

水とアルコールの混合実験

兵庫県立豊岡高等学校生物自然科学部

3年 大津樹 菅村健也

2年 岸田菜奈 倉田瑞希 原田聖也

1年 南條拓希 足立梨乃 佛生祐哉 野田直希 奥西辰覇

動機及び目的

水とアルコールを混合すると、その体積はそれぞれの体積の和よりも減少することが知られている。この理由については二通りの異なる説明が報告されている。

1つ目は、「**大きなアルコール分子の隙間に水分子が入りこむため**」…説明1)

2つ目は、「**水は部分的に隙間の大きな構造になっており、その隙間にアルコール分子が入りこむ**」…説明2)

このことを踏まえて実験により混合のメカニズムを明らかにしようと試みた。

実験1

水とエタノールを様々な体積比で混合した。ガラス棒で攪拌した際に多量の気泡が見られたので、気泡が目視で観察できなくなるまで攪拌し、その後に体積を測定した。

<結果>

十分に攪拌した後の体積は下の表のようになった。

水とエタノールの混合(体積比)		
エタノール/水 (mL/mL)	混合後の体積(mL)	減少量(mL)
10/90	99.0	1.0
20/80	98.0	2.0
30/70	97.0	3.0
40/60	97.0	3.0
50/50	96.9	3.1
60/40	96.5	3.5
70/30	97.0	3.0
80/20	97.0	3.0
90/10	97.6	2.4

実験2

水50 mLと様々なアルコール50mLの混合実験を実験1と同様の手順で行った。

<結果>

結果は下の表のようになった。

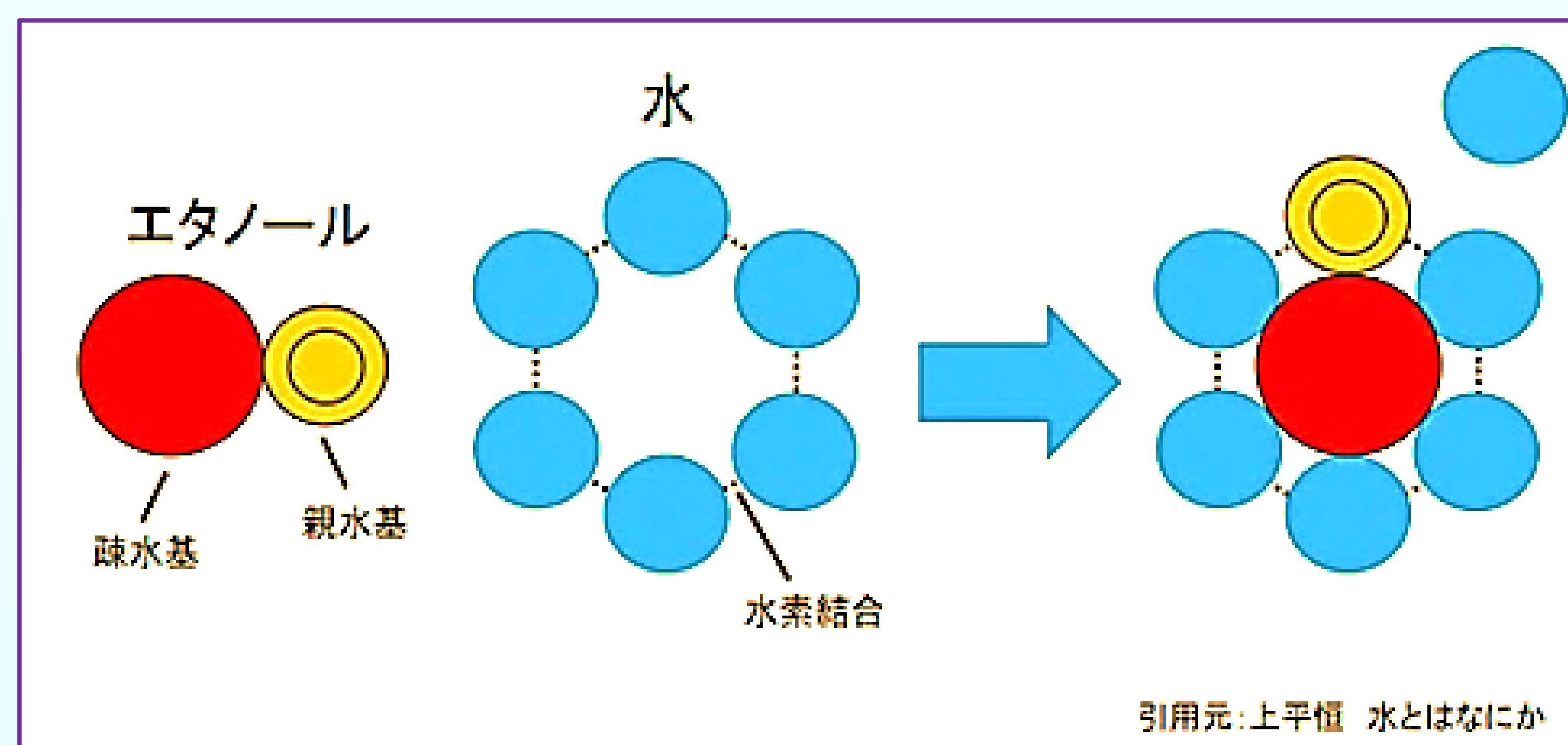
表2 水50mlと種々のアルコール50mlの混合		
アルコール	混合後の体積(ml)	備考
メタノール	96.0	多量の気泡
エタノール	96.9	多量の気泡
1-プロパノール	97.0	多量の気泡
2-プロパノール	96.0	多量の気泡
1-ブタノール	99.0	二層に分離
2-ブタノール	99.0	二層に分離
Tert-ブタノール	97.0	多量の気泡

