遠山岳史・松田弘幸　編



共立出版

著者一覧

青山 忠	（あおやま ただし）	日本大学理工学部物質応用化学科 准教授	4.3～4.6
浮谷 基彦	（うきや もとひこ）	日本大学理工学部物質応用化学科 准教授	1.1, 1.3, 5.1～5.3
大月 穣	（おおつき じょう）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	1.1～1.3, 2.6～2.8
角田 雄亮	（かくた ゆうすけ）	日本大学理工学部物質応用化学科 助教	2.2～2.5
櫛 泰典	（くし やすのり）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	1.1, 5.7～5.19
栗原 清文	（くりはら きよふみ）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	6.1～6.4
小嶋 芳行	（こじま よしゆき）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	3.1～3.3
櫻川 昭雄	（さくらがわ あきお）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	2.1
清水 繁	（しみず しげる）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	4.10～4.15
須川 晃資	（すがわ こうすけ）	日本大学理工学部物質応用化学科 助教	6.7
鈴木 佑典	（すずき ゆうすけ）	日本大学理工学部物質応用化学科 助教	5.6
谷川 実	（たにがわ みのる）	日本大学理工学部物質応用化学科 准教授	5.4, 5.5
遠山 岳史	（とうやま たけし）	日本大学理工学部物質応用化学科 准教授	3.4, 3.5
西宮 伸幸	（にしみや のぶゆき）	日本大学理工学部物質応用化学科 教授	6.5, 6.6
萩原 俊紀	（はぎわら としき）	日本大学短期大学部生命・物質化学科 教授	4.1, 4.2, 4.7～4.9
星 徹	（ほし とおる）	日本大学理工学部物質応用化学科 助教	3.6, 3.7
吉川 賢治	（よしかわ けんじ）	日本大学理工学部物質応用化学科 専任講師	1.3, 2.9

（五十音順，所属先・肩書きは刊行時のもの，最右列は執筆箇所）

監修のことば

化学実験は，座学で学んだ基礎知識をもとに，実際に物質を手に取って，設定された物理的・化学的または生物学的諸条件の下で物質がどう振る舞うかを実感し，どのような装置を使ってそれを定量的に調べるかを学習し，結果をきちんと記録し，整理してレポートを作成することからなる．

日本大学理工学部では，かつては『大学課程実験工業化学』（金丸競 編）を教科書として用い，最近では時代の要請に応じたカリキュラムの改訂に対応して内容を改め，各担当教員作成のプリントで対応してきた．この度，次代を担う理工系学部学生に広く学んでもらうことを意図して，これまで実施してきた化学実験をもとに，物質応用化学科の教員諸氏が分担執筆し，大月穣教授らが取りまとめて，新しい実験書を上梓することとなった．監修に際しては国際純正応用化学連合（IUPAC）の学術用語および単位のチェックに特に注意した．

本書の大きな特徴は，従来の化学および化学工学実験が更新されただけでなく，生物実験／遺伝子操作を含む生物化学実験が充実している点であり，これは時代の変化を反映している．また近年，応用化学系学科のみならず機械学科や電気・電子工学科などでも化学物質を取り扱う実験を行う局面が生じているが，そのような際にも有用な構成となっている．

本書を使って実験を行う学生諸君は，実験書とにらめっこして実験を行うのではなく，予習して手順の流れ図を予め作ってから実験に臨むことが強く勧められる．

岩村　秀

化学は既存の物質を出発原料として新たな機能と価値を有する物質を創製する学問である．歴史的には錬金術に端を発する．アメリカ化学会の CAS REGISTRY には 1 億を超える化学物質が登録されている．まさに合成実験の成果であるが，得られた化合物の構造を解析し，その物質の有する機能を調べ，機能の発現機構を調べるには実験が必要である．コンピューターケミストリーの進歩により反応性や機能の発現機構を予測できるようになってきてはいるが，ベースになるデータ採取や検証には実験が必須であり，これからも化学研究の基本が実験にあることは変わらない．予測に反する実験結果が新発見につながったケースも数多く報告されている．

近年，化学の対象とする物質はサイズ（分子，ナノ粒子，結晶など）や状態（気体，液体，固体など）など極めて広範囲にわたり，用途も拡大している．本書では無機化学，有機化学，高分子化学，生化学，分析化学，物性測定から化学物質を工業的に製造する際の基礎となる化学工学まで，広範囲な分野を対象にしている．このような広い領域を対象にした化学実験書は日本には今までなかっただろう．

