

目 次

1. 試薬の純度と濃度の表示	1
1.1 いろいろな純度とその表示	1
1.2 濃度の表示	5
1.3 試薬カタログの純度表示	5
2. 主要な有機溶媒	7
2.1 溶媒の精製法	7
2.2 有機溶媒の極性指標	26
2.3 共沸混合系	30
3. 固体の融点	32
3.1 融点測定器による固体の融点の測定	32
3.1.1 シリコーン油浴型融点測定器による測定	33
3.1.2 偏光顕微鏡型融点測定器による測定	34
3.1.3 融点測定用標準物質	35
3.2 多形現象と融点	35
3.2.1 結晶多形と融点	35
3.2.2 1次相転移と2次相転移	36
3.2.3 相図	38
3.2.4 二重融解挙動	38
3.2.5 二重融解挙動を体験できる標準物質	41
3.3 結晶多形と共融点	41
3.3.1 多形をとまなう2成分系の相図： 複数の共融点が観測される原因1	41
3.3.2 付加化合物（分子間化合物）を形成する2成分系の相図： 複数の共融点が観測される原因2	44

3.4	溶液相転移と準安定多形の作り方	44
3.4.1	溶液相転移	44
3.4.2	準安定多形の作り方	45
3.5	2つの試料が同一化合物の多形かどうかの確認法	46
4.	冷却・加熱	48
4.1	氷浴冷却浴	48
4.2	ドライアイス・液体窒素冷却浴	48
4.3	加熱浴	50
5.	乾 燥	52
5.1	液体の乾燥法と乾燥剤	52
5.1.1	液体の乾燥法	52
5.1.2	乾燥剤	53
5.2	デシケーター用乾燥剤と乾燥能力（固体の乾燥法）	54
5.3	気体の乾燥法	55
5.4	モレキュラーシーブ	56
6.	酸・塩 基	57
6.1	有機化合物と無機化合物の酸・塩基強度	57
6.2	超強酸・超強塩基	59
6.3	緩衝液	63
6.4	溶解度	63
7.	元素の同位体	64
7.1	密封線源用放射性同位体	65
7.2	市販の重水素溶媒と保存取扱法	66
7.3	市販の安定同位体化合物	67
8.	化学結合	69
8.1	ファンデルワールス半径とイオン半径	69

8.2	原子間距離と原子価角	71
8.3	結合の引っ張りばね定数と原子価角の曲げばね定数	74
8.4	回転の障壁エネルギー	75
8.5	結合や環の歪エネルギー	76
8.6	結合や原子団の双極子モーメント	77
8.7	芳香族性と共鳴エネルギーおよび非局在化エネルギー	79
9.	反応速度論	81
9.1	反応速度式	81
9.2	アレニウスの式	85
9.3	アイリングの式	87
9.4	拡散律速速度式	89
9.5	ハメットの式とハメット定数	91
9.6	同位体効果	93
10.	光化学と光学活性	97
10.1	ジャブロンスキーエネルギー状態図	97
10.1.1	ジャブロンスキーエネルギー状態図	97
10.1.2	量子収率	98
10.2	一重項および三重項増感剤	99
10.2.1	一重項増感剤	99
10.2.2	三重項増感剤	99
10.2.3	増感剤の選択	101
10.2.4	増感剤一覧表	101
10.3	光学活性表示と旋光度測定	101
10.3.1	光学活性体の表示法	101
10.3.2	旋光度測定	105
11.	電気化学	109
11.1	はじめに	109
11.2	標準電極電位	109

11.2.1	電極電位	109
11.2.2	基準電極	110
11.2.3	電極を3本使う計測	111
11.2.4	標準電極電位 E°	111
11.2.5	E° データの活用	112
11.2.6	式量電位	115
11.2.7	ネルンストの式	115
11.3	ボルタンメトリー	116
11.3.1	装置・溶液	117
11.3.2	バックグラウンド測定	118
11.3.3	反応物の測定	119
11.3.4	ボルタモグラムの解剖	119
11.3.5	ボルタモグラムから得られる情報	121
11.3.6	実例：フェロセンのボルタンメトリー	121
12.	クロマトグラフィー	124
12.1	カラムクロマトグラフィー用充填剤（保持力調整法）	124
12.2	移動層と溶出力	128
12.3	HPLC 充填カラム一覧	130
12.4	HPLC 移動相用溶媒と選択法	132
12.5	SEC と分子量標準物質	133
13.	計算化学	136
13.1	分子軌道法の分類	136
13.2	分子軌道法関連ソフトウェア	139
13.3	PPP 分子軌道法プログラム (PPP-PC Ver. 2.0) の使い方	142
13.3.1	プログラムのインストール	143
13.3.2	開始画面	144
13.3.3	分子骨格の入力	144
13.3.4	置換基の導入	149
13.3.5	座標ファイルの保存	150

13.3.6	計算用ファイルの作成と保存	150
13.3.7	PPP 分子軌道法計算の実行	154
13.3.8	計算結果の図示	160
14.	化学研究用データをどう探すか	161
14.1	原点は個々の研究者のデータ整理	161
14.2	情報の種類	162
14.3	3次情報の調べ方	162
14.4	2次情報の調べ方	163
14.5	1次情報の調べ方	163
15.	実験データの統計処理	165
15.1	実験データはどのように表示すべきか	165
15.1.1	計測結果の数値による表し方と誤差	165
15.1.2	誤差の種類と実験データの扱い方	167
15.2	測定データの誤差解析	170
15.2.1	最良推定値と偶然誤差の推定	170
15.2.2	誤差の伝播	173
15.2.3	エラーバーはどのようにつけたらよいか	176
15.3	統計的手法によるデータ解析と実験計画	178
15.3.1	統計手法によるデータ整理	179
15.3.2	誤差解析と実験計画	181
索 引		183