

目 次

1. 有機概念図の基礎

1.1 有機概念図成立の基礎	3
有機概念図の基本条項	3
1.2 有機化合物の法則性の由来とグラフ化の基礎	5
1.3 有機化合物の性状のグラフ化	12
1.3.1 有機性の数値	13
1.3.2 無機性の数値	14
1.3.3 環状化合物の無機性の数値	18
1.3.4 表にない無機性基の数値の求め方	20
1.4 有機概念図	20
1.4.1 有機化合物のグラフ	20
1.4.2 グラフ化の例	22
1.4.3 概念図上の分布状況	25
1.5 有機化合物間の近縁関係と概念図	27
1.5.1 化学構造の近縁関係	27
1.5.2 有機，無機両性の比率近似の関係	28
1.5.3 両近縁関係の累加性	32
1.6 有機化合物の性状と概念図	34

2. 基礎的な応用

2.1 概念図による有機化合物の予測	37
2.1.1 性状既知で構造未知の場合	38
2.1.2 構造既知で性状未知の場合	41
2.2 有機溶剤の系統化と概念図	42

2.2.1	概念図上の位置と溶解性	43
2.2.2	各溶剤の溶解性分野	44
2.2.3	溶剤の軽重	48
2.2.4	溶剤が溶質に及ぼす影響	50
2.2.5	分離用溶剤の選択	50
2.2.6	再結晶（精製用）溶剤の選択	52
2.3	混合溶剤の溶解性	54
2.3.1	混合溶剤の座標の求め方	55
2.3.2	最良混合比	57
2.3.3	精製用混合溶剤の使い方	61
2.4	新溶剤の案出	62
2.5	溶解性別による物質の大区分	66
2.6	混合有機化合物の系統分離体系	68
2.6.1	半化学的分離法の例	70
2.6.2	精細分離法の例	71
2.7	クロマトグラフィーへの応用	73
2.7.1	ろ紙クロマトグラフィー	73
2.7.2	薄層クロマトグラフィー	77
2.7.3	ガスクロマトグラフィー	79
2.7.4	各種クロマトグラフィーの適用範囲の概観	83
3.	一般的な応用	
3.1	化学防災	87
3.1.1	危険物水溶液の引火点	88
3.1.2	引火点による危険物の分類	89
3.1.3	燃焼危険性による分類	91
3.1.4	化学データの訂正	92
3.2	界面化学	95
3.2.1	界面活性剤のHLB	95
3.2.2	化粧品への応用	99

3.2.3	防腐剤の性状と効力	103
3.2.4	合成潤滑油	107
3.2.5	そ の 他	108
3.3	環 境 化 学	108
3.3.1	難分解・濃縮性化合物	109
3.3.2	ヒトの癌原化合物	115
3.3.3	有機水銀化合物	118
3.3.4	水道水の異臭物質	121
3.3.5	排水処理の化学技術	124
3.3.6	有害化合物の分布範囲	126
3.3.7	環境ホルモンが化学と化学工業の将来に及ぼす影響 —有機概念図から—	127
3.4	食 品 化 学	131
3.4.1	三大栄養素	132
3.4.2	ビ タ ミ ン	133
3.4.3	食品添加物	135
3.5	染料および染色	136
3.5.1	合成繊維用染料	138
3.5.2	有機概念図による染色理論	142
3.5.3	ポリアクリロニトリルの染色	146
3.5.4	ポリプロピレン繊維の染色	151
3.5.5	染色のその他の諸問題	157
3.5.6	染料の昇華性	163
3.5.7	そ の 他	164
3.6	農 薬	164
3.6.1	農薬と界面活性剤	164
3.6.2	農薬の概念図上の分布と意義	166
3.6.3	現在の農薬の分布	170
3.6.4	魚への毒性	171
3.6.5	農薬による皮膚炎の原因物質	171

6.3	加成性の認められる諸量	250
6.4	有機概念図と溶解パラメータ	252
6.5	有機概念図の問題点	252
6.5.1	液体限界線について	253
6.5.2	匂限界線について	253
6.5.3	結晶圏について	253
6.5.4	生体濃縮性に関連して	254
6.6	他の領域で用いられる概念図	254
6.6.1	無機元素のイオンポテンシャル	254
6.6.2	その他の化学関係概念図	257
6.6.3	機械・電気部門の概念図	257
6.6.4	登山・探検のための概念図	258
6.7	概念図の未来予測	260
6.7.1	概念図ばやりの世の中	260
6.7.2	藤田の警告	261
6.8	概 念 と は	262
付 録		
1	石炭・石油の起原	265
2	九州産業技術連盟講演	271
3	有機概念図を解説した書籍・雑誌一覧	275
4	藤田 穆先生業績目録	277
5	藤田 穆先生略歴	282
索 引		283

書き込み用有機概念図および無機性基表……………前見返し

書き込み用周期表および原子量表……………後見返し

1. 有機概念図の基礎*

産業の発展によって化学製品が生活のあらゆる面に行きわたり、その大きな恩恵と場合によっては被害も見られるのが日本の現状である。これだけ化学物質の利用が進めば、化学の知識は専門の研究者だけでなく、製造、販売、利用の仕事にたずさわる人々から、家庭の主婦に至るまで、すべての人の常識にならなければ間に合わぬ時代になってきた。

このような状況の下で、プロパンなどの家庭燃料から染料、医薬品までを含めた広範な有機化合物の利用を始めとし、1,000万以上といわれる多数の化合物を対象とする有機化学の専門的な研究に至るまでのありとあらゆる仕事の際に、取り扱う化合物がどんな性質のものか、合成しようとする化合物の物性値がどの程度のものになるかをあらかじめ知りたいというのは誰しも考えることである。もし、それを概略でもよいから確実につかむことができれば、実際上、非常に助かることであろう。

古い話になるが、明治の中頃、有機化学と薬学の大先達、長井長義先生が現東大薬学部の研究室で若い助手たちに合成を命ぜられるとき、まだ見ぬ新物質の性状について「それは多分沸点が何度ぐらいで、融点は何度ぐらい、旋光度はこのくらいでしょう。水には溶けないが、アセトンにはよく溶けるでしょう……」などと予測をいわれる。助手たちが作ってみると、いつもほとんど先生の予言どおりになっていたという。

