

1P03 「Excel で物理化学の解法がわかる本」を執筆して

吉村 忠与志

福井工業高等専門学校物質工学科

1. はじめに

Excel ワークシートや VBA プログラミングを通して物理化学の例題を解く手法を解説することによって、熱力学から各論に至る物理化学全般を学習するための教科書を執筆し出版した。福井高専のみならず、多くの教育機関で利用してもらうために、この教科書の利点を紹介する。

2. 執筆の趣旨

物理化学を演習していると、数式がいろいろと出現し、それらの活用に戸惑うことが多い。本書で取り上げた例題は長文読解問題であり、問題提示において用意される数値パラメータが問題解決に必要なか不要かを判断するために整理する必要がある。そこで、鉛筆とメモ用紙の代わりに Excel ワークシートを用いて整理するとそのまま計算に利用でき、試行錯誤による数式の論理性を持ってシミュレートすることができる。

さらに、ワークシートに整理することによって、物理化学問題を視覚的に整理することができ、必要な数式をやさしく組み込むことができる。問題解決のために Excel ワークシートを上手に活用できる能力はこれからの技術者に必須の課題であり、VBA も含めた情報処理能力を身に付けることは重要である。Excel ファイルを CD-R 添付したので、即時的に学習できる。

3. 内容

教科書の表紙体裁は図 1 のようである。



図 1 本の表紙

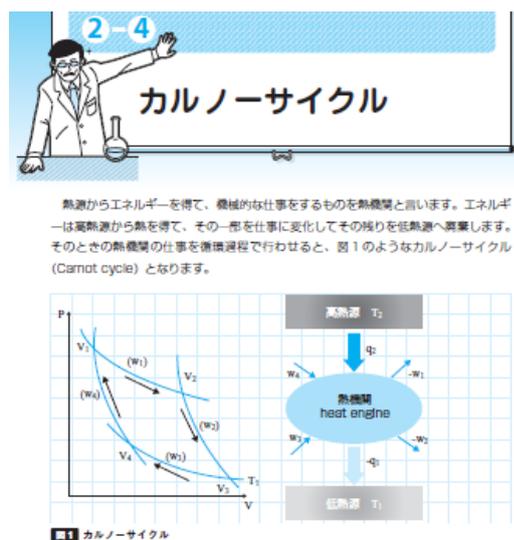


図 2 カルノーサイクル解説の紹介事例

本書のはじめには、第 0 章「Excel で演習する前に」として、Excel ワークシート上でいかに問

題点を整理するか、そして使用する数式をいかに視覚化して整理するかを図解化して解説した。Excel ワーク関数ならびに数値計算法である、ゴールシークやソルバーについての利用法も解説した。さらに、VBA による Basic マクロコードの構築によるプログラミングで問題解決することも解説した。特に、物理化学の問題解決に必要な微分法(ルンゲクッタ法)と積分法(シンプソン則)について VBA マクロコードの構築を解説した。

物理化学の内容に関しては、第 1 章「物質の状態変化」、第 2 章「熱力学」、第 3 章「相平衡」、第 4 章「化学平衡」、第 5 章「化学反応速度」、第 6 章「電気化学」について例題を 98 題提示し、問題解決のための手法を解説した。問題を視覚化するために図解を多く利用した。その一部を図 2 に紹介する。各項目において例題の解法をワークシート上で実践することはもとより、図 3 に示したように Excel/VBA を利用する事例(Excel/VBA による数値積分)も紹介し、計算手法として解説した。

例題で提示される数値を変化させることによって物理化学問題のシミュレーションを行うことができ、物理化学的現象のオーダー変化が直感できるようになることを教育目標とした。

この例題では、モル熱容量の積分による解を用いて計算しましたが、積分には数値積分法があるので、この例題で VB マクロによる数値積分を行います。数値積分にはシンプソン (simpson) のアルゴリズムを用いて VB マクロコードを作成すると、図 2 のようになります。

```
Public Sub simpson()
    t1 = Cells(8, 2)
    t2 = Cells(9, 2)
    n = Cells(10, 2)
    h = (t2 - t1) / n
    Cells(5, 5) = t1
    ft1 = Cells(4, 5)
    Cells(5, 5) = t2
    ft2 = Cells(4, 5)
    fsum = ft1 - ft2
    For i = 1 To n - 1 Step 2
        Cells(5, 5) = t1 + h * i
        fi = Cells(4, 5)
        Cells(5, 5) = t1 + h * (i + 1)
        fj = Cells(4, 5)
        fsum = fsum + 4 * fj + 2 * fi
    Next i
    Cells(11, 2) = h / 3 * fsum
End Sub
```

図 1 シンプソン法による数値積分のマクロコード

| 数値積分 シンプソン法1 | | | | | |
|-------------------------------|--------|-----------|----------|--|--|
| 水蒸気のモル熱容量 | 係数 a | 係数 b | 係数 c | | |
| $C_p = a + bT + cT^2$ | 7.218 | 2.37E-03 | 2.07E-07 | | |
| 水のモル熱容量 | 18.06 | cal/K.mol | Cp = | | |
| $\Delta H(100^\circ\text{C})$ | 9720 | cal/mol | T = | | |
| $\Delta H(27^\circ\text{C})$ | 10451 | cal/mol | | | |
| 温度 | 27 | °C | | | |
| T_1 | 300.15 | K | | | |
| T_2 | 373.15 | K | | | |
| n(分割数) | 200 | | | | |
| $\int \Delta C_p dT$ | -730.9 | cal/mol | | | |

図 2 計算結果 (2)

よって、数値積分によっても同じ結果となりました。

セル設定 マクロ作成: シート [シンプソン積分法25]

- E4セル Cells(4, 5) =(D3-B4)+E3*E5+F3*E5^2 モル熱容量の関数
- E5セル Cells(5, 5) 関数のパラメータとなる温度
- E4セル とE5セルとの間でデータをやり取りすることによって数値積分に関数を計算しています。
- B6セル =B5-B11
- B10セル 200 積分区間数(偶数)
- B11セル Cells(11, 2) 積分値の出力

シンプソンの数値積分に必要な関数の数値解をVBとセルとのやり取りで計算しています。

図 3 モル熱容量の計算をシンプソン則の数値積分で行った例題解答

4. 教育効果

物理化学の計算にはいろいろな単位に遭遇するが、教育分野では SI 単位系に統一する傾向があり、リットル(L)を用いず dm^3 を推奨しているが、本書では単位の換算に便利なワークシートを利用することもあり、いろいろな単位に慣れ親しむことを強調している。

本書を利用した現場教育は 2008 年 4 月より実施するので、教育効果については論ずることができないが、物理化学の問題解決に必要な問題点の整理・構築を学習目標に掲げ、問題の本筋を正確に捉えることのできる学習能力を涵養する。そしてその教育成果として、科学リテラシーが身に付くことを期待する。本書の利用法として、物理化学の解法を学ぶことと、化学計算を Excel/VBA により問題解決することの、2 通りの方法があり、いずれにおいても有効な教育効果が上がるものと考えられる。本書は出来立てであり、使用による教育的成果は今後の課題とする。