本書では化学の面白さを実感しながらスキルを磨くことができるように工夫されており，卒業研究，さらには大学院での研究実験の基礎となるものと確信している．

角五正弘

はじめに

化学は，物理との境界領域である基礎から，新物質・新材料の合成といった技術に近い分野，さらには，生命のしくみの解明にいたるまで幅広く発展している．化学は物質の化学であり，実際に物質に触れることが欠かせない．大学の化学系学科では初年時から化学実験と座学が両輪としてカリキュラムが組まれているだろう．

市販されている化学系学科のための学生実験のテキストを見てみると，まだ内容的に，定性分析，定量分析，物質の合成，反応速度，スペクトルという伝統的な化学実験の範囲に限られているものが多いようである．ところが，化学系学科では，高分子，化学工学，生物化学といったより広い内容を取り扱う学科も多く，最近の機能材料や生命科学に関する実験も学生実験として取り扱うことが望ましい状況になっているだろう．日本大学理工学部物質応用化学科では，化学の進展に合わせて学生実験の内容の見直しを行い，2014 年度から一新した内容で進められている．それに合わせて，学生実験のテキストにも従来の化学実験に加えて，燃料電池や太陽電池などの応用デバイスに関する実験やタンパク質や遺伝子等に関する実験も含めてまとめておく必要があるだろうと企図されて誕生したのが本書である．

本書は，正しい結果を出すためのマニュアルではなく，原理を考えて議論ができる構成にすること，そして，研究室に入ってからや卒業してからも使える内容とすることをコンセプトに編集した．また，どの大学の化学系学科でも活用できることを念頭に構成したので，多くの大学でテキストとして採択されることと期待している．

本書では，化学の分野を「物理化学・分析化学」,「無機化学」,「有機化学・高分子化学」,「生物化学」,「化学工学・機能化学」と章ごとに分類し，その中の各節で一区切りの実験を説明した．それぞれの実験は半日を単位として 1～2 日程度で行える内容である．各節，つまり各実験は以下のように基本的な構成がもとになっている．各項目についてどのように読めばよいかヒントを挙げておこう．

1 実験の目的：それぞれの実験で理解し，身に付けてもらいたいことをまとめてある．

2 実験の背景：それぞれの実験を行うにあたっての背景知識を述べている．概要を簡単に紹介しているだけなので，自分自身が納得できるまで調べるとよい．

3 実験の方法：実験に用いる器具や薬品をまとめ，実験法を説明している．

4 結果と考察：実験の目的に照らし合わせて実験結果を整理してまとめ，自分なりに主体的に考察してほしい．本項はそのためのヒントである．

本書を出版するにあたって，学生実験担当である助手の小田真弓，早川麻美子，原秀太，綿貫泰寛の各先生をはじめ，非常勤講師の先生方の助けを大いに借りました．これらの先生方並びに丁寧に監修していただいた岩村秀先生，角五正弘先生，そして，短期間で完成度の高い書籍に仕上げていた共立出版の岩下孝男氏，日比野元氏に感謝いたします．

2016 年 3 月

大月　穣，青山　忠，浮谷基彦，遠山岳史，松田弘幸

目　次

第 1 章　化学実験とは …… **1**
1.1　化学実験の基本 …… 1
1.2　実験データ …… 8
1.3　化学実験便利帳 …… 12

第 2 章　物理化学・分析化学 …… **20**
2.1　キレート滴定（水の硬度測定） …… 20
2.2　液体の密度 …… 23
2.3　液体の粘度 …… 25
2.4　気体の密度 …… 27
2.5　反応速度（一次反応） …… 30
2.6　酸・塩基平衡 …… 33
2.7　反応速度（二次反応） …… 38
2.8　吸　　着 …… 41
2.9　電気化学的分析法 …… 45

第 3 章　無機化学 …… **52**
3.1　炭酸カルシウムの合成 …… 52
3.2　炭酸カルシウムの粒度分布 …… 58
3.3　炭酸カルシウムの比表面積 …… 62
3.4　フェライトの合成 …… 65
3.5　セラミックスの作製と評価 …… 70
3.6　熱重量分析（TGA） …… 75
3.7　熱機械分析（TMA） …… 83

