

二成分系溶液の組成とそれらの相互変換式に関する再検討（1）

— 濃度、コンテンツ、分率、および比の相互変換 —

中 川 徹 夫

Revisiting Compositions of Binary Solutions and Their Interconversion Equations, Part 1

— Interconversions of Compositions among Concentrations, Contents, Fractions, and Ratios —

NAKAGAWA Tetsuo

要 旨

本研究では、二成分系溶液の様々な組成を3種類の示強性量に分類した。これらの量は、溶質の示量性量を、(1) 溶液の示量性量、(2) 溶質と溶媒の示量性量の和、および、(3) 溶媒の示量性量で除すことで得られる。そして、濃度、コンテンツ、分率、および比に関する相互変換について系統的に検討した。濃度については、モル濃度 (物質濃度)、数濃度、質量濃度、体積濃度、コンテンツについては、モルコンテンツ (物質濃度)、数コンテンツ、体積コンテンツ、分率については、モル分率 (物質分率)、質量分率、体積分率、比については、モル比 (物質比)、質量比、体積比に関する相互変換式を誘導し、得られた結果を表に整理した。エタノールの質量分率が0.500のエタノール水溶液を例にして、この中のエタノールの種々の組成を定義と相互変換式から算出したところ、両者は完全に一致した。組成の相互変換式は単純かつ平易であり、溶液科学の議論に有用である。

キーワード：二成分系溶液、組成、濃度、分率、相互変換

Abstract

In this study, we have classified various compositions of binary solutions into three intensive properties. These compositions are obtained from dividing the extensive properties of solute by the extensive properties of (1) solution, (2) the sum of solute and solvent, and (3) solvent. We have systematically investigated interconversion relations among concentrations, contents, fractions, and ratios. In concrete, we have derived interconversion equations on concentrations among molar (amount), number, mass, and volume concentrations, on contents among mole (amount), number, and volume contents, on fractions among mole (amount), mass, and volume fractions, and on ratios among mole (amount), mass, and volume ratios, and summarized these derived equations in tables. We have also calculated various compositions of ethanol in an aqueous ethanol solution which mass fraction of ethanol is 0.500 using both definition equations and derived interconversion equations. Calculated composition values using definition equations are in complete agreement with ones using interconversion equations. These equations are simple and plain, and therefore they are useful for solution science.

Keywords: binary solution, composition, concentration, fraction, interconversion

1 はじめに

混合物中のある成分を表す示量性を、混合物全体（あるいは各成分の総和やその成分を除いた残りの成分の総和）を表す示量性で除して得られる示強性は、組成とよばれる。示量性としては、質量 m 、体積 V 、物質 n などがよく用いられる。代表的な組成として、モル濃度（物質濃度） n_i/V (n_i : 成分 i ($= 1, 2, 3, \dots$) の物質、 V : 混合物の体積)、モル分率（物質分率） $n_i/(n_1 + n_2 + n_3 + \dots)$ 、質量分率 $m_i/(m_1 + m_2 + m_3 + \dots)$ (m_i : 成分 i ($= 1, 2, 3, \dots$) の質量) などが挙げられる。

混合物のうち、溶質（固体、液体、気体のいずれでも良い）と溶媒（液体）の二種類の成分だけからなり、溶質が溶媒和分子（例えば、水和水など）を含まず、しかも溶液中で電離しない二成分系溶液（液体）は、最も基本となる溶液であり、教材論の視点からも興味深い。二成分系溶液は、小学校・中学校理科や高等学校化学でも頻繁に登場するが、その大部分は溶媒が水の水溶液である。

溶液の組成は、前述のモル濃度、モル分率、質量分率に加え、質量濃度、体積濃度、体積分率、質量モル濃度など、さまざまな形式で表示される。このように、組成の表示は多様であるため、二成分系溶液を扱う際、ある組成を別の組成に変換する必要がある。たとえば、高等学校化学で、未知の濃度の水酸化ナトリウム水溶液を、質量パーセント濃度（質量百分率）3.00%、つまり、質量分率0.0300の硫酸で滴定する場合、まずこの値をモル濃度に変換しなければならない。また、校種にかかわらず、実験室や準備室の薬品庫に保管された試薬類のラベルには、さまざまな組成で表示されている場合も多く、必要に応じて、組成の変換を行わなければならない。

