

理工系学生・技術者

新化学計算

島原健三著

理工系学生・技術者

新化学計算

島原健三著

3k596/06

三共出版

著者略歴

しま けん けん ぞう
島 原 健 三

1928年 東京に生れる
1950年 慶応義塾大学工学部応用化学科卒業
現在 成蹊大学工学部教授 工学博士
著書 化学計算の解釈研究 (共著：三共出版)
周期系の歴史上・下 (翻訳：三共出版)
化学演示実験 (共著：三共出版)
自壊する原子 (翻訳：三共出版)
数値で学ぶ生物科学 (共訳：講談社サイ
エンティフィク)

新化学計算

定価 2,200 円

昭和59年11月15日 初版発行

© 著者 島 原 健 三

発行者 萩 原 町 子

印刷者 横 山 弘

発行所 三共出版株式会社 東京都千代田区

神田神保町3の2

郵便番号 101 電話 (264) 5711(分) 振替東京 1-1065

社団法人 日本書籍出版協会・社団法人 自然科学書協会・工学書協会 会員

Printed in Japan

印刷・装幀印刷 島本・密住

ISBN4-7827-0178-0

まえがき

この本は理工系の大学生、高専生および中級技術者を対象とする、基礎的な化学計算についての技法を述べた参考書であり、小著“化学計算（1973、三共出版）”をもとに、それを全面的に書きあらため、“新化学計算”と題したものである。

化学計算の参考書としては、大学生向けの一般化学や物理化学の演習書、高校生向けの学習参考書などで、すぐれた本が少なからず出版されている。しかし、それらの本は、目的からみて当然のことながら、扱われている範囲が狭く、また、あくまでも学校での勉強のための参考書として構成されているために、いったんその課程を終えた人がかつて勉強したことを思い出したり確認するために使うには、かならずしも使いやすくはできていない。筆者は、もう少し広い範囲をおおい、かつ、繰り返して使うのに便利な本が必要であると、かなり前から考えていた。

この考えを不完全ながら最初に実行に移した結果が、“基礎応用・化学計算法（1960、三共出版）”であり、これに大幅な改訂と追加を加えたものが、上記の“化学計算”であった。幸い両書とも大方の好評を得、四半世紀にわたって版を重ねることができた。この点、筆者の上のような考えが多少は受け入れられたものと、自負している。

しかし、10年あまりを経て、“化学計算”の内容が現状にややそぐわなくなってきた。SI単位が多く使われるようになったこと、統一的な記号法が推奨され利用されるようになってきたこと、一部の術語が変更になったこと、などのためである。そこで、これをふまえて全面的に書きなおすことにしたわけであるが、今回の改稿にあたっては、水林久雄氏との共著として数年前に“化学計算”のジュニア版姉妹編といふべき“化学計算の解釈研究（1976、三共出版）”を上梓したことも考慮に入れ、それとの重複をなるべく少なくするようにつとめた。本書は旧著とは全面的に異なるものであるが、おもな相違点を挙げればつぎのとおりである。

(1) 旧著の内容のうちのもっとも基礎的な部分は、一部を“解釈研究”にゆずることにして圧縮し、かわりに、従来紙数の関係で盛り切れなかった部分を拡充した。圧縮したのは、化学量論、気体、など、拡充したのは、化学熱力学、分子構造、環境分析、などに関する部分である。また、旧著では22章あったものを、全16章に改編統合した。

(2) SI単位を多くとり入れた。しかし、完全にSI単位のみ基準にすることはあえて行わず、非SI単位による例題もかなり残し、かつ、SI単位と非SI単位との関係の説明と例解にかなりの紙数を割いた。SI単位が広く使われるようになってきたとはいえ、非SI単位もまだまだ使用されており、ここ当分の間は、化学および関連分野にたずさわる者としては、両様の単位の扱いに習熟することが必要だと考えるからである。

(3) 術語および記号の大部分を、現在奨励されているものにあらためた。

(4) “例題索引”を設けた。これにより例題の検索が容易になり、必要に応じて必要な問題の解き方を見いだすという、“例題ハンドブック”のような使い方がしやすくなったはずである。