実験で使用した二種類のプロパノールと3種類のブタノールは、化学式で表すと同じであるが体積減少量が異なった。

考察

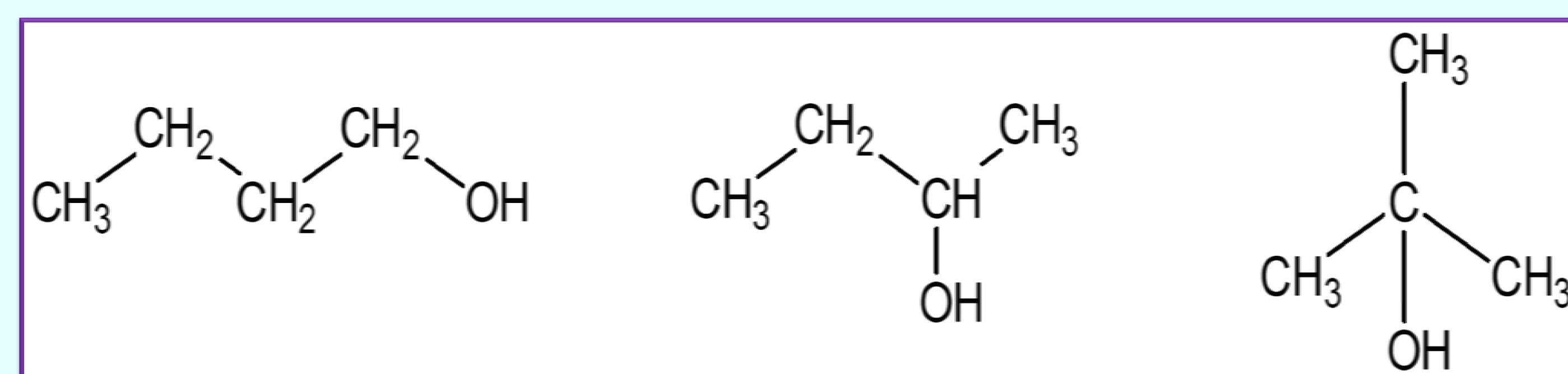
実験2の結果より、メタノール、2-プロパノールは、1-プロパノールより体積減少が大きかった。1-プロパノールと2-プロパノールは化学式で表すと同じであるが、体積減少量が異なった。

