
反応熱推計支援ツール 使用マニュアル

2022年5月

みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社

独立行政法人労働者健康安全機構 労働安全衛生総合研究所
化学安全研究グループ

	(ページ番号)
1. はじめに 1 ~ 5
2. 反応熱計算シート 6 ~ 7
3. Bensonグループ推定ツール 8
4. 生成熱推計ツール 9 ~ 11
5. Bensonグループ一覧 12

【更新履歴】

2022年5月 マニュアル初版作成

1. はじめに

- 本マニュアルは、独立行政法人労働者健康安全機構労働安全衛生総合研究所（以降「安衛研」という）が開発した反応熱推定支援ツール（以降「本ツール」という）の使用方法を説明したものです。

ツールの名称	反応熱推計支援ツール (ver.1.0.)
開発者	○安衛研 化学安全研究グループ ○みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社 環境エネルギー第2部
入手方法	安衛研Webページより無償で入手可能
ツールの概要	<ul style="list-style-type: none">・ 化学プロセスにおける「反応」そのものの反応熱を計算により推定することを支援することを目的（Microsoft Excel 2010以降のバージョンを使用することを推奨）。・ 本ツールでは、温度依存性は考慮せず、「反応物の生成熱の総和」と「生成物の生成熱の総和」の差をとって反応熱を推計。・ 生成熱が不明な化学物質については、加成性則（化学結合の生成熱への寄与率を加算すること）により、生成熱を推定。・ 物質の生成熱や化学結合グループ（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生成熱を推定。なお、当該データベースは全ての物質及びBensonグループの生成熱等のデータを有してはいないことに留意。・ 生成熱の推計を支援するため、CASあるいはInChIkeyを入力することで自動的に化学構造からBensonグループの同定が可能。ただし、得られたBensonグループとその個数は推定であるため、すべての物質でその正確性を保証するものではないことに注意。・ Bensonグループの推定が出来ない物質あるいはBensonグループの生成熱のデータがない物質の場合、手入力することで反応熱を推計することが可能。・ 反応熱を推計するにあたり、物質の状態（物質の三態（気体／液体／固体））及び化学反応式の係数の入力必須。・ 物質の状態によっては、生成熱データがない場合があり、その場合は反応熱を推計することが本ツールでは出来ない。・ 推定反応熱の単位は、「kJ/mol」。・ 同じ物質であっても、構造による生成熱が異なる場合があるが、本ツールでの対応は困難であることから、自動的に安全側な計算を実施。ただし、化学物質の構造異性体などによる一定の補正は可能。・ 本ツールにおいて、生成熱データを有するBensonグループは、[Bensonグループ一覧]に掲載。

