

脂肪酸は皮膚表面を覆っている皮脂成分の 1/3 程度を占めている成分。

### 洗浄剤

**液体タイプ各種洗浄剤 (1-13)**

洗浄剤の種類	主な成分	添加剤	対象	
水系洗浄剤	界面活性剤主体型	界面活性剤	アルカリ剤・キレート剤・再汚染防止剤・酵素など	種々の汚れ
	酸主体型	無機酸(塩酸など)・有機酸(酢酸・クエン酸など)	界面活性剤・キレート剤	金属汚れ(カルシウムや鉄さび など)
	アルカリ剤主体型	苛性ソーダ(水酸化ナトリウム)	界面活性剤・酸化剤	蛋白質・油脂類
	酸化剤主体型	酸化剤(次亜塩素酸類・過酸化水素など)	アルカリ・界面活性剤	有機物汚れ
	還元剤主体型	還元剤		鉄サビ・酸化で傷んだもの
準水系洗浄剤	有機溶剤(水和型)		油性汚れ	
非水系洗浄剤	有機溶剤	界面活性剤	油性汚れ	

界面活性剤の作用はこんなにある

洗浄に関わる界面活性剤の基本作用 (2-2)

名称	説明
浸透・湿潤作用	表面張力と界面張力を下げて、モノをぬらしやすく、浸み込みやすくする
乳化作用	そのままでは混ざり合わない水と油を、その界面張力を下げて乳液やクリームのように混ぜ合わせる
分散作用	水と固体粒子を混ぜ合わせて、分離しないようにする
可溶化作用	界面活性剤水溶液の中に油成分を溶かし込む
起泡作用	界面活性剤水溶液の中に気泡を安定に保持して泡立たせる
再汚染防止作用	いったん離脱した汚れが、再び被洗物に付着しないように働く

表面張力と界面活性剤

水に溶解して使用する界面活性剤は、水の表面張力を下げるはたらきがあります。一般の洗剤類では水の表面張力は  $30\text{mN/m}$  程度となります。すると、それが外部から異物が入り込んでくるのに抵抗する力が減ります。たとえば、アメンボが浮いている水に界面活性剤を入れると、その表面張力が低下してアメンボは水中に沈んでしまいます。

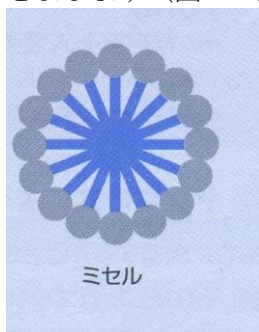
====Web=====

<http://rakuchem.com/amenbo.htm>

=====

ミセル形成と臨界ミセル濃度

水中の界面活性剤の濃度を高めていくと気/液界面に界面活性剤が吸着して表面張力が低下していきます。界面活性剤水溶液の表面張力は一般に濃度の対数に対して直線的に低下します。そして**界面が界面活性剤の飽和吸着膜で覆われると、表面張力は一定値**を示します。余剰の界面活性剤が吸着する場所がなくなるので、それ以上の濃度では界面活性剤同士が集まって**ミセル**とよばれる会合体を形成します。内側に疎水基を向け、外側に親水基を並べた構造で、水中でも安定です。このミセルを形成し始める濃度を臨界ミセル濃度 (cmc : Critical micelle concentration) とよびます (図 2-9)。





$\gamma_s = \gamma_{ws} + \cos\theta \cdot \gamma_w$  (ヤングの式)より  
 上式は次式に変形できる。  
 $\cos\theta = (\gamma_s - \gamma_{ws}) / \gamma_w$   
 接触角 $\theta$ が小さくなればぬれが促進されるので、 $\theta$ が $180^\circ$ のとき $\cos\theta$ は $-1$ 、 $\theta$ が $0^\circ$ のとき $\cos\theta$ は $+1$ となる。よって、 $\theta$ が小さくなると $\cos\theta$ は大きくなる。つまり、 $\cos\theta$ が大きくなることはぬれが促進されることにつながる。ぬれやすくなるためには、まず上式の分数の分子の $(\gamma_s - \gamma_{ws})$ が正でなければならない。表面張力 $\gamma_w$ は負の値をとることはないので、 $(\gamma_s - \gamma_{ws})$ が負になれば $\cos\theta$ が負の値となり、接触角が $90^\circ$ よりも大きくなってしまふ。よって、界面張力である $\gamma_{ws}$ が $\gamma_s$ よりも小さい値でなければ、ぬれは促進されない。さらに、一層 $\gamma_{ws}$ が小さくなると $(\gamma_s - \gamma_{ws})$ はより大きな値となるので $\cos\theta$ が大きくなって接触角が小さくなる。このように、固体基質と液体の界面張力である $\gamma_{ws}$ を小さくすることがぬれ促進につながる事がわかる。また、 $(\gamma_s - \gamma_{ws})$ が正の値であるという前提の下で、 $\gamma_w$ も小さくなればなるほど $\cos\theta$ を大きくして濡れ促進に結びつく。