学生時代の藤田 穆 先生は助手たちからこの話を聞いて感嘆し、大先生の頭脳の中には霊能というよりはむしろ整然とした合理的な予見の方式がしまわれているに違いない、それを一般化することができればどれだけ学術進歩の助け

* 本章の大半は主として、藤田 穆、赤塚政美：“系統的有機定性分析” 純粋物編、風間書房（1970）の関係部分に加筆したものである。その他の引用文献は章末にまとめて示した。

2 1. 有機概念図の基礎

になるかわからないと考えた。以来 10 余年間、寸暇を惜しんで長井先生の予見方式の解剖に熱中し、考案されたのがこの有機概念図である。

藤田先生はこれを羅針盤として、無機定性分析のように使える系統的な有機定性分析を創始された。

明治の西欧先進技術の導入期には、どこの大学、研究機関でも神様になぞらえられる大先生がいて、こういうことをされた、ああ言われたという伝説や神話に類する話がたくさんあったものである。その中のいくつかは単なるお芝居に過ぎなかったこともわかっているが、そうでないすぐれた科学的内容を備えたものもあったわけである。その 1 つが長井先生の場合であることをこれから読者は順次理解されることと思う。

藤田先生の有機概念図は、化合物の性質を共有結合性を表わす有機性値と、イオン結合性を表わす無機性値に分け、すべての有機化合物を有機軸と無機軸と名づけた直交座標上の 1 点ずつに位置づけて示すものである。その有機性値はおおよそ、その化合物の炭素数に 20 を掛けた値を横軸上にとり、無機性値は各置換基に与えられている無機性値の加算値を縦軸上にとる。無機性値は $-OH$ を 100 とし、 $>CO$ 、 $-NH_2$ など 80 個ほどの基の値が現在までに表になって与えられている。

たくさんの既知化合物をこの方法で同一の図上に位置づけると、化合物の構造によらない共通の性質が図から浮かび上ってくる。創案者によって、概念図上に気体、液体、^{におい}匂、揮発、結晶などの各限界線が、ぼかしになっているという但し書き付きで与えられている。したがって構造のわかっている化合物のおおよその物性値は、この概念図から予測できることになる。

科学の研究上、このような図による絵画的思考は、往々、数学的思考より劣るとされがちであるが、有機化学の歴史を見ればわかるように、4 面体炭素でもベンゼンの構造式でも、それらは本質的には絵画的なものであると同時に、芸術的な美しさも備えていた。この複雑な有機化学の領域では、今なお活き活きとした絵画的思考と練達した直観の価値が大きいのである。

近年の有機化学は、IR、ガスクロ、ガスマス、液クロ、NMR など分析機器の発達に負う面が大きく、これらの機器の精度向上に目を奪われている観がある。しかし、一方これらの分析機器の条件設定に時間をとられる面も生じてい

る。これらの分析機器は有機化合物の小さな相違点や状態を詳細に知らせるには優れているが、有機化合物全体の展望を与えるには、あまりに鋭利過ぎて適当でない面もあるようである。

例えば、鋭利なかみそりでは森林の伐採や荒地の開墾はできない。もっと鈍重な斧やくわがこれらの目的に必要なように、これからも有機化学とその関連諸領域の未開拓の荒地を耕すことを志す人々のためには、有機概念図は鈍重に見えても、必ず頼りになる道具になると思われる。

1.1 有機概念図成立の基礎

有機化合物はその成分元素の種類が少ないにもかかわらず、1,000 万以上に及ぶ多数の化合物を形成しているのであるから、無機化合物が多面的性格を持つのに比べて、著しく一元的で組織的なことは**有機**という名称の示すとおりである。もちろん、その中には遊離基のような不正規な化合物や例外的な化合物も含まれているが、無機化合物のそれに比べると格段の相違である。

特にその最も基本的な成分元素は**炭素**と**水素**の2つだけであって、この2つが有機物らしい特色を形作っており、他の諸元素はそれに別の性質をつけ加えるのに役立っているだけと見ることもできる。したがって有機化合物全体が著しく一元的な性格を持ち、同族的な色彩が濃いのである。

このような性格を背景として、組織化の基礎になるようないくつかの基準をうまく設定すれば、数学的な定量性の域にまでは達しなくても、ある程度までは有機化合物の性状を1つの理論の下に体系的にまとめ得るわけである。有機概念図はこのような考え方の下で、有機化合物のいくつかの基本的な物理的性状を基礎として系統的に組み立てられたものである。

今、その系統上の基礎になる事項を列記すると次のようである。

有機概念図の基本条項

(1) 全有機化合物は最も簡単なメタンを元祖として、その同族的な延長を行なったものか、あるいはさらにその水素を他の元素または基で置換した誘導体と見なすことができる。

(2) 全有機化合物中で最も有機的な特徴を示すパラフィン族炭化水素の同族列は、メチレン基 ($-\text{CH}_2-$) 1 個だけ増すごとにその物理化学的諸性状はほ

ば規則的に漸進的な変化を示す。

(3) パラフィン族炭化水素の各列員に、その水素原子の代りに何か置換基(特殊原子または原子団)が入るか、あるいは変態部(環の形成または二重結合、三重結合など)を導入すれば、その度に化学的性質はもとより、その物理的性状もこれに応じて一躍、大変動をきたす。もしこれらの置換基、変態部が重複すれば、その度にそれらの性状も飛躍的に変化する。

(4) 置換基はもともと H_2O , H_2CO_3 , NH_3 , HNO_2 , H_2SO_3 , HCl などのような種々の無機化合物の残基であって、置換基そのものを基本としてみれば、一般有機化合物は無機化合物または無機元素にメチレンの鎖が結びついたものと考えることができる。炭化水素自身も実は H_2 という無機化合物に同様な鎖がついたものとも解釈し得る。

(5) すべての有機化合物は、それ自身を一基点としてメチレン基の漸増による同族列を形成することができるが、これらは炭化水素のようにその物理化学的性状はほぼ規則的に漸進的な変化を示す。