これまでに二成分系溶液の組成に関しては、いくつかの報告がある¹⁻⁵⁾。しかし、組成の相互変換¹⁻⁴⁾に関しては、質量分率、モル分率、体積分率、モル濃度、質量モル濃度など、いくつかの限定された組成のみが対象にされたにすぎず、系統的な相互変換式の誘導はなされていない。そこで、二成分系溶液組成の系統的な相互変換に関しては、再考の余地がある。

本研究では、二成分系溶液の組成を3種類に大別し、濃度、コンテンツ、分率、および比の相互変換式を系統的に誘導した。そして、得られた相互変換式の有用性についても検討した。なお、物理量の記号は、Cvitaš⁶⁾、IUPACのGold Book⁷⁾およびGreen Book⁸⁾の表記に準拠した。

2 二成分系溶液の組成の分類

2-1 溶質、溶媒、成分

本研究では、溶質と溶媒の2成分からなる二成分系溶液を研究の対象とし、溶質を成分1、溶媒を成分2とする。ただし、溶解前の溶質は、水和水のような溶媒和分子を含まない非電解質と仮定し、溶質（成分1）の組成に着目して議論する。なお、溶液調製前の成分1および成分2に関する物理量については、物理量の記号の右下に添字1および2を付して表現する。添

字のない物理量は、調製された溶液に関する物理量を意味する。また、アボガドロ定数を N_A で表し、各成分や溶液の密度を d 、モル質量を M とする。

二成分系溶液の様々な組成を、溶質の示量性を、(1) 溶液の示量性、(2) 溶媒と溶質の示量性の和、および (3) 溶媒の示量性で除して得られる 3 種類の示強性に分類し、相互変換式の誘導を試みた。

2-2 組成の分類

2-2-1 濃度とコンテンツ

混合前の溶質の示量性を、混合後の溶液の示量性で除した組成のうち、溶液を体積 V で表現した場合は濃度^{6,7)}とよばれ、溶液関連の研究を行う際に最も重要視される。慣用的に、質量パーセント濃度（質量百分率、質量分率を100倍した値）や質量モル濃度などは、高等学校化学では濃度として扱われるが⁹⁾、いずれも溶液の示量性が V ではないので、厳密には、これらの組成は濃度ではない。

溶質を物質質量 n_1 、粒子数 N_1 、質量 m_1 、体積 V_1 で表した場合の濃度が、それぞれ、モル濃度（物質濃度） c_1 、数濃度 C_1 、質量濃度 ρ_1 、体積濃度 σ_1 であり、次式で定義される⁷⁾。

$$c_1 = n_1/V \quad (1)$$

$$C_1 = N_1/V \quad (2)$$

$$\rho_1 = m_1/V \quad (3)$$

$$\sigma_1 = V_1/V \quad (4)$$

溶液の示量性が質量 m の場合の組成はコンテンツ (content)⁶⁾といわれる。モルコンテンツ（物質濃度コンテンツ） k_1 、数コンテンツ K_1 、体積コンテンツ κ_1 は、次式により定義される^{7,10)}。

$$k_1 = n_1/m \quad (5)$$

$$K_1 = N_1/m \quad (6)$$

$$\kappa_1 = V_1/m \quad (7)$$

2-2-2 分率

分率^{6,7)}は、混合前の溶質の示量性を、混合前の溶質と溶媒の示量性の和で除した組成である。溶質、溶媒ともに物質質量 n 、質量 m 、体積 V で表した場合の分率が、それぞれ、モル分率（物質分率） x_1 、質量分率 w_1 、体積分率 ϕ_1 であり、次式で定義される^{7,11)}。

$$x_1 = n_1/(n_1 + n_2) = n_1/n \quad (8)$$

$$w_1 = m_1/(m_1 + m_2) = m_1/m \quad (9)$$

$$\phi_1 = V_1 / (V_1 + V_2) \quad (10)$$

2-2-3 比

比⁶⁾は、混合前の溶質の示量性を、混合前の溶媒の示量性で除した組成である。各成分を物質質量 n 、質量 m 、体積 V で表した場合の比が、それぞれ、モル比（物質質量比） $\tau_{1,2}$ 、質量比 $\xi_{1,2}$ 、体積比 $\psi_{1,2}$ であり、次式で定義される^{7,12)}。