第 4 章　有機化学・高分子化学 …… **87**
4.1　アセトアニリドの合成 …… 87
4.2　*p*–ニトロアニリンの合成 …… 91
4.3　ベンゾイル乳酸エチルの合成 I …… 95
4.4　ベンゾイル乳酸エチルの合成 II …… 98
4.5　ジベンザルアセトンの合成 …… 103
4.6　旋光度測定 …… 106
4.7　ポリエステルの合成 …… 110
4.8　メタクリル酸メチルの蒸留 …… 114
4.9　ポリメタクリル酸メチルの合成 …… 118

4.10　鎖状高分子モデルの統計実験 …… 123
4.11　高分子希薄溶液の粘性 …… 128
4.12　高分子の温度特性 …… 134
4.13　静的粘弾性 …… 137
4.14　ゴム弾性 …… 141
4.15　結晶性高分子材料の結晶化度 …… 144

第 5 章　生物化学 …… 149
5.1　糖質・アミノ酸の定性分析 …… 149
5.2　緩衝液の調製と酵素反応 …… 153
5.3　ブラッドフォード法を用いたタンパク質定量と分光計の取り扱い …… 157
5.4　微生物培養 …… 160
5.5　タンパク質の精製 …… 168
5.6　酵素活性測定 …… 174
5.7　ゲノム DNA の抽出と定量 …… 186
5.8　遺伝子のクローニング …… 189
5.9　プラスミド DNA の抽出と精製 …… 194
5.10　RNA の抽出と 1st ストランド cDNA の合成 …… 197
5.11　特異的なプライマーによる PCR を用いた遺伝子の増幅 …… 200
5.12　プラスミド DNA の制限酵素処理 …… 202
5.13　アガロースゲル電気泳動 …… 204
5.14　DNA フラグメントの抽出と精製（ゲル抽出） …… 206
5.15　ライゲーション …… 208
5.16　シークエンス反応 …… 210
5.17　シークエンス反応物の精製 …… 212
5.18　シークエンス解析 …… 214
5.19　塩基配列のデータベース解析 …… 216

第 6 章　化学工学・機能化学 …… 218
6.1　物質の状態と物性 …… 218
6.2　物質収支 …… 228
6.3　物質分離 …… 235
6.4　流体輸送 …… 240
6.5　ミクロサイズ電気分解による水素の発生とその爆発性の評価 …… 247
6.6　固体高分子形燃料電池による水素 → 電気エネルギー変換 …… 251
6.7　色素増感型太陽電池の作成と評価 …… 256

索　引 …… 262

第1章 化学実験とは

1.1 化学実験の基本

1 化学実験とは

化学は物質とは何かについて理解を深め，また物質はどのように変化するかを明らかにすることを目的とする科学である．化学の追究の過程で，人間は物質を役に立つように変化させることを学び，新しい物質を創造することにもつながってきた．その意味で化学は技術とも結びつきやすい科学である．

「化学物質」というと，工場で人間の手が加えられた物質，というイメージがあるが，人工の物質も天然の物質も，そして生命を形作る物質も，本質的な違いは何もない．

化学についての昔からの知識が整理された教科書的な知識や理解は非常に重要であるが，化学が「モノ」を対象とする科学である以上，実際にモノを見て，いじって，感じる化学実験も，同じように重要である．化学では，物質やその変化を記号で表す．水素と酸素から水ができる反応は次のように表される．

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O \qquad (1.1.1)$$

記号の理解は重要であり，左辺と右辺で原子数が変化していないことを係数の計算からわからなければならない．一方でこれは数学の式ではなく，現実におこる反応を表す式であり，2 種類の気体から液体ができ，反応のさせ方によっては爆発的に進行することもあれば，じわじわと反応させて電気エネルギーに変換することもできるといった，実際の感覚，イメージをもっておくことも大切である．爆発的な反応も電気を作る反応も第 6 章で実験を紹介している．

2 安全に実験を行うために

化学の実験するにあたっては，やはり安全第一である．化学に関して初心者である学生にとっては，まずは，指導してくれるスタッフの指示

に従うことが重要である．その上で，自分から取り組むべきことがらをいくつか挙げておこう．

・実験中は保護メガネをすること．

薬品，特に水酸化ナトリウム等の塩基性物質が眼に入ると失明に至る危険がある．自分が操作していなくても，隣の実験台から薬品が飛んでこないとは限らない．油断しがちで危ないのが，実験後の器具の洗浄時である．洗浄時は液体がはねやすいし，容器を落とす可能性も高い．フラスコに少量のこった試薬がはねてきても大丈夫なように常に保護メガネを着用しておこう．

