

化学薬品（有機物質）の管理

The management of chemical substances (organic compounds)

遠藤 忠利

Tadatoshi ENDO

1. はじめに

以前（2016年）、化学研究室での無機物質の管理について当紀要にまとめさせていただいた¹⁾。無機物質は市販品を中心にまとめることができたが、有機物質はデータベースも管理方法も少し異なるので、今回は有機物質を中心にまとめたことを紹介する。

有機物質、無機物質を問わず、管理している物質は研究室によって偏ることになるが、当研究室で管理している有機物質については、無機物質と比べ、次のような特徴が上げられる。1) 常温常圧で固体および液体の状態をとる。2) 気化しやすい。3) 分解しやすい。4) 可燃性があるものが多い。5) 市販されていない物質がある。6) 教員ごとに異なる使用（合成）物質群がある。これらを考えて効率よく、安全に薬品を管理しなくてはならないことになる²⁾。

2. 有機物質の状態と消防法による薬品の分類

無機物質と同様に消防法による有機物質を分類する。ただし、後で述べるが、保管場所については官能基を中心に保管している。有機物質で気体の物質（アセチレン等）はボンベによる保管となるのでその管理法にしたがうことになる。当研究室では、ホルマリン（ホルムアルデヒド（気体）の水溶液）のように溶液の状態でしか気体物質は保管していない。実験で用いるときには必要に応じて気体を発生させる形で使用することになっている。したがって、化学研究室が管理するすべての有機物質は、固体、液体の状態で保管されている。

消防法（火災、爆発の回避）での化学物質の分類は、第1類（酸化性固体）、第2類（可燃性固体）、第3類（自己発火性、禁水物質）、第4類（引火性液体）、第5類（自己反応性物質）、第6類（酸化性液体）の6つである。具体例は次のようになる。

消防法での分類の化合物例

- 第1類 過酸化物塩、硝酸塩、二クロム酸塩、過マンガン酸塩、塩素酸塩、過塩素酸塩、塩化イソシアヌル酸など
- 第2類 赤リン、金属粉、硫黄、引火性固体
- 第3類 アルカリ金属、アルキルリチウム、黄リン、金属水素化物など
- 第4類 炭化水素、アルコール、エーテル、二硫化炭素など
- 第5類 有機過酸化物、硝酸エステル、ニトロ化物、アジ化物など
- 第6類 過塩素酸、硝酸、過酸化水素水など

有機物質では第1類、第6類にはほとんど該当物がない。ほとんどの有機物質は、燃焼の3要素（酸素供給源、燃料、点火源）のうち燃料（還元剤）となるので、単独で酸素供給源（酸化剤）とはなり得ないからである。第2類も引火性が非常に強いものに限定されるので、可燃性の固体ではあるが危険物に指定されない有機物質も多い。有機金属（有機溶媒に溶解している）は第3類、有機溶媒等の液体に関してはほとんどが第4類、過酸化ベンゾイル等の過酸化物（物質内に酸素供給源を持つ有機物質）、および、アゾビスイソプロピロニトリル等のアゾ化合物のように自己分解性のある有機物質が第5類となる。第4類に関してはさらに次のように、主に引火点に基づいて分類されている。これにより、保管場所の保管許容量が決まってくる。

特殊引火物

- 発火点 $\leq 100^{\circ}\text{C}$ または 引火点 $\leq -20^{\circ}\text{C}$ で、沸点 $\leq 40^{\circ}\text{C}$
- 第1 石油類
 - 引火点 $< 21^{\circ}\text{C}$
- アルコール類
 - 水溶性の炭素数 1～3 の一価のアルコール
- 第2 石油類
 - $21^{\circ}\text{C} \leq$ 引火点 $< 70^{\circ}\text{C}$