水の表面張力 $\gamma_w$ 、水/基質界面張力 $\gamma_{ws}$ 、基質の表面張力 $\gamma_s$ とする  
 と次式が成立。  
 $\gamma_s = \gamma_{ws} + \cos\theta \cdot \gamma_w$   
 $\gamma_{ws}$ と $\gamma_w$ を小さくすればぬれが促進 $\theta$ される。

表面張力とヤングの式

===Web===

<http://www.fia-sims.com/p40-interface-science.html#surfacetension2>

表面張力は「表面の単位長さにはたらく力」として定義され、「力/長さ」の次元をもつ量です。単位は通常  $\text{mN/m}$  (ミリニュートン毎メートル) が用いられます。例えば水の表面張力は  $72.8\text{mN/m}$  ( $20^\circ\text{C}$ ) です。

Maxwell の枠で膜を広げるのに必要な力  $F$  は、膜の表/裏を考慮した幅  $2L$  に比例するということになります。このときの比例定数を $\gamma$ とすれば、次のように表すことができます。

$$F = \gamma(2L)$$

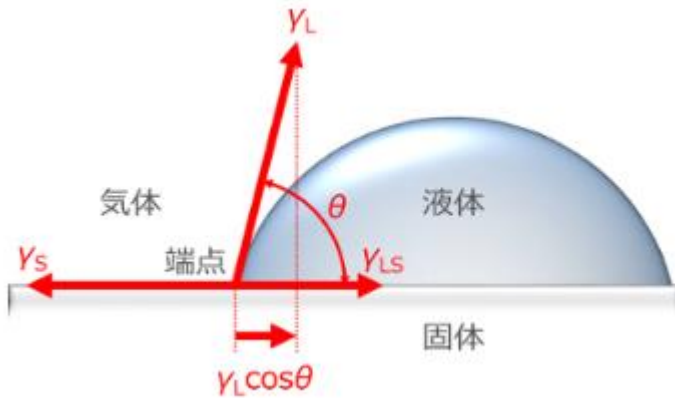
$$\therefore \gamma = \frac{F}{2L}$$

これが表面張力の定義です。力を長さで割っており、表面張力が「表面の単位長さにはたらく力」であることがわかります。

接触角 $\theta$ を支配しているものは液体、固体それぞれの表面張力 $\gamma_L$ 、 $\gamma_s$ 、及び液体/固体間の界面張力 $\gamma_{LS}$ のバランスです。

Young の式としてよく知られています。

$$\gamma_s = \gamma_L \cos \theta + \gamma_{LS}$$



固体表面上の液滴形状を水平方向からを観察したときに、液滴の輪郭曲線と固体表面との交点を「端点」とすれば、端点における接触角が右図の $\theta$ です。

このとき、端点には、固体の表面張力（気体/固体間の界面張力） $\gamma_s$ 、液体/固体間の界面張力 $\gamma_{LS}$ 、液体の表面張力（気体/液体間の界面張力） $\gamma_L$ がはたらきます。

固体の表面張力 $\gamma_s$ は、固体の表面、すなわち、気体/固体間の界面の面積を小さくしようとして、端点を左側に引っ張ります。

液体/固体間の界面張力 $\gamma_{LS}$ は、液体/固体間の界面の面積を小さくしようとして、端点を右側に引っ張ります。

液体の表面張力 $\gamma_L$ は、液体の表面、すなわち、気体/液体間の界面の面積を小さくしようとして、液滴輪郭の接線方向にはたらきますが、その水平方向の成分 $\gamma_L \cos \theta$ が端点を右向きに引っ張ります。