ポイント！

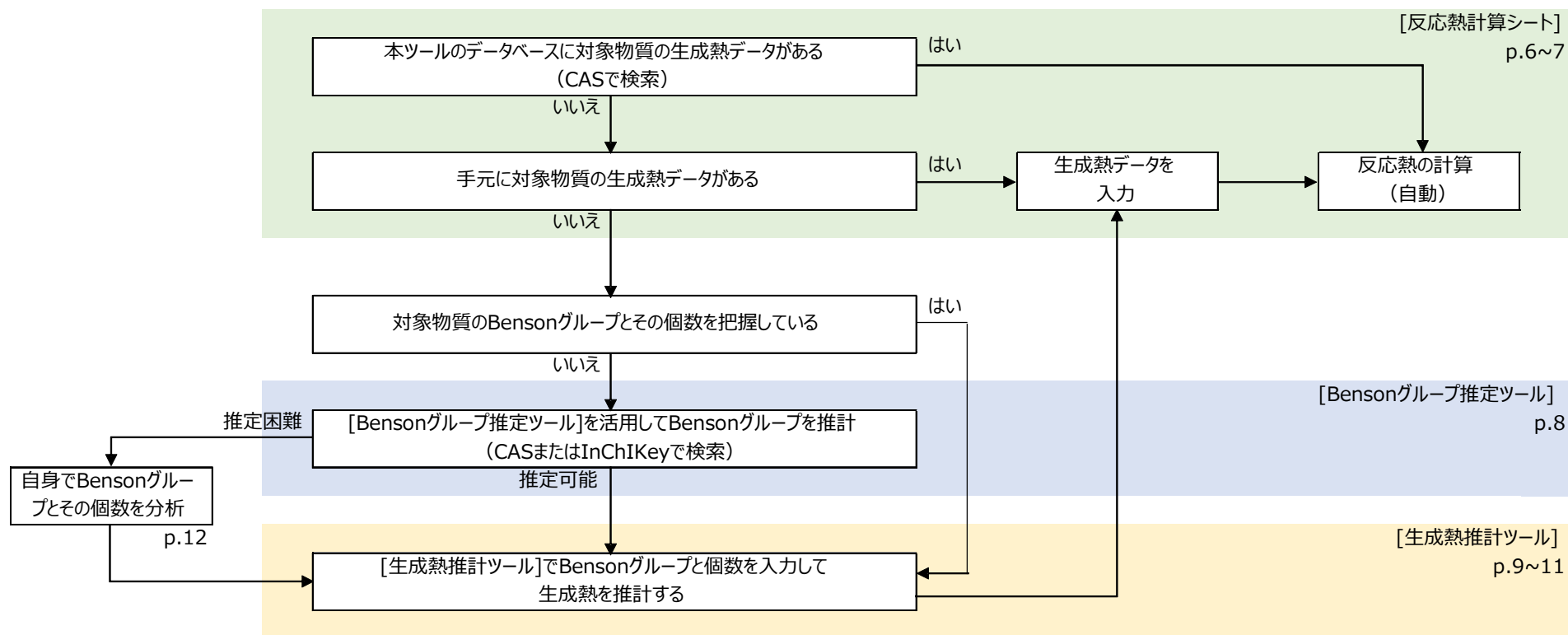
すべてのBensonグループの寄与値などに関するデータを含んでいないことに留意。

Bensonグループの分析は、化学構造から自動的にを行っているため得られた結果の正確性を担保するものではないため、最終的には自身で正しいかどうかを判断し、必要に応じて修正すること。

[Bensonグループ一覧]に掲載されたBensonグループで構成された化学物質であっても、物質の三態（気体／液体／固体）によっては生成熱データを有していない場合がある。

1. はじめに

- 本ツールの使用の流れは下記のとおりです。



- ✓ 具体的な使い方等は、該当するページを参照してください。

1. はじめに

- まず、[はじめに]のシートをご覧ください。
- 本ツールを使用するにあつての注意事項、免責事項等を確認ください。
 - ✓ 承諾いただける場合、左下の黄色のセルから「使用する」を選択してください。

○注意事項

- 本ツールは、Microsoft EXCEL 2010以降のバージョンでご使用ください。
 - ※バージョンが古い場合、正しく動作しない場合があります。
- ご利用の際には、必ず「反応熱推定支援ツール使用マニュアル」をご覧ください。
- 本ツールでの反応熱は、生成熱への寄与値などから計算しているため、諸条件により実際の反応熱と異なる場合があります。
- 本ツールは、予告なく更新、修正などを行うことがあります。

○免責事項

- 本ツールは、独立行政法人労働者健康安全機構 労働安全衛生総合研究所（以降「安衛研」という）の事業に基づき、みずほ情報総研株式会社が作成したものであり、著作権は安衛研が有しております。
- 使用者は、著作権法及び関連法規を遵守するとともに、営利目的の個人、法人、団体等が、利益を得る目的で本ツールを配布、または他の製品と合わせて配布することは禁止します。
- 本ツールを使用して得られた結果について、著作権者は利用者に対していかなる保証をするものではありません。利用者は自己の責任においてご使用ください。

○質問・問い合わせについて

- 本ツールの使用に際する不具合等は、安衛研ホームページの「お問合せ」先へご連絡ください。
<https://www.jniosh.johas.go.jp/rule/contact.html>

○更新履歴

- ・2022年4月 反応熱推定支援ツール (ver.1.0)公開

「使用する／使用しない」を選択

本シートでの記載内容について承諾のうえ、
本ツールをご使用ください。

上記を承諾のうえ、

[選択してください]