そして、1-ブタノール、2-ブタノール、*tert*-ブタノールの結果においても、化学記号で表すと $C^4H^{10}O$ と同じであるにも関わらず、*tert*-ブタノールのみ体積減少が起こった。これらの結果より、説明1) だけでは矛盾が生じると考えた。



上の図は説明2) の概念図である。アルコールの疎水基が水クラスターの中に入り込み、アルコールの水酸基が水分子と入れ替わることが起こることを示している。

また、使用した3つのブタノールについて、その構造は下の図の通りである。



1-ブタノール 2-ブタノール *tert*-ブタノール

1-ブタノール、2-ブタノールの疎水基が細長い形をしているのに対し、*tert*-ブタノールの疎水基は球の形に近い。このことから、*tert*-ブタノールの方が水クラスターの中に入りやすいと考えられ、説明2) と矛盾せず、有力なのではないかと考える。

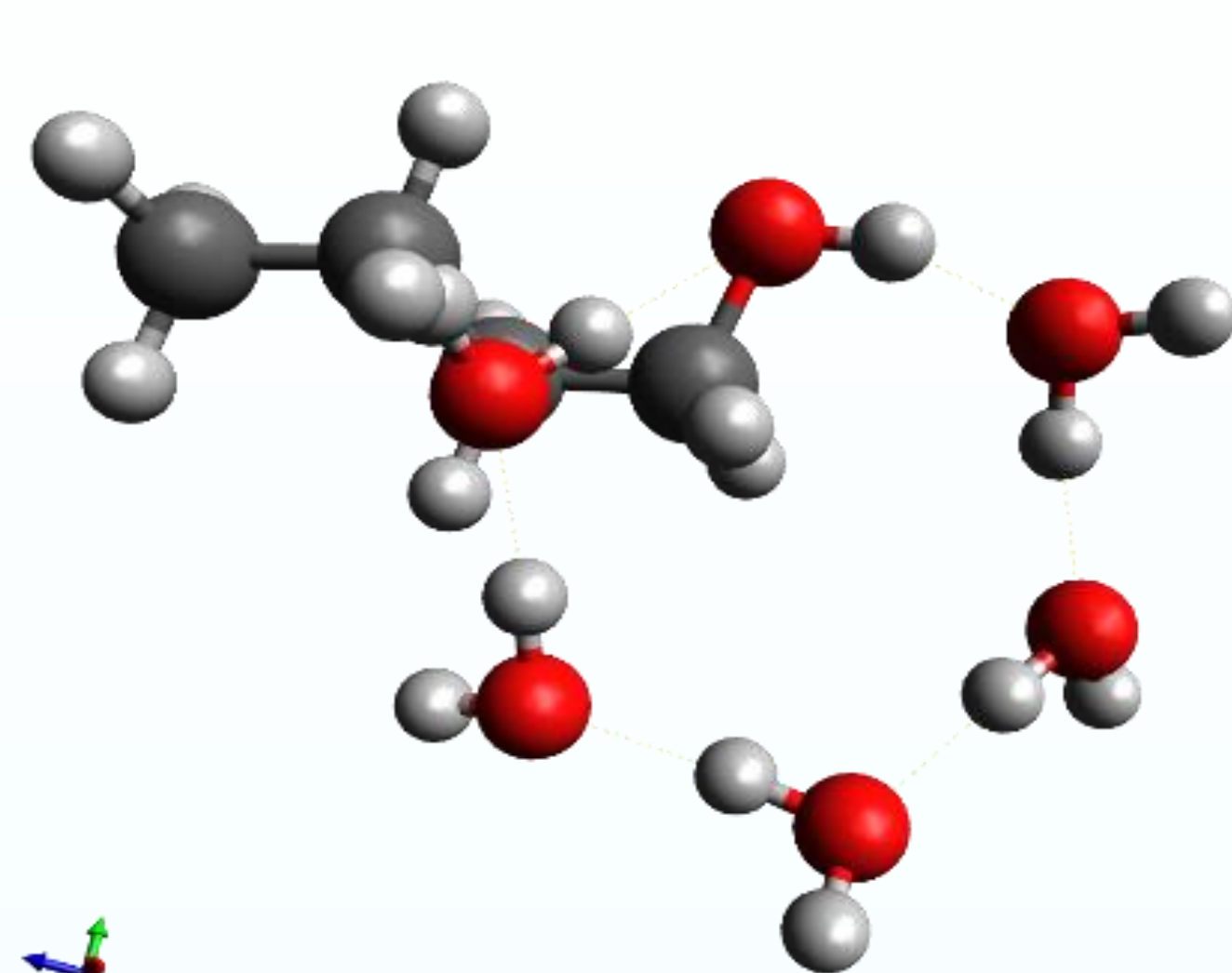
検証1

説明2)を立証するために、3種類の C_4H_9OH について、それぞれが水クラスターの中に納まるかを検討した。

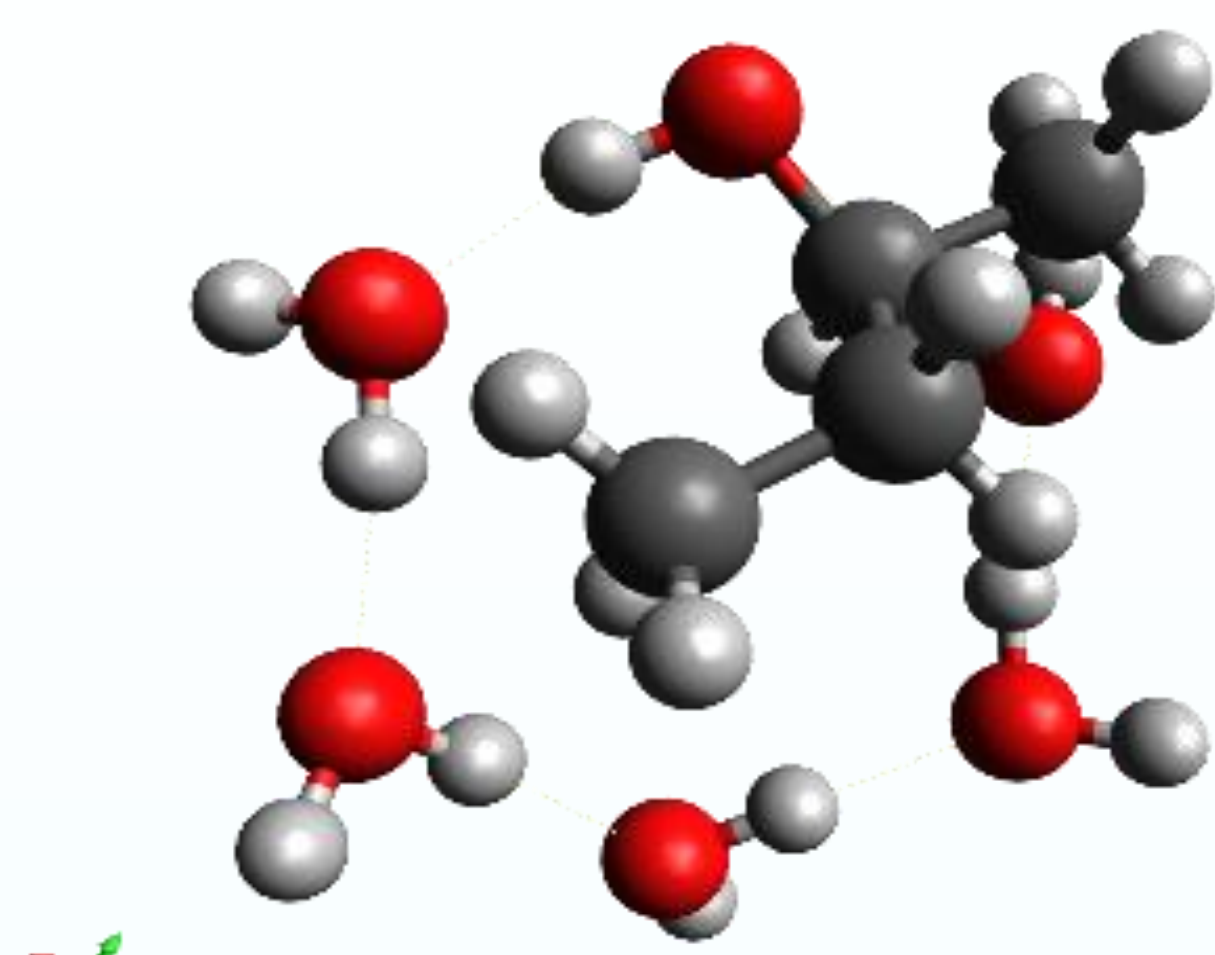
まず、立体空間で電子を自由に扱えるソフト『Avogadro』を使い水クラスターの空隙にそれぞれのアルコールが収まるかどうかをシミュレーションした。