ぬれの状態が安定しているとき、端点は右にも左にも動かず、静止していますから、これらの3つの力はつり合っていることとなります。

=====

乳化した状態の代表的なものに牛乳が挙げられます。牛乳の大部分は水分ですが、その中に乳脂肪が含まれています。これは本来は水と混ざり合わない油性成分です。牛乳の場合は**カゼイン等のタンパク質が一種の界面活性剤**として働いて、乳脂肪を水中に安定に保持しているのです。なお、牛乳を使うと、水のみで洗浄するよりも汚れを除去しやすくなる場合があります。

墨汁もこの分散作用によってできています。墨汁はカーボンブラックをニカワというタンパク質の一種が界面活性剤として作用して分散しています。ただし、**墨汁に使われるニカワはいったん乾燥すると非常に溶けにくい物質に変わってしまいます。通常の洗濯ではほとんど除去することはできません。**界面活性のある物質が含まれていても、墨汁を洗浄に用いることはできません。

===Web=====

墨の作り方

<http://www.sumi-nara.or.jp/narasumi3.html>

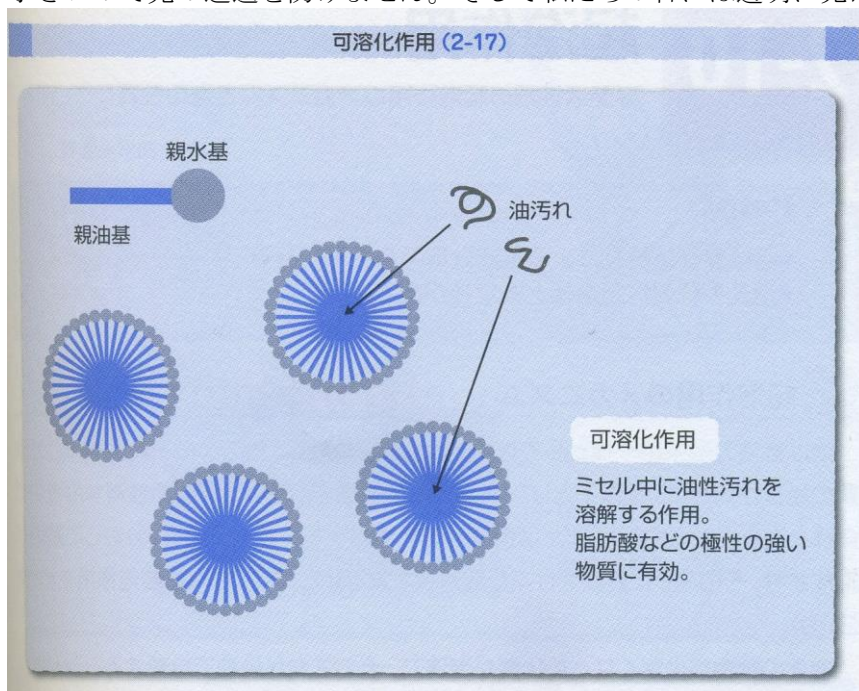
=====

可溶化作用のメカニズム

界面活性剤には油性物質などの水に溶解し難い物質を水中に溶解する作用があります。これを可溶化作用とよびます（図2-17）。cmc以上の濃度ではミセルが形成

されますが、可溶化では油汚れ等がこのミセルの中に取り込まれることとなります。脂肪酸などは非常に可溶化されやすい傾向があります。可溶化はミセルの中に溶け込んでいく作用なので、ミセルの数が多いほどこの作用は大きくなります。よって、可溶化作用を起こすためには高い界面活性剤濃度が必要です。

可溶化作用も乳化作用も油性物質を界面活性剤が取り囲んで水中に安定に保持する作用であるという点では似ていますが、両者には見た目での大きな違いがあります（図 2-18）。乳化された状態は濁っていますが、可溶化された状態は透明です。乳化は油滴の周りを界面活性剤が覆っていますが、油滴は光の波長（数百 nm）よりもずっと大きいため、光の通過を妨げます。すると私たちの目には濁って見えるのです。一方で可溶化はミセルの中に油が溶け込むのですが、ミセルは光の波長よりも小さいので光の通過を妨げません。そして私たちの目には透明に見えるのです。



石けんの表現には「石けん」「せっけん」「石鹼」「セッケン」の4種類がありますが、分野によって使われ方が異なります（図 2-27）。

石けん関連の用語 (2-27)			
	界面活性剤としての SOAP	商品としての SOAP	背景
JIS		石けん	「鹼」が当用漢字ではないため。界面活性剤と商品の区別なし
一部出版関係		せっけん or 石鹼	漢字とひらがなの混ざった「石けん」を避ける傾向
化学系学会	セッケン	せっけん	界面活性剤としての意味と商品としての意味を区別

直鎖アルキルベンゼンスルホン酸塩（LAS: Linear Alkylbenzene Sulfonate）は洗濯用合成洗剤をはじめ各種産業洗浄剤の成分として従来から多量に用いられてきた界面活性剤です。原料が比較的廉価で洗浄能力も高いのが特徴です。

...



