

## 酸塩基指示薬の色と構造の関係

(弘大教育) ○島田 透

Relationship between color and structure of acid-base indicator (*Department of Science, Faculty of Education, Hirosaki University*) ○Toru Shimada

Bromothymol blue (BTB) and thymol blue (TB), which are members of sulfonphthalein dyes, are widely used as acid-base indicators in elementary and secondary education. BTB exhibits a color of yellow in a weak acid solution, and it turns to blue via green on raising pH. TB undergoes the color changes from red to yellow in an acid solution and from yellow to blue in an alkaline solution. Although BTB and TB have a common molecular structure, the color of them seems to be different. Until now, the relationship between the colors and structure of BTB and TB has been confused, and it has been difficult to explain the difference between the colors of BTB and TB. Recent studies have succeeded in determining the molecular structure corresponding to each color of these molecules<sup>1, 2, 3)</sup>. In this presentation, I will report on the color difference between BTB and TB based on the determined structures.

**Keywords :** *Acid-base Indicator; Thymol Blue; Bromothymol Blue; Dyes of Sulfonphthalein Series*

初等中等教育において酸塩基指示薬として使用されるブロモチモールブルー (BTB) およびチモールブルー (TB) は、スルホンフタレイン系の色素である。これらの分子は溶液中の液性に応じ、BTB は酸性で黄色、中性で緑色、アルカリ性で青色、TB は酸性で赤色、中性で黄色、アルカリ性で青色を呈するとされる。BTB と TB は共通する分子骨格をもつものの、液性に対して呈する色は異なる印象を受ける。これまで、BTB と TB の色と構造の関係には混乱がみられ、BTB と TB の色の違いを説明することが困難であった。最近の研究により、これら分子のそれぞれの色に対応した分子構造の決定に成功した<sup>1,2,3)</sup>。本発表では、決定した構造に基づき、BTB と TB が呈する色の違いについて報告する。

- 1) Determination of equilibrium structures of bromothymol blue revealed by using quantum chemistry with an aid of multivariate analysis of electronic absorption spectra. T. Shimada, T. Hasegawa, *Spectrochim. Acta, Part A* **2017**, 185, 104.
- 2) 酸塩基指示薬ブロモチモールブルーの色と分子構造. 島田 透, *海洋化学研究* **2019**, 32, 65.
- 3) Determination of pH Dependent Structures of Thymol Blue Revealed by Cooperative Analytical Method of Quantum Chemistry and Multivariate Analysis of Electronic Absorption Spectra. T. Shimada, K. Tochinal, T. Hasegawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2019**, 92, 1759.