

確率できまる化学的平衡状態

—第4回数学教材研究会での話—

丸山 耕一

Chemical equilibrium state determined by thermodynamic probability

Koh-ichi MARUYAMA

(平成24年12月12日受理)

One of the theme in 4th meeting of Mathematics teaching-materials study group of Akita National College of Technology is presented in this paper. The concept of chemical equilibrium is introduced to the portion of the lesson (inorganic chemical engineering) of the department of the applied chemistry, from the viewpoints of statistical thermodynamics. All molecules reach an equilibrium state by a chemical reaction. The state seems to be correctly determined by chance like the state of the card from a box. Unlike the problem of a card, a natural phenomenon is dependent on temperature. The importance of cooperation with mathematics and technical knowledge will be discussed by use of this problem.

Keywords : cooperation between subjects, mathematics, material science, equilibrium state, thermodynamic probability, Boltzmann distribution

1. はじめに

物質工学・材料工学分野の全国高専からは、化学産業、電子産業、バイオ・医療産業に技術者の卵を排出している。最先端技術に対応するために、高専の基礎工学教育では、実験・実習を通じた専門概念・技術の習得が重視されている。一方で、技術を創造するための基礎的概念を座学で習得することも重要である。秋田高専の物質工学科では、物質や生体の機能を化学概念からアプローチして認識し、それを技術へ応用する能力・技能を養成する専門教育を行っている。本科5年間で、分析化学、物理化学の基礎概念から出発して、無機化学、有機化学、生物化学等の専門科目へ接続され、さらには各種材料の各論へのアプローチとするカリキュラムである。

物質や材料の特性を理解するには、化学概念と物理学概念からのアプローチの2面性がある。しかしながら、これらの概念は厳密に差別化されるものではなく、一体化しているという認識のほうが正しい。多結晶膜の組織は熱力学的な相平衡によってきまり、電子のスピンはフェルミ粒子の集団的な挙動

からきまる。これらの例が示すように、物質・材料のマクロな性質もミクロな性質も、熱力学的な平衡状態で記述できると考えることができる。

すなわち、固体の性質は、熱力学的な状態量によって記述できる。状態量は、固体の微視的性質、すなわち、分子や原子、その性質をきめる電子の挙動を意識せずとも、実験室で観測できる量である。この物理量を、電子の集団的挙動から説明するのが、統計熱理論である。電子の状態は、量子論で記述される。以上を整理すると、化学概念に登場する熱力学諸量は、物理学理論によって保証されている、といえる。物理学は、単純化されたモデルを数学的に表現し、自然現象を整然化している。

著者は、秋田高専物質工学科の5年生に対して、熱力学諸量の物理学モデルからの導入と、この概念を化学反応の平衡、固体の熱的性質、半導体の電気伝導性の理論へと応用した内容の講義を行っている。これを、最先端物質工学の概論、あるいは、物質のミクロな機構の制御概念（物質工学におけるメカトロニクス）と位置づけている。この中で、化学平衡は、化学概念の基礎的、必須概念であり、一方で、

数学の確率理論から説明できるため、初学者、異分野の人にも比較的なじみ易い。本報では、この内容に限定して、講義内容の概要に加え、数学教材研究会の講演にて発表した、数学と物理学と化学と工学の接点を議論した内容を、整理して報告する。

2. 化学変化を確率で記述できる

化学変化では通常、非平衡状態から平衡状態に変化する。非平衡状態は変化する傾向のある状態、平衡状態は自身では変化できない（と見える）状態である。たとえば、水素と重水素の同位体交換反応を考える。水素 4mol と重水素 1mol を混ぜるとどのような平衡状態に到達するかは、確率だけで決まってしまう。

原子 1mol を 1 個と数えることにする。箱の中に、水素原子が 8 個と重水素原子が 2 個入っている。この中から任意に 2 個の原子を取り出し、それが水素 2 個であれば、水素 (H_2) 分子、重水素 2 個であれば、 D_2 分子、水素と重水素であれば HD 分子と这样に考えればよい。この現象は、箱の中に入っている 2 種類のカードを取り出す確率が同様に確からしいという数学の問題に帰着される。