第3 石油類

70°C ≤ 引火点 < 200°C

第4 石油類

200°C ≤ 引火点

動植物油類

引火点 200 ~ 300°C

このように火災の危険を考えての分類であるが、実際の研究室での保管は、有機物質の場合、この分類では行なわれない。ほとんどの有機物質は、危険物でないか、第4類であり、化合物の官能基での分類による保管のほうが使用に当たり便利なことによる。たとえば、トルエン（第4類第1石油類）、キシレン（第4類第2石油類）は同じ棚に炭化水素類として保管し、ピリジン（第4類第1石油類）とN,N-ジメチルアミノピリジン（固体）もアミン類として保管する。ただし、第3類、第5類、第4類特殊引火物、分解性のある物質などは禁水、冷凍、冷蔵、防爆条件などがそろった所が保管場所となる。

3. データベース化

化学薬品の管理では、ある時点で、ある化学薬品がどこに、どのくらいの量で、ストックされているかをまとめて把握しておかなくてはならない。比較的少ない項目で無機薬品類、有機薬品類をまとめてデータベースを作り管理している。以前示したデータ項目は次のようなものである。個々の項目に対する説明は以前述べた¹⁾。

No	207
Name	Calcium chloride
名前	塩化カルシウム
量：g or mL	500
管理場所	C-a3
形状	粒状
濃度等	
別名	

市販品の場合は、有機物質の場合でも、これらの項目で十分であるが、合成品、研究者による精製品の場合はさらに次の項目を付ける必要が出てきた。

①誰が合成、調製、使用したのか。

自分の扱う物質に、市販されていないが合成法が確立されている試薬を作用させる場合は、文献に基づいてその試薬を合成することになる。この場合は、通常の命名（文献に記されている）による分類、管理（反応性を考慮して場所を決める）を行えば問題は無い。それに対して、合成を行なうときの中間物質、新規反

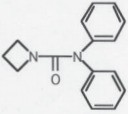
応用の試薬、同系統の反応の生成物等では新規物質が生じる。これらはその研究者による一連の化合物となることが多い。したがって、それらに対して命名による分類をするだけでなく、研究者名（使用者名）をデータベースに組み込んでおく方が管理しやすくなる（化学研究室では、AN、TI、TE←筆者と付けることにした）。ただし、サンプル程度（～5g程度）の保管量である場合はデータベースに加えなかった。

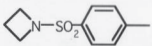
②構造式のみで示してある物質（図1）

市販試薬でもアンプルへの詰め替え等を行なった場合、あるいは純度を上げるため、蒸留、再結晶等の操作を行ない、試薬びんに詰め替えられた場合では構造式のみラベルに記されているものもある。本来、市販品と同様に扱えるのだが、それらの操作を行なった研究者が退職された場合、データベースとしての管理が難しくなる。有機化学の命名法に慣れた研究者がいれば市販品であることが確認できるのであるが、そうでない場合は難しいことになる。また、合成した物質では、ラベルに構造式のみ記してあり命名されていない有機物質もある。正式に命名すると長い名前になり、その名前から考えてもその構造式がすぐに出てこない場合があり、利便性から構造式のみをラベルに記してあることによる。これらに正式な名称をつけることは、時間がかかり実務的ではなくなることも多い。したがって、そのような物質については、その構造式中の母核となる物質名をデータベースに入れ、周りの置換基等を別に記し、さらに、構造式を加えることにした。これに、上記の研究者名を加えればそれなりに分類ができると考えた（図2）。構造式を書くのにはそれなりに手間がかかるので、まだ、完了していないが進行中である。なお、構造式はフリーのソフトウェア ISIS draw を用いた³⁾。



図1 構造式が書かれたラベルのみの試薬。左は合成品、右は市販品を蒸留しアンプルに詰め替えた試薬。

No	1107		
Name	N,N-diphenylcarbamylazetidine		
名前	N,N-ジフェニルカルバミルアゼチジン		
量：g or mL	25		
管理場所	C-g2左AN		
形状			
濃度等			
別名			
母核名	azetidine	使用者	AN
基	diphenylcarbamyl	構造式	

No	1111		
Name	N-p-toluenesulfonylazetidine		
名前	N-トルエンシルホルニルアゼチジン		
量：g or mL	10		
管理場所	C-g2左AN		
形状			
濃度等			
別名			
母核名	azetidine	使用者	AN
基	toluenesulfonyl	構造式	