$$\tau_{1,2} = n_1 / n_2 \quad (11)$$

$$\xi_{1,2} = m_1 / m_2 \quad (12)$$

$$\psi_{1,2} = V_1 / V_2 \quad (13)$$

3 二成分系溶液の組成の相互変換

3-1 濃度の相互変換

3-1-1 c_1 と C_1 の相互変換

式(1)、(2)より、

$$c_1 = n_1 / V = (N_1 / N_A) / V = (N_1 / V) / N_A = C_1 / N_A \quad (14)$$

$$C_1 = N_A c_1 \quad (15)$$

が得られる。

3-1-2 c_1 と ρ_1 の相互変換

式(1)、(3)より、

$$c_1 = n_1 / V = (m_1 / M_1) / V = (m_1 / V) / M_1 = \rho_1 / M_1 \quad (16)$$

$$\rho_1 = M_1 c_1 \quad (17)$$

が得られる。

3-1-3 c_1 と σ_1 の相互変換

式(1)、(4)、(16)より、

$$c_1 = n_1 / V = (m_1 / V) / M_1 = (d_1 V_1 / V) / M_1 = (V_1 / V) (d_1 / M_1) = d_1 \sigma_1 / M_1 \quad (18)$$

$$\sigma_1 = M_1 c_1 / d_1 \quad (19)$$

が得られる。

3-1-4 C_1 と ρ_1 の相互変換

式(2)、(3)、(16)より、

$$C_1 = N_1/V = n_1 N_A/V = N_A n_1/V = N_A \rho_1/M_1 \quad (20)$$

$$\rho_1 = M_1 C_1/N_A \quad (21)$$

が得られる。

3-1-5 C_1 と σ_1 の相互変換

式(2)、(4)、(18)より、

$$C_1 = N_1/V = n_1 N_A/V = N_A n_1/V = d_1 N_A \sigma_1/M_1 \quad (22)$$

$$\sigma_1 = M_1 C_1/(d_1 N_A) \quad (23)$$

が得られる。

3-1-6 ρ_1 と σ_1 の相互変換

式(3)、(4)より、

$$\rho_1 = m_1/V = d_1 V_1/V = d_1 \sigma_1 \quad (24)$$

$$\sigma_1 = \rho_1/d_1 \quad (25)$$

が得られる。

式(14)–(25)の結果を、表 1 に整理した。

表 1 濃度の相互変換表

	c_1	C_1	ρ_1	σ_1
$c_1 =$	c_1	C_1/N_A	ρ_1/M_1	$d_1 \sigma_1/M_1$
$C_1 =$	$N_A c_1$	C_1	$N_A \rho_1/M_1$	$d_1 N_A \sigma_1/M_1$
$\rho_1 =$	$M_1 c_1$	$M_1 C_1/N_A$	ρ_1	$d_1 \sigma_1$
$\sigma_1 =$	$M_1 c_1/d_1$	$M_1 C_1/(d_1 N_A)$	ρ_1/d_1	σ_1

3-2 コンテントの相互変換

濃度の相互変換の計算を行う際、変化したのは溶質の物理量のみで、溶液の体積 V は不変である。コンテントに関しても、溶液の質量 m は不変であるので、濃度と同様の手法で変換式を誘導できる。結果のみを表 2 に示す。

表 2 コンテントの相互変換表

	k_1	K_1	κ_1
$k_1 =$	k_1	K_1/N_A	$d_1 \kappa_1/M_1$
$K_1 =$	$N_A k_1$	K_1	$d_1 N_A \kappa_1/M_1$
$\kappa_1 =$	$M_1 k_1/d_1$	$M_1 K_1/(d_1 N_A)$	κ_1

3-3 分率の相互変換

3-3-1 x_1 と w_1 の相互変換

式(8)より、

$$x_1 = n_1/(n_1 + n_2) = (m_1/M_1)/(m_1/M_1 + m_2/M_2) = M_2 m_1/(M_2 m_1 + M_1 m_2) \quad (26)$$

