

酸塩基指示薬の色と構造の関係の整理



しまだ とおる
島田 透

弘前大学教育学部
准教授

研究の目的、背景

酸塩基指示薬は溶液の液性を簡便に知るための試薬として広く用いられる。なかでもブロモチモールブルー (BTB) およびチモールブルー (TB) は、学校で使用される教科書等にも記載され、色と液性の関係についてはよく知られている。しかし、これらの分子が示す色と分子構造との関係については、これまで混乱がみられ明確ではなかった。そこで本研究では、分光学的実験手法による実験と量子化学理論に基づいた計算により、この混乱の解決に取り組んだ。

研究成果

さまざまなpHに調整した指示薬溶液を用意し、それらの可視吸収分光測定を行った。得られたスペクトルに対しケモメトリクス(化学における多変量解析)を適用することで、平衡定数のイオン強度依存性を明らかにした。この結果をもとに、色に対応した分子構造の絞り込みを行い、それらの構造に対して量子化学計算を行うことで、最終的な構造決定を行った。

決定した分子構造から予想される可視吸収スペクトルのシミュレーションも行い、実験で得られたスペクトルの特徴を再現する結果を得た。このようにして、BTBおよびTBの色と構造との関係を明らかにし、これまでの混乱を解決した。この成果は、学校教育で使用される教科書に記載されるほど広く知られた内容でさえも、完全には解明されていない部分を含むことを示すものであり、アメリカの7割の大学で採用される代表的な分析化学教科書の改訂にも貢献した。

今後の展望

本研究の成果をもとに、今後は酸塩基指示薬の色変化におけるイオン強度依存性をさらに詳細に調べていく予定である。また、実験データの解析に用いたケモメトリクスを赤外分光法や近赤外分光法にも適用することで、表面増強赤外吸収のメカニズム解明、薄膜の詳細な構造解析、農産物などの非破壊分析にも取り組んでいきたい。

主な研究資金(直接経費)

JSPS 科研費 JP18H01998/2018年度～2020年度
/13,600,000円

JSPS 科研費 JP16K13619/2016年度～2017年度
/2,900,000円

JSPS 科研費 JP26810001/2014年度～2015年度
/3,100,000円



BTB溶液の色変化



TB溶液の色変化