以上の変更点を含め、本書の構想については、次ページの“この本を使う人のために”を参照していただきたい。

本著でとりあげた例題、問題の多くは、旧著から引きついだぶんを含め、先人たちの著書から採らせていただいたものである。本の体系に合わせるために筆者の責任において改変を行なった部分が少なくないので、いちいち出典は記さなかったが、これらの著者のかたがたに感謝の意を表したい。また、本書の企画から完成まで、長期間にわたって筆者のわがままにつき合っただき、かつ、多くの有益な助言をいただいた担当の西尾文一氏にふかく感謝するしだいである。

1984年10月

島原健三

この本を使う人のために

本の構成

この本は 16 章に分けられた本文、および、データ表、数表、記号一覧などの付録、索引からなっている。データ表等のうち、原子量表と電子配置表は前見返し、基本定数、SI 基本単位・位どり接頭語・誘導単位、頻出する非 SI 単位、単位換算に関する諸表は後見返しにのせた。後見返しの諸表がもっともひんばんに参照されるはずである。また、元素の周期表、常用対数表、記号一覧は巻末に、その他のデータ表は本文中においた。

各章は数節にわかれ、各節は基本的な事項の説明に続いて例題が配置されている。1 章以外の各章では、巻末にそれぞれの章の内容に対応する問題を置いた。

術語・記号・単位

術語は原則として“学術用語集・化学編 (1974, 南江堂)”および“「物理・化学量および単位」に関する記号と術語の手引 (1979, 日本化学会)”によったが、一部慣用されている術語を使った場合もある。記号は原則として、“手引”に推奨されているものを使った。しかし、術語、記号とも、ごく一部ではあるが、筆者自身の主張にもとづき、あえて推奨以外のものを使った場合がある（それらについては理由を当該箇所注記した）。

単位は SI 単位によった場合が多いが、非 SI 単位も併用した。とくに、圧力の単位である atm, mmHg, Torr, エネルギーの単位である cal, 温度の単位である °C はひんばんに使った。これらは化学および関連分野で広く使われており、その傾向は一朝一夕には変らないであろうから、現在のところ両様の単位に慣れておくことが必要と思われる。単位についてこのような不統一をあえてしたのは、以上の理由による。SI 単位系の構成、および、SI 単位と非 SI 単位の関係については、1・1 節に解説した。

なお、本書で使われる記号は、p. 234 の“記号・略号一覧”にまとめて解説した。

定数

定数はひんばんに使われるものは前後の見返しに、主として 1 つの章にだけ関連するものは本文のその章に、表の形で挿入した。それらが置かれている箇所は目次の末尾に示されている。

定数の値は可能なかぎり新しいものを用いた。これらの値は測定技術の進歩によって今後変更される場合があるが、本書に収められている程度の計算には、このまま使っておおむね支障はないはずである。しかし、実験データの処理などでより正確な定数が必要

な場合には、最新のデータブックを参照していただきたい。

例題

例題にはすべて、内容を示す見出しを付した。見出しは短くするために、しばしば“.”を“および”の意味に使った。例えば、“任意の温度・圧力における体積”は“任意の温度および任意の圧力における体積”の意味である。

同一の見出しに2以上の例題が含まれている場合、それらは内容は同一で、単位だけが異なっている。一方にはSI単位が使われているから、各例題の解法を対比すれば、SI単位と非SI単位の関連、両者の扱い方の同異、などについての理解を深めることができよう。このような、複数の例題が並置されている箇所は、p.1 脚注3に示してある。

各例題には詳細な解答を付した。計算は、1・2節に述べた方法にもとづき、必要かつ十分な精度において行なわれている。また、計算に使われる値はすべて、たんなる数値としてではなく、量として、つまり単位を付けた形で扱われている。量を扱う以上、数値と単位の積として扱うのは理にかなっているが(p.1, “物理量”の定義)、この方法には誤りを減らすという実用的な効果もある。例えば、不適当な単位をもつ値を使って計算すると、期待した単位と合致しない答えが得られ、おのずから誤りがチェックされることになる。このようなわけで、ことに初心者には、面倒なようでも数値には単位をつけて計算することをすすめる。

対数の計算は、すべて常用対数の形で行なわれている。例えば、 $\ln x$ を求めるのに、いったん $2.303 \log x$ としたのち、計算している。これは関数用電卓を使わない場合を想定したからであって、自然対数の計算ができる計算器を使う場合には、直接値を求めていただいでさし支えない。