赤色カード 8 枚と白色カード 2 枚が入った箱 (図 1) から 2 枚のカードを取り出したとき、2 枚とも赤色カードを取り出す確率は、数学では、 $8/10 \times 7/9 (=28/45)$ である。これはまた、2 枚の白色カードを取り出す確率に等しい。同様に、箱の中から水素原子、重水素を取り出す確率をそれぞれ $P(H)$ 、

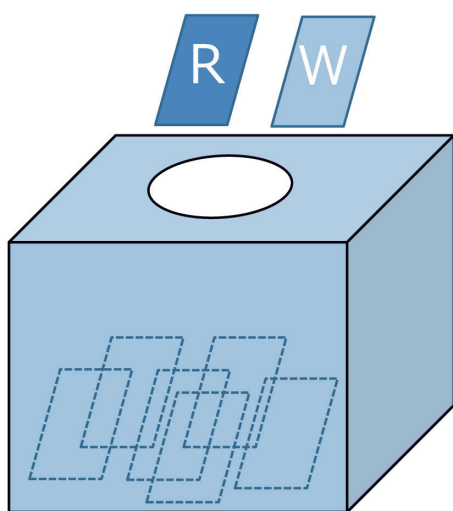


図 1 箱の中に10枚のカード(赤色か白色)が入っている。無作為に2枚のカードを取り出す。図では、赤色と白色のカードが1枚ずつ取りだされた状態を表している。

$P(D)$ とする。また、2 個取り出した原子が結合して、水素分子となる確率を $P(H_2)$ 、同様に、 $P(D_2)$ 、 $P(HD)$ を定義する。このとき、

$$P(H_2) = \frac{8}{10} \times \frac{7}{9} \approx \frac{8}{10} \times \frac{8}{10} = P(H) \times P(H) \quad \cdots (1)$$

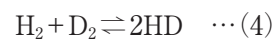
である。カードと原子の問題には、カードの枚数と原子の物質質量 (モル数) の違いがあり、後者の方が桁違いに数が多い。原子 1mol は 6.02×10^{23} 個であるので、式 (1) 中の近似は問題なく許容される。同様に考えれば、

$$P(D_2) \approx P(D) \times P(D) \quad \cdots (2)$$

$$P(HD) \approx 1 - \{P(H_2) + P(D_2)\} \quad \cdots (3)$$

と計算できる。ここでは、数学的には、確率における AND 演算、OR 演算、余事象の考え方を知っている必要がある。箱の中には合計 10mol の原子が入っているので、これらを任意に取り出して (二原子) 分子とすると、分子は 5mol ($=N_{\text{all}}$) できるはずである。 N_{all} と、式 (1) から (3) で求めた値を用いれば、各分子の個数 (モル数) が得られる。すなわち、これらの分子の個数が数学的には最確分布である。

化学平衡は、トランプカードを例にすると、イメージがつかみやすい。買ったばかりのため、ハート、ダイヤ、スペード、エースが順序良く上から数の順番で並んでいる。このカードをよくきり続けるとやがてランダムな順番になる。ある程度きれば、そのカードを使ってゲームを開始しても誰も不満を言わなくなる。このきり続けられている状態が化学変化の終焉の状態、すなわち、平衡状態だといえる。化学反応式で書けば、



である。この平衡反応は、水素原子と重水素原子が結合して分子を形成する反応 (右反応) と、結合した分子が離れて水素分子と重水素分子に戻る反応 (左反応) とが等しい速度で起きているため、見かけ上、変化していない状態を表している。

3. 状態数とエントロピー

化学平衡は、“エントロピーが最大の状態”といえる。通常、化学熱力学では、エントロピー σ は乱雑さを表す量だと定義される。しかし、この意味はわかりにくい。 σ は状態量 W によって定義される。

表1 3個のエネルギー量子が3個の粒子（#1～#3）に分配される場合のされ方。

case	#1	#2	#3
1	3	0	0
2	0	3	0
3	0	0	3
4	2	1	0
5	1	2	0
6	0	1	2
7	0	2	1
8	2	0	1
9	1	0	2
10	1	1	1

すなわち,

$$\sigma \equiv \ln W \quad \dots(5)$$

である。化学反応は、原子や分子という粒子と熱エネルギーの相互作用である。したがって、反応によって発熱や吸熱する。量子論によると、粒子のもつエネルギーは量子化されている。すなわち、連続的ではなく離散的な値をもつ。3個の粒子に、最大3個のエネルギー量子を与えることができる系を考える。エネルギー量子1個分の値をEとすると、ある粒子のエネルギーは、0, E, 2E, 3Eの4通りある。3個の粒子に対するエネルギー分布は表1に示すように、10通りある。これを粒子の全状態数 ($W_{\text{all}}=10$) という。この10通りは、次の3種類の分布に場合分けできる。

