

## C<sub>4</sub> グリコール類(C<sub>4</sub> Glycols) の物性

### 1. まえがき

三重、二重、一重結合を有する C<sub>4</sub> 炭化水素に二個の -OH 基を置換する組合せを考え、多重結合を有する炭素には -OH 基の置換はおこらないという条件を入れると下記の化合物が残る。

- 1)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$
- 2)  $\begin{array}{c} \text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$
- 3)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$
- 4)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$  (cis-, trans-)
- 5)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}=\text{C} \begin{array}{l} \diagup \text{CH}_2-\text{OH} \\ \diagdown \text{CH}_2-\text{OH} \end{array} \end{array}$
- 6)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$  ((+)(R)-, (-)(S)-, (±)-)
- 7)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$  ((+)(S)-, (-)(R)-, (±)-)
- 8)  $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$
- 9)  $\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$  (meso-, rac-, (-)-, (+)-)
- 10)  $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H}_2\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$
- 11)  $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H}_2\text{C}-\text{CH}-\text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$

これらのうち2) についての記載は見当たらないが、立体異性体も含めて他の18種はすでに報告されている<sup>1)</sup>。

ここではブタジェンから容易に誘導される3), 4), 6), 8) の化合物について物性を示した。

### 2. 各化合物の物性

[1] 3-ブテン-1, 2-ジオール (英, 3-Butene-1, 2-diol, 独, Buten-(1)-diol-(3, 4), Erythrol)<sup>2)</sup>

分子式	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	
構造式	$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2 \\   \quad   \\ \text{OH} \quad \text{OH} \end{array}$	
分子量	88.10	
沸点 (°C)	196.5	Fig. 1
比重 (D <sub>4</sub> <sup>20</sup> g/cc)	1.0466	
屈折率 (n <sub>D</sub> <sup>20</sup> )	1.4616	

[2] シス-2-ブテン-1, 4-ジオール (英, cis-2-Butene-1, 4-diol, 独, cis-Buten-(2)-diol-(1, 4))<sup>3), 4), 5)</sup>

分子式	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	
構造式	$\begin{array}{c} \text{HC}-\text{CH}_2-\text{OH} \\    \\ \text{HC}-\text{CH}_2-\text{OH} \end{array}$	
分子量	88.10	
沸点 (°C)	234	Fig. 1
融点 (°C)	11.77	
比重 (D <sub>4</sub> <sup>20</sup> g/cc)	1.080	
屈折率 (n <sub>D</sub> <sup>20</sup> )	1.478	
双極子能率 (ベンゼン又はジオキサン中)	2.48D	

[3] トランス-2-ブテン-1, 4-ジオール (英, trans-2-Butene-1, 4-diol, 独, trans-Buten-(2)-diol-(1, 4))<sup>4), 5), 6)</sup>

分子式	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	
構造式	$\begin{array}{c} \text{HC}-\text{CH}_2-\text{OH} \\    \\ \text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH} \end{array}$	
分子量	88.10	
沸点	—	Fig. 1
融点 (°C)	25.5	