2. 反応熱計算シート

● 対象物質のCASが分かっている場合

- ✓ まず状態（物質の三態（気体／液体／固体））を選択のうえCASを入力してください。
 - 本ツールのデータベースに生成熱データがある物質は、自動的に生成熱データが入力されます。
- ✓ 次に係数（整数値）を入力してください。
 - $aA + bB \rightarrow cC + dD$ (A、B、C、D：化学物質、a、b、c、d：係数)
- ✓ 反応系及び生成系すべての物質のCASが分かっている、かつすべての物質の生成データがある場合、自動的に反応熱が計算されます（負の値：吸熱、正の値：発熱）

反応物と生成物のCASを入力してください。
※CASが不明であっても、生成熱を直接入力することで反応熱量を計算することも可能です。

化学物質の構造から生成熱を推計する場合はクリック→ Bensonグループ推定ツール

単位：kJ/mol

反応物							
状態 (物質の3態)	↓入力	係数	↓自動表示			↓入力	
	CAS		物質名	生成熱	文献	物質名	生成熱
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
20							

単位：kJ/mol

生成物							
状態 (物質の3態)	↓入力	係数	↓自動表示			↓入力	
	CAS		物質名	生成熱	文献	物質名	生成熱
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
20							

③係数を入力

上記のa、b、c、dに該当する数値（整数）を入力してください。

反応熱が自動計算

反応系、生成系のデータが正しく入力されると反応熱の計算結果が表示されます。

②CASを入力

計算対象物質のCASが分かっている場合、CAS（半角英数）を入力してください。

①状態を選択

計算対象物質の三態（気体／液体／固体）を選択してください。状態を選択しない場合、正しく反応熱が計算できません。

データベースに生成熱データ等がない場合

反応物							
状態 (物質の3態)	↓入力	係数	↓自動表示			↓入力	
	CAS		物質名	生成熱	文献	物質名	生成熱
1	気体	100-00-0	データなし				
2							
3							

「データなし」が表示

本ツールのデータベースに入力された物質のCASがない場合、「データなし」が表示されます。

「生成熱データなし」が表示

「生成熱データなし」が表示された場合は、対象物質のデータがあるものの、物質の状態に応じた生成熱データがないものを示しています。

上記の場合は、次ページを参照してください **6**

2. 反応熱計算シート

● 対象物質のCASが不明／CASなし物質の場合

- ✓ 状態（物質の三態（気体／液体／固体））を選択のうえ、CASのカラムにおいて、「不明／CASなし」を選択してください。
 - 黄色のセルが現れるため、当該セルに物質名（任意）及び生成熱を入力してください。
- ✓ 次に係数（整数値）を入力してください。
 - $aA + bB \rightarrow cC + dD$ （A、B、C、D：化学物質、a、b、c、d：係数）
- ✓ 反応系及び生成系の物質のCASが分かっても（CASがない物質であっても）、生成熱データを手入力することで、自動的に反応熱が計算されます（負の値：吸熱、正の値：発熱）

反応物							
	状態 (物質の3態)	↓入力	係数	↓自動表示		↓入力	
		CAS		物質名	生成熱	物質名	生成熱
1	気体	不明					
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
20							

「不明／CASなし」を選択
対象物質のCASが不明、あるいはCASなし物質に選択してください。

物質名及び生成熱を入力
計算したい物質の名称（任意）と生成熱（必須）を入力してください。
生成熱の単位は「kJ/mol」です。

「生成熱が分からない！」そんな時は、

化学物質の構造から生成熱を推計する場合はクリック→ [Bensonグループ推定ツール](#)

Bensonグループ推定ツールを活用
化学物質の化学結合（Bensonグループ）から生成熱を推計することが可能です。
まずは、どんなBensonグループで構成されているか推定してみましょう。（クリックして移動）