このように有機化合物の一般性状は多分に法則的な面があるから、何か全般に通じる原則的な基準を数値として設定できれば、1つの化合物がわかれば他のものの性状も半定量的に類推し得る可能性がある。普通に得られる個々の物理的性状、例えば融点、沸点、屈折率、比重、表面張力などはそれぞれ1つの原理に基づいて測定される全化合物にわたる性質ではある。しかし、これらは化合物自身を同定する精密さはあるが、あまりに一面的すぎて総合的な見通しに欠けるため、その個々の数値を知るだけでは化合物の大雑把な輪郭さえ容易につかめない。

本章では未知化合物のおおよその輪郭を予見しつつ分析を進めたり、既知化合物の必要な物性値を任意に導き出して取り扱いを適切にすることが、絶対的に有利な条件であるばかりでなく必要性が大きくなっている現状から、上にあげた一面的な個々の物性値による以外に、全範囲の化合物についてある程度の化学構造ないし大体の輪郭を予見する手段として、性状の起源に基づく一定の基準を数値として求め、それによって任意の化合物をグラフ上に示す方法を考え、全有機化合物の概念的把握に役立てようとするものである。

1.2 有機化合物の法則性の由来とグラフ化の基礎

有機化合物の多様な性状の起源は、それを構成する元素の種類（原子）だけでは決まらず、むしろその結合状態の影響が主体になっている。もしこれに法則性があるとすれば、それは結合状態に起因するものである。

有機化合物でも無機化合物でも、すべて2つの原子が結合する様式は、金属結合を除外すれば、共有結合と静電結合に大別される。共有結合は、結合にあずかる両原子からそれぞれ1つずつの価電子を対称的に供出し合うもので、双極子モーメントが零であること、すなわち無極性であることが特徴である。これに対して静電結合では、結合にあずかる価電子が大なり小なり偏在して非対称的になっていて、両原子は陰または陽に帯電し、その特徴は多少にかかわらず双極子となって現れる点にある。その程度はまちまちで、片方の原子がその価電子を相手の原子に全く譲り渡してしまう場合が真のイオン結合で、これは大きい双極子モーメントを示す。またイオン結合まで行かずに多少分極した程度のものもあって、極限では双方の価電子を対称的に供出する上記の共有結合まで多くの段階がある。

詳しい研究によると、無機、有機のいずれの化合物でも、実際には純粋な共有結合も静電結合もなく、例えば以前は完全なイオン結合と考えられていた食塩でも、その結合の幾分かは共有結合であり、また純共有結合に数えられていたメタンさえ、その結合の小部分は静電的であるという。すなわち一般にA, B 2原子間の正常な結合の波動関数を Ψ_{A-B} とし、 $\Psi_{A:B}$ をA, B間の完全な共有結合を表わす関数、 $\Psi_{A^+B^-}$ をA, B間の完全なイオン結合を表わす関数とすると、近似的に

$$\Psi_{A-B} = m\Psi_{A:B} + n\Psi_{A^+B^-} \quad (1.1)$$

のように表わすことができる。ここに係数 m , n の大小によって両原子の結合様式の性格が規定される。

以上は2原子間のことであるが、近似的にこれを多原子化合物である有機化合物に押し拡げると、基本的なパラフィン族炭化水素（アルカン）では、その各原子間は圧倒的に式(1.1)右辺の第1項の共有結合が支配していて、それ

* Ψ ギリシャ文字。プシイあるいはプサイと読む。

も最高度の共有である。これに反して、他の化合物では置換基，変態部から大なり小なり第2項の静電結合が加わってきて，このため化合物は一般に極性を現わす。

アルカンはほとんど完全な無極性であるばかりでなく，もしその何れかの水素の代りに置換基が導入された場合は，炭化水素残基はその置換基の活性を弱める働きをする。そして残基が大きくなればなるほど弱める力も大きい。例えば水酸基（ヒドロキシル基）とかアルデヒド基などが小さいアルキル基に結合したのと，大きいアルキル基に結合したのとでは，後者の方がすべての試薬に対して置換基の反応性ははるかに鈍い。その鈍る度合は共有結合からなるメチレンの鎖の長さにはほぼ比例する。炭化水素自身の無極性はほとんど完全な無極性で，それに大小強弱があるとは考えにくい。が，上述のように置換基や変態部が導入されたときは明らかにその鎖の長さがものをいう。これを反映した例として直鎖アルコール同族列の水溶性¹⁾の変化を図1.1に示す。

つまり高度の共有結合よりなるメチレンの鎖は置換基の静電的性質と対立する際には，それに拮抗する勢力と見なし得るわけで，従来高位化合物の不反応性または有機的特徴として認められてきたものの本体は，このような拮抗（対抗）力にあるといえる。それから帰納して，元の炭化水素自身にも，鎖の長さ

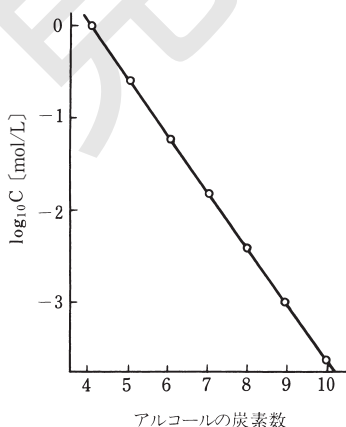


図 1.1 直鎖アルコール同族列員の水
への溶解度 (25℃)¹⁾

に比例する大小の拮抗力が内在するものと見なすことができよう。

この不反応性はメチレンの鎖が長くなれば当然分子も大きくなるから、そのための分子運動の遅鈍化が原因だとも考え得るが、例えば酢酸エステルのけん化反応は、これにアセチル基 ($\text{CH}_3\text{CO}-$) がついたアセト酢酸エステルではかえって活発化し、エチルがついて酪酸エステルになると遅鈍化することでわかるように、不反応化は単なる分子量のためではなく、分子増大の陰に潜むメチレン基の増加によるのである。