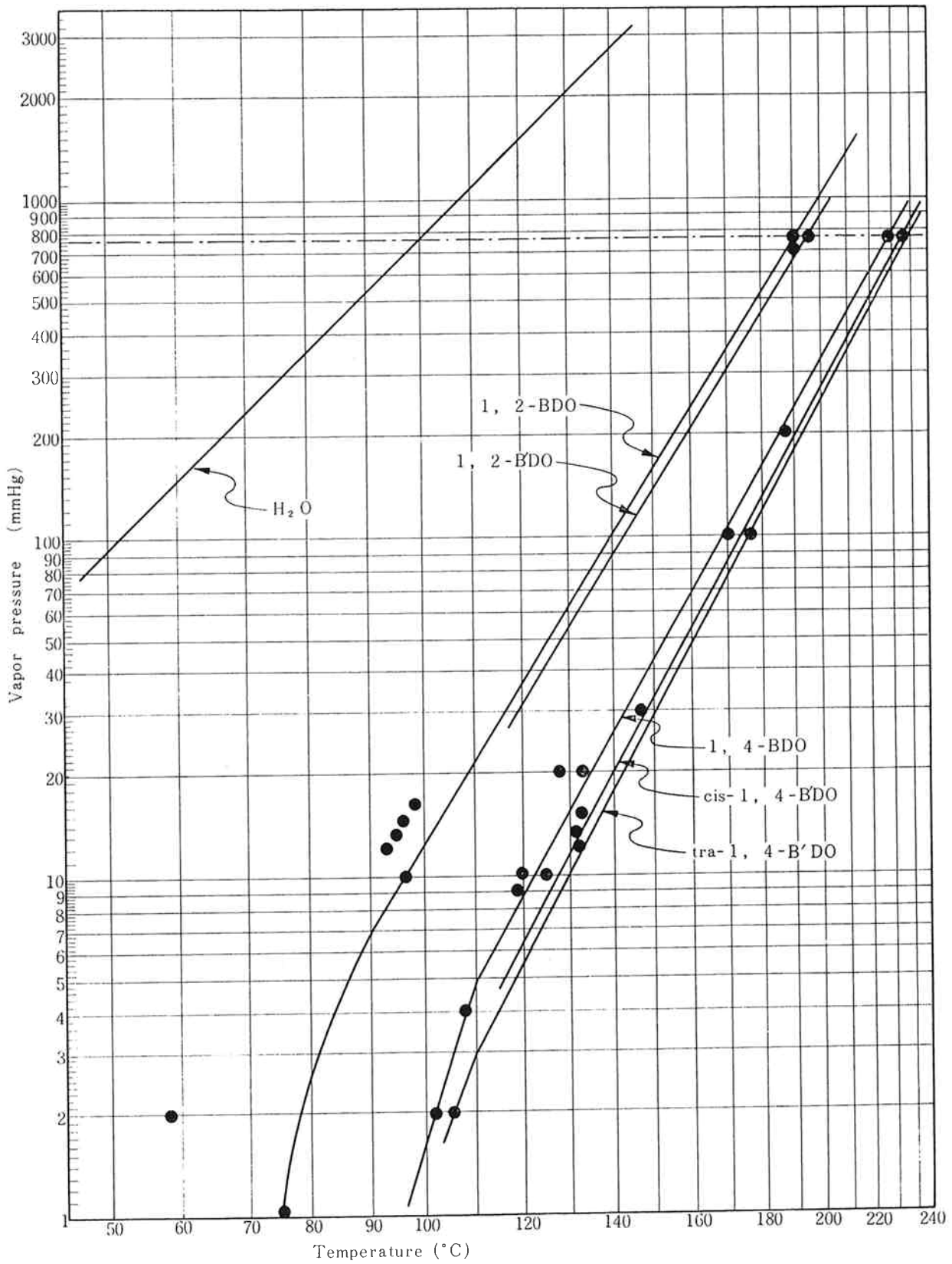


Fig. 1 Relation between vapor pressure and temperature

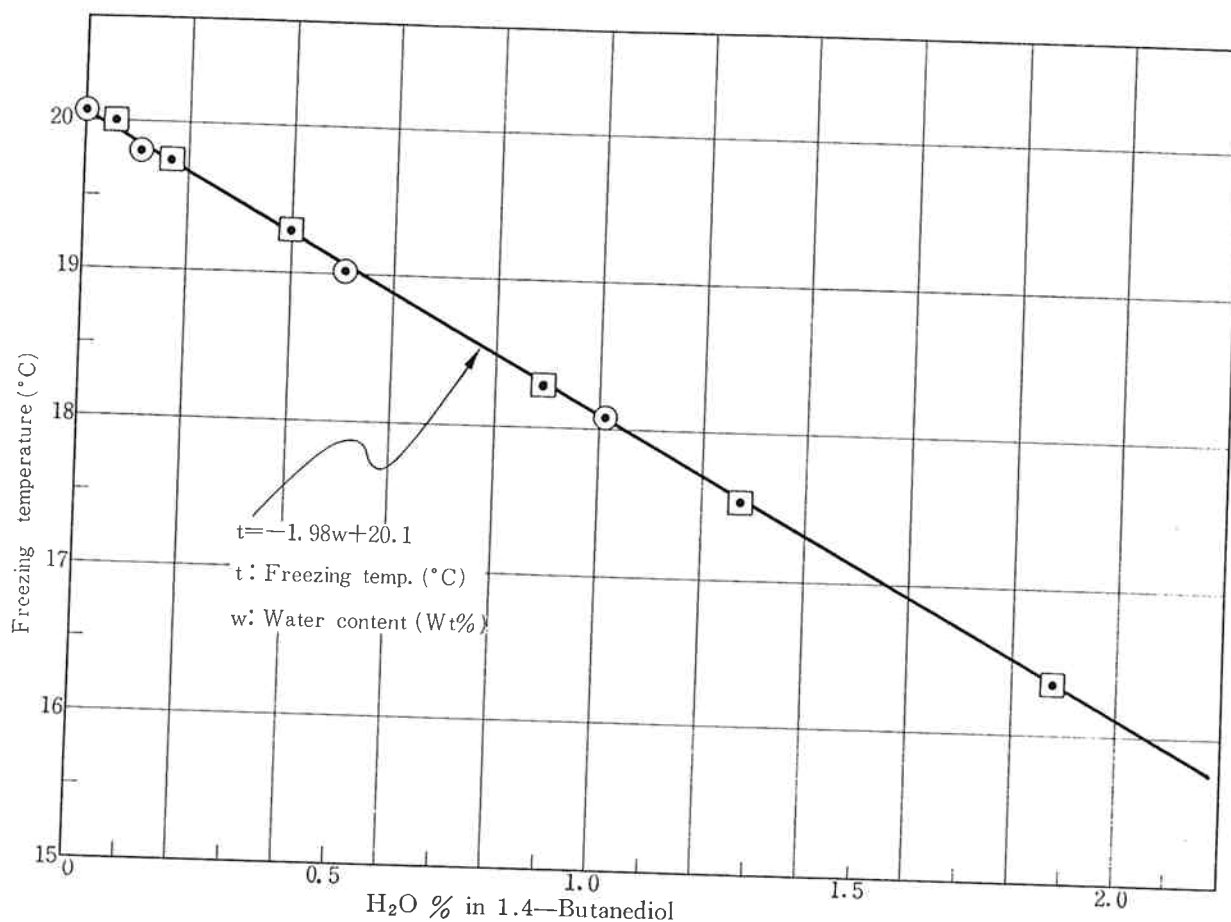


Fig. 2 Freezing temperature of 1, 4-Butanediol containing water

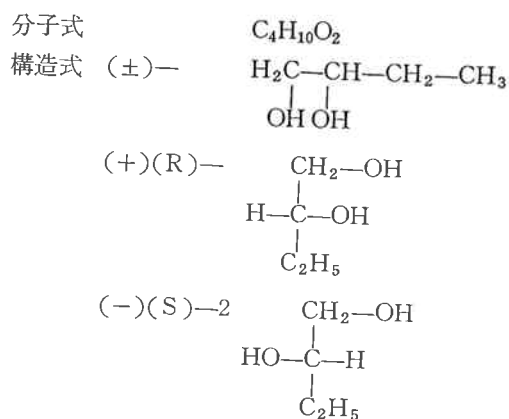
● : Catalog data of Antara Chemicals  
 ■ : Observed values at the laboratory of our Co.