分布A：1個の粒子のみが3個のエネルギー量子をもつ場合、

分布B：1個の粒子が2個のエネルギー量子をもち、1個の粒子が1個のエネルギー量子をもつ場合、

分布C：3個の粒子が各々1個のエネルギー量子をもつ場合、

である。これらの場合の状態数をそれぞれ、 W_A , W_B , W_C とすれば、これらの値は表1から明らかである。したがって、分布Bとなる確率 P_B は、 $W_B/W_{\text{all}}=6/10$ となり、分布Bが最確分布である。最確分布に対する他の分布の相対的な確率、例えば、任意の分布Xに対して、

$$\begin{aligned} P_X/P_B &= (W_X/W_{\text{all}}) \times (W_B/W_{\text{all}}) \\ &= W_X/W_B \quad \dots(6) \end{aligned}$$

となり、各分布の状態数さえわかれば、全状態数は必ずしも必要でない。これは、分子のようなモル数

単位での化学変化を考える場合にはとくに有効である。また、このため状態数 W は熱力学的確率とも呼ばれる。数学で学ぶ相対確率という概念が役立つ例である。

4. 化学平衡とボルツマン分布

全宇宙は、着目する系と外界とから構成され、2つの系、あるいは系と外界の境界では、エネルギーまたは粒子が交換される。ある系がエネルギーのみを接触する別の系（または外界）と交換する場合は閉鎖系、また、このような接触を熱的接触と呼ぶ。エネルギーと粒子を交換する場合は開放系、拡散的接触と呼ぶ。熱浴と系のエネルギーと粒子の配置図を図2に示す。化学変化において、質量保存の法則が成立することから、閉鎖系を考えればよいことがわかる。

初めに、系1と系2とが熱的接触した場合を考える。各系のエネルギーを U_1 , U_2 、状態数を W_1 , W_2 とすると、全エネルギー U と全状態数 W は、

$$U = U_1 + U_2 \quad \dots(7)$$

$$W = W_1(U_1) \times W_2(U_2) \quad \dots(8)$$

である。系1と系2とが接触してから平衡状態に終焉するまでに交換したエネルギーの大きさ dU と、平衡状態でのエントロピーの大きさから、

$$dU = dU_1 + dU_2 = 0 \quad \dots(9)$$

$$dW = \left(\frac{\partial W_1}{\partial U_1} dU_1 \right) W_2 + \left(\frac{\partial W_2}{\partial U_2} dU_2 \right) W_1 = 0 \quad \dots(10)$$

となる。式(5)、式(9)を用いて、式(10)を計算し

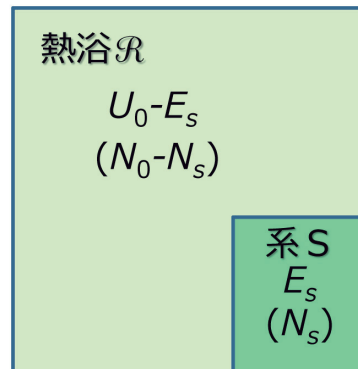


図2 熱浴（外界）と熱的接触をした系（閉鎖系）ではエネルギーを、熱浴と拡散的接触をした系（開放系）では、エネルギーと粒子を、それぞれ交換できる。化学反応は、通常閉鎖系での出来事である。

ていくと、

$$\frac{\partial \sigma_1}{\partial U_1} = \frac{\partial \sigma_2}{\partial U_2} \quad \dots (11)$$

となり、これが熱的平衡条件である。ここで、

$$\frac{1}{T_n} \equiv k_B \left(\frac{\partial \sigma_n}{\partial U_n} \right)_{N,V} \quad \dots (12)$$

と定義される量が、絶対温度であり、平衡状態では、 $T_1 = T_2$ である。ここで、式(12)は、粒子数 (N)、体積 (V) が一定の変化であることを示している。