・白衣，手袋，マスクを着用すること．

薬品から皮膚や洋服を守るため白衣を着用しよう．化学系の白衣は，薬品を被ったり火がついたときに素早く脱げるように袖がルーズなものが多いが，実験台上の器具や薬品に引っ掛けると危ないので気を付けること．また，手に触れてはいけない薬品を取り扱う場合には手袋を着用する，粉体等舞いやすいものを取り扱う際にはマスクを着用するなど，体と薬品が直接接触することのないように気を付けよう．もちろん，液体を量り取るときに，ピペットを口でくわえて吸い込んだりしてはいけない．

・予習が重要．

化学薬品は，それぞれの人体に与える影響，環境に与える影響，反応性など特徴があるので，実験で使う薬品に関して，スタッフからの注意をよく守ること．それに先立って，自分で扱う薬品の性質は自分でも調べておくことも大切である．融点や沸点などの基本的な性質に加えて，安全性，取り扱い上の注意も実験前に調べておこう．

3　環境に配慮した実験

化学実験を行うと，使用済みの薬品や物質がでる．どれをどのように捨てればよいか初心者にはわかりにくい．これもやはり，スタッフの指示に従うことである．特に，スタッフに断り無しに，水道の流しに液体を流してしまってはいけない．

化学系の学科では廃棄される物質ごとに，処理法や処理の委託法が確立されているはずであり，自分が廃棄した物質がどのように処理されるのかも知っていることが望ましい．

4　化学薬品に関する法令

化学実験で扱う可能性のある物質は，いくつかの法律によって，使用・保管・廃棄に関するルールが定められている．それぞれの法律がどのような物質を対象としているか調べてみるとよい．

市販の試薬には様々なラベルが添付されている．図 1.1.1 に示すような，劇物，毒物，危険物などについては，ラベルの表示が法令によって義務づけられている．最近では，それに加えて，GHS が導入され，その物質の危険性等が詳しく表示されるようになっている．GHS というのは，Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals（化学品の分類および表示に関する世界調和システム）という，化学薬品の表示の世界スタンダードである．学生実験では，用いる薬品のラベルをよく読み，表示されている記号の意味等をインターネットで調べてみよう．

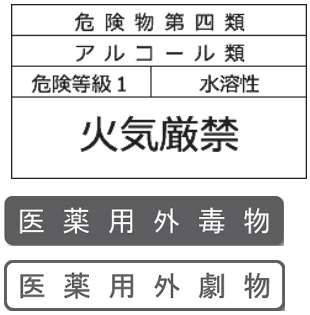


図 1.1.1　化学薬品の容器の表示．

【消防法】

消防法によって「危険物」が定められており，次のように分類され，それぞれ保管方法等が決められている．

第 1 類　酸化性固体
第 2 類　可燃性固体
第 3 類　禁水性物質
第 4 類　引火性物質
第 5 類　自己反応性物質
第 6 類　酸化性液体

【毒物及び劇物取締法】

医薬品や医薬部外品以外で人体に有害な薬品を劇物または毒物と分類している．より少量で危険なものが毒物である．

【医薬品，医療機器等の品質，有効性及び安全性の確保等に関する法律】

医療で用いられる医薬品や，それよりも一般的な医薬部外品が定義されている．

【特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律】（化管法）

この法律は，PRTR 制度と SDS 制度を柱として，事業者（大学を含む）による化学物質の自主的な管理の改善を促進する目的でつくられている．

PRTR（Pollutant Release and Transfer Register）制度は，対象物質の事業所（大学等）から環境へ排出される量，廃棄物に含まれて事業所外へ移動する量を，事業者が自ら把握し国に届け出をし，国が排出量・移動量を集計・公表する制度である．

SDS（Safety Data Sheet）制度は，事業者が対象物質を他の事業者に譲渡・提供する際にその情報を提供するという制度である．以前，MSDS（Material Safety Data Sheet）と呼ばれていたものである．