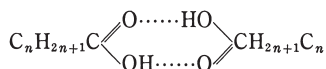
このことは多くの物理的性状でも同様であって、ある1つの置換基すなわち静電部による影響力が、ほぼ残基の大小に比例して弱められたような数値を示すことは、多くの恒数表やハンドブックに見られるとおりであって、残基が極端に大きくなると、どの物理恒数もみな置換基を失った残基だけ、すなわち誘導された元の炭化水素のそれにほとんど一致してくる。この拮抗力はメチレン基の電子雲によってもたらされるとされ、量子論ではエネルギー分散力もしくは単に**分散力***と呼ばれる力で、分子あるいは原子が平均として中性かつ無極性であっても、電子の運動に伴って電子雲に不均等を生じ、時間とともに変化する電場を生じることに起因している。他の分子あるいは原子が接近すると、この電場により誘電分極を生じて両者の間に引力を生じることになる。いわゆるファンデルワールス力のうち最も一般的で重要な力はいずれである。

したがって置換基による静電性は、メチレン基の電子雲の運動に伴う一定しない電場によって結果的には弱められるのであろう。このような拮抗力すなわち有機的特徴の本体を、実体的な名称としてこれまで使われてきた**有機性**という語でそのまま表わすことにする。

有機性に対立するものは置換基および変態部に存在し、静電結合に由来する静電的性格のものであって、この方が一般に化学反応性の源であるとともに、諸種の物理化学的性状も多くはそれを中心として発現するようであるから、一般に通じる一貫した基準が欲しいのである。しかし、この方は有機性のように簡単なものでなく、その特徴である極性的要素（双極子力）は種々の原理が適用されてきたが、いままでのところあまり満足には表わされていない。その最

* 原子や分子による電磁波の分散は、これらの原子や分子が電磁波によって分極されることによって生じる。

大の原因は、この要素の根本に横たわる非対称的な静電荷が、分子内に本来の姿のままでいてくれれば本当の評価ができるのであるが、無数分子が密集する普通の存在状態では、静電性の本質上、隣接する分子相互間で程度がまちまちな静電性の中和、例えば下に示す脂肪酸分子のような会合や水素結合などが行なわれて、分子固有の真の静電状態が外に現われにくいのである。



これを実測するには、普通、完全な無極性溶剤に希薄に溶解したり、またはガス状にしてなるべく単一分子の本来の静電性を現わす状態で測るけれども、それでも必ずしも万全でなく、分子単独の状態の測定は容易ではない。

現在、静電的性格に立脚して測られるものに誘電率、双極子モーメント、分子分極、原子分極、電子分極などがあるが、それらから導かれた結論と化学の実際とはどうもうまく合致しない点が多い。

それで、直接静電性そのものを研究することは他に譲り、ここでは別の考察をしよう。すなわち沸点、融点、表面張力、粘度など各種の物理化学的性質は、例え直接静電性から発現しなくても、いずれも分子内にある静電結合部位の影響を受けないものはないから、この静電部位の影響力を評価するなんらかの方法を採れば、静電力そのものでなくても十分に化合物の性格を表示する1つの基準が得られるわけである。

いま直交軸を設け横軸に炭素数を取り、縦軸に沸点をとると $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$ で表わされるパラフィン族直鎖(状)炭化水素の同族列は図1.2のVのような曲線となる。炭化水素はほとんど完全な無極性であるから、この沸点曲線はなんら特別な極性の影響を受けず、ほとんど全くファンデルワールス力に基づくものの示す曲線である。

このファンデルワールス力というのは、これまで完全にその本質がわかったとはいえないが、前頁の有機性の項で述べたように、中性の分子でも電子の運動に伴い時間とともに変化する電場を生じて分極が起こることに基づく力とされている。すなわち、すべての原子、分子に**平等普遍的極性**とでもいうべきもので、電子分極がその輪郭を示すものである。

ファンデルワールス力の結合エネルギーは普通の化学結合力の1~10%程度

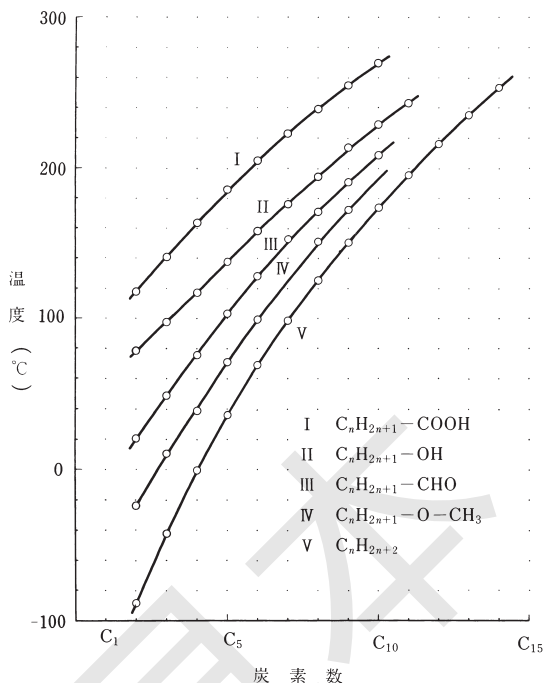


図 1.2 直鎖脂肪酸同族列の沸点曲線

の最も弱い力で、弱い相互作用とも呼ばれるが、電子を伴うところならどこからでも発現し、原子の種類にもよらず、無極、有極の別もない。すなわちパラフィン族炭化水素のようなほとんど完全な無極性化合物にもあれば、またヘリウム、アルゴンなど全く価電子を欠く物質にもあって、それらが超低温で液化したり、結晶化したりするときの凝集力の本体と考えられている。むろん置換基そのものにも含まれているだろうが、それは置換基の特別に強い静電性の陰に隠されているに違いない。

この弱い相互作用力はこれまで理論化学方面ではあまり研究されていなかったが、近年にわかに研究が盛んになりつつある。このため有機概念図にとっても今後は有力な根拠が与えられるものと期待される。

とにかくメチレン基の増加に伴い沸点がおしなべて高くなるのは、増大する凝集力を熱運動で振りちぎって単分子状態の蒸気にするために高温が必要とな

るのである。

いま、これに一定の置換基として水酸基が1個だけ端についた直鎖第一アルコール $C_nH_{2n+1}-OH$ を同様にプロットすると、同図Ⅱのような同形式の曲線を得る。水酸基以外の置換基を代入したものの例は同図Ⅰ，Ⅲ，Ⅳなどに示した。