反応熱
kJ/mol

3. Bensonグループ推定ツール

● CASまたはInChIKeyを入力

- ✓ 計算対象物質のCASまたはInChIKeyを入力すると、データベースに化学構造に関するデータがあるものは構成されるBensonグループと個数の推定結果が表示されます。
- ✓ 表示された場合
 - ❑ 化学構造から自動的に推定したものであるため、すべての物質でその正確性を担保するものではないのでご注意ください。
 - ❑ 必ずご自身で、表示されたBensonグループで正しいかをご確認ください。
- ✓ 表示されなかった場合
 - ❑ ご自身で、[生成熱推計ツール]シートにBensonグループと個数を入力してください。

生成熱推計ツールはコチラ

【使い方】
InChIKeyを入力すると、データベースに情報があるものは下記にBensonグループと個数が表示されます。
自動的に推定したものであるため、**全ての物質でその正確性を保証するものではありません**。必ず自身でBensonグループが正しいものであるかを確認してください。
場合によっては、ご自身でBensonグループと個数を**[生成熱推計ツール]シートに手入力**してください。
また、ご自身で間違いが確認のうえ適宜**[生成熱推計ツール]シートにコピー&ペースト**してください。
[生成熱推計ツール]シートにペーストする際には**必ず「文字列」としてペースト**してください。
また、[生成熱推計ツール]シートに直接手入力してください。**(本シートでは修正不可)**
・**本シートの関数は削除しないでください。**

※CASとInChIKeyは同時に入力しないでください。正しく検索できません。

CAS	50-78-2	物質名	o-アセトキシ安息香酸
InChIKey			

Nr	Bensonグループ	個数
1	C[B]-(H)	4
2	CO-(C)(O)	1
3	CO-(C[B])(O)	1
4	O-(CO)(H)	1
5	O-(C[B])(CO)	1
6	C-(H)3(CO)	1
7	C[B]-(O)	1
8	C[B]-(CO)	1
9		
10		
11		
12		

補正值の候補 (環状構造、システランス異性体等)

Nr	補正条件 (構造条件、Bensonグループ等)	個数
1	(CH3O)(COOH),ortho	1
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

①CASまたはInChIKeyを入力
CASとInChIKeyどちらかを入力してください。
同時に入力すると正しく推定できません。

④生成熱を推計しよう
生成熱を推計するため、[生成熱推計ツール]シートに移動しましょう。
※本シートでは生成熱を推計できません。

③補正值の確認
物質によっては構造によって補正值が設定されています。
補正条件が正しいかどうかを確認してください。

②Bensonグループと個数を確認
推定されたBensonグループと個数が正しいか確認してください。
正しくない場合は、[生成熱推計ツール]シートで正しいBensonグループと個数を入力してください。

4. 生成熱推計ツール

- [Bensonグループ推定ツール]で推定されたBensonグループと個数を**使用する**場合
 - ✓ [Bensonグループ推定ツール]で表示されたBensonグループと個数、それぞれをコピー&ペーストしてください。
 - ペーストする際には、必ず「文字列」としてペーストしてください。
 - ✓ 推計対象物質の状態（気体/液体/固体）と系（反応物/生成物）を選択してください。

生成熱推計ツール

反応熱計算シートはコチラ

【使い方】

② 個数をペースト
[Bensonグループ推定ツール]シートの個数をコピーして、必ず「文字列」としてペースト（貼り付け）してください。そのままペーストすると不具合が生じます。※手入力可

④ 物質の状態と系を選択
推計対象物質の状態（気体/液体/固体）と系（反応物/生成物）を選択してください。生成熱の推計値が表示されます。

③ 補正条件をペースト
①、②と同様に、[Bensonグループ推定ツール]シートの補正条件及び個数をそれぞれコピーして、必ず「文字列」としてペースト（貼り付け）してください。※手入力可

① Bensonグループをペースト
[Bensonグループ推定ツール]シートのBensonグループをコピーして、必ず「文字列」としてペースト（貼り付け）してください。そのままペーストすると不具合が生じます。※手入力可

状態（物質の3態）を選択してください
反応物/生成物を選択してください

固体 生成熱 kJ/mol
反応物

補正値の候補（環状構造、シス-トランス異性体等）

No	Bensonグループ	個数
1	C[B]- (H)	4
2	CO- (C)(O)	1
3	CO- (C[B])(O)	1
4	O- (CO)(H)	1
5	O- (C[B])(CO)	1
6	C- (H) ₃ (CO)	1
7	C[B]- (O)	1
8	C[B]- (CO)	1
9		
10		
11		
12		

