

保存則を基礎とした表計算ソフトによる化学平衡計算

○向井 浩（京都教育大学）

キーワード：化学平衡、表計算ソフト、保存則、物質収支則、電気的中性則

1. はじめに

化学平衡計算は、高等学校化学Ⅱで扱われる、化学反応の量的関係を学ぶ重要な学習内容である。しかし、計算を含むため、高校生にとって理解が難しい内容の一つでもある。一方、複雑な計算に便利な道具として表計算ソフトがあり、高校生にも利用可能である。このため、化学平衡計算に表計算ソフトを用いれば学習に効果的であると期待できる。

演者らは、表計算ソフトを用いた酸塩基平衡の計算方法について提案^{1,2)}し、高校生を対象に教育実践³⁾を行ってきた。これらの化学平衡計算においては、物質収支則や電気的中性則といった保存則に立脚した考え方を重視している。教科書に見られる、化学平衡の法則から導出する近似計算とは対照的である。

本発表では、保存則を基礎とした表計算ソフトによる化学平衡計算の方法と特色について、新たに改良した点も含めて述べる。

2. 方法

2.1. 方程式の導出

水と電解質の電離平衡に対する化学平衡の法則、電解質成分の物質収支則、及び、水溶液の電気的中性則から連立方程式を立て、これを解いて pH を求める方程式を導出した。酢酸ナトリウム水溶液の例では次式となる。

$$C_{Na} + 10^{-pH} - K_w / 10^{-pH} - C_{OAc} \{ K_a / (10^{-pH} + K_a) \} = 0$$

2.2. 表計算ソフトによる計算

表計算ソフトとして、Microsoft Office Excel 2007 を用いた。式で用いる Excel のセル、セル範囲、行、列に名前を定義し、文字式の通りに式を入力できるようにした。方程式を解くには、ワークシート関数を用いる方法^{1,2)}、

または、Excel のソルバーを用いた。

3. 結果

水溶液の pH と滴定曲線を計算で求めた。例として、pH の結果を図に示す。H₂O、0.01 mol L⁻¹ HCl、NaOH、CH₃COOH、CH₃COONa 水溶液の pH を算出した。ワークシート上に、溶質濃度・平衡定数の値、塩素・ナトリウム・酢酸についての物質収支の関係、及び、方程式を解いて得られた pH が示されている。

material	H2O	HCl	NaOH	HOAc	NaOAc
conc		Ca0	Cb0	Cac0	Csac0
value		0.01	0.01	0.01	0.01
material	H2O			HOAc	
constant	Kw			Ka	
value	1.00E-14			1.75E-05	
title	H2O	HCl	NaOH	HOAc	NaOAc
CCl		0.01			
CNa			0.01		0.01
COAc				0.01	0.01
pH		7	2	12	3.4
					8.4

図 水溶液の pH を計算するワークシート。

4. 考察

本法の特色として、次のことが挙げられる。計算そのものより、その背景にある法則を重視するので、原理についての理解が深まる。特に、物質収支則と電気的中性則について着目できる。近似式を用いないので、濃度条件の制約を受けない。定義した名前を用いるので、文字式通りに式を入力することができる。

- 1) 向井浩他, 化学と教育 **2005**, 53, 714.
- 2) 宗林由樹・向井浩, 基礎分析化学, サイエンス社, **2007**, pp.76-79.
- 3) 向井浩他, 化学と教育 **2010**, 58, 376.