となる。分母、分子を $m = m_1 + m_2$ で除すと、式(9)より、

$$\begin{aligned} x_1 &= (M_2 m_1/m)/(M_2 m_1/m + M_1 m_2/m) = M_2 w_1/(M_2 w_1 + M_1 w_2) \\ &= M_2 w_1/[M_2 w_1 + M_1(1 - w_1)] \end{aligned} \quad (27)$$

が得られる。式(27)を w_1 について解くと、

$$w_1 = M_1 x_1/[M_1 x_1 + M_2(1 - x_1)] \quad (28)$$

となる。なお、式(27)、(28)は、すでに中川が誘導している³⁻⁴⁾。

3-3-2 x_1 と ϕ_1 の相互変換

式(8)、(26)より、

$$x_1 = n_1/(n_1 + n_2) = M_2 m_1/(M_2 m_1 + M_1 m_2) = d_1 M_2 V_1/(d_1 M_2 V_1 + d_2 M_1 V_2) \quad (29)$$

となる。分母、分子を $V_1 + V_2$ で除すと、式(10)より、

$$\begin{aligned} x_1 &= [d_1 M_2 V_1/(V_1 + V_2)]/[d_1 M_2 V_1/(V_1 + V_2) + d_2 M_1 V_2/(V_1 + V_2)] \\ &= d_1 M_2 \phi_1/(d_1 M_2 \phi_1 + d_2 M_1 \phi_2) = d_1 M_2 \phi_1/[d_1 M_2 \phi_1 + d_2 M_1(1 - \phi_1)] \end{aligned} \quad (30)$$

が得られる。式(30)を ϕ_1 について解くと、

$$\phi_1 = d_2 M_1 x_1/[d_2 M_1 x_1 + d_1 M_2(1 - x_1)] \quad (31)$$

となる。

3-3-3 w_1 と ϕ_1 の相互変換

式(9)より、

$$w_1 = m_1/(m_1 + m_2) = d_1 V_1/(d_1 V_1 + d_2 V_2) \quad (32)$$

となる。分母、分子を $V_1 + V_2$ で除すと、式(10)より、

$$\begin{aligned} w_1 &= [d_1 V_1/(V_1 + V_2)]/[d_1 V_1/(V_1 + V_2) + d_2 V_2/(V_1 + V_2)] = d_1 \phi_1/(d_1 \phi_1 + d_2 \phi_2) \\ &= d_1 \phi_1/[d_1 \phi_1 + d_2(1 - \phi_1)] \end{aligned} \quad (33)$$

が得られる。式(33)を ϕ_1 について解くと、

$$\phi_1 = d_2 w_1/[d_2 w_1 + d_1(1 - w_1)] \quad (34)$$

となる。

式(26)–(34)の結果を、表3に整理した。

表 3 分率の相互変換表

	x_1	w_1	ϕ_1
$x_1 =$	x_1	$\frac{M_2 w_1}{[M_2 w_1 + M_1 (1 - w_1)]}$	$\frac{d_1 M_2 \phi_1}{[d_1 M_2 \phi_1 + d_2 M_1 (1 - \phi_1)]}$
$w_1 =$	$\frac{M_1 x_1}{[M_1 x_1 + M_2 (1 - x_1)]}$	w_1	$\frac{d_1 \phi_1}{[d_1 \phi_1 + d_2 (1 - \phi_1)]}$
$\phi_1 =$	$\frac{d_2 M_1 x_1}{[d_2 M_1 x_1 + d_1 M_2 (1 - x_1)]}$	$\frac{d_2 w_1}{[d_2 w_1 + d_1 (1 - w_1)]}$	ϕ_1

