

# 確率でさまる化学的平衡状態

秋田高専物質工学科 丸山耕一

第4回 数学教材研究会  
2012年3月22日  
秋田高専 テクノコミュニティー

## はじめに

### 経歴からみる数学との関連

大学受験（ほとんどが理学部数学科→全部×）  
数理科学専攻→物理教室→金属工学科  
→物性解析研究 G p. →物理学科→分子動力学部門→放射線科学→物質工学

### 担当講義からみる数学との関連

無機材料工学	材料学概論（拡散方程式、アレニウスの法則、・・・） 電磁気学（ベクトル、ベクトル解析、・・・）
現代応用物理学	化学熱力学（仕事（積分）、可逆変化（完全微分）、・・・） 古典力学＋電磁気学（運動、ポテンシャル、仕事、・・・）
情報処理	2ビット（n進数、ブール代数、・・・）
材料計測工学	誤差論（平均値、最小二乗法、誤差の伝播）
無機工業化学	量子力学（固有値問題、複素関数論、・・・） 統計熱力学

## 熱・統計力学

熱力学  
⇒ 化学熱力学

実験室で観測できる状態量  
に成り立つ法則、原理

熱力学の第 1、2、3 法則

エントロピー  
エンタルピー  
温度  
化学ポテンシャル  
平衡定数

巨視的な熱力学的現象  
(化学平衡)

熱・統計力学

分子（原子）集団の挙動

多数の分子各々が  
ある状態を占有する確率

状態数

エントロピー

## 化学変化

非平衡

変化する傾向  
のある状態

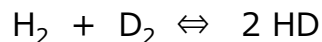
化学変化

平衡

自身では変化  
できない状態

◎ 平衡状態は確率論だけから予測することができる。

問題 水素と重水素の同位体交換反応を考える。  
水素 4 molと重水素1 molを混ぜると、  
どのような平衡状態に到達するだろうか？



## 化学平衡 ⇔ カードの問題

よくきられたトランプカードから、2枚のカードをひく。

- (1) 2枚のうち1枚だけがハートである確率
- (2) 2枚ともハートでない確率

(1) の考え方 ;

- (1枚目がハート) **かつ** (2枚目がハート以外)
- または**
- (1枚目がハート以外) **かつ** (2枚目がハート)

$$\longrightarrow \frac{13}{52} \times \frac{39}{51} + \frac{39}{52} \times \frac{13}{51} = \frac{1014}{2652}$$

**AND演算**      **OR演算**

(2) の考え方 ;

- (1枚目がハート以外) **かつ** (2枚目がハート以外)

$$\longrightarrow \frac{39}{52} \times \frac{38}{51} = \frac{1482}{2652}$$

(1) の別解 (**余事象**の考え方) ;

{ 2枚のうち1枚だけがハートである確率 }

= 1 - { 2枚ともハートである確率 } - { 2枚ともハートでない確率 }

$$\longrightarrow 1 - \frac{13}{52} \times \frac{12}{51} - \frac{39}{52} \times \frac{38}{51} = \frac{1014}{2652}$$

## 講義では

- (1)  $P_x = \frac{x \text{ を得る "場合の数" }}{\text{全体の "場合の数"}}$
- (2) AND 演算
- (3) OR 演算
- (4) 余事象  $P_{\bar{x}} = 1 - P_x$

例題 1 1つのサイコロを投げたとき、4の目が出る確率 ( $\Rightarrow$ (1))

例題 2 10個のサイコロを投げたとき、すべてが4の目が出る確率 ( $\Rightarrow$ (1) or (2))

例題 3 52枚（ジョーカーなし）のトランプカードをよくきったときに、上から順に2枚ともハートが並ぶ確率 ( $\Rightarrow$ (2))

例題 4 サイコロを1回ふって、2または3の目が出る確率 ( $\Rightarrow$ (3))

例題 5 2個のサイコロをふって、目の和が8である確率 ( $\Rightarrow$ (2)+(3))