問題

問題は略解を付するにとどめ、そのかわり本文中の参照箇所を示した。例えば、(3・3・1) および (3・1 節) は、“例題 3・3・1 参照” および “3・1 節参照” を意味する。

索引

通常の“事項索引”のほかに“例題索引”を設けた。つまり、全例題と一部の問題との内容を見出し語とする索引である。この“例題索引”と各例題に付した見出しを利用すれば、必要とする例題の検索は容易になろう。そして、このような利用をすることにより、本書は“化学問題解法のための例題ハンドブック”として役だつはずである。

目 次

1 章	化学計算法	1
1.1	単位 単位の換算	1
1.2	数値の扱い方	5
1.3	数値のグラフ化	8
1.4	高次方程式の近似解	9
1.5	対数の扱い	10
2 章	化学式 化学反応式	13
2.1	原子量 分子量 モル質量 原子・分子の質量	13
2.2	化学式と化合物の組成	15
2.3	化学式の立て方 元素分析	16
2.4	化学反応式の立て方	18
2.5	化学反応式による計算	20
	問 題	22
3 章	気 体	24
3.1	気体の量と体積との関係 アボガドロの法則	24
3.2	気体の体積と圧力と温度との関係 理想気体の状態式	25
3.3	気体の密度・比重 気体および気化しやすい液体の分子量決定法	27
3.4	混合気体の体積・圧力 ドルトンの分圧の法則	30
3.5	混合気体の組成 ガス分析	31
3.6	気体分子の速度	34
3.7	気体の流出 グレアムの法則	35
3.8	実在気体の温度と圧力と体積との関係 ファン・デル・ワールスの状態式	36
3.9	ファン・デル・ワールス定数と臨界定数	39
	問 題	40
4 章	状態の変化 相律 状態図	45
4.1	蒸気圧と蒸発量 空気の湿度	45
4.2	蒸気圧と蒸発熱 クラウジウス・クラペイロンの式	47
4.3	沸点の温度と蒸発熱 トルートの法則	50
4.4	昇華 融解 転移	51

4-5	相律	52
4-6	一成分系(純物質)の状態図	54
4-7	二成分系の状態図 I —— 沸点図	55
4-8	二成分系の状態図 II —— 融点図	58
	問題	61
5	章 溶 液	65
5-1	溶液の濃度の表わし方	65
5-2	水の硬度	68
5-3	固体の溶解度	68
5-4	気体の溶解 ヘンリーの法則	70
5-5	溶質の2液間での分配 分配の法則 抽出	71
5-6	浸透圧 ファント・ホッフの法則	73
5-7	蒸気圧降下 ラウールの法則	75
5-8	沸点上昇 凝固点降下	76
	問題	78
6	章 内部エネルギー エンタルピー	82
6-1	定圧体積変化にともなう仕事	82
6-2	熱容量 温度の上昇に必要な熱	84
6-3	温度変化にともなう内部エネルギー変化・エンタルピー変化	87
6-4	状態の変化にともなう内部エネルギー変化・エンタルピー変化	89
6-5	化学変化にともなう内部エネルギー変化・エンタルピー変化 定積反応熱と定 圧反応熱	91
6-6	種々の反応熱とそれらのあいだの関係 ヘスの法則	92
6-7	生成熱の意味	95
6-8	燃焼熱と発熱量	98
6-9	温度変化・状態の変化による反応熱の変化	99
	問題	101
7	章 エントロピー ギブズエネルギー	105
7-1	理想気体の定温体積変化・断熱体積変化	105
7-2	エントロピー変化 熱力学の第二法則	108
7-3	標準エントロピー 熱力学の第三法則	112
7-4	ギブズエネルギー ヘルムホルツエネルギー	113
	問題	115