これらの曲線は次の2つの事項を表わしている。すなわち1つの炭化水素の種々の誘導体の同族列曲線が、基本炭化水素の同族列曲線とほぼ平行（ただし、炭素数の大きいところでは同一歩調で漸近する）することは、ほとんどすべての化合物の同族列に共通普遍な現象で、ファンデルワールス力のような平等の原因からくるものと考えられる。これに反し、各曲線が大小まちまちな相互間の隔たりをもって配置されていることは、置換基または変態部の静電性が沸点に及ぼす影響力の強弱を示すもので、それが上の例に出てきた酸素原子そのものの特殊性でないことは、下記のエチルアルコールとその異性体ジメチルエーテルとの両同族列の沸点曲線（図1.2（Ⅱ，Ⅳ））が大きな隔たりを示すことでわかるであろう。



（藤田らの古い著書では、エチルアルコールの $-OH$ を遊離基、ジメチルエーテルの $-O-$ を被覆基という名称で呼んでいる）

これらの曲線と基本炭化水素曲線間の隔たりは、一般に大きい極性基の持主ほど大きいですが、必ずしもそれに比例してはいない。これは極性そのものの直接的な現われでなく、間接的なその影響力の現われだからに違いない。しかし後でわかるように、この影響力の方がはるかによく化学的事実に合致するのであって、これらの間隔の差をもって近似的に静電部位の影響力の尺度とし、その大小は簡単に曲線上の炭素同数の点の間の距離を測ればよい。ただし経験上、有機物らしい性格を備える C_4 以上の点で比較するのがよい。また沸点のない物質では分配率などの便法を用いる。

その他の物理恒数、例えば融点、屈折率、粘度、表面張力などへも、多少値

3. 一般的な応用

前章までに有機概念図の基礎と有機分析への応用について述べたが、これらとは別に工業化学，農芸化学，環境化学など広範な専門領域の研究者によって有機概念図は多方面に活用され，研究報告の一部ないし主要部分として記載されている．近年は欧米の国際誌にも概念図を用いた報文が散見されるようになったが，これらの応用面はこれまで集録されたことがないので，以下にやや詳細にまとめた．集録によってこれらの成果が総合的に活用されることを期待するとともに，今後の概念図利用研究の一助になれば幸いである．

一般的な応用は，燃料と燃焼，化学防災，界面化学，環境化学，食品化学，香料，染料および染色，農薬，医薬品の9節に分類した．これらの応用の内容は，前章のように物理化学的性状等から結果をただちに理解し得るものから，農薬，医薬品の作用などのように，主として広範な経験を取りまとめるもの，すなわち現状ではブラックボックスを介して現象を説明する応用例まで多様な内容が含まれている．

3.1 化学防災

有機化学の発展は1千万以上の新化合物を生み出し，化学工業はこの中から数万点の新しい化学品を製造して市場に送り，現代生活に数多くの恩恵を与えている．しかしその反面，これらの取り扱いを誤れば，近年頻発している人命にかかわる大災害が全国どこでも起こりかねない状況になっている．

これらの実用される化学品の防災のためには，個々の薬品の詳細な危険性データ表¹⁾が完成し，それぞれの性質に応じた安全な取扱がされることが第一である．しかしなにもふんにも万の桁の化合物の多種多様な項目の試験を要するので，データ表の完成に長年月を要することと，日常の少量の化学品の取り扱い

いではそれほど詳細なデータは必要でなく、おおよその物性値がわかれば安全取扱の目的を達することが多いので、これらのことから有機概念図が化学防災へも用いられるようになっていく。

3.1.1 危険物水溶液の引火点

可燃性液体は消防法で広範に規制されているが、水溶性危険物の引火点に関するデータは少なく、アルコールなどの一部について一定濃度以上のものだけに限り危険物として規制している現状である。しかし実際にはそれより低濃度の液体からも火災が発生することがある。例えば、名古屋のある造り酒屋の仕込み桶が発酵の最終段階で引火し、火災になったことがあった。日本酒のアルコール濃度は16～20%なので、意外と低い温度から注意する必要がある。こうした実態を調査するため、水溶液の濃度別に引火点が測定²⁾された。

水溶液になった危険物の引火点は濃度が薄くなるに従って次第に上昇するが、その温度は元の物質（溶質）の引火点に左右される。すなわち

(1) 元の物質の引火点が0℃以下のものの水溶液は、濃度10%でも常温付近で十分引火する（テトラヒドロフラン、アセトン、メチルエチルケトン、アセトアルデヒド）。

(2) 元の物質の引火点が0～40℃のものの水溶液は、濃度10%でも33～62℃（灯油の引火点とほぼ同じ）で引火する（メチル、エチル、プロピル、第3級ブチルの各アルコール、ジオキサン、ピリジン）。

(3) 元の物質の引火点が40～100℃のものの水溶液は、一定濃度以下では引火しなくなる。

このようにして、これまで危険物関係の実務ハンドブックに載せられていない化合物でも、注意が必要なものがいくつもあることが見いだされた。

また、ある薬品（危険物）が水に溶けるか否かを前もって予測できれば、火災予防査察指導および消火活動の面から大変便利であるので、有機概念図を用いてこれを予測することを試みた。ある化合物が水によく溶ける（>25%）か否かの区別は次の基準で判断できる。

(1) 化合物中に $-\text{OH}$ 、 >C=O 、 $-\text{C}\equiv\text{N}$ 、 $-\text{NH}_2$ 、 $-\text{NH}-$ 、 $-\text{COO}-$ など無機性基を持っていること。