例題 6 （前述のトランプカードの問題）

## カードの問題 $\Rightarrow$ 化学平衡

箱の中に赤いカードが800枚、白いカードが200枚入っている。この中から2枚のカードを取り出したとき、

- (1) 2枚とも赤いカード
  - (2) 2枚とも白いカード
  - (3) 赤いカードと白いカードが1枚ずつ
- となる確率を考える。



箱の中にH原子が800個、D原子が200個入っている。この中から2個の原子を取り出したとき、

- (1) 2個ともH原子となる確率 ( $P_{H_2}$ )
  - (2) 2個ともD原子となる確率 ( $P_{D_2}$ )
  - (3) H原子とD原子が1個ずつとなる確率 ( $P_{HD}$ )
- を考える。

$$P_{H_2} = \frac{800}{1000} \times \frac{799}{999} \approx \frac{800}{1000} \times \frac{800}{1000} = \frac{64}{100}$$

$$P_{D_2} = \frac{200}{1000} \times \frac{199}{999} \approx \frac{200}{1000} \times \frac{200}{1000} = \frac{4}{100}$$

$$P_{HD} = \frac{800}{1000} \times \frac{200}{999} + \frac{200}{1000} \times \frac{800}{999} \\ \approx \frac{800}{1000} \times \frac{200}{1000} + \frac{200}{1000} \times \frac{800}{1000} = \frac{32}{100}$$

## 分子の個数

$$\left. \begin{array}{l} P_H = \frac{800}{1000} \\ P_D = \frac{200}{1000} \end{array} \right\} \begin{array}{l} P_{H_2} \approx P_H \times P_H \\ P_{D_2} \approx P_D \times P_D \\ P_{HD} \approx P_H \times P_D + P_D \times P_H \end{array}$$

$$N_{\text{all}} = 500$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{H_2} = N_{\text{all}} \times P_{H_2} \approx 500 \times \frac{64}{100} = 320 \\ N_{D_2} = N_{\text{all}} \times P_{D_2} \approx 500 \times \frac{4}{100} = 20 \\ N_{HD} = N_{\text{all}} \times P_{HD} \approx 500 \times \frac{32}{100} = 160 \end{array} \right.$$

↓

320 H<sub>2</sub> + 20 D<sub>2</sub> + 160 HD  
が最確分布

箱の中に  
H原子が8.0 mol、D原子が2.0 mol  
入っている。

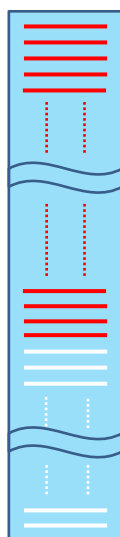
$$\left\{ \begin{array}{l} P_H = \frac{8.0}{10} \\ P_D = \frac{2.0}{10} \end{array} \right.$$



$$N_{\text{all}} = 5.0 \text{ mol}$$

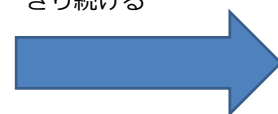
$$\left\{ \begin{array}{l} N_{H_2} = N_{\text{all}} \times P_{H_2} \approx 5.0 \times \frac{64}{100} = 3.2 \text{ mol} \\ N_{D_2} = N_{\text{all}} \times P_{D_2} \approx 5.0 \times \frac{4}{100} = 0.20 \text{ mol} \\ N_{HD} = N_{\text{all}} \times P_{HD} \approx 5.0 \times \frac{32}{100} = 1.6 \text{ mol} \end{array} \right.$$

## 平衡状態とは

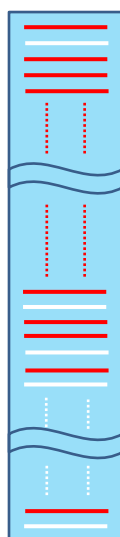


(H, H): 4.0 mol

箱の中の赤いカードと白いカードを  
きり続ける

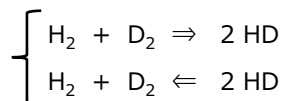


(D, D): 1.0 mol



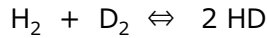
(H, H): 3.2 mol  
(D, D): 0.2 mol  
(H, D): 1.6 mol