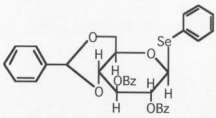
No	1110		
Name			
名前			
量：g or mL	10		
管理場所	T-a6		
形状			
濃度等			
別名			
母核名	phenylselenoglucoside	使用者	TE
基	benzoyl,benzylidene	構造式	

図2 データベースの表示。使用者、母核名、基の名称、構造式を追加して管理している。No1107とNo1111は共に azetidine 誘導体であり、使用者はANである。保管場所は使用者のものを集めたコンテナに入れてある(C-g2 左 AN)。No1110の名称は 2,3-di-O-benzoyl-4,6-O-benzylidene-β-D-glucopyranosyl phenyl selenide 等とすべきであるが、あえて記入しなかった。

4. 薬品棚での安全管理

有機物質は主として次の形体の容器で保管されている。

①ねじ口の試薬びん

固体の場合は広口、液体の場合は細口で比較的安全な物質が入れている。キャップは樹脂製でパッキングも樹脂製であるが、蒸気圧がそれなりに高い物質、分解しやすい物質は口から薬品が少しずつ漏れ出ていると考えた方がよい。したがって、化学ではなるべく瓶をポリスチレンの容器に入れ保管して室内に漏れ出ないようにしているが、それでも漏れ出ている可能性がある（無機物質ではあるがヨウ素などでは試薬びんを入れてあるケースが比較的すぐに茶色に着色してくる）。また、それぞれの漏れ出た物質による棚の腐食も否定できない。

②アンプル

大気からの水分で分解しやすい物質、揮発しやすい物質等が入れている。アンプルは薬品の保管としては、完全に密閉され、ガラス面にのみ接触しているので最も良い保管方法であるが、毎回、アンプルを切って封入を繰り返す必要があること、形状から先端が細いガラス管となり破損しやすいことなどの不便さがある。また、自己分解性がある場合は破裂することもある。したがって、化学研究室では一部のアンプルは、それを覆う入れ物に入れてある（図3）。



図3 アンプルおよび有機物質を入れてあるコンテナ（左）、コンテナ内部（左下）およびアンプルを入れてある試薬びん（右）。コンテナ上部のふちにシリコンラバーを貼付け、塩化ビニル板のふたをのせている。密閉性を持たせ、蒸気を漏れにくくし、また、破損しやすいアンプル上部を保護している。右写真はプラスチックの試薬びんを切断しアンプルを入れてテープを巻いて止めてある。この物質は保管中に破裂することがある⁴⁾。

化学薬品（有機物質）の管理

③バイアルびん

有機金属試薬（ブチルリチウムヘキサン溶液、グリニヤール試薬 THF 溶液等）および脱水した溶媒などはバイアルびん（Aldrich Sure/Seal bottles 等）に入れて市販されている。すなわち、水や酸素等を極端に嫌う物質が入っていて、それを簡単に取り出すための容器である。シリンジの針を刺すゴムの部分は、試薬側はテフロンでコーティングされているが、一度針を通すとそこから漏れ出ることが多い。したがって、化学研究室では、その容器をシリカゲル入りの密閉容器（ガラス製、パッキングはシリコンゴム）に入れて保管している（図5）。

それぞれの試薬の化学研究室での保管場所は次の場所である。

①薬品棚

室温で安定な有機物質は無機物質と同様に薬品棚で市販の洗い桶に入れ、官能基別に管理される。また、アセトン、エタノール、ヘキサンなどの溶媒類は官能基別ではなく、薬品棚で管理している¹⁾。湿気を嫌う物質はさらにデシケータに入れ、棚に置かれる。地震等の場合、デシケータが動いて棚のガラスを破損しないように、あるいは破損しても落下しないように、ワイヤーをして管理している（図4）。



図4 ワイヤーで保護したデシケータ。ワイヤーの両端に棚を固定する金具を付け、取り外しできるようにしてある。

②冷蔵庫

分解性のある物質は冷蔵庫、冷凍庫での管理になるが、有機物質の場合、可燃性の物質が多い。したがって、防爆型の冷蔵庫を用いることになる。防爆型の冷蔵庫は高額であり、すべての有機物質を入れることはできないので、比較的安全な物質は通常の冷蔵庫の保管となる。