(2) 無機性基に結合するアルキル基が低級のものであること。

(3) 概念図上、水 (I=100, O=0) に近い位置にロケイトされるものであること。

この結果を図 3.1 に示す。この図は図 2.2 (p. 46) と共通性を持つものである。

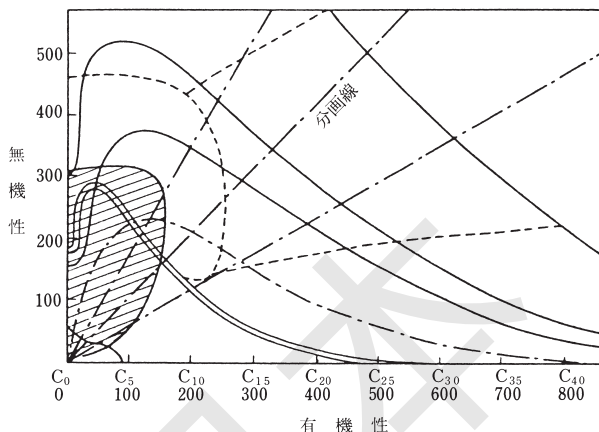


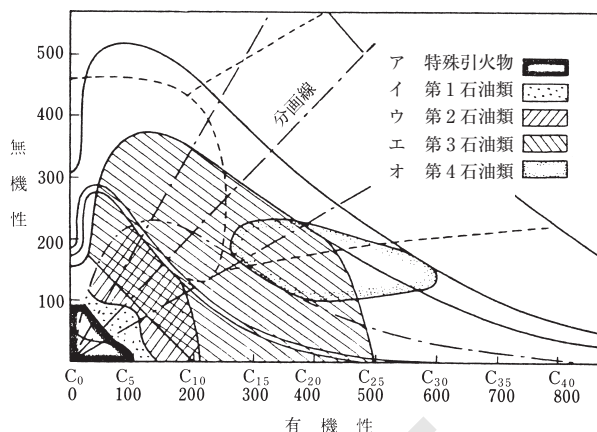
図 3.1 水溶性化合物の分布範囲⁴⁾ (斜線部分)

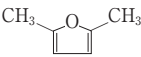
3.1.2 引火点による危険物の分類

消防法別表の特殊引火物（ジエチルエーテル，二硫化炭素その他，発火点が 100℃ 以下のもの，または引火点が -20℃ 以下で沸点が 40℃ 以下のもの），第一石油類（アセトン，ガソリン，その他引火点が 21℃ 未満のもの），アルコール類（炭素数が 1～3 個までの飽和 1 価アルコール），第二石油類（灯油，軽油など引火点が 21～70℃ の液体），第三石油類（重油，クレオソート油など 20℃ で液体で，引火点が 70～200℃ のもの），第四石油類（ギヤー油，シリンダー油のほか，20℃ で液状で引火点が 200℃ 以上のもの）として分類し，有機概念図上にロケイトして分布図が作られた^{4, 5)}。

結果は図 3.2 に示すとおりで，特殊引火物は気体限界線に近い位置にあり，非常に揮発しやすいことが伺われる。

第 1 石油類の化合物は無機，有機軸上の各 160 を結ぶ線以内の限られた範囲に分布する。参考のために第 1 石油類に分類された化合物の例を表 3.1 に示し

図 3.2 引火点別危険物の分布範囲⁴⁾表 3.1 第一石油類の化合物⁴⁾

No.	化合物名	化学式	有機性	無機性	引火点 (°C)	水溶性
1	アクリル酸エチル	$\text{CH}_2=\text{CHCOOC}_2\text{H}_5$	100	62	10	微
2	アセトニトリル	CH_3CN	60	70	6	∞
3	アリルアルコール	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{OH}$	60	102	21	∞
4	イソヘキサン	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	110	0	< -29	不
5	アセトン	CH_3COCH_3	60	60	-18	∞
6	N-エチルブチルアミン	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{NHC}_2\text{H}_5$	120	70	17.8	不
7	エチルメチルケトン	$\text{C}_2\text{H}_5\text{COCH}_3$	80	65	-9	不
8	ジアリルエーテル	$(\text{CH}_2=\text{CHCH}_2)_2\text{O}$	120	24	-6.7	不
9	1,3-ジメチルブチルアミン	$\text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ NH_2	110	70	13	不
10	2,5-ジメチルフラン		120	35	7.2	不
11	2,3-ジメチルヘキサン	$(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	150	0	7	不
12	臭化ブチル	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CH}_2\text{Br}$	140	10	18	微
13	テトラヒドロフラン		80	30	-14	∞
14	トリエチルアミン	$(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N}$	120	70	-6.7	∞
15	ベンゼン		120	15	-11	不

索引

あ 行

青葉アルコール 94
赤土 268
悪臭物質 121
アクリル酸 41
アゴニスト 214
アセタール化度 138
アセトアルデヒド 88
アセトン 65, 66, 88, 89
アゾ顔料 140
アフラトキシン B₁ 116
アミノアントラキノン類 76
アミノ酸 64, 99
アミノピリン 52
アミョーネブルク 227
アミン性窒素 240
アラミド 139
アリザリン 23
アリザリン・ダイレクトブルー
A 型染料 74
アルカン 5
アルキル水銀 169
アルキルレゾルシン 176
アルコール 60, 88
アルコール類 89, 91
アルデヒド類 184
アルドリン 79
アルブチン 52
アルミニウム 256
アンタゴニスト 214
アンドロステロン 62

イオン解離度 26
イオン交換クロマトグラフィー
84
イオン半径 255
イオンポテンシャル 254,
255
胃けいれん 195

異臭物質 121
伊勢白粉 129
医薬品 175
医薬品の製剤化への応用
201

液体 (カラム) クロマトグラ
フィー 71
液体限界線 253
液体シンチレーション法
204
17 β -エストラジオール
215, 216
エタンスルホン酸 39
エチレングリコールモノアセ
テート 65
エフェドリン 227
塩化ビニル 116
塩化メチル水銀 119
塩素系殺虫剤 169

オイレン酸ナトリウム石鹼
96
黄体ホルモン 110
 β -オキシ安息香酸エステル類
106
温 浸 52

か 行

界面化学 95
界面活性剤 95, 164, 239
——の HLB 96
——, ゲルを形成しない
100
——, ゲルを形成する
100
——, 非イオン 50, 239
科学技術振興 271
化学的分離法 68

化学データ 92
化学物質審査規制法 109
科学文学 272
化学防災 87
拡散溶解 74
過酸化物質 240
ガスクロマトグラフィー 79
ガス検置器設置 273
ガソリン 89
活性炭 123
活性炭吸着性 124
カネミ油症事件 109
カーバメート系殺虫剤 168
ガリウム 256
華麗に析出させる溶剤 53
環境化学 108
環境残留性 115
環境ホルモン 127, 212, 219
環境ホルモン戦略計画
SPEED'98 214
冠血管拡張剤 194
感作限界線 110, 121, 241
環状化合物 18
甘味料 137