カードは  
きり続けられている



◎ 平衡状態は  
“最確分布”  
そのものである。

## 平衡定数 $K$



$$\rightarrow K \equiv \frac{[\text{HD}]^2}{[\text{H}_2]^1 \times [\text{D}_2]^1} \quad [\text{A}]: \text{Aのモル濃度 (mol/L)}$$

$$= \frac{[\text{N}_{\text{all}} \times P_{\text{HD}} / V]^2}{[\text{N}_{\text{all}} \times P_{\text{H}_2} / V]^1 \times [\text{N}_{\text{all}} \times P_{\text{D}_2} / V]^1} = \frac{[P_{\text{HD}}]^2}{[P_{\text{H}_2}]^1 \times [P_{\text{D}_2}]^1}$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{H}_2: 4.0 \text{ mol/L} \\ \text{D}_2: 1.0 \text{ mol/L} \end{array} \right\} K = \frac{[P_{\text{HD}}]^2}{[P_{\text{H}_2}]^1 \times [P_{\text{D}_2}]^1} \approx \frac{\left(\frac{8}{10} \times \frac{2}{10} + \frac{2}{10} \times \frac{8}{10}\right)^2}{\left(\frac{8}{10} \times \frac{8}{10}\right) \times \left(\frac{2}{10} \times \frac{2}{10}\right)} = 4$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{H}_2: 2.5 \text{ mol/L} \\ \text{D}_2: 2.5 \text{ mol/L} \end{array} \right\} K = \frac{[P_{\text{HD}}]^2}{[P_{\text{H}_2}]^1 \times [P_{\text{D}_2}]^1} \approx \frac{\left(\frac{5}{10} \times \frac{5}{10} + \frac{5}{10} \times \frac{5}{10}\right)^2}{\left(\frac{5}{10} \times \frac{5}{10}\right) \times \left(\frac{5}{10} \times \frac{5}{10}\right)} = 4$$

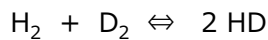
## ここまでのまとめ(1)

1. 化学反応の平衡に対して、物質の存在量、平衡定数は、確率だけで決まる。
2. 平衡状態は、“最確分布”である。
3. 平衡定数は、反応物の初期濃度によらない。  
→ 平衡定数がわからなくても、平衡での存在量は求められる。

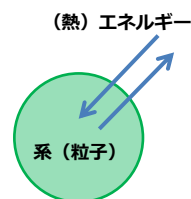
◎ “最確分布”のゆらぎは？

$N_{\text{all}} \sim 10^{23}$  のオーダーでは、ゆらぎは観測されないほど小さい。

## 平衡定数（実測値）



$K=3.2$  (25 °C)  $\Rightarrow$  **温度依存性**



◎ 化学反応は **分子**と**(熱) エネルギー**の相互作用  
分子や原子にも**エネルギー分布**がある。  
**量子化されている。**

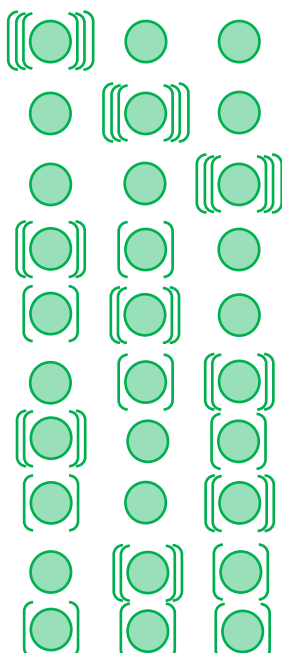
3 個の粒子、3 個のエネルギー量子の系で、  
粒子のもつエネルギーの最確分布を考える。