LASは石油由来のパラフィンを原料としてアルキルベンゼンをスルホン化して作ります(図2-33)。当初はプロピレンを原料とする**分枝鎖型アルキルベンゼンスルホン酸塩**が製造されていましたが、生分解性が低いために河川や下水処理場で**発泡問題**が起きました。その問題を解決するために開発されたのがLASで、1960年頃より世界各地で用いられるようになってきました。日本でも1970年頃にはLASが多く用いられるようになり、現在は世界中で分枝鎖型アルキルベンゼンスルホン酸塩ではなくLASが使われるようになってきました。

MAP(モノアルキルリン酸エステル塩)皮膚に対する刺激性が低く、皮膚洗剤の成分として用いられる。」

水分子(H<sub>2</sub>O)は一定の法則に従って**水素イオンH<sup>+</sup>**(より正確にはH<sub>3</sub>O<sup>+</sup>のオキソニウムイオン)と**水酸化物イオンOH<sup>-</sup>**に電離します。そしてH<sup>+</sup>が多い場合が酸性、OH<sup>-</sup>が多い場合が塩基性またはアルカリ性、H<sup>+</sup>とOH<sup>-</sup>が等しい場合が中性となります。水溶液の酸性と塩基性(アルカリ性)はPH(ピーエイチ、またはペーハーと発音)で表されます。PH=7が中性で、**PHが大きいと塩基性、PHが小さいと酸性**になります。身近な物質では酸型トイレ用洗剤が強酸性、住まいの強力洗剤が強アルカリ性であり、酸・アルカリが洗浄に非常に重要であることが理解できます。

pHに関するQ & A(3-2)

H<sup>+</sup>とOH<sup>-</sup>のイオン濃度を[H<sup>+</sup>][OH<sup>-</sup>]とする。水のイオン積K<sub>w</sub>は[H<sup>+</sup>][OH<sup>-</sup>]=1.0×10<sup>-14</sup>の一定値を示す。そしてpHは水素イオン濃度の対数から次のように求める  $pH = -\log_{10}[H^+]$

質問	解答
[H <sup>+</sup> ]=[OH <sup>-</sup> ]=1.0×10 <sup>-7</sup> のときのpHは?	pH = 7 → 中性
[H <sup>+</sup> ] = 1.0×10 <sup>-2</sup> のときのpHは?	pH = 2 → 酸性 なお[OH <sup>-</sup> ] = 1.0×10 <sup>-12</sup>
中性のときの[H <sup>+</sup> ]の数は?	[H <sup>+</sup> ] = [OH <sup>-</sup> ] = 1.0×10 <sup>-7</sup> mol/L 1 mol = 6.02×10 <sup>23</sup> 個の分子だから [H <sup>+</sup> ]の数は 1.0×10 <sup>-7</sup> mol/L → 6×10 <sup>16</sup> 個/L
pHが14のときの[H <sup>+</sup> ]の数は?	1.0×10 <sup>-14</sup> mol/L → 6×10 <sup>9</sup> 個/Lの[H <sup>+</sup> ]
pHが0のときの[H <sup>+</sup> ]の数は?	1.0×10 <sup>-0</sup> mol/L → 6×10 <sup>23</sup> 個/Lの[H <sup>+</sup> ]
pHが0のときの水分子に対する[H <sup>+</sup> ]の割合は?	1Lの水の分子数: 1L = 1000g、 水の分子量 = 18、1000÷18=55.56mol よって分子数 = 55.56×6.02×10 <sup>23</sup> 個 = 3.33×10 <sup>25</sup> 個/L。pH = 0のときの[H <sup>+</sup> ]が 約6×10 <sup>23</sup> 個/Lであるから、その約50倍の値。 つまり水分子50に対して、およそ1個の[H <sup>+</sup> ]が 存在する。
pHが1のとき水分子に対する[H <sup>+</sup> ]の割合は?	[H <sup>+</sup> ]が約6×10 <sup>22</sup> 個/Lであるから、水分子500 に対して1個の[H <sup>+</sup> ]
pHが7のとき水分子に対する[H <sup>+</sup> ]の割合は?	pHが7のとき[H <sup>+</sup> ] = [OH <sup>-</sup> ] = 6×10 <sup>16</sup> 個/L。 水分子約 5×10 <sup>24</sup> (5億)に対して1個の[H <sup>+</sup> ]