8 章 化学反応の速度	118
8-1 反応次数 速度定数	118
8-2 気相反応の扱い	123
8-3 素反応と複合反応	124
8-4 反応速度と温度 アレニウスの式	128
問題	131
9 章 化学平衡	134
9-1 平衡定数と濃度・圧力 質量作用の法則	134
9-2 不均一系化学平衡の扱い	137
9-3 平衡定数と温度 ファンツ・ホッフの式	138
9-4 濃度・圧力・温度の変化と平衡の移動 ル・シャトリエの原理	140
9-5 平衡定数とギブズエネルギー	140
問題	142
10 章 電解質溶液の性質 電気分解	145
10-1 電解質溶液の浸透圧・蒸気圧降下・沸点上昇・凝固点降下	145
10-2 電気分解 ファラデーの法則	147
10-3 電解質溶液の電気伝導	148
10-4 極限モル伝導率 コールラウシュの法則	150
10-5 イオン移動度 輸率	153
問題	155
11 章 電離平衡	158
11-1 弱電解質の電離平衡	158
11-2 水のイオン積 pH pK	162
11-3 塩の加水分解	165
11-4 酸または塩基とその塩との混合 緩衝溶液	168
11-5 中和滴定曲線	169
11-6 酸塩基指示薬	172
11-7 溶解度積	174
問題	175
12 章 電池	178
12-1 活量	178

viii 目次

12.2	電池図 標準電極電位と標準起電力	178
12.3	濃淡電池	182
12.4	電池の起電力 ネルンストの式	184
12.5	起電力とギブズエネルギー変化・平衡定数	186
	問題	187
13章	表面張力 吸着 粘性 沈降	189
13.1	表面張力	189
13.2	吸着 ラングミュアの吸着等温式 フロイントリヒの吸着等温式	190
13.3	粘性	193
13.4	沈降 スベドベリの式	195
	問題	196
14章	原子の構造	199
14.1	陽子・中性子・電子の数	199
14.2	電子の配置	200
14.3	同位体	202
14.4	原子核反応	203
14.5	放射性壊変	204
14.6	質量とエネルギーとの関係	206
	問題	206
15章	化学結合 分子の構造	209
15.1	分子内の電子配置	209
15.2	結合エネルギー	210
15.3	共鳴	212
15.4	電気陰性度	214
15.5	双極子モーメント	216
	問題	217
16章	容量分析 吸光光度法	219
16.1	規定度 標準液	219
16.2	滴定の計算	221
16.3	溶存酸素 BOD COD	224
16.4	吸光光度法 ランバート・ベールの法則	226
	問題	229

資料目次

1	原子量表	前見返し	13	標準エントロピーと標準生成ギブズエネルギー	112
2	原子の電子配置	"	14	モルイオン伝導率	151
3	基本的な定数	後見返し	15	弱酸と弱塩基の解離定数	159
4	SI 基本単位・位どり接頭語	"	16	酸塩基指示薬の変色域	173
5	特別な名称と記号をもつ SI 誘導単位	"	17	標準電極電位	180
6	非 SI 単位	"	18	素粒子の電荷とモル質量	199
7	単位換算表	"	19	結合エネルギー	210
8	ファン・デル・ワールズ定数	37	20	電気陰性度	215
9	モル沸点上昇とモル凝固点降下	77	21	酸化剤・還元剤の反応	220
10	実在気体の定圧モル熱容量	85	22	元素の周期表	231
11	定圧燃焼熱	93	23	常用対数表	232
12	標準生成熱	96	24	記号・略号一覧	234
	例題索引	238		事項索引	244

1 章 化学計算法

1.1 単位 単位の換算

化学の計算では測定値や定数など、さまざまな量が扱われるが、これらの量の多くは単位をもっている。同一の量を記述するときでも、単位が異なれば数値も異なる（たとえば、0.168 kg という質量は g 単位で表わせれば 168 g となる）から、単位を記さずに数値だけを示したのでは、量としての意味をなさない。したがって、

物理量は数値と単位の積である

ということが出来る。いま、ある物体の質量 m が 0.168 kg だったとして、このことを表わすには

$$m = 0.168 \text{ kg}$$

または、両辺を kg (キログラム) という単位で割って

$$m/\text{kg} = 0.168$$

のように書く。後者のような書き方は、表の見出しやグラフの座標軸に使うと便利である。

単位にはさまざまな系列のものがあるが、現在では、後述の国際単位系（略称 SI¹⁾）を使うことが推奨されている。しかし、化学の分野では、従来の慣行から、CGS 単位系²⁾やその他の慣用的な単位（たとえば、圧力の単位 atm）も広く使われている。したがって、化学にたずさわる者は、それら各種の単位の扱いを熟知しておく必要がある。この本では、物理量の大半は SI 単位で記述されているが、非 SI 単位も少なからず使われている。これは、各種の単位に習熟していただくために、あえて試みたことである。同一の例題を SI 単位と非 SI 単位の両方で述べた箇所もある³⁾が、これは各種の単位のあいだの関係を

¹⁾ Système International d'Unités の略。

²⁾ 長さ、質量および時間の単位として cm, g および s (秒) をとり、この3者を基本単位として組み立てた単位系。

³⁾ 例題 3.2.1, 3.2.3, 4.1.1, 4.2.1, 5.4.1, 5.6.1, 6.1.3, 6.3.1, 6.4.1, 6.5.1, 7.2.1, 9.1.2, 10.1.1.