No	補正条件（構造条件、Bensonグループ等）	個数
1	(CH3O)(COOH),ortho	1
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

No	Bensonグループ
1	
2	
3	
4	
5	
6	
7	
8	

↑お手元にBe

生成熱が推計されたら

反応熱計算シートはコチラ

[反応熱計算シート]に戻って生成熱セルに入力してください。
※コピー&ペーストをする場合は、必ず「文字列」としてペースト（貼り付け）してください。

寄与値がない場合、セルが黄色くなります

4. 生成熱推計ツール

● [Bensonグループ推定ツール]で推定されたBensonグループと個数を**使用しない**場合

✓ Bensonグループの表に直接手入力してください。

- ❑ 本ツールで使用可能なBensonグループは[Bensonグループ一覧]に記載されていますので、適宜ご利用ください。
- ❑ [Bensonグループ一覧]にないBensonグループの場合は、右下の表に寄与値[kJ/mol]と個数を手入力してください。

② 個数を手入力
Bensonグループの個数を入力してください。

寄与値がない場合、セルが黄色くなります

No	Bensonグループ	個数
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20		

① Bensonグループを手入力
[Bensonグループ一覧]シートに記載のあるBensonグループを入力してください。
※ [Bensonグループ一覧]シートからコピー&ペースト可

手元にBensonグループと寄与値データがある場合
Bensonグループ（任意）と寄与値及び個数を入力してください。
なお、寄与値の単位は「kJ/mol」です。

④ 物質の状態と系を選択
推計対象物質の状態（気体/液体/固体）と系（反応物/生成物）を選択してください。生成熱の推計値が表示されます。

状態（物質の3態）を選択してください
反応物/生成物を選択してください

生成熱 kJ/mol

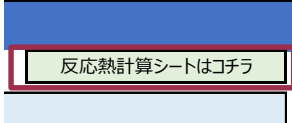
補正値の候補（環状構造、シス-トランス異性体等）

No	補正条件（構造条件、Bensonグループ等）	個数
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

③ 補正条件を手入力
必要に応じて、[Bensonグループ一覧]シートの補正条件及び個数（原則1個）を入力してください。
※ [Bensonグループ一覧]シートからコピー&ペースト可

No	Bensonグループ	寄与値	個数
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			

生成熱が推計されたら
[反応熱計算シート]に戻って生成熱セルを入力してください。
※コピー&ペーストをする場合は、必ず「文字列」としてペースト（貼り付け）してください。



4. 生成熱推計ツール

- (参考) [Bensonグループ一覧]にBensonグループ掲載されていても、生成熱が推計されない場合
 - ✓ 物質の状態 (気体/液体/固体) によっては、寄与値がデータベースになく、生成熱が推計されないことがあります。
 - 下記のとおり、寄与値がデータベースにない場合は該当するBensonグループのセルが黄色くなります。
 - 別途手元に当該寄与値データがある場合、右下の表に寄与値と個数を入力することで生成熱が推計されます。

物質の状態によっては計算できない
 本ツールのデータベースに、Bensonグループはあるものの、寄与値がない場合に生じる現象です。
 ※本ケースでは、「気体」の場合、推計可能

寄与値がない場合、セルが黄色くなります

状態 (物質の3態) を選択してください
 反応物 / 生成物を選択してください

生成熱 kJ/mol

No	Bensonグループ	個数
1	C[B]-(H)	4
2	CO-(C)(O)	1
3	CO-(C[B])(O)	1
4	O-(CO)(H)	1
5	O-(C[B])(CO)	1
6	C-(H) ³ (CO)	1
7	C[B]-(O)	1
8	C[B]-(CO)	1
9		
10		
11		
12		
20		

補正值の候補 (環状構造、シス-トランス異性体等)

No	補正条件 (構造条件、Bensonグループ等)	個数
1	(CH3O)(COOH),ortho	1
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