【遺伝子組換え生物等の使用等の規制による生物の多様性の確保に関する法律】（カルタヘナ法）

国際的に協力して生物の多様性の確保を図るため，遺伝子組換え生物等の使用等の規制に関する措置を講ずることにより，カルタヘナ議定書の的確かつ円滑な実施を確保することを目的として制定された．遺伝子組換え実験を行う際にはルールを守る必要があり，例えば P1，P2 レベルといった適切な拡散防止措置をとった上で実験を実施する必要がある．

ある生物の DNA を別の生物に導入し，遺伝子組換え生物を作成すると，健康や環境に有害な性質を有する場合がある．例えば，病気の原因遺伝子や，毒素を作り出す遺伝子の導入などである．したがって，遺伝子組換え生物の作成を行う場合，導入する DNA（供与核酸）と，その由来する生物（核酸供与体），DNA を導入する生物（宿主）の危険度（実験分類，表 1.1.1）に応じて，漏出を防ぐのに必要な設備と操作（拡散防止措置，表 1.1.2）が定められている．また，特に安全性の高い宿主とベクターの組み合わせ（宿主–ベクター系，表 1.1.3）も指定されている．遺伝子組換え実験を行う場合，用いる核酸供与体，供与核酸，宿主，ベクターの組み合わせ，および必要と判断される拡散防止措置を記載した実験計画書を作成し，実施機関（大学等）の遺伝子組換え安全委員会の承認を得なければならない（機関実験）．危険度が高いと予想さ

表 1.1.1　実験分類：宿主または核酸供与体をその性質．（病原性，伝播性）に応じて分けたもの．

	クラス 1	クラス 2	クラス 3	クラス 4
病原性	なし	低	高	高
伝播性			低	高

クラス 1：大腸菌，パン酵母，動物，植物など
クラス 2：コレラ菌，肝炎ウイルスなど
クラス 3：結核菌，ペスト菌，AIDS ウイルスなど
クラス 4：エボラウイルスなど

表 1.1.2　拡散防止措置．

実験分類	拡散防止措置（微生物使用実験）
クラス 1	P1
クラス 2	P2
クラス 3*	P3

＊宿主がクラス 3 の場合およびクラス 4 は拡散防止措置が定められていない → 大臣確認

表 1.1.3　認定宿主–ベクター系の例．

区分	名称	宿主とベクターの組み合わせ
B1 レベル*1	EK1	*E. coil* K12 株と接合能力のないプラスミドまたはバクテリオファージ
	BS1	*B. subtilis Marburg* 168 株とプラスミドまたはバクテリオファージ
	SC1	*S. cerevisiae* とプラスミド，ミニクロムソーム
B2 レベル*2	EK2	*E. coli* K12 株のうち，特殊な培養条件下以外での生存率を極めて低い株を宿主とし，宿主への依存性が特に高く，他の細胞への伝達性が極めて低いプラスミドまたはバクテリオファージをベクターとするもの

＊1　自然条件下では生存能力が低い宿主と，宿主依存性が高く，他の細胞，微生物に移行しにくいベクターの組み合わせ，または遺伝学的，生理学的および自然条件下での生態学的挙動に基づいて安全性が高いと認められる宿主–ベクター系
＊2　B1 レベルの条件を満たし，かつ自然条件下での生存能力が特に低い宿主と宿主依存性が特に高いベクターを組み合わせた宿主–ベクター系

れる実験は，カルタヘナ法に拡散防止措置が定められておらず，文部科学大臣に申請して，しかるべき拡散防止措置の判断を個別に仰ぐ必要がある（大臣確認実験）．

本書で扱う実験（5.8 節～5.12 節）は，核酸供与体，宿主ともクラス 1 で，B1 宿主–ベクター系を用いており，しかるべき拡散防止措置が P1 レベルの機関実験として承認されている必要がある．P1 レベルの要点は，以下のような内容である．

【施設等】

・通常の生物の実験室等．

【運搬】

・遺伝子組換え生物等が漏出しない構造の容器に入れる．

【その他】

・遺伝子組換え生物等の不活化．
・実験室の扉を閉じておく．
・実験室の窓等の閉鎖等．
・エアロゾルの発生を最小限にとどめる．
・遺伝子組換え生物等の付着・感染防止のための手洗い等．
・関係者以外の者の入室制限（例えば，図 1.1.2 に示すような表示をすることが望ましい）．