理解する助けになるであろう。単位換算についての例題1・1・3~5とあわせて、利用していただきたい。

国際単位系では、長さ、質量、時間、電流、温度、物質質量（モル数）¹⁾ および光度を独立した物理量と考え、それぞれに対して m, kg, s, A, K, mol および cd を SI 基本単位と定める²⁾ (資料4)。これ以外の物理量の単位は、SI 基本単位の積または商の組み合わせによって作ることができる。たとえば、体積は [長さ]³ だから、その SI 単位は m³ であり、密度は [質量/体積] だから、その SI 単位は kg m⁻³ である。このような、SI 基本単位から誘導された単位を SI 誘導単位という。SI 誘導単位のあるものは、資料5 (後見返し) に示すような特別な名称が与えられている。

資料4 SI基本単位(左)と位どり接頭語

物理量	単位(名称)	大きさ	記号	大きさ	記号
長さ	m (メートル)	10 ⁻¹	d (デシ)	10	da (デカ)
質量	kg (キログラム)	10 ⁻²	c (センチ)	10 ²	h (ヘクト)
時間	s (秒)	10 ⁻³	m (ミリ)	10 ³	k (キロ)
電流	A (アンペア)	10 ⁻⁶	μ (マイクロ)	10 ⁶	M (メガ)
温度	K (ケルビン)	10 ⁻⁹	n (ナノ)	10 ⁹	G (ギガ)
物質質量 (モル数)	mol (モル)	10 ⁻¹²	p (ピコ)	10 ¹²	T (テラ)
		10 ⁻¹⁵	f (フェムト)	10 ¹⁵	P (ペタ)
光度	cd (カンデラ)	10 ⁻¹⁸	a (アット)	10 ¹⁸	E (エクサ)

SI 基本単位や特別な名称をもつ誘導単位は、上表の位どり接頭語をつけることによって、本来の大きさの 10ⁿ 倍 (n は整数) を表わすことができる。たとえば、1 kJ = 10³ J, 1 μg = 10⁻⁶ g = 10⁻⁹ kg である。接頭語のつけ方には、

- (i) 接頭語を二つ重ねてはならない。たとえば、kkg は不可、Mg と書く。
- (ii) 接頭語と記号の組み合わせられたものは単一の記号と見なす。したがって、その累乗はカッコを使わずに表わす。たとえば、cm² は (cm)² を意味し、c(m)² の意味ではない。

という約束がある。

国際単位系以外の単位でよく使われるものを、資料6 (後見返し) にあげる。表の上半

¹⁾ 従来から“モル数”とよばれてきた量のこと。現在では“物質の量”とよぶことが推奨されているが、“量”ということばは“かさ”、“目方”など、漠然とした対象を指し、“mol という明確な単位で記述された量”とは結びつきにくいので、この本ではあえて助詞の“の”を省き、“物質質量”ということばを使うことにする。

²⁾ mol の定義は p.14 脚注に述べる。他の基本単位の定義は、日本化学会発行“物理・化学量および単位”に関する記号と術語の手引”を参照していただきたい。

分は、CGS系に属する単位など、SI単位との比が 10^n の関係にあるものである。これらはSI単位系との関係が単純だから、相互の換算は簡単である。表の下半分にある単位はSI単位による定義はなされている¹⁾が、両者の関係は単純ではない。以下、温度、圧力、エネルギーの単位について述べる。

(1) 温度の単位 温度のSI単位は、従来絶対温度、ケルビン温度などとよばれていたものである。単位記号はKであり、°Kではない。このほか、セルシウス温度（セ氏温度ともいう。記号°C）も使われる。両者の関係は

$$T/K = t/^{\circ}\text{C} + 273.15 \quad (1-1)$$

で与えられる（単位換算の具体例は例題1-3-3）。

(2) 圧力の単位 ふつう使われる単位には、

(i) SI単位. Pa

(ii) CGS単位. bar, mbar (= 10^{-3} bar)