我々は通常、ビーカーの中（着目する系 S ）で起こる化学反応を、熱的接触する外界（熱浴 R ともいう）から観察する。系 S のエネルギーを E_S のとき、熱浴 R のエネルギーと状態数を、 $U (= U_0 - E_S)$ 、 W_R とする。ここで、全系のエネルギー U_0 は一定値であり、 $U_0 \gg E_S$ である。このとき、熱浴 R のエントロピー σ_S は、

$$\begin{aligned} \sigma_S(U) &= \sigma_S(U_0 - E_S) \\ &= \sigma_S(U_0) + \frac{U - U_0}{1!} \left[\frac{\partial \sigma_S}{\partial U} \right]_{U=U_0} \\ &\quad + \frac{(U - U_0)^2}{2!} \left[\frac{\partial^2 \sigma_S}{\partial U^2} \right]_{U=U_0} + \dots \quad \dots (13) \end{aligned}$$

と、 $U = U_0$ のまわりでテイラー展開できる。式(13)の2階微分の項以降は無視し、式(12)を用いると、

$$\sigma_S(U_0 - E_S) = \sigma_S(U_0) - \frac{E_S}{k_B T_S} \quad \dots (14)$$

となる。系 S のエネルギーが、 E_1 、 E_2 となる確率、 $P(E_1)$ 、 $P(E_2)$ は、熱浴 R のエネルギーがそれぞれ $U_0 - E_1$ 、 $U_0 - E_2$ となる確率に等しい。式(6)で考えた、相対的確率は、

$$\begin{aligned} \frac{P(E_2)}{P(E_1)} &= \frac{W(E_2)}{W(E_1)} \\ &= \frac{\exp(\sigma_2)}{\exp(\sigma_1)} = \frac{\exp\left[\sigma_2(U_0) - \frac{E_2}{k_B T}\right]}{\exp\left[\sigma_1(U_0) - \frac{E_1}{k_B T}\right]} \\ &= \frac{\exp\left[-\frac{E_2}{k_B T}\right]}{\exp\left[-\frac{E_1}{k_B T}\right]} \quad \dots (15) \end{aligned}$$

となる。ここで、熱浴 R の絶対温度 T は、系 S のエネルギーに関係なく $T = T_1 = T_2$ とした。式(15)の右辺の $\exp(-E_S/k_B T)$ をボルツマン因子といい、熱力学的確率から得た値であることがわかる。すなわち、系のエネルギーは、熱浴がどのような状態数をもつかの確率によって定まることをいっている。

5. 平衡定数の温度依存性

式(4)の化学反応を例に、平衡定数 K を定義すると、

$$K = \frac{[HD]^2}{[H_2]^1 [D_2]^1} \quad \dots (16)$$

である。すなわち、化学反応式の左辺と右辺のモル濃度 (mol/l) と係数とで定義される。式(16)を用いて、2節で考えた問題を解くと、

$$\begin{aligned} K &= \frac{[N_{\text{all}} \times P_{HD}/V]^2}{[N_{\text{all}} \times P_{H_2}/V]^1 [N_{\text{all}} \times P_{D_2}/V]^1} = \frac{[P_{HD}]^2}{[P_{H_2}]^1 [P_{D_2}]^1} \\ &\approx \frac{\left(\frac{8}{10} \times \frac{2}{10} + \frac{2}{10} \times \frac{8}{10}\right)^2}{\left(\frac{8}{10} \times \frac{8}{10}\right) \times \left(\frac{2}{10} \times \frac{2}{10}\right)} = 4 \quad \dots (17) \end{aligned}$$

である。この値は25℃における実測値 $K = 3.2$ に近い値になっている。

平衡定数の温度依存性に着目する。このために、もう少し単純なモデルを考える。

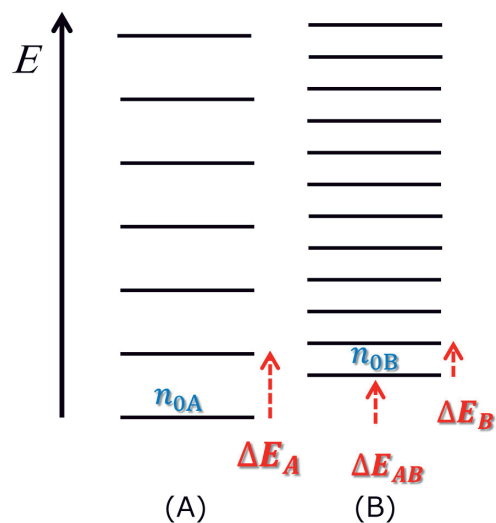


図3 異性化反応 $A \rightleftharpoons B$ のそれぞれの分子の基底状態と励起状態のエネルギー準位図。各々の分子のエネルギー準位は等間隔 (ΔE_A 、 ΔE_B) であり、両分子の基底状態のエネルギー差は、 ΔE_{AB} である。