3-4 比の相互変換

3-4-1 $\tau_{1,2}$ と $\zeta_{1,2}$ の相互変換

式(11)、(12)より、

$$\tau_{1,2} = n_1/n_2 = (m_1/M_1)/(m_2/M_2) = (M_2/M_1) \cdot (m_1/m_2) = M_2 \zeta_{1,2}/M_1 \quad (35)$$

$$\zeta_{1,2} = M_1 \tau_{1,2}/M_2 \quad (36)$$

が得られる。

3-4-2 $\tau_{1,2}$ と $\psi_{1,2}$ の相互変換

式(11)、(12)、(35)より、

$$\begin{aligned} \tau_{1,2} &= n_1/n_2 = (M_2/M_1) \cdot (m_1/m_2) = (M_2/M_1) \cdot (d_1 V_1)/(d_2 V_2) \\ &= d_1 M_2/(d_2 M_1) \cdot (V_1/V_2) = d_1 M_2 \psi_{1,2}/(d_2 M_1) \end{aligned} \quad (37)$$

$$\psi_{1,2} = d_2 M_1 \tau_{1,2}/(d_1 M_2) \quad (38)$$

が得られる。

3-4-3 $\zeta_{1,2}$ と $\psi_{1,2}$ の相互変換

式(12)、(13)より、

$$\zeta_{1,2} = m_1/m_2 = d_1 V_1/(d_2 V_2) = (d_1/d_2) \cdot (V_1/V_2) = d_1 \psi_{1,2}/d_2 \quad (39)$$

$$\psi_{1,2} = d_2 \zeta_{1,2}/d_1 \quad (40)$$

が得られる。

式(35)–(40)の結果を、表 4 に整理した。

表 4 比の相互変換表

	$\tau_{1,2}$	$\zeta_{1,2}$	$\psi_{1,2}$
$\tau_{1,2} =$	$\tau_{1,2}$	$M_2 \zeta_{1,2}/M_1$	$d_1 M_2 \psi_{1,2}/(d_2 M_1)$
$\zeta_{1,2} =$	$M_1 \tau_{1,2}/M_2$	$\zeta_{1,2}$	$d_1 \psi_{1,2}/d_2$
$\psi_{1,2} =$	$d_2 M_1 \tau_{1,2}/(d_1 M_2)$	$d_2 \zeta_{1,2}/d_1$	$\psi_{1,2}$

4 組成の相互変換式の有用性の検証

誘導した組成の相互変換式の有用性を、具体的にエタノール水溶液の例で検証した。エタノール水溶液中の各種組成の値を、まず定義から算出し（すべての組成）、続いて相互変換式からも算出し（質量分率、質量濃度、質量比を除く残りすべての組成）、両者を比較した。

（例）エタノール50.0 g と水50.0 g を混合して調製したエタノール水溶液がある。この場合、エタノールを溶質（成分1）、水を溶媒（成分2）とし、以下のエタノールの種々の組成を算出する。ただし、混合前のエタノールの密度 d_1 を $0.789 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$ 、水の密度 d_2 を $0.998 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$ 、混合後のエタノール水溶液の密度 d を $0.914 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}$ とする（いずれも 20°C の値¹³⁾）。また、エタノールのモル質量 M_1 を $46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、水のモル質量 M_2 を $18.0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 、アボガドロ定数 N_A を $6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ とする。

（1）質量分率 w_1 、（2）モル分率（物質分率） x_1 、（3）体積分率 ϕ_1 、（4）質量濃度 ρ_1 、（5）モル濃度（物質濃度） c_1 、（6）数濃度 C_1 、（7）体積濃度 σ_1 、（8）質量比 $\xi_{1,2}$ 、（9）モル比（物質比） $\tau_{1,2}$ 、（10）体積比 $\psi_{1,2}$

（1）質量分率 w_1

（定義から算出）

式(9)より、

$$w_1 = m_1 / (m_1 + m_2) = 50.0 \text{ g} / (50.0 \text{ g} + 50.0 \text{ g}) = 0.500 \quad (\text{答}) 0.500$$

（2）モル分率（物質分率） x_1

（定義から算出）

$$n_1 = m_1 / M_1 = 50.0 \text{ g} / 46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 1.08459 \cdots \text{ mol}$$

$$n_2 = m_2 / M_2 = 50.0 \text{ g} / 18.0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 2.77777 \cdots \text{ mol}$$

式(8)より、

$$\begin{aligned} x_1 &= n_1 / (n_1 + n_2) = 1.08459 \cdots \text{ mol} / (1.08459 \cdots \text{ mol} + 2.77777 \cdots \text{ mol}) \\ &= 0.2808 \cdots \quad (\text{答}) 0.281 \end{aligned}$$