図 **1.1.2**　P1 実験室であることを示す掲示の例．

5　実験の安全に関する参考図書

安全に実験を行うために参考になる図書を以下に挙げておく．基本的な知識を身に付けると同時に，様々な事故の事例を知っておくことも必要である．

・『研究室に所属したらすぐ読む　安全化学実験ガイド』研究実験施設・環境安全教育研究会編，講談社．
・『研究のためのセーフティサイエンスガイド—これだけは知っておこう』東京理科大学安全教育企画委員会編，朝倉書店．
・『実験を安全に行うために』化学同人編集部編，化学同人．
・『基礎化学実験安全オリエンテーション』山口和也，山本仁，東京化学同人，DVD 付き．
・『学生のための化学実験安全ガイド』徂徠道夫，山成数明，山本仁，鈴木孝義，山本景祚，斎藤一弥，高橋成人，東京化学同人．
・『化学実験の安全指針』日本化学会編，丸善．
・『実験室の笑える？　笑えない！　事故実例集』田中陵二，松本英之，講談社．
・『バイオ系実験安全オリエンテーション』片倉啓雄，山本仁，東京化学同人，DVD 付き．

・『有機化学実験の事故・危険，事例に学ぶ身の守り方』鈴木仁美，丸善．
・『取り扱い注意試薬ラボガイド』東京化成工業編，講談社．

6　実験ノート

学生実験は，将来，研究・開発者となるためのトレーニングでもある．研究・開発の現場では，実験ノートにきちんと記録することは，実験をすることと同じくらい重要である．

実験ノートの基本は，いつ，何をして，どうなったか，ということが，自分が後から見ても，そして他人が見てもわかること，それを見て実験が再現できること，また，もし再現できなかった場合には，原因となる可能性のある操作や観察事項が記録されていることである．

また，実験ノートは，記録された年月日にその実験が行われて，記録されている結果が得られたことの証拠としても採用される．そのため，後で書きかえられないように，鉛筆ではなくボールペンを使って詰めて書く．

実験ノートには，一方で読みやすく正確な記録が必要であるということと，他方で気づいたことは何でも記録することが望ましいという，相反する要求がある．これを解決するには，例えば，左のページは様々なメモに利用し，右のページにはきちんと記録するというような工夫をするとよい．また，ノートの最初の 2 ページくらいは空けておいて，その実験ノートの目次に当てるとよい．

7　実験レポート

学生実験の実験レポートを書く目的は，行った実験，得られた結果，そこから明らかになったこと，考察などを，自分自身でも整理し，他人にも理解できるように論理立ててまとめる能力を養成することであり，将来，科学論文や開発報告書などを書くためのトレーニングをすることでもある．それぞれの学科によって，書式のローカルルールがあると思うので，それは指導者に従ってもらうとして，ここでは科学論文に共通の事項についてまとめておこう．

一般に，論文の構成は，以下の①から⑧のようになっている場合が多い．それぞれについてポイントをまとめておこう．

①　タイトル

タイトルは論文の最も短い要旨である．論文の主旨を簡潔に表す．

②　氏名，所属

科学論文の場合は，大学名，学部名や住所等を書くが，学生実験の場合は，学生番号や実験の班名を書くことになるだろう．

③　要旨

緒言，実験，結果と考察，結論をすべて含んだ簡潔なまとめ．

④　緒言

その論文に書いた研究，実験で何を行ったかを読者にわかってもらうことが緒言の役割である．そのために，なぜそれを行ったかの目的を記す．またそのために，なぜその目的に行き着いたかの背景を説明する．通常はこれを順序立てて，背景 → 目的 → 内容の順に論理的に示す．背景は参考文献を適宜引用しつつ説明する．

緒言の構成

○○という背景がある．

→ そのために，○○を目的とした．

→ そこで本研究（実験）では，○○を行った．

⑤　実験

その分野の知識のある人が読んだ場合に実験が再現できるよう行った実験操作，使った材料等を書く．

⑥　結果と考察

結果と考察を別々に分けて書く場合もある．「結果」では，どのような結果が得られたかを説明する．その方がわかりやすい場合には図や表にまとめて示す．その場合にも，「結果は図に示す」で終わってはいけない．文章でその図や表のデータをどのように読んで解釈したか，説明が必要である．「考察」では，得られた結果は，それまでに知られている知識と照らし合わせてどういう位置づけになるか，文献を引用するなどして，議論する．また，得られた結果からどのようなことがいえるか，どのように研究目的につながるのか議論する．