粒子の存在形態は 4 通り



## 全部で何通り？

合計で、 $W_{\text{all}}=10$



A: 1 個の粒子のみが 3 つのエネルギー量子をもつ

$$P_A = \frac{W_A}{W_{\text{all}}} = \frac{3}{10}$$

B: 1 個の粒子が 2 つのエネルギー量子をもつ  
1 個の粒子が 1 つのエネルギー量子をもつ

$$P_B = \frac{W_B}{W_{\text{all}}} = \frac{6}{10} \quad \text{(\textbf{最確分布})}$$

C: 3 個の粒子が各々 1 つのエネルギー量子をもつ

$$P_C = \frac{W_C}{W_{\text{all}}} = \frac{1}{10}$$

**状態数  $W$**

最確分布に対するある分布 (x) の相対確率:  $\frac{P_x}{P_B}$

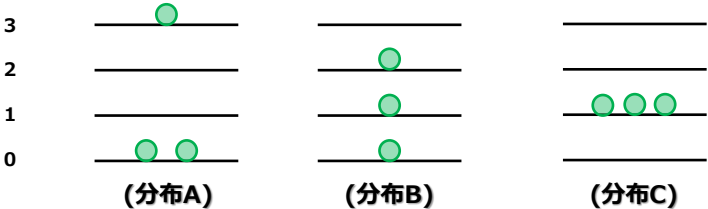
$$\frac{P_x}{P_B} = \frac{\frac{W_x}{W_{\text{all}}}}{\frac{W_B}{W_{\text{all}}}} = \frac{W_x}{W_B}$$

◎  $W_{\text{all}}$  を知らなくても、分布(x)の相対確率は求まる。

$W_x$ : 熱力学的確率

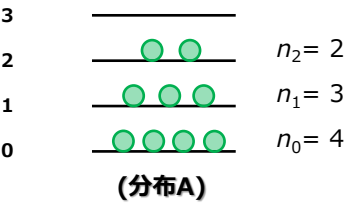
粒子は区別できない ⇒ 「エネルギー準位」による表現が便利

エネルギー量子



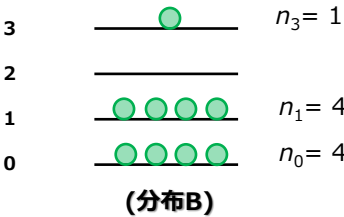
9 個の粒子、7 個のエネルギー量子の系で、  
粒子のもつエネルギーの最確分布を考える。

エネルギー量子



$$W_A = W_2 \times W_1 \times W_0 = C_2^9 \times C_3^7 \times C_4^4 = \frac{9 \times 8}{2 \times 1} \times \frac{7 \times 6 \times 5}{3 \times 2 \times 1} \times \frac{4 \times 3 \times 2 \times 1}{4 \times 3 \times 2 \times 1} = 1260$$

エネルギー量子



$$W_B = W_3 \times W_1 \times W_0 = C_1^9 \times C_4^8 \times C_4^4 = 630$$

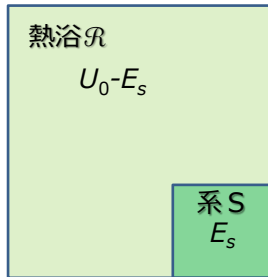
$$\therefore \frac{P_B}{P_A} = \frac{W_B}{W_A} = 0.5$$



## エントロピー $\sigma$

$$\sigma \equiv \ln W$$

◎ 化学反応の前後では、熱の移動がある  $\Rightarrow$  発熱反応、吸熱反応



$$\sigma_S(U) = \sigma_S(U_0 - E_S)$$

$$= \sigma_S(U_0) + \frac{U - U_0}{1!} \left[ \frac{\partial \sigma_S}{\partial U} \right]_{U=U_0} + \frac{(U - U_0)^2}{2!} \left[ \frac{\partial^2 \sigma_S}{\partial U^2} \right]_{U=U_0} + \dots$$

$$\frac{1}{T_S} = k_B \left[ \frac{\partial \sigma_S}{\partial U} \right]_{U=U_0} \text{を用いると、}$$