器械的分離 68
危険物水溶液の引火点 88
キニーネ 23
技能練習 271
キノン類 187
キャリヤー染色 144
吸着剤 71
吸入 (全身) 麻酔剤 110
吸入麻酔剤 194
共重合型の繊維 143
凝集沈殿 123
強心薬 197
共有結合 5
局所麻酔剤 194
近縁関係 27

金属コバルトの粉末 65

クエンチング剤 204

駆虫薬 197

屈折率 11

クラウンエーテル 240

クラッキング作用 270

グラフ化 5

グリコール酸エチル 65

グリセオフルビン 79

グリセリン 65

グルタミン酸 65

クレゾール 124

クロラムフェニコール 79

クロロホルム 63

くん蒸剤 170

蛍光増白染料 161

ケイ酸塩ガラス 250

系統的有機定性分析 230

化粧品への応用 99

血圧降下薬 194

頁岩層 266

血糖降下薬 194

解熱・鎮痛剤 189

ゲル乳化法 99

原点 26

抗ウイルス薬 196

抗うつ薬 196

光学異性体 71

抗結核薬 180

抗高尿酸血症薬 197

合成潤滑油 107

合成繊維用染料 138

抗生物質 79, 170, 191

——, 制癌性 187

構造近似の溶剤 43

高速液体クロマトグラフィー
84

抗てんかん剤 197

抗ヒスタミン剤 198

抗マラリア剤 198

御所白粉 129

糊料 137

コンクリート 250

混合溶剤 54, 64

さ 行

再結晶溶剤 52

催眠鎮静剤 197

最良混合比 57

魚への毒性 171

酢酸エステル 7

酢酸エチル 60, 63

酢酸セルロース 58

殺魚性農薬 172

殺菌剤 168, 170

殺菌力 176

殺線虫剤 169

殺ダニ剤 168, 170

殺虫剤 170

サルファ剤 177

酸化防止剤 135

酸性珪酸アルミニウム 266,
267

酸性珪酸鉄 267

酸性白土 268

酸素酸 255

三大栄養素 133

酸味料 137

ジエチルエーテル 89

ジエチルスチルベストロール
216, 221

ジオキサン 88

ジクロロフェノール 124

ジクロロメチルエーテル

116

シックハウス 223

実験観察 272

質量分析 65

シベトン 22

重金属汚染 129

消毒薬臭 124

ショウノウ 23

蒸発潜熱 245, 247

醤油黴 106

醤油に対する防黴作用 104

食品添加物 135

植物起原説 270

植物残骸 265

除草剤 168, 170

——, ジフェニルエーテル系
79

——, トリアジン系 79

——, 尿素系 79

——, フェノキシ系 79

ジルコニウム 256

親水群 67

浸透移行性殺虫剤 169

親油群 67

水道水の異臭物質 121

推理 272

スカンジウム 256

砂ろ過 123

成因説 265

制癌剤 182

精細分離 69

精細分離法 71

精神神経用薬 194

生体濃縮性 112, 254

静電結合 5

生物蓄積症 115

生分解性の良好な領域 112

生理作用圏 176, 179, 241

——, 第1 241

——, 第2 241

——, 第3 241

石炭 265

石炭の起原 265

石油エーテル 66

石油系統の炭化水素 269

石油系燃料 94

石油成因説 270

石油層 270

セメント 250

——, 風化した 250

セリン 64

染色理論 142

染色座席 144

染料 112

染料の拡散 157
 染料の昇華性 163
 双極子力 7
 相似化合物 28
 草食動物 256
 ソフトレーザー脱離イオン化法 65

た 行

第一石油類 89, 90
 第一種指定化学物質 214
 対応状態の原理 246
 ダイオキシシン 110
 第三石油類 89
 第四石油類 89
 第二石油類 89
 炭酸 267
 炭塵爆発 273
 男性ホルモン 62
 タンパク質 65

知育偏重 271
 チェレンコフ光 204
 チタン 256
 チモール 62
 着香料 137
 着色料 135
 中間群 68
 中枢興奮薬 197
 調味料 137
 直鎖アルコール同族列 6
 チロキシシン 24
 鎮痛（鎮咳）薬 194

定量的構造活性相関 215
 鉄 256
 鉄バクテリアの生産物 267
 テトラヒドロフラン 88
 展開溶剤 64
 天然殺虫剤 168, 169
 デンプン 52
 同族列線 26

銅代謝 257
 同比率線 26
 特殊引火物 89
 トリウム 256
 トリステアリン酸ソルビタンエステル 96
 トリフェニルスズ 220
 トルートの規則 245
 曇点 50

な 行

内分泌攪乱化学物質 212
 ナイロン 66 139
 6-ナイロン 25
 難分解・濃縮性化合物 109, 111

匂限界線 80, 241, 253
 ニオブ 256
 肉食動物 256
 二酸化チタン 102
 ニトロセルロース 25
 日本酒 88
 乳糖 52
 二硫化炭素 89

濃縮性が無い、あるいは低いと判断される物質 111
 農薬 77, 112, 164
 農薬中毒 171

は 行

排水処理の化学技術 124
 バイレックスガラス 256
 薄層クロマトグラフィー 77
 発明工夫展 272
 パーフルオロオクタンスルホン酸 222
 p -パラオキシ安息香酸エステル 103
 パラフィン族炭化水素 3, 4, 5
 パルミチン酸 62

ハロゲン系殺虫剤 168
 半化学的分離 68
 ——法 70
 ハンシュ（Hansch）-藤田法 216

非イオン界面活性剤 97
 ビタミン 134, 199
 ——B₁ 24
 ——E 187
 ——K₂ 187
 ヒトの癌原化合物 115
 ビニロン 138
 標準沸点 249
 ピリジン 88
 比率近似 28
 ——の溶剤 43

ファンデルワールス力 8
 フェナセチン 52
 フェニル- β -ナフチルアミン 22
 フェノール 64
 複素環 18
 ——の芳香性 19

物質の大区分 66
 沸点 11
 物理的分離 68
 部分置換繊維 143
 不溶群 68
 フルオロカーボン類 252
 プレオマイシン 187
 プロピレンオキシド 41
 ブロムワレリル尿素 52
 プロリン 64
 分解性が良好でなく、かつ濃縮性が大いだと判断される物質 111