(iii) 慣用単位. atm, Torr [= (1/760) atm], mmHg (= 1 Torr)²⁾

の3系列がある。(ii)と(i)との関係は

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}, \quad 1 \text{ mbar} = 10^2 \text{ Pa} = 1 \text{ hPa}$$

と簡単であるが、(iii)と(i)との関係は簡単ではなく

$$1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa}, \quad 1 \text{ mmHg} = 1 \text{ Torr} = (101\,325/760) \text{ Pa} = 133.322 \text{ Pa}$$

である。単位換算表を資料7（後見返し）、換算の計算例を例題1-3-4にあげる。

(3) エネルギーの単位 常用されている単位はさらに多いが、この本でひんばんに使われるものは、

(i) SI単位. J, kJ (= 10^3 J)

(ii) 慣用単位. cal, kcal (= 10^3 cal)

(iii) 慣用単位. $\text{m}^3 \text{ atm}$, $\text{dm}^3 \text{ atm}$ (= $10^{-3} \text{ m}^3 \text{ atm}$), $\text{m}^3 \text{ mmHg}$ [= (1/760) $\text{m}^3 \text{ atm}$], ……

の3系列である。各系列間の関係は、

$$1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}, \quad 1 \text{ kcal} = 4.184 \text{ kJ}$$

$$1 \text{ m}^3 \text{ atm} = 101\,325 \text{ J}, \quad 1 \text{ m}^3 \text{ mmHg} = (101\,325/760) \text{ J} = 133.322 \text{ J}$$

¹⁾ たとえば、cal（カロリー）は、かつては“純水1gを1atmの圧力下で14.5°Cから15.5°Cまで昇温させるのに必要な熱量”と定義されていたが、現在では熱化学カロリーとよばれる、SI単位により1cal₁₅ = 4.184 Jと定義された値が用いられている。

²⁾ mmHgの定義は、“高さ1mm、密度13.5951g/cm³の液体が、980.665cm/s²の重力のもとで及ぼす圧力”である。1mmHgと1Torrの差は 2×10^{-7} Torr以下だから、実質的には1mmHg = 1Torrとしてさし支えない。

4 1章 化学計算法

$$1 \text{ m}^3 \text{ atm} = (101\,325/4.184) \text{ cal} = 24\,217.3 \text{ cal}$$

である。単位換算表を資料7（後見返し）、換算の計算例を例題1・3・5にあげる。

1・1・1 位どり接頭語の使い方

例題 つぎの量を、位どり接頭語をはずしたSI基本単位で表わせ。

(i) 6.4 kK, (ii) 1 mg, (iii) 22 nm, (iv) 5 cm³, (v) 5 mmol dm⁻³

[解] (i) $6.4 \times 10^3 \text{ K}$, (ii) 10^{-6} kg , (iii) $2.2 \times 10^{-8} \text{ m}$

(iv) $5 \times 10^{-6} \text{ m}^3$ [$\because 1 \text{ m}^3 = (10^2 \text{ cm})^3 = 10^6 \text{ cm}^3$]

(v) 5 mol m^{-3} [$\because 1 \text{ mmol dm}^{-3} = 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3} = 1 \text{ mol m}^{-3}$]

[注] (ii) 質量の基本単位はkgであってgではない。(v) モル濃度の基本単位はmol m⁻³である。ただし、従来の慣習からmol dm⁻³も多く使われている。