熱浴 R と熱的接触している系 S

$$U_0 \gg E_S \\ U_0 \text{ は一定値}$$

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

◎ 系 S の 1 つの状態のエネルギーと温度によって、熱浴のエントロピー (状態数) は決定される。

系 S のエネルギーが  $E_s$  となる確率:  $P(E_s)$

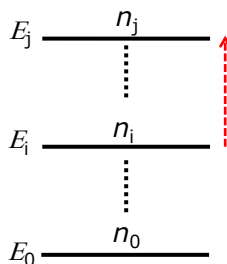
||

熱浴 R のエネルギーが  $U_0 - E_s$  となる確率

系 S のエネルギーが  $E_1$  と  $E_2$  になる確率の比:  $P(E_2)/P(E_1)$  を考える。

$$\frac{P(E_2)}{P(E_1)} = \frac{W(E_2)}{W(E_1)} = \frac{\exp(\sigma_2)}{\exp(\sigma_1)} = \frac{\exp\left[\sigma_2(U_0) - \frac{E_2}{k_B T}\right]}{\exp\left[\sigma_1(U_0) - \frac{E_1}{k_B T}\right]} = \frac{\exp\left[-\frac{E_2}{k_B T}\right]}{\exp\left[-\frac{E_1}{k_B T}\right]}$$

分子: 基底状態 ( $T=0(K)$ )  $\Rightarrow$  励起状態 ( $T$ : 有限温度)



粒子の準位と j 準位の個数、 $n_i$ 、 $n_j$  の比は

$$\begin{aligned} \frac{n_j}{n_i} &= \frac{P(E_j)}{P(E_i)} = \frac{\exp\left[-\frac{E_j}{k_B T}\right]}{\exp\left[-\frac{E_i}{k_B T}\right]} = \exp\left[-\frac{E_j - E_i}{k_B T}\right] \\ &= \exp\left[-\frac{\Delta E_{ij}}{k_B T}\right] \end{aligned}$$

## ボルツマン分布が最確な理由

(状態A)  $\rightarrow$  (状態B)

$$W_A = \frac{n!}{n_0! \cdot n_1! \cdot n_2! \cdots n_i! \cdot n_j! \cdot n_k! \cdots}$$

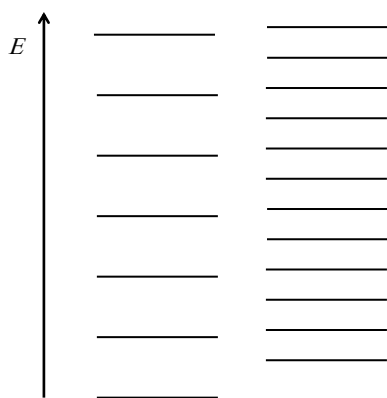
$$W_B = \frac{n!}{n_0! \cdot n_1! \cdot n_2! \cdots n_{i+1}! \cdot n_{j-2}! \cdot n_{k+1}! \cdots}$$

$$W_B = W_A \left\{ \frac{(n_j - 1)n_j}{(n_i + 1)(n_k + 1)} \right\} < W_A \frac{n_j^2}{n_i n_k} = W_A \times \frac{n_j}{n_i} \times 1 \left/ \left( \frac{n_k}{n_j} \right) \right. = W_A$$

$$\because (n_i + 1)! \cdot (n_j - 2)! \cdot (n_k + 1)! = n_i! (n_i + 1) \times \frac{n_j!}{(n_j - 1)n_j} \times n_k! (n_k + 1) = n_i! n_j! n_k! \times \left\{ \frac{(n_j - 1)n_j}{(n_i + 1)(n_k + 1)} \right\}$$

## (再び) 化学反応の平衡状態

$A \rightleftharpoons B$  (AとBは異性体)



- 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。
- Bの準位の間隔はAのその1/2。

異性化反応の  $K = \frac{[B]}{[A]} = \frac{n_B}{n_A}$  を考える。

(1)  $T = 0$  (K)  
 $\Rightarrow$  すべての分子は最低準位にある。

$$K = \frac{n_B}{n_A} = 0$$

(2)  $T = 200$  (K)  
 $\Rightarrow K = \frac{n_B}{n_A} = \frac{n_B/n}{n_A/n} = \frac{0.160}{0.840} = 0.19$

(3)  $T = 600$  (K)  
 $\Rightarrow K = \frac{n_B}{n_A} = \frac{n_B/n}{n_A/n} = \frac{0.458}{0.542} = 0.846$