（相互変換式から算出）

式(27)より、

$$\begin{aligned} x_1 &= M_2 w_1 / [M_2 w_1 + M_1 (1 - w_1)] \\ &= 18.0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 0.500 / [(18.0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}) \cdot (0.500) + (46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}) \cdot (1 - 0.500)] \\ &= 0.2808 \cdots \quad (\text{答}) 0.281 \end{aligned}$$

式(8)の定義式に基づいて計算する場合は、まず n_1 と n_2 を算出しなければならない。これに対して、 w_1 の値と式(27)の相互変換式を利用すれば、直接 x_1 が求まる。

(3) 体積分率 ϕ_1

(定義から算出)

$$V_1 = m_1/d_1 = 50.0 \text{ g}/0.789 \text{ g}\cdot\text{mL}^{-1} = 63.3713 \cdots \text{ mL}$$

$$V_2 = m_2/d_2 = 50.0 \text{ g}/0.998 \text{ g}\cdot\text{mL}^{-1} = 50.1002 \cdots \text{ mL}$$

式(10)より、

$$\phi_1 = V_1/(V_1 + V_2) = 63.3713 \cdots \text{ mL}/(63.3713 \cdots \text{ mL} + 50.1002 \cdots \text{ mL}) = 0.5584 \cdots$$

(答) 0.558

(相互変換式から算出)

式(34)より、

$$\begin{aligned}\phi_1 &= d_2 w_1 / [d_2 w_1 + d_1 (1 - w_1)] \\ &= (0.998 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) \cdot (0.500) / [(0.998 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) \cdot (0.500) + \\ &\quad (0.789 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}) \cdot (1 - 0.500)] \\ &= 0.5584 \cdots\end{aligned}$$

(答) 0.558

式(10)の定義式に基づいて計算する場合は、まず V_1 と V_2 を算出しなければならない。これに対して、 w_1 の値と式(34)を利用すれば、直接 ϕ_1 が求まる。

(4) 質量濃度 ρ_1

(定義から算出)

$$\begin{aligned}V &= m/d = (m_1 + m_2)/d = (50.0 \text{ g} + 50.0 \text{ g})/0.914 \text{ g}\cdot\text{mL}^{-1} \\ &= 109.409 \cdots \text{ mL} = 0.109409 \cdots \text{ L}\end{aligned}$$

式(3)より、

$$\rho_1 = m_1/V = 50.0 \text{ g}/0.109409 \cdots \text{ L} = 457.00 \cdots \text{ g}\cdot\text{L}^{-1} \quad (\text{答}) 4.57 \times 10^2 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$$

(0.457 kg \cdot L $^{-1}$)

(5) モル濃度 (物質質量濃度) c_1

(定義から算出)

(2) の結果より、 $n_1 = m_1/M_1 = 1.08459 \cdots \text{ mol}$ 、(4) の結果より、 $V = 0.109409 \cdots \text{ L}$

式(1)より、

$$c_1 = n_1/V = 1.08459 \cdots \text{ mol}/0.109409 \cdots \text{ L} = 9.913 \cdots \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1} \quad (\text{答}) 9.91 \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$$

(相互変換式から算出)

式(16)より、

$$c_1 = \rho_1/M_1 = 457.00 \cdots \text{g} \cdot \text{L}^{-1}/46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 9.913 \cdots \text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \quad (\text{答}) 9.91 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$$

式(1)の定義式に基づいて計算する場合は、まず n_1 と V を算出しなければならない。これに対して、 ρ_1 と式(16)を利用すれば、直接 c_1 が求まる。

(6) 数濃度 C_1

(定義から算出)

(2) の結果より、 $n_1 = m_1/M_1 = 1.08459 \cdots \text{mol}$ だから、

$$N_1 = N_A n_1 = (6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) \cdot (1.08459 \cdots \text{mol}) = 6.52923 \cdots \times 10^{23}$$

(4) の結果より、 $V = 0.109409 \cdots \text{L}$

式(2)より、

$$C_1 = N_1/V = 6.52923 \cdots \times 10^{23}/0.109409 \cdots \text{L} = 5.967 \cdots \times 10^{23} \text{ L}^{-1} \\ (\text{答}) 5.97 \cdots \times 10^{23} \text{ L}^{-1}$$

(相互変換式から算出)