分解性の良好な物質 111
 分画線 26
 分散染料 76, 140
 分散力 7
 分子蒸発熱 245
 分離用溶剤 50

ベークライト 139
 ヘッドスペース 82
 ベリリウム 256
 ペンジジン 116
 4-ベンゼンアゾ-1-ナフトール
 23
 ベンゾ[a]ピレン 220
 ペンタノール 63

 ホウケイ酸ガラス 256
 防腐剤 103
 ボーキサイト 256
 ポリアクリロニトリル 139,
 146
 ポリエステル 139
 ポリエチレン 139
 ポリ塩化クアテルフェニル
 110
 ポリ塩化ジベンゾフラン
 110
 ポリ塩化ビニリデン 139
 ポリ塩化ビニル 139
 ポリ塩化ビフェニル 109
 ポリオキシシン 79
 ポリオールエステル 107
 ポリカーボネート 139
 ポリ臭化ジフェニルエーテル類
 222
 ポリスチレン 25, 139
 ポリテトラフルオロエチレン
 139
 ポリプロピレン 139
 ポリプロピレン繊維 151
 ポリメタクリル酸メチル
 139
 ホルモン 199

ま 行

マイトマイシン C 187
 麻酔性 176
 マールブルク 227
 マンガンイオン 256

 水 66

水-オクタノール系分配係数
 216
 水と *n*-オクタノールとの分配
 率 47
 水俣病様症候 119

 無機顔料の分散媒 102
 無機軸 21
 ——寄りの溶剤 50
 無機性 12
 ——基 12
 ——の数値 14

 メタン 3
 メチルエチルケトン 88
 メチル硫酸 39
 メチレン基 3, 4
 メラミン・ホルムアルデヒド樹
 脂 139

 モナズ石 256
 モノクロロ酢酸 64
 モノラウリン酸ソルビタンエス
 テル 96

や 行

薬理作用別剤数 199
 薬理作用別分布図 187
 ——, 医薬品の 198

 有害化合物の分布範囲 126
 有機塩素剤 79, 113
 有機概念図 228
 ——の発展世代 242
 有機化合物の沸点 247
 有機軸 21
 ——寄りの溶剤 50
 有機水銀化合物 118, 120
 有機性 7
 ——の数値 13
 ——の強い生理活性物質
 111
 ——排水の処理 126
 有機分析 230

有機溶剤の系統化 42
 有機リン系殺虫剤 168
 有機リン剤 79
 有機リン殺虫剤 113
 遊離の極性基 40
 油頁岩 270
 油溶性ビタミン 110
 油溶染料 140

 溶解性 66
 ——分野 44
 溶解パラメータ 252
 溶 剤 71
 ——染色 158
 ——の軽重 48

ら 行

酪酸エステル 7

 理科教育 272
 理科学 272
 陸上植物 256
 利胆薬 197
 利尿剤 193
 臨界圧 247
 臨界温度 247
 リン酸エステル基 240

 累加性 32

ロケイト 21
 ろ紙クロマトグラフィー
 64, 72, 73

A~Z

DDD 218
 DDE 218
 DDT 79, 218
 DES 221
 DNA マイクロアレイ 215
 Excel 用有機概念図計算シート
 211
 ExTEND 2005 214

HLB 239
LIGPLOT 212
 $\log P$ 216, 222
PBDEs 222
PCB 109, 220

PCDF 110
PCQ 110
PFOS 223
2-phenylethanol 41
Protein Data Bank 216

PRTR 214
QSAR 215
3D-QSAR 215
REACH 214
X線造影剤 189

見本

■著 者 略 歴

甲 田 善 生 (こうだ よしお)

1926 年 7 月 大分県に生れる
1945 年 3 月 第五高等学校理科甲類卒業
1948 年 3 月 京都大学理学部化学科卒業
1948 年 4 月 吉富製薬 (株) 入社
1952 年 8 月 通産省工技院名古屋工業技術試験所入所
主任研究官 理学博士
専攻: 有機化学, 放射化学, 環境化学
1987 年 3 月 同所定年退職
1993 年 9 月 日中人材交流協会派遣講師として中国北京理工大にて講義
著 書 アイソトープの工業利用 (1958, 共著) 化学工業社

佐 藤 四 郎 (さとう しろう)

1947 年 10 月 静岡県に生まれる
1970 年 3 月 星薬科大学卒業
1972 年 3 月 星薬科大学大学院薬学研究科修了
1972 年 4 月 静岡県採用 (保健所, 衛生環境センター, 環境衛生科学研究所)
2007 年 3 月 静岡県退職
2008 年 9 月 (財) 静岡県生活科学検査センター退社

本 間 善 夫 (ほんま よしお)

1953 年 4 月 新潟市に生まれる
1975 年 3 月 山形大学工学部高分子化学科卒業
1977 年 3 月 山形大学大学院工学研究科高分子化学専攻修士課程修了 (工学修士)
1977 年 4 月 東北女子大学助手 ('80 年に講師, '83 年に助教授)
1986 年 4 月 県立新潟女子短期大学助教授
2009 年 4 月 新潟県立大学准教授着任予定
現 在 Web サイト「生活環境化学の部屋」主宰
専 門 環境化学, 生命情報科学, 科学コミュニケーション

しんぱん ゆうき がいねん ず き そ おうよう
新版 有機概念図—基礎と応用

1984年 5 月10日 初版第 1 刷発行

2008年 11 月30日 新版第 1 刷発行

© 著 者 甲 田 善 生
佐 藤 四 郎
本 間 善 夫
発行者 秀 島 功
印刷者 横 山 明 弘

発行所 三 共 出 版 株 式 会 社

郵便番号 101-0051
東京都千代田区神田神保町 3 の 2
振替 00110-9-1065
電話 03 3264-5711 FAX03 3265-5149
<http://www.sankyoshuppan.co.jp>

社団法人 日本書籍出版協会・社団法人 自然科学書協会・工学書協会 会員

Printed in Japan

印刷・製本／横山印刷

JCLS (株)日本著作出版権管理システム委託出版物

本書の無断複写は著作権法上での例外を除き禁じられています。複写される場合は、その都度事前に (株)日本著作出版権管理システム (電話03-3817-5670, FAX03-3815-8199) の許諾を得てください。

ISBN 978-4-7827-0587-2