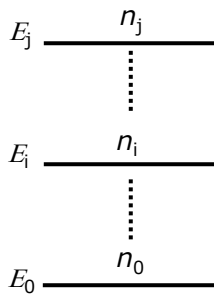
◎ 温度の上昇によって、分子は、Aの準位、Bの準位を区別なく励起するため、Aの個数は必然的に減っていく。

(4)  $T = 1000$  (K)  
 $\Rightarrow K = \frac{n_B}{n_A} = \frac{n_B/n}{n_A/n} = \frac{0.541}{0.459} = 1.18 > 1$

◎  $K > 1$  となる理由は？

Kの温度依存性を考えるための準備

**n(全粒子数)と $n_0$ (基底状態の粒子数)の関係**



$$n = n_0 + n_1 + n_2 + \cdots + n_i + \cdots + n_j + \cdots$$

エネルギー準位が等間隔

$$\Rightarrow \frac{n_1}{n_0} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{n_3}{n_2} = \cdots = \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right] \equiv x$$

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{n_i}{n_{i-1}} \times \frac{n_{i-1}}{n_{i-2}} \times \cdots \times \frac{n_2}{n_1} \times \frac{n_1}{n_0} = x^i$$

$$\therefore n = n_0 + n_1 + n_2 + \cdots + n_i + \cdots + n_j + \cdots \\ = n_0(1 + x + x^2 + x^3 + \cdots)$$

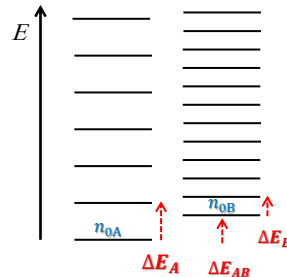
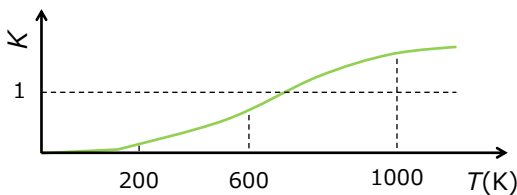
$$n_{1<} = n_1 + n_2 + \cdots = n_1(1 + x + x^2 + x^3 + \cdots)$$

$$\frac{n_{1<}}{n} = \frac{n_1(1 + x + x^2 + x^3 + \cdots)}{n_0(1 + x + x^2 + x^3 + \cdots)} = \frac{n_1}{n_0}$$

$$\rightarrow n_{1<} = \frac{n_1}{n_0} \times n = n \times \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right] = n - n_0$$

$$\therefore n_0 = n \left[ 1 - \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right] \right]$$

## Kの温度依存性



$$K \equiv \frac{n_B}{n_A} = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_B}{k_B T}\right)} \times \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right) \quad \left\{ \begin{array}{l} n_{0A} = n_A \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{k_B T}\right) \right] \\ n_{0B} = n_B \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_B}{k_B T}\right) \right] \\ \frac{n_{0B}}{n_{0A}} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right) \end{array} \right.$$

$$T: \text{低温} \Rightarrow K \approx \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right)$$

$$T: \text{高温} \Rightarrow K = \frac{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_A}{k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\Delta E_B}{k_B T}\right)} \times \exp\left(-\frac{\Delta E_{AB}}{k_B T}\right) \approx \frac{\frac{\Delta E_A}{k_B T}}{\frac{\Delta E_B}{k_B T}} \times 1 = \frac{\Delta E_A}{\Delta E_B}$$

## ここまでのまとめ（２）

1. 粒子（分子）の取りうるエネルギーは量子化され、とびとびの値をもつ。この粒子の最確分布は、状態数（＝熱力学的確率⇒エントロピー）によってきまる。（全状態数を知る必要はない。）
2. 実際の分子（という粒子）の最確分布は、温度を与えることによって、一部が励起した状態（基底状態以上のエネルギーをもつ状態）をいい、粒子（という系）は熱浴との間での熱的接触を考慮することで、状態数（エントロピー）がきまる。
3. 反応物と生成物のエネルギー準位を考慮すると、  
 反応物(A)  $\rightleftharpoons$  生成物(B) の化学反応の平衡定数  $K = \frac{n_B}{n_A}$  は、  
 \* 反応物と生成物のそれぞれのエネルギー準位の間隔( $\Delta E_A, \Delta E_B$ )  
 \* 反応物と生成物の基底状態のエネルギー準位差( $\Delta E_{AB}$ )  
 によってきまる。

