

## Benson グループを用いた生成熱の推定方法の解説

### 1. はじめに

労働安全衛生総合研究所では、化学物質の既知の生成熱や、生成熱が不明な物質の生成熱を予測するための Benson グループの寄与値のデータを取りまとめ、Excel のデータシートとして整理し、反応熱及び生成熱の簡単な計算機能を付与した反応熱推計支援ツールを作成しました。本ツールは、生成熱及び反応熱を推定するための以下の機能を有しています。

- ・ 反応原料の生成熱の総和と生成物の生成熱の総和の差をとって反応熱を推計する機能
- ・ Benson グループごとの寄与値をデータベース化し、当該データを用いて加成性則により生成熱を推計する機能
- ・ CAS 登録番号あるいは InChIkey を入力することで、自動的に化学構造から Benson グループの同定を行う機能

本資料では、お手元に Benson グループ及びその生成熱への寄与値がある場合に、それらを用いて対象とする分子の生成熱を推定する方法の概要を説明します。

### 2. 加成性則による生成熱の推定方法の概要

加成性則とは、分子中の原子、結合又は原子団に物性値の寄与値を与えて、対象とする分子の物性を、その構造から推定する方法です。

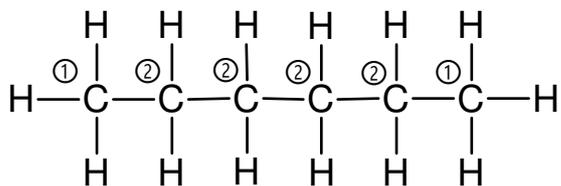
分子の生成熱については、Benson によって加成性則による推定方法が提案されています。Benson の方法では、隣接原子の効果を考慮した原子団（グループ）に生成熱への寄与値を割り当て、対象とする分子の構造に応じて、グループに与えられた寄与値を加算することによって生成熱を推定します。本ツールでは、それらのグループを「Benson グループ」と称しています。

### 3. 分子に対する Benson グループによる記述例

以下にいくつかの分子について、Benson グループによる記述例を示します。なお、Benson グループの表記は本ツールでの表記で示しています。本ツールでは、化学構造から自動的に推定した Benson グループで記述した物質データのデータベースを有しており、データベースにデータがある物質については、「Benson グループ推定ツール」で推定対象物質の CAS 登録番号あるいは InChIkey を入力することにより、構成される Benson グループと個数の推定結果を知ることができます。

(例 1) n-ヘキサン

構造式：

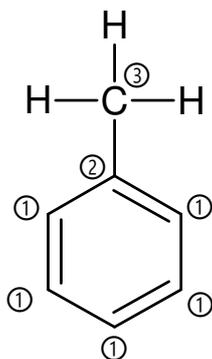


Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	C-(H)3(C)	2
②	C-(C)2(H)2	4

(例 2) トルエン

構造式：

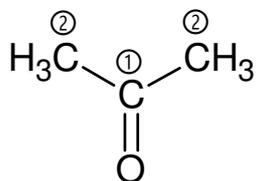


Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	C[B]-(H)	5
②	C[B]-(C)	1
③	C-(C[B])(H)3	1

(例 3) アセトン

構造式：

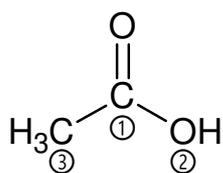


Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	CO-(C)2	1
②	C-(H)3(CO)	2

(例 4) 酢酸

構造式：

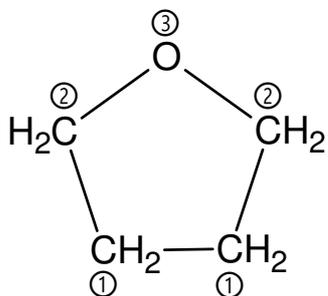


Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	CO-(C)(O)	1
②	O-(CO)(H)	1
③	C-(H)3(CO)	1

(例 5) テトラヒドロフラン

構造式：

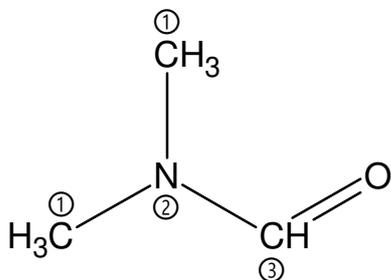


Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	C-(C)2(H)2	2
②	C-(C)(H)2(O)	2
③	O-(C)2	1

(例 6) N,N-ジメチルホルムアミド

構造式：



Benson グループによる記述

構造式中の番号	Benson グループ	グループ数
①	C-(H)3(N)	2
②	N-(C)2(CO)	1
③	CO-(H)(N)	1