No	Bensonグループ	寄与値	個数
1			
2			
3			
4			
5			
6			
7			
8			

寄与値がないBensonグループ
 [Bensonグループ一覧]シートに記載のある (Bensonグループそのものは本ツールのデータベースにある) もの、寄与値がない場合、セルが黄色くなる。
 ※物質の状態によっては寄与値がないものもある

手元にBensonグループと寄与値データがある場合
 お手元に寄与値データがあれば、入力することで生成熱の推計が可能です。
 ※必ず左上のリストから寄与値がないBensonグループを削除してから入力

生成熱が推計されたら
 [反応熱計算シート]に戻って生成熱セルに入力してください。
 ※コピー&ペーストをする場合は、必ず「文字列」としてペースト (貼り付け) してください。

5. Bensonグループ一覧

- (参考) [Bensonグループ一覧]は本ツールのデータベースに搭載されているBensonグループです。
 - ✓ 本シートにないBensonグループは、寄与値のデータがないため生成熱を推計することが出来ません。
 - お手元に寄与値のデータがある場合は、[生成熱推計ツール]シートに入力してください。
 - ✓ 当該シートを参考に、生成熱を推計したい物質のBensonグループをご自身で分析してください。
 - [Bensonグループ推定ツール]シートで推定できなかった物質の生成熱を推計する場合などにご利用ください。

Bensonグループ		補正值			
No	Bensonグループ	No	CAS	補正条件 (構造、Bensonグループ、物質等)	説明
1	B-(C)3	1	-	C-(H)3(C),tertiary	
2	B-(Cl)	2	-	C-(H)3(C),quaternary	
3	B-(H)(O)2	3	-	C-(H)3(C),tert/quat	
4	B-(N)(Cl)2	4	-	C-(H)3(C),quat/quat	
5	B-(N)2(Cl)	5	-	cis(unsat)corr	不飽和脂肪族,cis
6	B-(N)3	6	-	tert-Butyl,cis	
7	B-(O)(Cl)2	7	-	ortho corr, hydrocarbons	炭化水素.ortho
8	B-(O)2(Cl)	8	-	meta corr, hydrocarbons	炭化水素.meta
9	B-(O)3	9	-	C-(C)(H)(O)2	
10	B-(OH)	10	-	(COOH)(COOH),ortho	
11	B-(S)	11	-	(COOH)(COOH),meta	
12	B-(S)3	12	-	(CH3O)(COOH),ortho	
13	Bi+	13	-	(CH3O)(COOH),meta	
14	C-(Al)(H)2	14	-	(OH)(OH),ortho	
15	C-(Al)(H)3	15	-	(OH)(OH),meta	
16	C(allene)	16	-	(COOH)(OH),ortho	
17	C-(B)(H)	17	-	Epoxy(ring)	環状のエポキシ基を有する化合物
18	C-(B)(H)2	18	-	Zwitterion enegy, aliphatic	脂肪族のアミノ酸またはペプチド

- ✓ Bensonグループ記述ルール (本ツール独自ルール)
 - 二重結合 : [d]、三重結合 : [t] (例 : 二重結合を有するCの場合、C[d]とした。)
 - 芳香族炭素 : [B]、多環系炭素 : [BF]、芳香族化合物 : [Ar]、アゾ結合における窒素 : N[A]、イミン結合における窒素 : N[I]
 - 記述の順番
 - [d]→[t]→[B]→[BF]→[Ar]→N[A]→N[I]
 - ハロゲンを除き原則アルファベット順 (C→H→N→O) →ハロゲン (F→Cl→Br→I)
 - ひとつかたまりになる単元素・官能基は「 (括弧) 」でくり、2つ以上ある場合は直後に数を記述 (例 : Hが3つ結合の場合、(H)3)
 - cisやmeta、orthoなど構造を表す文字はBensonグループ直後に「 , (カンマ) 」を入れて記述 (例 : (NO2)(NO2),ortho)

※本ツールはExcelを活用しているため、Excelで判別できるような記述にする必要があったため独自に設定したものです。(一般的なルールとは異なる)