pH って、こうやって出すんだ。  $pH = -\log_{10}[H^+]$

タンパク質繊維(絹、毛髪)の等電位・電位0のpHは4弱、4.5~5.5

皮脂汚れの1/3程度を占める脂肪酸（R-COOH）は弱いアルカリと接触すると中和されて水に溶けやすい石けんに変化し、また生成された石けんが界面活性剤として洗淨に寄与します（図3-9）。そのため、重曹などの弱いアルカリでも脂肪酸は容易に除去できます。

不溶性のカルシウム塩・マグネシウム塩は主として水回りの中心的な汚れとなります。水の中にはカルシウムイオンとマグネシウムイオンが含まれており、その度合いを水の硬度とよびます。たとえば、カルシウムやマグネシウムが重碳酸塩として水中に存在している場合、煮沸すると水に不溶性の炭酸カルシウムや炭酸マグネシウムとして析出します。よって、水を煮沸するポットや給湯器には不溶性のカルシウム塩やマグネシウム塩が沈着しやすいのです。また、水が蒸発することによって溶角軍成分が析出する際にも、これらの不溶性の塩が析出しやすくなります。

酸化は酸素を与えるではなかった。

酸化と還元は酸素を与えるか奪うか、水素を与えるか奪うか、または電子を放出させるか獲得させるかで表現できます（図4-1）。

酸化と還元の意味 (4-1)	
酸化	還元
酸素を与える	酸素を奪う
水素を奪う	水素を与える
電子を放出させる	電子を獲得させる

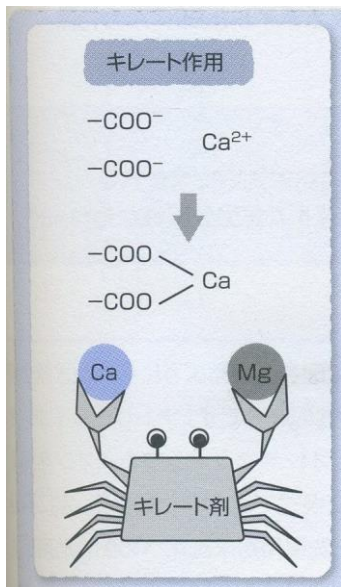
酸化反応例
$2\text{Cu} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CuO}$ 銅は酸素を与えられる
$2\text{CH}_3\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{HCHO} + 2\text{H}_2\text{O}$ メタノールは水素を奪われる
$2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$ ナトリウムは電子を放出する

還元反応
$\text{Fe}_2\text{O}_3 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{Fe} + 3\text{H}_2\text{O}$ 酸化鉄は酸素を奪われる
$2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$ 塩素は電子を獲得する

「酸」と「酸化」は混同しやすい用語です。日本語では「△△化」という言葉は性質や状態を△△に変えることを意味するので、酸とは酸化剤のことだと考える人がいてもおかしくありません。しかし、本質的に「酸」と「酸化」は関係のない用語です。「酸」は「すっぱい」の意味から、「酸化」は「酸素」から導かれた言葉です。「

「キレート」とはギリシャ語で蟹のハサミを意味する言葉で、化学的には複数の配位座を有する配位子による金属イオンへの結合を意味します。



天然のセルロースやタンパク質は空気中で放置しておくと**黄ばみ**を生じてきます。これは青紫色の光を吸収するようになるからです。

太陽光線は可視光線の400nm～700nm付近までがバランスよく含まれた光線で(図5-12)、白色に見える物質はすべての波長の光線を吸収せずに反射しています。その400nm付近の光が吸収されるようになると、白かった物体が黄ばんで見えるようになるのです。

#### 石鹸置場の白濁液は・・・

石けん水は何色でしょうか？ 多くの人が石けんを水に溶解すると少し白く濁った状態になると思っていることでしょうか。しかし、純粋な石けんを蒸留水で溶解すると透明な水溶液になります。図5-14のように蒸留で石けんを溶解した無色透明の水溶液の中に水道水を注ぐと、瞬く間に石けん水は白濁します。