異性化反応 ($A \rightleftharpoons B$) の分子 A と B のエネルギー準位図を図 3 に示す。A の基底準位のエネルギーは B のそれよりも低い。エネルギー準位の間隔は、A も B もそれぞれで等しいが、B の準位の間隔は A のその 1/2 である。仮に、A と B の分子の個数 (n_A, n_B) の合計が 5 千万個あるとする。200K では、 $K = [A]/[B] = n_A/n_B = 0.19$ だった。(今はこの値自体は議論しない。) 絶対零度では、すべての分子は基底準位を占有するため、 $K=0$ である。絶対零度以外では、分子は B が A のより高いレベルのエネルギー準位を占有するようになる。したがって、絶対零度から温度が上昇するほど、A の基底準位を占有する分子は減少し、A と B の同レベルの準位を占有する分子数が同じ数であることから、結果的に B の分子が増大することがわかる。

式(4) の平衡反応を、温度を考慮しないモデル ($K=4$) と自然現象 (25°C で $K=3.2$) の違いが、ここで明らかとなった。前者は、 H_2, D_2, HD のどの分子の基底状態とよりエネルギーレベルの高い準位 (励起準位) のどの準位にも、分子は等確率で存在できるというモデルである。これに対して、後者の自然現象は、分子はなるべくエネルギーレベルの低い準位を占有しようとする確率が高い現象といえる。この確率を決定するのが、前節で説明したボルツマン分布である。

平衡定数 K の温度依存性を定量的に表現する前に、全粒子数 (n) と基底状態を占有する粒子数 (n_0) の関係を導く。準位 i を占有する粒子数を n_i とすると、隣り合う準位での粒子数の比 ($\equiv x$) は、式(15) を用いて、

$$\frac{n_{i+1}}{n_i} = \frac{\exp\left[-\frac{E_{i+1}}{k_B T}\right]}{\exp\left[-\frac{E_i}{k_B T}\right]} = \exp\left[-\frac{E_{i+1}-E_i}{k_B T}\right] = \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right] \equiv x \quad \dots(18)$$

である。ここで、 ΔE は、準位間のエネルギー差である。このとき、

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{n_i}{n_{i-1}} \times \frac{n_{i-1}}{n_{i-2}} \times \dots \times \frac{n_2}{n_1} \times \frac{n_1}{n_0} = x^i \quad \dots(19)$$

$$n = n_0 + n_1 + n_2 + \dots + n_i + \dots = n_0(1 + x + x^2 + x^3 + \dots) \quad \dots(20)$$

である。今、基底状態に無い粒子数 ($n - n_0$) と全粒子数の比を考えると、

$$\frac{n - n_0}{n} = \frac{n_1(1 + x + x^2 + x^3 + \dots)}{n_0(1 + x + x^2 + x^3 + \dots)} = \frac{n_1}{n_0}$$

$$\therefore n - n_0 = \frac{n_1}{n_0} \times n \quad \dots(21)$$

となる。ここで、式(18) を用いると、

$$n_0 = n \left[1 - \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right] \right] \quad \dots(22)$$

となり、全粒子数 (n) と基底状態を占有する粒子数 (n_0) の比較的単純な関係式が得られる。

再び、 $A \rightleftharpoons B$ の異性化反応の問題に戻る。ある温度 (T) での平衡定数を求める。分子 A と分子 B の個数をそれぞれ n_A, n_B とする。また、それぞれの基底状態を占有する分子の個数を、 n_{0A}, n_{0B} とすると、式(22) と式(18) を用いると、

$$n_{0A} = n_A \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{k_B T}\right) \right] \quad \dots(23.1)$$

$$n_{0B} = n_B \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_B}{k_B T}\right) \right] \quad \dots(23.2)$$

$$\frac{n_{0B}}{n_{0A}} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right) \quad \dots(23.3)$$

