

【技術分類】 2－3－1 素材／物性・分析／物理恒数

【技術名称】 2－3－1－1 物理恒数

【技術内容】

香料を取り扱う際に関係する物理恒数は主に蒸気圧および匂いの強さの尺度である。先ず、蒸気圧について記す。高い蒸気圧を有する芳香物質は、軽い果実様のにおいを持つか、あるいは溶剤のようなにおいを有している。主要有香物質の蒸気圧を図表 1 に示す。

【図表 1】

化 合 物	蒸 気 圧 (25℃) (mmHg)	沸 点 (760mm) (℃)	化 合 物	蒸 気 圧 (25℃) (mmHg)	沸 点 (760mm) (℃)
Acetaldehyde	837	22.4	Isobutyl isobutyrate	4.7	146.5
Methyl formate	584	31.8	<i>n</i> -Propyl <i>n</i> -butyrate	4.5	142.5
Dimethyl sulfide	500	36	α -Pinene	4.4	154
Ethyl formate	243	54.5	<i>n</i> -Nonane	4.25	149.5
Acetone	224	56.5	Propionic acid	4.0	140.3
Methyl acetate	218	57.2	Methyl amyl ketone	3.85	151.5
Ethyl acetate	94.6	77.1	Allyl isosulfocyanate	3.55	150.7
Methyl propionate	85.3	79.8	Aldehyde C ₇	3.4	155
Propyl formate	82.7	81.2	Anisol	3.3	153.8
Ethyl alcohol	59	78.3	Camphene	2.7	159.5
Diacetyl		88	Isoamyl propionate	2.6	178.6
Methyl isobutyrate	50.4	92.6	Propyl isovalerate	2.4	155.9
Isopropyl alcohol	44.5	82.4	Isobutyl <i>n</i> -butyrate	2.25	156.9
Isobutyl formate	42.0	97.7	Isobutyl isovalerate	2.2	170
Formic acid	40	100.6	<i>n</i> -Amyl propionate	2.1	160.4
Ethyl propionate	36.5	99.2	Ethyl hexylate	1.7	166
Propyl acetate	33.6	102.0	Myrcene	1.65	171.5
Methyl <i>n</i> -butyrate	32.6	102.9	Terpinolene	1.8	185
Water (参考)	23.756	100.0	Cineole	1.65	176.4
Ethyl isobutyrate	22.1	109.9	Isobutyl valerate	1.55	169.4
Methyl valerate	19.0	118.5	Furfuryl aldehyde	1.5	161.7
Isobutyl acetate	17.2	116.1	<i>n</i> -Amyl isobutyrate	1.45	169.8
Isopropyl isobutyrate	15.9	120.8	<i>p</i> -Cymene	1.45	176.8
Ethyl butyrate	15.5	119.6	<i>n</i> -Amyl isovalerate	1.4	187
Acetic acid	15.2	118.7	Dipentene	1.4	177.6
Isoamyl formate	14	124.0	(Limonene)		
Propyl propionate	13.1	121.4	<i>p</i> -Cresyl methyl ether	1.2	175
Diethyl sulfide	8.4	138.6	Methyl heptenone	1.2	173.1
Ethyl isovalerate	8.1	134.3	Ethyl amyl ketone	1.1	172.9
Propyl isobutyrate	7.9	133.9	Benzaldehyde	1.1	178.1
Isobutyl propionate	6.6	136.8	<i>n</i> -Butyric acid	1.03	175.8
Isoamyl acetate	5.6	142.0	α -Phellandrene	1.03	175.8
Styrene	4.9	144.0			