⑦　結論

実験，結果と考察を踏まえ，結論をまとめる．緒言に記した目的と対応していることが必要である．

⑧　参考文献

引用した，または参考にした文献のリスト．引用論文なら，著者，雑誌名，年，巻，ページを記す．書籍を引用した場合には，著者，本のタイトル，編者，出版社，発行年，ページを記す．

1.2 実験データ

1 物理量

長さ，質量，温度，物質量など，数字を使って表される物理的に意味のある量を物理量という．物理量は数値と単位のかけ算で表される．例えば，1 m は 1 × m，1 g は 1 × g，1 mol は 1 × mol である．そして単位も数値と同じように，かけ算や割り算ができる．これを理解していると，複雑な単位の換算でも迷わずにできる．

$$\text{物理量} = \text{数値} \times \text{単位} \tag{1.2.1}$$

モル質量 180 g mol^{-1} のグルコース 270 g の物質量 (mol) は，単位も割り算ができることに注意して，結果が mol になるように機械的に分母と分子にこれらの量を並べればよい．

$$\frac{270\,\cancel{\mathrm{g}}}{180\,\frac{\cancel{\mathrm{g}}}{\mathrm{mol}}} = 1.50\ \mathrm{mol} \tag{1.2.2}$$

単位の換算も機械的にできる．モル質量 180 g mol^{-1} のグルコース 270 mg の物質量は，1000 mg = 1 g，1000 mmol = 1 mol の関係から，

$$\begin{aligned} &1000\ \mathrm{mg} = 1\ \mathrm{g} \rightarrow \mathrm{mg} = \frac{1}{1000}\ \mathrm{g} \\ &\text{および } 1000\ \mathrm{mmol} = 1\ \mathrm{mol} \rightarrow \mathrm{mmol} = \frac{1}{1000}\ \mathrm{mol} \end{aligned} \tag{1.2.3}$$

を代入して，

$$\frac{270\ \mathrm{mg}}{180\,\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}} = \frac{270 \times \frac{1}{1000}\,\cancel{\mathrm{g}}}{180\,\frac{\cancel{\mathrm{g}}}{\mathrm{mol}}} = 1.50 \times \frac{1}{1000}\ \mathrm{mol} = 1.50\ \mathrm{mmol} \tag{1.2.4}$$

2 測定値と有効数字

ある物質の質量を天秤で 5 回繰り返し測定したところ，

$$0.025\ \mathrm{g},\ 0.024\ \mathrm{g},\ 0.025\ \mathrm{g},\ 0.026\ \mathrm{g},\ 0.026\ \mathrm{g}$$

であったとしよう．この物質の質量は，0.025 g 程度であろうと思われるが，一般に測定値はこのように毎回ばらつくものであり，真の値はわからない．どこまで正確に値を求めなければならないかは，実験の目的次第である．

測定値がおよそこの程度までは正しいだろうという目安に，有効数字というものがある．上記の物質の質量は 0.025 g として，最後の桁の 5 は不確かさを含むだろうと考えられるので，この値の有効数字は 2 桁，小数点以下第 3 位までである．この物質を溶媒に溶かして 10.0 mL の溶液を作ったとしよう．10.0 mL は有効数字 3 桁，小数点以下第 1 位までである．この溶液の濃度は，

$$\frac{0.025}{10.0}\frac{\mathrm{mmol}}{\mathrm{mL}}$$

であるが，有効数字はどうなるであろうか．0.025 は，最後の数字が不確かなので，0.026 かもしれないし，0.024 かもしれない．10.0 は，最後の数字が不確かなので，10.1 かもしれないし，9.9 かもしれない．そこでこれらの値だったときに結果がどうなるか計算してみよう．

$$\begin{aligned}\frac{0.026}{10.1} &= 0.00257\cdots, \quad \frac{0.026}{9.9} = 0.00262\cdots,\\ \frac{0.024}{10.1} &= 0.00237\cdots, \quad \frac{0.024}{9.9} = 0.00242\cdots\end{aligned} \tag{1.2.5}$$

これらの数値は 0 でない数の上から 2 桁目でばらつくことがわかる．したがって，この 2 桁目が最後の数字になるように，

$$\frac{0.025}{10.0}\frac{\mathrm{mmol}}{\mathrm{mL}} = 0.00025\frac{\mathrm{mmol}}{\mathrm{mL}} = 0.25\ \mathrm{mmol\ L^{-1}} \tag{1.2.6}$$