である。ここで、分子 A の隣り合う準位のエネルギー差、分子 B のそれをそれぞれ $\Delta E_A, \Delta E_B$ とし、両分子の基底状態のエネルギー差を ΔE_{AB} とした。式(23) を用いると、平衡定数 K は、

$$K \equiv \frac{n_B}{n_A} = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_B}{k_B T}\right)} \times \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right) \quad \dots(24)$$

と定量的に表現される。式(24) は、分子 A と分子

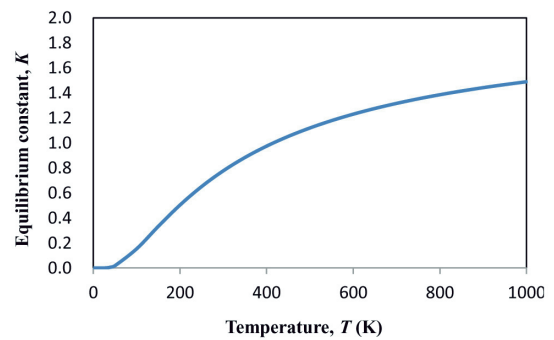


図 4 $A \rightleftharpoons B$ の異性化反応の平衡定数の計算値。 $\Delta E_{AB} = \Delta E_B = \Delta E_A/2$, $\Delta E_{AB}/k_B = 2 \times 10^2$ として計算した。 K は単調増加し、より高温では 2 に漸近する。

Bの個数は、エネルギー準位の間隔によって、基底状態以外を占有する分子の存在が確率的にきまるところに起因することを示している。

最後に、式(24)を用いて平衡定数の温度依存性を描画したものを図4に示す。ここでは、 $\Delta E_{AB} = \Delta E_B = \Delta E_A/2$ とし、 $\Delta E_{AB}/k_B = 2 \times 10^2$ なる値を用いて計算した。平衡定数は、温度とともに増大し、 $T \sim 415\text{K}$ で1となり、高温の極限では $K=2$ に漸近する。これは、低温ほど分子は基底状態にあり、絶対零度ではすべての分子がAという構造をもち、温度の上昇によって、分子Aや分子Bの励起状態を占有する確率が増大していくことを表している。このことから、化学平衡は温度依存性を考慮する必要があるが、分子がどの準位を占有するかという確率を考えればよいことがわかる。すなわち、 $K=2$ という極限状態は、分子という粒子がすべての準位を占有する確率が同様に確からしいという状態である。これは、箱の中から色の違う球やカードを無作為に取り出して、その組み合わせ方の場合の数から確率を考えるという、数学の問題と同等であることがわかる。

6. 基礎科学と専門知識との接点・連携について

本稿で例示した、“化学平衡の温度依存性”は、基礎的な化学実験でも頻繁に観察する結果ではあるが、一方でその理論的解釈は難解であるという、化学教育ではありがちな内容の一例といえる。しかし、化学には“化学熱力学”という、分子や原子の存在を気にしなくても熱力学諸量の実験値を再現する関係式が体系化された、便利な道具が存在する。この学問体系は、固体や液体等のマクロな組織の機能性を探求する際には有効である。しかしながら、分子や原子などのミクロな粒子に機能性を期待するときには、“統計熱力学”が必要となる。

“化学平衡の温度依存性”に話を限定すれば、本稿のような配列で講義すれば、平衡定数の分子論的な解釈が理解できると、著者は考えている。この配列に含まれる内容は、本来は複数の教科の橋渡しを要する内容である。

- (i) 箱の中から無作為に球を取り出して組み合わせる問題は、数学の確率論の初歩であり、これを分子の結合の問題に接続している。
- (ii) エントロピーは化学熱力学で導入される状態量であるが、これが状態数という熱力学的な確率を表す量であることを認識する（これは熱統計力学の基礎でもある）と、エントロピーの概念

自体の理解が深まる。

- (iii) 分子や原子の状態量は、エネルギー準位という概念が基礎となる。これは本来、量子論によって導入される概念である。（著者が行う講義では、前期量子論と量子論の基礎概念によって、離散的なエネルギー準位の導入も行っている。本稿では、数学の確率論と基礎科学理論の接点に焦点をあてたため、この内容を割愛した。）
- (iv) 化学では、ボルツマン分布は閉鎖系で成り立つ有用な法則としている。これを導くためには、この系が外界（熱浴）と熱的接触しているモデルとするのが、熱統計論である。