この白濁の正体は金属石けんです。石けんがカルシウムイオンやマグネシウムイオンと反応してできる不溶性の物質です。水に溶けないので洗浄に働かないことはもちろん、金属石けん自体が厄介な汚れになります。



各種パラフィンの性質 (6-4)

分子式	名称	凝固点	沸点	用途	分子式	名称	凝固点	沸点	用途
CH <sub>4</sub>	メタン	-182.6	-164	燃料ガス	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	トリデカン	-6	230	灯油
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	エタン	-172	-89	燃料ガス	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	テトラデカン	5.5	251	灯油
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	プロパン	-190	-42	液化石油ガス	C <sub>15</sub> H <sub>32</sub>	ペンタデカン	10	268	軽油
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	ブタン	-135	-0.5	液化石油ガス	C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	ヘキサデカン	18	280	軽油
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	ペンタン	-129	36	溶剤	C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	ヘプタデカン	22	303	軽油・重油など
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	ヘキサン	-94	69	ガソリン	C <sub>18</sub> H <sub>38</sub>	オクタデカン	28	317	重油
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	ヘプタン	-90	98	ガソリン	C <sub>19</sub> H <sub>40</sub>	ノナデカン	32	330	重油
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	オクタン	-59	126	ガソリン	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	エイコサン	37	343	潤滑油
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	ノナン	-54	151	ガソリン					ワセリン
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	デカン	-30	174	ガソリン	C <sub>25</sub> H <sub>52</sub>	ペンタコサン	53		潤滑油
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	ウンデカン	-26	196	灯油					ワセリン
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	ドデカン	-10	216	灯油	C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	トリコンタン	66		潤滑油
									ワセリン
					C <sub>40</sub> H <sub>82</sub>	テトラコンタン	81		ワセリン
									ろうそく

C の数 ; ガソリン、灯油、軽油の順に増える

メタノールは炭化水素と混合しない。

アルコール系溶剤の特徴 (6-5)

種類	特徴
メタノール	化学式はCH <sub>3</sub> OHで、水との親和性が高く、水、アルコール類、エステル類、ケトン類等と良く混合するが、炭化水素とは一定限度しか溶解しないか、または全く混合しない。毒物及び劇物取締法における劇物に指定されており、他のアルコールに比べて毒性が強い。飲用によって麻痺・失明などを起こす危険性がある。水洗後の金属等の表面の残留汚れや界面活性剤の吸着膜の除去などに用いられる。
エタノール	化学式はC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OHで、メタノールよりもやや油性物質を溶解する性質がある。毒性が低く、有機溶剤中毒予防規則の適用溶剤から除外されている。また環境汚染のおそれもない。エタノールは酒類の重要な原料なので、酒税法との関係で洗浄用エタノールには少量のイソプロパノール等の添加剤が加えられている。殺菌力もあり、消毒用薬剤としても用いられる。
イソプロパノール	プロパノールの化学式はC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OHで、3つの炭素のうちどこに-OHが付くかで種類が変わる。末端に付くと1-プロパノール、真ん中の炭素に-OHが付いたものが2-プロパノールと呼ばれる。洗浄分野では「イソプロパノール」と表現する機会が多いが、これは2-プロパノールを意味する。メタノールやエタノールよりも油性汚れの溶解力が優れている。エタノールと同様に殺菌力がある。また安価である点も特徴である。