式(20)より、

$$C_1 = N_A \rho_1/M_1 = (6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}) \cdot (457.00 \cdots \text{g} \cdot \text{L}^{-1})/46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \\ = 5.967 \cdots \text{mol} \cdot \text{L}^{-1} \quad (\text{答}) 5.97 \cdots \times 10^{23} \text{ L}^{-1}$$

式(2)の定義式に基づいて計算する場合は、まず N_1 と V を算出しなければならない。これに対して、 ρ_1 の値と式(20)を利用すれば、直接 C_1 が求まる。

(7) 体積濃度 σ_1

(定義から算出)

(3) の結果より、 $V_1 = m_1/d_1 = 63.3713 \cdots \text{mL}$ 、(4) の結果より、 $V = 109.409 \cdots \text{mL}$

式(4)より、

$$\sigma_1 = V_1/V = 63.3713 \cdots \text{mL}/109.409 \cdots \text{mL} = 0.5792 \cdots \quad (\text{答}) 0.579$$

(相互変換式から算出)

式(25)より、

$$\sigma_1 = \rho_1/d_1 = 457.00 \cdots \text{g} \cdot \text{L}^{-1}/0.789 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1} = 579.2 \cdots \times 10^{-3} \quad (\text{答}) 0.579$$

式(3)の定義式に基づいて計算する場合は、まず V_1 と V を算出しなければならない。これに対して、 ρ_1 の値と式(25)を利用すれば、直接 σ_1 が求まる。 $V \neq V_1 + V_2$ なので、 $\sigma_1 \neq \phi_1$ である。

(8) 質量比 $\xi_{1,2}$

(定義から算出)

式(12)より、

$$\xi_{1,2} = m_1/m_2 = 50.0 \text{ g}/50.0 \text{ g} = 1.00 \quad (\text{答}) 1.00$$

(9) モル比 (物質質量比) $\tau_{1,2}$

(定義から算出)

(2) の結果より、

$$n_1 = 1.08459 \cdots \text{ mol}, n_2 = 2.77777 \cdots \text{ mol}$$

式(11)より、

$$\tau_{1,2} = n_1/n_2 = 1.08459 \cdots \text{ mol}/2.77777 \cdots \text{ mol} = 0.3904 \cdots \quad (\text{答}) 0.390$$

(相互変換式から算出)

式(35)より、

$$\tau_{1,2} = M_2 \xi_{1,2} / M_1 = (18.0 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}) \cdot (1.00) / 46.1 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} = 0.3904 \cdots \quad (\text{答}) 0.390$$

式(11)の定義式に基づいて計算する場合は、まず n_1 と n_2 を算出しなければならない。これに対して、 $\xi_{1,2}$ の値と式(35)を利用すれば、直接 $\tau_{1,2}$ が求まる。

(10) 体積比 $\psi_{1,2}$

(定義から算出)

(3)の結果より、 $V_1 = 63.3713 \cdots \text{ mL}$ 、 $V_2 = 50.1002 \cdots \text{ mL}$

式(13)より、

$$\psi_{1,2} = V_1/V_2 = 63.3713 \cdots \text{ mL}/50.1002 \cdots \text{ mL} = 1.264 \cdots \quad (\text{答}) 1.26$$

(相互変換式から算出)

式(40)より、

$$\psi_{1,2} = d_2 \xi_{1,2} / d_1 = (0.998 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1}) \cdot (1.00) / 0.789 \text{ g} \cdot \text{mL}^{-1} = 1.264 \cdots \quad (\text{答}) 1.26$$

式(13)の定義式に基づいて計算する場合は、まず V_1 と V_2 を算出しなければならない。これに対して、 $\xi_{1,2}$ の値と式(40)を利用すれば、直接 $\psi_{1,2}$ が求まる。

以上のように、いずれの場合も、定義から算出した組成の値と相互変換式から算出した組成の値は、有効数字3桁で完全に一致した。これより、組成の相互変換式は、いずれも正確であると判断できる。また、いずれの組成も、その定義から算出するよりも、ある組成が自明の場合は、相互変換式を用いて変換して算出する方がはるかに平易である。