<結果>

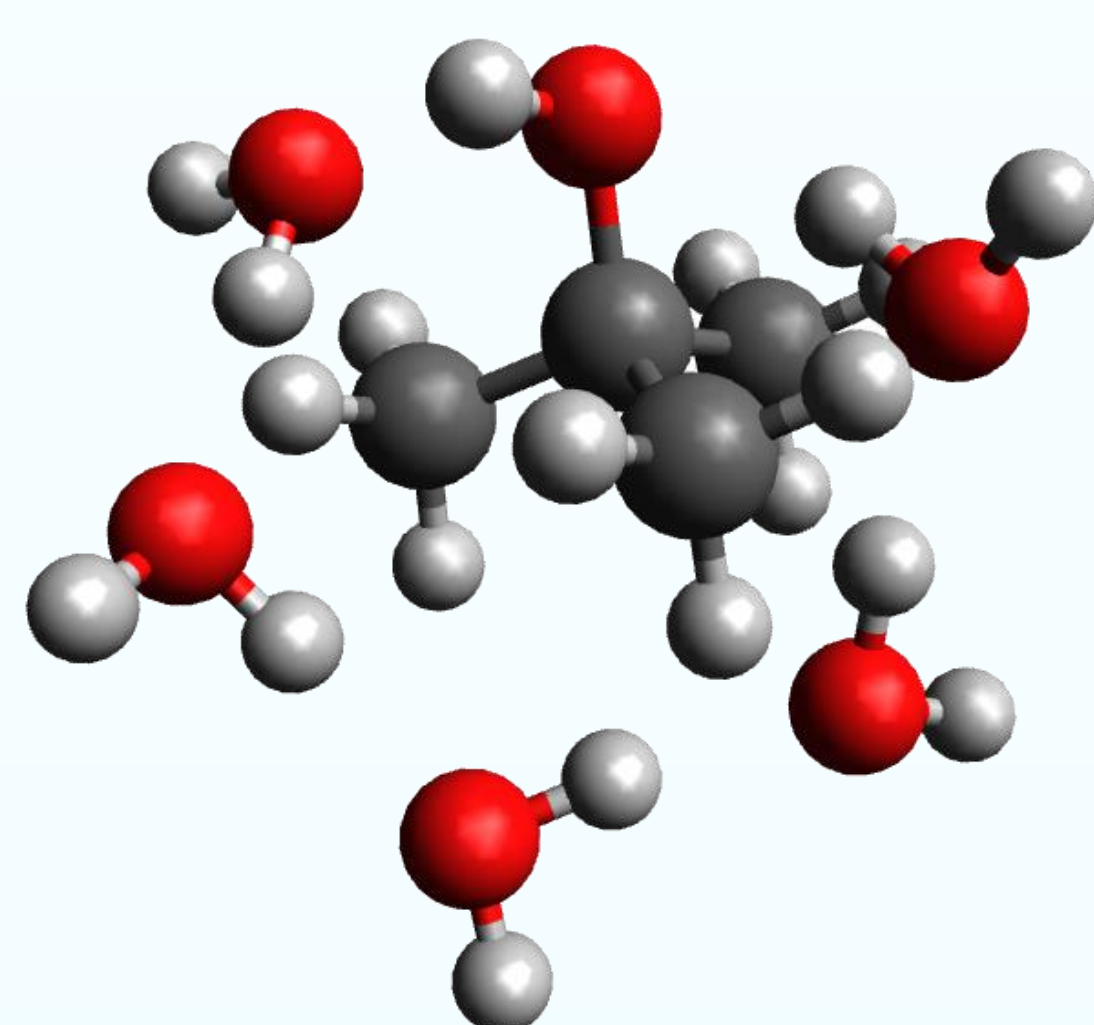
『Avogadro』でのシミュレーションの結果は、下の3つの図のようになった。



1-ブタノール



2-ブタノール



tert-ブタノール

● 3つのブタノールのうち、tert-ブタノールのみが水クラスターの中に収まるという結果になった。

1-ブタノールと2-ブタノールのアルキル基が最も長くなった配置の時、疎水基は水クラスターの中に収まりきらなかった。アルコールの疎水基のまわりを完全に水が取り囲むことができないため、溶解性が著しく低下したと考えられる。1-ブタノールと2-ブタノールの両端の炭素原子が最も近づく配座(丸まった構造)のときは、疎水基が水クラスター内からはみ出すか、疎水基が水分子に非常に近い状態になることが分かった。

よって、疎水基の炭素数は同じでも、異性体によって溶解度が異なるのは、アルキル基の形が大きく影響しており、それによって電子供与性が決まると考えられる。

検証2

水の隙間にそれぞれの $C^4H^{10}O$ が入るかを、共有結合半径の値(文献3)4))を用いて計算した。

<結果>

Tert-ブタノール
495pm~535pm

1-ブタノール
649pm~689pm

2-ブタノール
649pm~689pm
580pm~665pm

水クラスター
542pm

ここでは、水分子とブタノールを平面として扱い計算したが、こちらも検証1と同様tert-ブタノールでは疎水基が水の隙間に収まり、1-ブタノールと2-ブタノールはほとんど収まらないという結果になった。

追加実験

水とアルコールを混合する際に多量の気泡がみられたことに注目した。実験2の結果や検証の結果をうけて、混合の際生じた多量の気泡は、水クラスター内にもともと入っていた空気がアルコールによって押し出されて生じたものではないかと考えた。

そこで、アセトン50mLとメタノール50mLなど、様々な組み合わせにおける混合実験を、実験1, 2と同様の手順で行った。

