

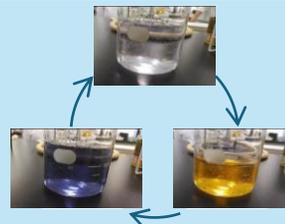
実験とシミュレーションによるBR反応の考察

A Study of BR Reaction Using Experiments and Simulations

東京都立日比谷高等学校 ○小林穂
Tokyo Metropolitan Hibiya High School ○Minori Kobayashi

動機と目的
BR反応は通常、攪拌しながら行うが、攪拌せずに行ったところ、色の変化が水面付近から起こることに気が付いた。そこで、色の変化が水面付近から起こる要因を探ることを目的として本研究を行った。

BR反応について
BR反応（Briggs-Rauscher反応）は、酸化還元反応によってI⁻とI₂が繰り返し現れ、無色→黄色→青紫色→無色……という周期的な色の変化が見られる反応である。
① $2IO_3^- + 5H_2O_2 + 2H^+ \rightarrow I_2 + 5O_2 \uparrow + 6H_2O$
② $CH_2(COOH)_2 + I_2 + O_2 \rightarrow 2HCOOH + CO_2 \uparrow + 2I^-$
 $I_2 + HCOOH \rightarrow 2I^- + CO_2 + 2H^+$
③ $5I^- + IO_3^- + 6H^+ \rightarrow 3I_2 + 3H_2O$
 $2I^- + H_2O_2 + 2H^+ \rightarrow I_2 + 2H_2O$
※②、③の反応は同時に進んでいる。
※BR反応の反応式は確定しておらず、いくつかの種類がある。



実験概要
使用薬品
A液：30%過酸化水素水150mLに純水350mLを加えた
B液：ヨウ素酸カリウム21.5g、濃硫酸5mLに純水を加え、全量を500mLとした
C液：可溶性でんぷん0.2g、マロン酸7.8g、硫酸マンガン(II)4・5水合物2.5gに純水を加え、全量を500mLとした
実験方法
調製した薬品を等量ばかりとり、A液、B液、C液の順に入れた。

予備実験
1 各実験で使用する容器（ビーカー、丸底フラスコ、試験管）で実験を行い、どの容器でも水面付近から色が変化することを確認した。
2 氷水につけて約0°Cで実験し、色の変化が水面付近から起こることと反応速度が遅くなることを確認した。
3 最初の1周期だけ攪拌し、徐々に水面付近から色が変化することを確認した。
実験
条件を一つずつ変えて、反応の様子を観察した。考察の際、各周期ではじめに色が変化した部分を反応起点と定義した。

実験番号	考えられる要因	実験方法	結果	考察
1	C液を入れる位置	駒込ピペットを用いて底付近からC液を入れた	はじめは水面付近と底付近からほぼ同時に色が変化していたが、次第に水面付近から変化するようになった。	C液を入れる位置は反応起点に影響するが、他にも要因があると考えられる。
2	空気中の酸素	写真1の装置でフラスコを真空にし、氷水につけて約0°Cで実験	水面付近から色が変化した。	空気中の物質は反応起点に影響しないと考えられる。
3	蒸発による濃度の偏り	A液、B液、流動パラフィンを順に入れ、試験管を傾けてC液を入れた	傾けている間は、水平面に対して上から色が変化した。その後は水面付近から変化した。	水面からの蒸発は反応起点に影響しないと考えられる。
4	温度の偏り	水面付近と底付近の温度を測った	グラフ1参照	部分的な温度の偏りは反応起点に影響するが、水面付近から変化する要因ではないと考えられる。
5		冷やした流動パラフィンを実験3と同様に入れた	傾けている間は写真2のように色が変化した。その後は水面付近から変化した。	
6	3種の液の密度の違い	各液の密度を測定した	表1参照	密度が反応中の挙動に影響を与える可能性があると考えられる。密度の差が小さいほど、入れる位置の影響が大きくなると考えられる。
7		C液の密度を他の2つの液に近づけたC ₁ 液、C ₂ 液を調製し、これらのC液で実験	C ₁ 液ははじめは水面付近から色の変化が起こったが、次第に均一に変化した。C ₂ 液は水面付近から変化した。	
8		密度を他の2つの液に近づけたC液を実験1と同様に底付近から入れた	C ₁ 液ははじめは水面付近から色の変化が起こったが、次第に均一に変化した。液ははじめは水面付近と底付近からほぼ同時に変化した。C ₂ 液は水面付近から変化した。	

シミュレーションによる考察
BR反応の化学反応と物質の拡散による濃度変化のシミュレーションプログラムを作成する。第一段階としてBR反応の化学反応による濃度変化のシミュレーションプログラムを作成した。結果はグラフ2のようになった。振動の原因となる、I₂とI⁻の濃度変化が確認できた。



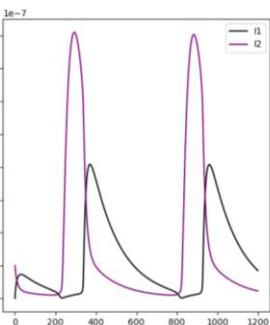
▲写真1 Picture1



▲写真2 Picture2

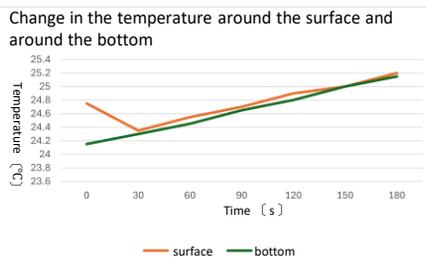
まとめ
反応起点を変化させる主な要因として、C液を入れる位置、部分的な温度の偏り、使用する3種類の液の密度の差が考えられる。また、現段階では、シミュレーションと実験結果が十分一致しており、シミュレーションによって実験結果を予測できる可能性が示された。

今後の展望
BR反応の化学反応と物質の拡散による濃度変化のシミュレーションプログラムを完成させ、シミュレーション結果と実験結果を比較する。



▲グラフ2 Graph2

The horizontal axis represents the time[s] and vertical, the concentration[mol/L].
"I1" and "I2" means I⁻ and I₂



▲グラフ1 Graph1

	密度 (g/cm ³)
A液	1.048
B液	1.043
C液	1.006
C ₁ 液	1.008
C ₂ 液	1.020

▲表1 Table1

参考文献
高校化学への化学振動反応の導入と工夫 PVAで迫るBR反応の謎～指示薬デンブンの本当の役割～https://gakusyu.shizuoka-c.ed.jp/science/sonota/ronnbunshu/R4/2230_08.pdf
BR反応におけるMn²⁺による反応挙動への影響<http://www.hikonehg-h.shiga-ec.ed.jp/blog/wp-content/uploads/2020/08/0765daf40c7ddb7d8e631260fa600100.pdf>
Oxygen Production and Numerical Simulation of the Interphase Transport in the Modified Oscillating Briggs-Rauscher Reaction