比重 (D<sub>4</sub><sup>20</sup> g/cc) 1.070  
 屈折率 (n<sub>D</sub><sup>20</sup>) 1.4755  
 双極子(ベンゼン又は) 2.45D  
 能力(ジオキサン中)

分子量 90.12  
 沸点 (°C) 190.5  
 比重 (D<sub>4</sub><sup>20</sup> g/cc) 1.0024  
 屈折率 (n<sub>D</sub><sup>20</sup>) 1.4378

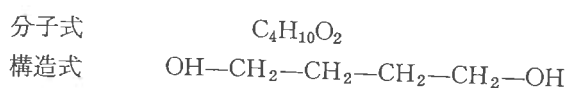
Fig. 1

[4] 1,2-ブタンジオール(英, 1, 2-Butanediol, 独, Butandiol-(1,2), 1, 2-Butylene Glycol)<sup>7)</sup>



燃焼熱 (定容, kcal/mol) 592.6  
 旋光度 (+)(R)体, [α]<sub>D</sub><sup>30</sup>: +14.5° (アルコール C=6), [α]<sub>D</sub><sup>21</sup>: +12.5° (アルコール C=16), [α]<sub>D</sub><sup>25</sup>: +12.6° (アルコール C=11)  
 (-)(S)体 [α]<sub>D</sub><sup>22</sup>: -7.4° (アルコール C=4)

[5] 1,4-ブタンジオール(英, 1, 4-Butanediol, 独, Butandiol-(1, 4), Tetramethyleneglycol, 1, 4-Butylene Glycol)<sup>8)</sup>



C<sub>4</sub> グリコール類 (C<sub>4</sub>Glycols) の物性

分子量	90.12	<i>Chem. Abst.</i> ; 53 4190 <sup>f</sup> , 44 100 <sup>g</sup> , 40 6412 <sup>6</sup> , 41 2389 <sup>g</sup> .
沸点 (°C)	229.15 Fig. 1	
融点 (°C)	20.1	3) Beilstein ; E III 1 2255, H1 499, E II 1 567,
比重 (D <sub>4</sub> <sup>20</sup> g/cc)	1.0154, 1.069	<i>Chem. Abst.</i> ; 43 2578 <sup>e</sup> 41 1607 <sup>f</sup> 50 16774 <sup>g</sup> 44 1005 <sup>g</sup> 60 2763 <sup>d</sup>
屈折率 (n <sub>D</sub> <sup>20</sup> )	1.4461	
粘度 (25°C, cp)	71.5	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> ; 78 1219, 73 244, 78 627, 86 652.
(20°C, cp)	88.8	
比熱 (20°~75°C cal/g. °C)	0.576	4) K. Othmer's Encyclopedea, 1, 612 (1963).
誘電率 (20°C)	31.1	5) Ullmann's Encyklopädie, 4, 765 (1953).
燃焼熱 (kcal/mol)	601.6	6) Beilstein ; E III 1 2256, E II 1 567.
蒸発熱 (kcal/kg)	137.6	<i>Chem. Abst.</i> ; 47 6338 <sup>f</sup> , 60 15723 <sup>e</sup> , 54 19462, 42 1873 <sup>f</sup> .
臨界温度 (T <sub>k</sub> , °C)	446	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 78 627, 78 1218, 86 652.
臨界圧力 (P <sub>k</sub> , kg/cm <sup>2</sup> )	42	7) Beilstein ; E III 1 2165, H1 477, E I 1 248, E II 1 545.
熱伝導率 (20°C, kcal/m. hr. °C)	0.138	8) Beilstein ; E III 1 2172, H1 478, E I 1 249, E II 1 545.
蒸気圧	$\log p = 8.26706 - \frac{2705.69}{T}$	K. Othmer's Encyclopedea, 10, 667, (1966).
表面張力 (22°C dyne/cm)	45.27	Ullmann's Encyklopädie, 4, 754 (1953).
双極子能率	2.40D, 2.5D	<i>Chem. Abst.</i> ; 41 2389 <sup>g</sup> , 53 15986 <sup>e</sup> , 55 3439 <sup>g</sup> , <i>J. Am. Chem. Soc.</i> ; 74 2675, 86 652, 84 190.

## 文 献

- 1) Beilstein ; E III 1 2165~2270.
- 2) Beilstein ; E III 1 2252, H1 499, E I 1 260, E II 1 567.