と記すのが適切である．一般にかけ算や割り算の結果の有効数字は，もとの数値の有効数字の桁数の少ない方（今の場合は，0.025 が 2 桁で 10.0 が 3 桁なので，少ない方の 2 桁）と同じになる．

次の例を考えよう．0.025 g の物質をフラスコに入れてフラスコごと質量を量ったら，210.5 g となった．最後の桁の 5 が不確かである．さて，フラスコだけの質量は何 g だろうか．フラスコの質量を求める式は，

$$210.5\ \mathrm{g} - 0.025\ \mathrm{g} \tag{1.2.7}$$

となるが，また，不確かな桁を確かめよう．0.025 は，最後の数字が不確かなので，0.026 かもしれないし，0.024 かもしれない．一方，210.5 は 210.6 かもしれないし，210.4 かもしれない．

$$\begin{aligned}&210.6 - 0.026 = 210.574, \quad 210.6 - 0.024 = 210.576\\ &210.4 - 0.026 = 210.374, \quad 210.4 - 0.024 = 210.376\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

小数点以下第 1 位でばらついている．したがって，小数点以下第 1 位が最後の数字になるように記して，

$$210.5\ \mathrm{g} - 0.025\ \mathrm{g} = 210.5\ \mathrm{g} \tag{1.2.9}$$

と表されるのが適切である．一般に足し算と引き算の結果の有効数字は，もとの数値の有効数字の大きな方の位（くらい）（今の場合は 201.5 の 0.1 の位）までとなる．

測定値に関して，有効数字による取り扱いは目安であって，厳密には統計学的に取り扱うべきものであることを記憶しておこう．実験データの取り扱いに関して『実験データを正しく扱うために』（化学同人編集部編，化学同人）を推薦しておこう．

3　最小二乗法

いくつかの温度 T における，ある物質の体積 V を求める実験を行い，それぞれの温度での体積のデータが得られたとして，この物質の温度と体積の関係はどのようになっているかを知りたいとしよう．

データは数値ではわかりにくいので，このような場合はまず，横軸に温度，縦軸に体積をとったグラフをつくってみるとよい．

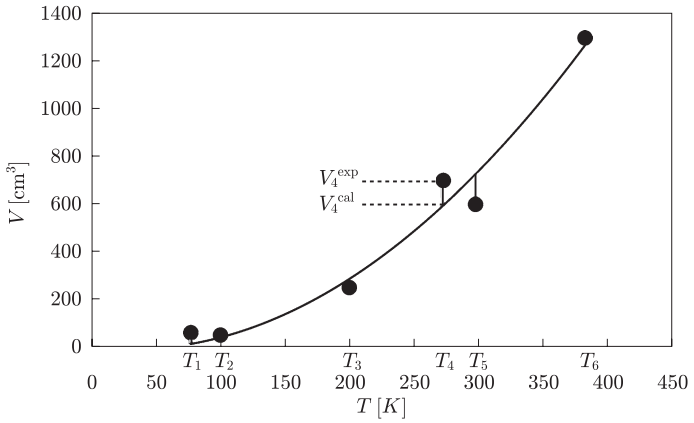


図 1.2.1　最小二乗法．実験値と計算値の差の二乗 $(V_i^{\mathrm{exp}} - V_i^{\mathrm{cal}})^2$ の $i = 1, 2, \cdots, 6$ の和を最少にする．黒丸が実験値，曲線が計算結果．

図 1.2.1 に示したグラフ中の黒丸が実験結果である．体積 V は温度 T に対して二次の関係にあるように見え，温度ゼロで体積がゼロにむかっているように見える．そこで，$V = aT^2$ の関係を仮定しよう．a の値はまだわからないが，こう仮定すると，それぞれの温度 T_i における体積 V_i の計算値は $V_i^{\mathrm{cal}} = aT_i^2$ と表すことができる．

それぞれの温度で実験値 V_i^{exp} と計算値 V_i^{cal} の差の二乗 $(V_i^{\mathrm{exp}} - V_i^{\mathrm{cal}})^2$ をとり，すべての i についてこの和をとる．

$$s = \sum_{i=1}^{6} (V_i^{\mathrm{exp}} - V_i^{\mathrm{cal}})^2 = \sum_{i=1}^{6} (V_i^{\mathrm{exp}} - aT_i^2)^2 \tag{1.2.10}$$