1・1・2 物理量の定義とSI単位との関係

例題 力は質量と加速度との積で定義される。力のSI単位N（ニュートン）をSI基本単位で表わせ。

[解] [加速度] = [長さ×時間⁻²]。ゆえに、[力] = [質量×加速度] = [長さ×質量×時間⁻²]。長さ、質量および時間のSI単位はm, kgおよびsだから、力のSI単位は

$$1 \text{ N} = 1 \text{ m kg s}^{-2}$$

で与えられる。

1・1・3 温度（ケルビン温度）とセルシウス温度との関係

例題 25.31°Cをケルビン温度で表わせ。

[解] (1・1)式に $t = 25.31^\circ\text{C}$ を代入して

$$T/\text{K} = t/^\circ\text{C} + 273.15 = 25.31 + 273.15 = 298.46$$

$$\therefore T = 298.46 \text{ K}$$

1・1・4 圧力のSI単位と慣用単位との関係

例題 つぎの圧力をSI単位で表わせ。

(i) 1032 mbar, (ii) 747 mmHg, (iii) 747 Torr, (iv) 255 atm

[解] (i) 単位換算表（資料7）により、1 bar = 10⁵ Pa。ゆえに、

$$1032 \text{ mbar} = 1.032 \text{ bar} \times 10^5 \text{ Pa/bar} = 1.032 \times 10^5 \text{ Pa (または } 103.2 \text{ kPa)}$$

(ii) 1 mmHg = 133.322 Paだから、

$$747 \text{ mmHg} = 747 \text{ mmHg} \times 133.3 \text{ Pa/mmHg} = 9.96 \times 10^4 \text{ Pa (または } 99.6 \text{ kPa)}$$

(iii) 1 Torr = 1 mmHgだから、答は前問と同じ。

(iv) 1 atm = 1.01325 × 10⁵ Paだから、

$$255 \text{ atm} = 255 \text{ atm} \times 1.013 \times 10^5 \text{ Pa/atm} = 2.58 \times 10^7 \text{ Pa (または } 25.8 \text{ MPa)}$$

〔注〕 数値の精度については1.2節を参照のこと。

1-1-5 エネルギーのSI単位と慣用単位との関係

例題 気体定数は $R = 8.206 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ である。これをSI単位およびcal単位で表わせ。

〔解〕 単位換算表(資料7)より、 $1 \text{ m}^3 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ J} = 2.42173 \times 10^4 \text{ cal}$ 。ゆえに、

$$\begin{aligned} R &= 8.206 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \\ &= 8.206 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \times 1.0133 \times 10^5 \text{ J/m}^3 \text{ atm} = 8.315 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \\ &= 8.206 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \times 2.4217 \times 10^4 \text{ cal/m}^3 \text{ atm} = 1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1} \end{aligned}$$

1.2 数値の扱い方

前節に述べたように、化学の計算の出てくる量は“数値×単位”という形で表わされる。単位については前節で考えたから、本節では数値について考える。数値はつぎの2種類にわけて考えると理解しやすい。

(1) 誤差を含む数値 測定値がこれである。測定は計器によってなされるから、測定値は計器の精度に対応する誤差を必然的に含んでいる。たとえば、質量 $16.81532\cdots\text{g}$ の物体があったとして、これを(1/10g)まで秤量できる上皿天秤で測定したとすると、16.8gという値が得られるが、小数点以下2桁目にはどのような値がくるかまったく不明である。つまり、この値は16.8gまでは信用でき、 $\pm 0.05\text{g}$ の誤差を含んでいる。このような場合、測定値は16.8g、またはよりいいいに $(16.8 \pm 0.05)\text{g}$ と書く。同様に、(1/10)mgまで秤量可能な化学天秤を使えば、16.8153gすなわち $(16.8153 \pm 0.00005)\text{g}$ という測定値が得られる。このような数値の精度を表わすのに、“有効数字何桁”とか、“小数点以下何桁まで有効”とかの言いかたをする。16.8gの場合は“有効数字3桁”、“小数点以下1桁まで有効”であり、16.8153gの場合は“有効数字6桁”、“小数点以下4桁まで有効”である¹⁾。なお、計算に定数がいられる場合も、定数の多くは測定された値であるから、上と同じ考え方で扱えばよい。

(2) 誤差を含まぬ数値 定数のあるものは、上とちがって定義された数値である。たとえば、炭素の質量数12の同位体の原子量12は、測定値ではなく定義された値である。これは誤差をまったく含まぬ値であり、いわば $12.00000\cdots$ として扱えばよい。このほか、計算問題には、モデルとしての数値がしばしば与えられる。たとえば、“1gの水に含

¹⁾ 小数点以下の末尾の数が0であっても省略してはならない。たとえば、16.800gは $(16.800 \pm 0.0005)\text{g}$ を意味するが、16.8gと書くと $(16.8 \pm 0.05)\text{g}$ の意味になってしまう。