<結果>

アセトンとメタノールを混合した結果は、下の表のようになった。

様々な組み合わせでの混合		
	攪拌後の体積(mL)	備考
アセトン/メタノール	98.0	泡なし
水/アセトン	95.1	多量の気泡
酢酸/メタノール	98.7	微量の気泡
水/メタノール	96.0	多量の気泡
水/酢酸	96.6	多量の気泡

アセトンとメタノールを混合した場合、体積は減少したものの、水とメタノールを混合した時のような気泡は発生しなかった。

よって水とアルコールを混合した際の体積変化、気泡の発生は、水が大きく関係しており、混合の際生じた多量の気泡は、水クラスター内にもともと入っていた空気がアルコールによって押し出されて生じたものではないかという推測は正しいと考えられる。

結論

液体の水分子は様々な会合状態を取っており、それは時々刻々変化している。**アルコールが水に溶解する際に、大きな分子であるアルコールの隙間に水分子が入り込むと同時に、水クラスターのつくる空間の中にアルコール分子が入り込むこと**によっておこると考えられる。アルコール分子がクラスター内に収まった際に、もともとそこにあった空気が追い出されるため、多量の気泡が出たのではないかと考えられる。なお、アセトンとメタノールの混合では体積は減少したが、気泡は発生しなかった。アセトンには水のようなクラスター構造がなく、閉じ込められている空気が少ないためではないかと考えられる。

反省と課題

シミュレーションや計算の結果を実証する実験データを得ることができなかった点が反省である。混合の際出てくる気泡について今後詳しく調べていきたい。

参考文献

- 1) 桑子研・竹田淳一郎著 科学検定 講談社
- 2) 上平恒 水とはなにか 講談社(2009)
- 3) 日本化学会編『化学便覧 基礎編』改訂5版(2004・丸善)』
- 4) 長倉三郎、他(編)『岩波理化学辞典』、第5版 CD-ROM版、岩波書店、1998年