アニリン点は石油製品や石油留分の溶解性を表す指標の一種です。試料と等容積のアニリンを混合して冷却したときに、均一な溶液となり得る最低温度を指標とし

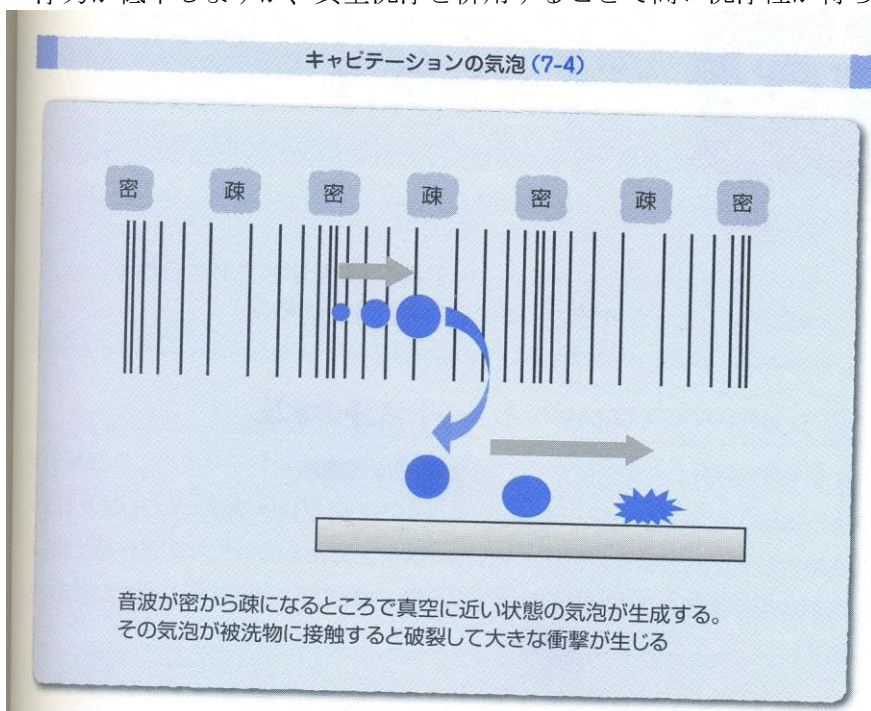
ます。アニリン点が低いほど溶解性が高いことになります。

#### 周波数の違いによる超音波洗浄の違い

超音波洗浄は用し1る周波数によって性質が大きく異なってきます(図7-3)。低周波ではキャビテーションによる強力な洗浄力が得られますが、高周波では液体分子の加速度運動による穏やかな洗浄作用で汚れが除去されます。

キャビテーションとは音波が「密-疎」に移行する領域で真空に近い気泡が生成し、それが固体基質に接触して消滅する際に大きな衝撃力が生じることをいいます(図7-4)。低周波超音波洗浄は、このキャビテーションを利用する強力な洗浄です。1MHz程度のメガソニックでは液体分子の加速度運動で、均一で穏やかな洗浄作用が得られ、超精密洗浄などに利用されます。

低周波洗浄では洗浄槽内の音波のムラに注意が必要です。アルミ箔を洗浄槽に浸し、その損傷の様子から超音波のムラ(音圧分布)が確認できます(図7-5)。また超音波洗浄で重要なのが溶存気体の存在で、それがキャビテーションを阻害して洗浄力が低下しますが、真空洗浄と併用することで高い洗浄性が得られます。





## エントロピーの意味

反応が自発的に進むかどうかは、蒸発熱や燃焼に伴う熱の出入り（エンタルピー）と原子や分子の並び方のデタラメさ（エントロピー）の2つの要素で決まります。エントロピーとは偶然に起こり得る状態か否かの尺度です（図10-8）。

### エントロピーとエンタルピー (10-8)

#### エンタルピー

エンタルピー( $\Delta H$ )は物質の転移(融解・蒸発等)、燃焼、化学反応等での熱量の変化を示す。モルエンタルピーは、水の蒸発： $40.7\text{kJmol}^{-1}$ 、氷の融解： $6.0\text{kJmol}^{-1}$ 、 $\text{H}_2(\text{g})$ の燃焼( $25^\circ\text{C}$ )： $-286\text{kJmol}^{-1}$ 、 $\text{CH}_4(\text{g})$ の燃焼( $25^\circ\text{C}$ )： $-890\text{kJmol}^{-1}$ であり、 $\Delta H < 0$ の場合は発熱反応、 $\Delta H > 0$ のときは吸熱反応であり、燃焼などの発熱反応は自発的に起こりやすい。

#### 自由エネルギーとエントロピー

反応の自発性をより正確に考えるのに自由エネルギーの概念を使う。自由エネルギー変化( $\Delta G$ ) $< 0$ ならば反応は自発的と考える。 $\Delta G$ は次の式で表される。

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

ここにGは自由エネルギー、Hはエンタルピー、Tは絶対温度、Sはエントロピーを示す。よって、 $\Delta S$ が大きくなる変化は自然に起こりやすくなる。このエントロピーは原子・分子レベルの並び方のでたらめさを表す数値である。偶然には起こりえない分子の並び(水分子ばかりの蒸留水)やエネルギー源物質はエントロピーの小さな状態である。