出典：香料の化学 1983 年 9 月 16 日、赤星亮一著、大日本図書株式会社発行、64 頁 表 3・3(a) 主要有香物質の蒸気圧

蒸気圧の測定方法は多数あり、それらを次に列挙する。

(1) 静止法

(a)直接法：u 型圧力計、改良 u 型圧力計、マクライド圧力計、絶対圧力計

(b)間接法：ガラス隔膜圧力計、示差隔膜圧力計、半透膜圧力計、らせん管圧力計、懸鐘圧力計、等圧法、露点法、蒸発法

(2) 気体流動法

(3) 沸点測定法

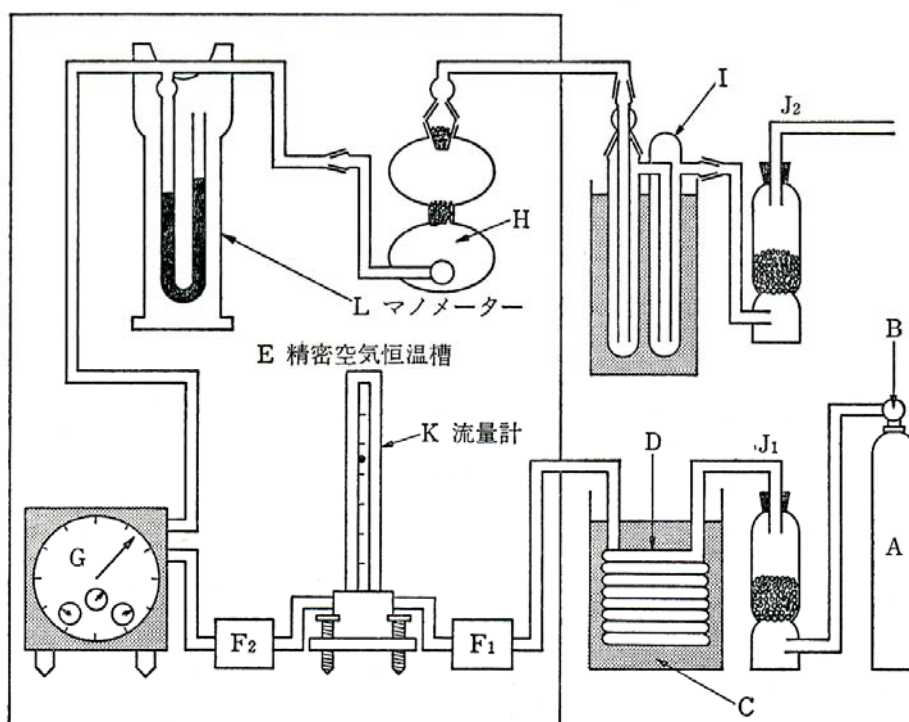
(4) 気体運動論に基づく方法

(a) 分子流出法、(b) 流出回転法、(c) 表面蒸発法、(d) 気体粘度を利用する方法、(e) 熱電対真空計、(f) ピラニ真空計、(g) ラジオメーター圧力計、(h) イオン化圧力計

これらの測定法のうち、香料の蒸気圧測定に適した方法は、u 型圧力計、改良 u 型圧力計、示差隔膜圧力計、気体流動法、沸点測定法による方法である。

例として、気体流動法の一つで 1~1000 μ の蒸気圧測定に適しているバブリング法による香料の蒸気圧測定法について、その装置を図表 2 に示す。

【図表 2】



出典：香料の化学 1983 年 9 月 16 日、赤星亮一著、大日本図書株式会社発行、69 頁 表 3・1 バブリング法による蒸気圧測定装置

【図表 2 の説明】

A のボンベより B のメインフローコントローラーを経て、窒素ガスは C の恒温水槽中に設置されているステンレス蛇管 D に入り、測定温度にまで昇温される。次に精密空気恒温槽 E 中の 1 次精密流量制御器 F_1 を通り、2 次精密流量制御器 F_2 、積算流量計 G を経てバブリングにより試料蒸気で飽和された窒素ガスは捕集管 I に採取される。J₁、J₂ は乾燥管である。この操作の結果得られた数量を用いて、所定の計算式によって蒸気圧が求められる。

次に、匂いの強さを表す $K \log C$ について記す。刺激の強さと感覚の強さを表すものに Weber-Fechner の法則がある。L. Appel は簡略化のため、I を感覚の強さを表す尺度とし、C を溶液中の濃度として、 $I = K \log C$ となる。標準有香物質としてシトラール、溶剤としてジエチルフタレート (DEP) のように沸点が高く無臭のものを選び、濃度 1% から 100% までのシトラールに対するにおいの強さを評価する基準として 6 段階のレベルを設けた。

$$100^{0.2} = 2.512 \text{ であるから}$$

シトラールの場合、 $K=2.5$ において、 $I=2.5\log C$ となる。

シトラールの基準濃度 (C) とにおいの強さのレベル (I) の関係を図表 3 に示す。

【図表 3】

においの強さ のレベル (I)	ジエチルフタレート 中のシトラールの 基準濃度 (C)	においの強さ のレベル (I)	ジエチルフタレート 中のシトラールの 基準濃度 (C)
	(%)	1.5	4
- 4	0.0256	2.0	6.3
- 3	0.064	2.5	10
- 2	0.16	3.0	16
- 1	0.40	3.5	25
0	1.0	4.0	40
0.5	1.6	4.5	60
1.0	2.5	5.0	100

出典：香料の化学 1983 年 9 月 16 日、赤星亮一著、大日本図書株式会社発行、48 頁 表 2・5 シトラールの基準濃度とおいの強さのレベル

他の有香物質に対する強さのレベルには次の式が適用できる。

$I = d + 2.5\log C$ I は DEP 中の有香物質 1% 溶液の強さ、d は標準シトラール溶液と比較して実験的に決定する。

物質の疎水性の指標として Log P がある。有機溶媒として n-オクタノールなどを用い、水と混合して平衡に達したときの両相での濃度比を常用対数で表示する。コンピューターで構造から Log P を予測する方法として Clog P 法がある。

【出典／参考資料】

香料の化学 1983 年 9 月 16 日、赤星亮一著、大日本図書株式会社発行、46－51 頁、62－72 頁