## 数学と専門教科との連携について（私感）

1. 線形代数学、解析学という「数学の基礎」は実は**非常に難しい**。  
 （勉強しても本質はわからないかもしれない・・・。）
2. 低学年の物理学では、ベクトルや微積分の極簡単な内容を  
**イラスト・イメージ**で教えることができる。
3. このイメージを 線形代数学、解析学の内容へ接続できる  
**タイミング**は現状でも存在している。
4. 従来の学生は、数学  $\rightleftharpoons$  物理学 の平衡を、自らのエネルギーで達成できた。  
 現状では、**別のエネルギー**が必要である。
5. 物質工学科の学生はもっと大変である。**物理学  $\rightleftharpoons$  化学** の平衡も  
 余計に必要である。
6. ただし、実験研究者には **物理学  $\rightleftharpoons$  自然現象** の方が大切である。  
 では、技術者には何が必要なのか？

**自然現象  $\rightleftharpoons$  人工的現象 (=技術) ??**

## 学生さん達へのメッセージ

私自身は、材料工学を専門としている。もともと、数学や物理にも大変興味があった。実は、化学は今も苦手である。でも、今思い出してみると、高校生の時、物理もよくわからなかった。物理の公式の意味がよくわからなかったからである。公式の意味がわからなかったのは、数式と自然現象を対応させなかったからだ。数式が意味していることを、簡単なイラスト・イメージにかきかえてみよう。高校（高専低学年）の物理で習う内容は、大体が絵を描ける。本来は、自然現象を理解するためには、それを数式で表現することが、理解するための1手段である。でも、一番大切な作業がある。自然現象は、考えれば考えるほど、複雑なものである。だから、その複雑なものを複雑なもののままに、絵に描こうと思うと、挫折する。でも、その複雑なものから、最も大切なことはなにか、を考えて、それを絵にしようと思えば、案外、簡単なことである。そして、その簡単な内容を、数式で表現しようと思うと、意外と、理解できる。だから、自然現象を数式で表現すると、簡単になるのである。この作業に、慣れてしまうと、案外、物理も数学も得意になるかもしれない。数学が苦手な人、物理が苦手な人、そういう人は、この数学は物理ではどこの分野で使うのか、をあたってみて、物理を勉強してみたらいい。反対に、物理をやっていて、使われている数式表現の意味がわからなかったら、数学を勉強しなおしてみればいい。

材料の分野で研究していると、物理だけでは、現象を説明できないときがある。熱や粒子の移動が伴うからである。これらは、物理化学、熱力学で理解できる。これらも広い意味で、物理である。やはり、数学と物理が、すべての科学技術の基本なんですよ。

## 特に物質工学科の学生さん達へ

材料を分類するとしたら、その構成物質によって、金属材料、無機材料、有機材料に分類される。有機物以外の物質はすべて無機物質だという考え方もできる。材料と物質とはどう違うか？前者には、人と人のかかわりの中で、物質を意識しようとする意図が含まれている。そういう意味では、ほとんどの科学技術者は、物質というよりは材料を相手にしているということができる。また、これは、「材料」は「ものづくり」の根幹に位置し、すべての科学技術の基礎を担っていることを意味する。

物質工学科では、将来的に物質の性質を制御し、新しい物質を合成する手法を開発できる技術者を育成するために、実験・実習を行っている。材料分野の科学技術では、材料の「合成」、「構造」、「特性」、「機能性」という観点で、研究開発が行われている。これらの4要素は、化学的観点から物理学的な観点までを融合して駆使することで、様々な現象を理解することが基礎となっている。