③金庫型スチール薬品保管庫¹⁾

禁水有機物質はナトリウム等の禁水無機物質と一緒にまとめて金庫型（ロッカー型）の薬品保管庫に入れて管理している（図5）。また、溶媒類を除き炭化水素類は金庫型（引き出し型）に入れて管理している。



図5 金庫型保管庫内部。手前の密閉容器は有機金属試薬である。また、金属ナトリウム、金属ナトリウムを入れ脱水している有機溶媒および二硫化炭素等の特殊引火物も入れてある。

5. 問題点と対策

化学研究室では、このようにいくつかの安全管理上の対策をとっているが不十分なことも多い。以前に無機物質についていくつかの問題点をあげた¹⁾。ここでは有機物質に関することについて、まだ、対策をしていないことを含め、注意することをあげる。

①有機物質の分解性の問題

有機物質は無機物質と比べ分解しやすいので、再結晶、蒸留などで精製してから実験に用いることも多い。それに伴い、試薬びんを移し替えることになり、元々の試薬びん張られていたラベルの情報が失われることになる。したがって、試薬の購入時にデータベースを作ることが重要になるが、その物質を使つての実験の方が優先され、なかなか実行できないことがある。

②廃棄の問題

①の分解性のこともあり、本来、使う分だけ購入し在庫は作らない方がよいことになる。余った物質は廃棄処分に回す方が正しいことも多い。研究者が合成した新規化合物に関しては必要年月が過ぎたら廃棄した方がよいが、これも実行できないことが多い。

③混載の問題

無機物質の保管の時にも述べたが、化学研究室には有機化合物の方が無機化合物より多種多量に保管されているので、保管スペースの問題から無機化合物と有機化合物が混載されることになる。消防法の分類にし

たがって、酸化剤と有機化合物を混載しないようにしているが、蒸気圧がある無機物質（塩酸、アンモニア水など）、蒸気圧のある有機物質（多くの液体の有機物質）が一部混載されているので、お互いが汚染される場合もあると考えられる。

④室温、換気の問題

③で述べたように、どうしても棚の中、部屋の中に薬品が漏れ出て、棚の扉を開けると薬品臭（アミン臭等）が感じられることがある。薬品を保管してある化学準備室は24時間、換気扇を回しているが、長時間その部屋にいることは薬品類により暴露されることになる。特に夏場の高温時の温度管理が問題になる。

6. まとめ

薬品類の保管管理は、使いやすさ（管理に手間をかけない、すぐに取り出せる等）と安全（破損防止、防犯対策等すべてを管理する）を両立させなくてはならない。さらに想定外のことが起こってもできるだけ被害が少なくなるようにすべての薬品を管理する必要があると以前述べた¹⁾。ここでもう1つ気が付いたのは、研究者のその研究場所での研究の終了時の薬品の処理、処分である。研究者は自分の扱っている薬品類はどのような性質なのか熟知している。しかし、分野の異なる研究者の扱っている薬品類は理解していない場合が多い。市販品についてはデータがある程度は入手できるが、合成品については、ほぼデータは無い。まして、自分独自の記号のみ記されている薬品はどうしようもなく、ただストックしておくという先送り対応となることもある。薬品処理は時間がかかり、生産性のない作業であることから退職間際でも行なわれず、次世代の研究室教員にゆだねられることも多い。次世代の研究室教員も研究テーマが異なれば、さらにストックしておくことになる。薬品の購入、使用中の管理、廃棄までが、薬品の管理者の責任であり、適切な薬品管理が行なえたらと思っている。

引用文献

- 1) 遠藤忠利、「鶴見大学紀要」 53号 第4部 pp33-37（平成28年）
- 2) 化学同人編集部編、「実験を安全に行なうために 第8版」、化学同人（2017年）
- 3) ISIS/Draw（MDL Information System）
- 4) 遠藤忠利、「鶴見大学紀要」 48号 第4部 pp7-10（平成23年）

化学薬品（有機物質）の管理

The management of chemical substances (organic compounds)

歯学部学内教授 遠藤忠利