今回誘導した相互変換式の利用により、濃度間 (モル濃度 c_1 、数濃度 C_1 、質量濃度 ρ_1 、体

積濃度 σ_1)、コンテンツ間 (モルコンテンツ k_1 、数コンテンツ K_1 、体積コンテンツ κ_1)、分率間 (モル分率 x_1 、質量分率 w_1 、体積分率 ϕ_1)、比間 (モル比 $\tau_{1,2}$ 、質量比 $\xi_{1,2}$ 、体積比 $\psi_{1,2}$) の相互変換が、容易に実行できるようになった。溶液科学関連の議論を行う際に、有用であろう。

5 おわりに

二成分系溶液の組成に着目して、溶質の示量性量を、(1) 溶液の示量性量、(2) 溶媒と溶質の示量性量の和、および (3) 溶媒の示量性量で除して得られる 3 種類の示強性量に分類し、相互変換式の系統的な誘導を試みた。先行研究では、一部の組成に限定した議論であったのに対して、本研究では、組成の種類ごとに、濃度、コンテンツ、分率、および比に関して系統的に相互変換式を誘導した。これより、濃度間、コンテンツ間、分率間、比間の相互変換が、容易に実行可能となった。

途中の計算過程を極力省略せずに示し、高度な数学も一切使用せず、相互変換式の誘導過程は、多項式の変形にすぎない。それゆえ、高校生や物理学や化学を専門としない大学生でも容易に追試可能であり、授業の教材としての活用も期待できる。

濃度－コンテンツ、濃度－分率、濃度－比、分率－比の相互変換に関しては、次報で論じる。

文献と註

- 1) A. P. Mills, "Derivation of Equations for the Interconversion of Concentration Units," *Journal of Chemical Education*, **42**(5), 314 (1965).
- 2) A. L. Horvath, "Concentration (weight percent)", in *Conversion Tables of Units in Science & Engineering*, Macmillan Press, London, 49-50 (1986).
- 3) T. Nakagawa, "Concentration units on the table," *Education in Chemistry*, **35**(4), 108-109 (1998).
- 4) 中川徹夫, 「高等学校化学 IB における 2 成分混合系の濃度の相互変換式の誘導とその利用」, 日本科学教育学会研究会研究報告, **14**(5), 1-4 (2000).
- 5) P. MacCarthy, "A Novel Classification of Concentration Units," *Journal of Chemical Education*, **60** (3), 187-189 (1983).
- 6) T. Cvitaš, "Quantities describing composition of mixtures," *Metrologia*, **33**(1), 35-39 (1996).
- 7) <https://goldbook.iupac.org/> (IUPAC Gold Book), 2019年2月アクセス.
- 8) E. R. Cohen, T. Cvitaš, J. G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H. L. Strauss, M. Takami, and A. J. Thor, "Quantities, Units, and Symbols in Physical Chemistry," IUPAC Green Book, 3rd Edition, IUPAC & RSC Publishing, Cambridge (2007).
- 9) たとえば、竹内敬人 他, 「改訂 化学」, 東京書籍, 43-44 (2017).、齊藤烈 他, 「化学 改訂版」, 啓林館, 57-59 (2017).、辰巳敬 他, 「改訂版 化学」, 数研出版, 74-75 (2017). など.
- 10) 質量コンテンツは、質量分率に等しいので除外している。式(5)-(7)の左辺は、紛らわしいが、それぞれ、ケー (アルファベット、小文字)、ケー (アルファベット、大文字)、カッパ (ギリシャ文字、小文字) である。なお、式(5)のモルコンテンツ (物質質量コンテンツ) は、質量モル濃度と同義ではない。質量モル濃度は、分母が溶媒の質量なので、コンテンツではない。慣例上濃度とよばれるが、比に分類される組成である。
- 11) 数分率は、モル分率 (物質質量分率) に等しいので除外している。質量 m や物質質量 n とは異なり、体積 V には加成性が成立しないので、体積濃度 σ_1 と体積分率 ϕ_1 は等価ではない。
- 12) 数比は、モル比 (物質質量比) に等しいので除外している。
- 13) "Density of Ethanol-Water Mixtures," in *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 99th edition, Section 15, J. R. Rumble (Editor-in-Chief), CRC Press, Boca Raton, 40 (2018).

(原稿受理日 2019年2月14日)