著者が講義をする際に参考とした複数の著書^{[1]-[4]}がある。これらの著書は、化学系のもの^{[1],[2]}、物理学系のもの^{[3],[4]}に区分できる。そもそも熱力学系なるものは、力学系のポテンシャル、平衡、可逆変化、最大仕事概念を拡張したものである。したがって、熱力学系は力学系を包含している。また、固体の示す特性を分子集団の挙動ととらえるためには、熱統計論が必要である。これだけを考えても、化学変化であろうが、それを物理学と切り離して考えることができないことがわかる。

大雑把な言い方をすれば、数学の専門的知識がほとんどない著者からすれば、統計力学というのは、ほとんど確率論だといってよいと思う。系で起きている変化を、系に比べものにならないほど大規模な外界に観察者が存在したとき、その外界の状態数は、熱力学的な相対確率によって支配されるからである。ボルツマン分布はこの内容を定量的に表現したに過ぎない。

化学平衡に限定すれば、文献[1]を拾い読みすることでも対応は可能である。また、固体化学や固体物理学で登場する、物体の温度と色の関係、量子化した格子振動（フォノン）、金属の自由電子論による比熱、半導体の電気伝導などは、エネルギーと粒子が移動する拡散的接触におけるギブズ因子を考えればよい。著者が行う本科5年生対象の講義（無機工業化学）では、これらの内容も扱うため、熱的接触と拡散的接触を対照させている。固体物理学の専門書は、熱統計力学を必ずしも詳細に説明してあるわけではないが、文献[5]は、文献[3]を初学者向けに書きなおした著書だと思われ、固体物理学に接続される比較的容易な自修用の内容である。

著者の講義では、数学と物理学と化学の連関を、機会ある毎に意識させている。本稿で紹介した内容は、数学としては、確率、相対確率、テイラー展開という概念しか用いていない。また、本稿で割愛し

たエネルギー準位の概念も含め、粒子の占有状態の、温度の影響をエネルギー準位間の励起現象と絡めて表現できる物理的イメージをもつことが、化学平衡の直観的なイメージに接続される。また、授業法という技術的な観点では、イラストや概念図を多用して、できるだけ数式表現のイメージを相補することに留意している。

数学⇄物理学⇄化学の平衡関係が旨く機能すれば、学生は化学的概念をイメージしやすくなると著者は考える。さらには、基礎科学⇄工学・技術の平衡も、同じ観点で成立する。また、この平衡位置を制御するのが教員の温度（情熱）なのだ、その使命を果たすために、教育のための研究も継続していきたいと考えている。

7. まとめ

著者が授業で講義している化学平衡の問題を題材として、数学と基礎科学と専門知識の連携の必要性、重要性を整理した。最先端技術に対応できる技術者教育では、ミクロな視点での専門概念の修得が必須である。このためには、一見複雑な自然現象を、単純なモデルを物理的な概念で描き表わせ、それを数学という便利な概念を用いて計算することに慣れることが益々有効となってくる。化学平衡の概念は、これのための具体例を提供してくれる格好の題材である。

8. 参考文献

- [1] Robert M. Hanson, Susan Green 著 (千原秀昭, 稲葉章訳), 熱力学要論 (分子論的アプローチ), 東京化学同人, 2009年
- [2] E. Brian Smith 著 (小林 宏, 岩橋槇夫訳), 基礎化学熱力学, 化学同人, 1992年
- [3] Charles Kittel 著 (山下次郎, 福地 充訳), キッテル 第2版熱物理学, 丸善, 1983年
- [4] L. I. Schiff 著, シッフ 新版量子力学 (井上 健訳), 吉岡書店, 1970年
- [5] 沼居貴陽著, 固体物性を理解するための統計物理入門, 森北出版, 2008年

9. 謝辞

本報を執筆する契機となった数学教材研究会 (主宰: 自然科学系 吉井洋二教授) とこの研究会に参加の皆様へ感謝いたします。また、講演時、コメントを頂いた自然科学系 成田章教授, その他, 皆様へ感謝いたします。なお、本報は、より講義に近い体裁に整理した内容として、プレゼン資料が吉井教授のホームページの一部 (<http://akita-nct.jp/~yoshii/maruyama.pdf>) に掲載されているので参照いただければ幸いです。