物質工学科では、2年生までに、「化学基礎」、「分析化学」、「分析化学実験」等の学習をしてきた。これからは、「無機化学」（3年生）では、原子や電子の性質と、無機元素・無機化合物の性質を学ぶ。さらには、「錯体化学」（4年生）ではバラエティな構造をもつ遷移金属化合物などの性質を学ぶ。物質や材料を合成できるのは、原子や分子で構成される物質が状態変化や化学変化をするからである。これらの現象は、「基礎物理化学」（3年生）・「化学熱力学」（4年生）という学問域の概念から理解できる。この概念を応用して、「固体化学」（4年生）では、物質の構造（安定性）と反応性について、物理化学的な視点から理解する。さらに、これらは、物質の触媒性、表面の触媒反応へと発展して、「無機工業化学」（5年生）へ接続される。

誰もが気づくように、身の回りの“もの”は、年々小型化している。これは、使いやすいから？、運びやすいから？、勿論、そういう利便性を私たちは間違いなく享受しているが、どうしてなのだろうか？従来は、材料の組織や構造によって、その特性を制御してきた。結晶サイズや組織を微細化すれば、材料自体サイズが小さくなり、この材料を用いたデバイスも小型化されるというストーリーである。CD-ROMとDVD-ROMを比較しても、これらを同等に比較するのは少々乱暴な話だが、後者のほうがより多くの情報量を記憶させることができることを知っているだろう。情報を記憶させる最小単位が後者の方が小さいからだ。

電化製品、電子部品は、その大方が半導体と呼ばれる素子が集積して、機能性を発揮している。「無機合成化学」（4年生）では、半導体も含め様々な物質の機能性を概観することで、合成物の目標がみえてくるかもしれない。有名な半導体は、シリコン(Si)であるが、純粋なSiにごく微量の不純物を添加して、半導体の電気伝導度を制御している。この現象は、不純物半導体の電子構造から説明できる。電子構造とは何だろう？「無機化学」でも学ぶかもしれないが、電子は、粒子であるが波動の性質も併せもつという概念を導入しないと、電子構造は議論できない。このためには、電子のエネルギー量子に加え、分子の回転エネルギーや振動エネルギーも量子化されていることと、これらの分子のエネルギーを測定する方法としての分光学の概念を、「物理化学」・「材料計測工学」（4年生）で学ぶ。

物質が変化したあと、一見変化はなくなる。この状態を、平衡状態という。平衡状態は、熱力学的な状態量を用いると、分子の種類に関係なく（という“神秘的な”話？で）、ある状態にある分子の数だけで記述できることを学ぶ。また、物質の平衡状態は、膨大な数（たとえば、 $1\text{ mol} \sim 10^{23}$ 個）の粒子が、確率的に最も確からしい状態に落ち着くことから説明できる（というある意味、“神秘的でない”話！となってしまうが・・・）、ということを「応用物質工学」（4年生）で学ぶ。

電子は“電荷”をもった粒子である。またこの粒子は“スピン”と呼ばれる磁気的なモーメントを有する。“電荷”と“スピン”によって、原子構造の形状はきまっている。“電荷”と“スピン”は、電場や磁場によってその挙動を制御できる。ここまでくると、チンプンカンプンだろう。しかし、「応用物理学」（4年生）で電磁気学を学ぶと、話が少しは見えてくるだろう。原子核（正電荷）1個と電子（負電荷）1個で構成される水素原子の構造から出発し、簡単な分子の構造を「量子化学」（5年生）で計算できるようになる。

“こんな”勉強をした後に、「無機材料工学」・「メカトロニクス」（5年生）を勉強すると、無機物質における材料特性の話がすんなりと頭に思い描けるかもしれない。でも、それは、そんなに容易なことではない。頭の中にイメージがすんなり描けるのは、高専を卒業してから、長くかかる人にとっては、10年後？、20年後？かもしれない。しかし、高専にいる間に、こんな背景を頭の片隅のどこかに置きながら、物質合成や構造・機能性評価の研究をしてもらいたいものである。

最後に、前段落の“こんな”の内容を再度よく考えていただきたい。数学や物理学の基礎を勉強しなくてもよいのか？そんなことは決してない。これらの科目はすべての専門科目の基礎的な概念を提供してくれる。特に不得意な分野は、できるだけはやく、改善してほしい。また、専門概念を習得することに困難を感じたときは、どうか、基礎概念にさかのぼって、勉強しなおしてほしい。

出典 秋田高専物質工学科・無機化学実験テキスト(p.5～6)