

別添資料 3－3
DME とプロパン・ブタンの物性

ジメチルエーテル

1. 名 称

化 学 名 ジメチルエーテル(dimethyl ether)
一 般 名 メチルエーテル(methyl ether), オキシビスメタン, メトキシメタン, DME

化 学 式 CH_3OCH_3 (分子量 46.07)

CAS登録番号 115-10-6

化審法整理番号 2-360

2. 国連危険物

危険物分類 可燃性ガス(クラス 2.1)

番 号 1033

3. おもな物理的性質

外 観 無色の気体
におい やや甘味臭
蒸気比重 1.621(空気=1)(25℃, 1 atm)
液体密度 0.661 kg/l(20℃, 飽和蒸気圧)
沸 点 -24.8℃(1 atm)
融 点 -141.5℃(1 atm)
臨界温度 126.9℃
臨界圧力 53.0 atm
蒸 気 圧

(1) 1 気圧以下

mmHg	10	20	60	200	760
℃	-93.7	-85.6	-70.87	-51.56	-24.84

また, Antoine 式

$$\log(P) = A - B/(C + t) \quad (P: \text{mmHg}, t: ^\circ\text{C})$$

において, $A = 7.31646$, $B = 1025.26$, $C = 256.05$

(2) 1 気圧以上

mmHg	760	1322	1520	1930	2728	3800	7600
℃	-24.8	-10	-6.4	0	+10	+20.8	+45.5

また, Harlacher-Braun の式

$$\ln(P) = A + B/T + C \ln(T) + D/T^2$$

($P: \text{mmHg}$, $T: \text{K}$)

において, $A = 48.857$, $B = -3840.19$, $C = -4.856$, $D = 1.71$

蒸 発 熱 5.14 kcal/mol(-24.8℃)

融 解 熱 1.181 kcal/mol(-141.5℃)

標準生成熱 -44.0 kcal/mol

燃 焼 熱 349.1 kcal/mol [生成物 $\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{CO}_2(\text{g})$; 25℃, 1 atm]

水 溶 性 7 wt%(1 atm, 18℃)

4. おもな化学的性質

(1) 不活性雰囲気下では熱的に安定である。また, 中性, 希薄な酸性およびアルカリ性溶液においても安定である。

(2) 空気中において自動酸化を起こし, 過酸化物を生成するが, 他のジアルキルエーテルに比べて生成量ははるかに少ない。

(3) ハロゲン酸あるいは三フッ化ホウ素と反応して, それぞれの付加化合物をつくる。

(4) 発煙硫酸や無水硫酸と反応し, ジメチル硫酸を生成する。

(5) 高温, 適当な触媒の存在下, アミン類, フェノール類, 芳香族炭化水素やオレフィンなどと反応し, それらのメチル誘導体などを生成する。

5. 発火・爆発性

(1) 引火点 -41.1℃

(2) 発火点 350℃(空気中), 250℃(酸素中)

(3) 爆発範囲 3.4~27 vol%(空気中)
3.9~61 vol%(酸素中)

(4) 最小発火エネルギー 0.45 mJ($\phi = 1$)

(5) 自己反応性 空気中において自動酸化を起こし, 過酸化物を生成するため, 打撃, 摩擦などにより発火・爆発することがある。

(6) 自然発火性 なし

6. 工業材料に対する腐食性

(1) 常温では, 通常使用される金属に対しては腐食性はない。

(2) ゴム製品, プラスチック製品などを膨潤させる。また, プラスチック類に含まれる安定剤, 可塑剤のなかには作用を受けるものもあり, プラスチック類の物性劣化の原因となることがある。

(3) ポリテトラフルオロエチレン(テフロン)やポリエチレンは比較的侵されにくい。

生体に対する有害性・参考資料

- (1) 皮膚腐食性 皮膚を侵すことは少ないが、液体の状態では皮膚に触れたときは凍傷のおそれがある。
- (2) 刺激性 気体状態のジメチルエーテルの目・皮膚への刺激性はきわめて少ない。
- (3) 感作性 気体状態のジメチルエーテルの目・皮膚への感作性はきわめて少ない。
- (4) 急性毒性 吸入(ラット) LC_{50} 308 g/m³
吸入(マウス) LC_{50} 385 940 ppm/30 分
ヒトに対する毒性としては、
7.5 vol% : 軽い不快感が起こるが、外観的に変化なし。
8.5 vol% : 21.5 分後、平衡障害、運動不調、視覚攪乱など。
14.0 vol% : 23 分で麻痺、26 分後には失神状態になる。
- (5) 亜急性毒性 吸入(ラット) 10 000 ppm/4 週間 悪影響なし。
吸入(ラット) 20 000 ppm/15 週間 悪影響なし。
吸入(ハムスター) 20 000 ppm/13 週間 白血球数、リンパ球数減少。
非影響濃度 5 000 ppm。
- (6) 慢性毒性 吸入(ラット) 20 000 ppm/30 週間 肝臓に対する毒性の徴候あり。
吸入(ラット) 2 000 ppm/104 週間 影響のない濃度レベル。
- (7) 変異原性 サルモネラ菌 119 000 ppm/48 時間 変異原性なし。
ショウジョウバエ 28 000 ppm/14 日間 突然変異性なし。
- (8) 生殖毒性 吸入(ラット) 28 000 ppm/6~15 日間 催奇性なし。

7. 生体に対する有毒性

8. 環境影響

(1) 環境特性

生分解性 MITI 法(BOD)4 W 0~1 %²⁾

$\log P_{ow}$ 0.20²⁾

文献は巻末共通文献 B 参照。

9. 商品の品位および用途

9.1 商品の品位

JISはないが、一般の製品は表1に示すとおりである。

表1 ジメチルエーテルの品質

純 度	不 純 物 の 含 有 量
99.8 % (wt) 以上	二酸化炭素 0.2 % (wt) 以下 ギ酸メチル 0.01 % (wt) 以下 メタノール 0.01 % (wt) 以下 水 分 20 ppm (wt) 以下

9.2 用 途

ジメチルエーテルは、エアゾール噴射剤、冷媒、抽出用溶剤などとして広く用いられる。

10. 分析試験および検知方法

10.1 分 析 試 験

(1) 二酸化炭素、ギ酸メチルおよびメタノール 試

料を液状でとり、ガスクロマトグラフに注入し、キャリアーガスで展開し、得られたクロマトグラフを解析して含有量を求める。

なお、ガスクロマトグラフの充填剤は、二酸化炭素についてはマレイン酸ジブチル(DBM)、ギ酸メチルとメタノールについては、ポリエチレングリコール(PEG)が一般的に使用される。また、キャリアーガスとしてヘリウムが用いられる。

(2) 水 分 試料を耐圧試料容器にとり、メタノール中に試料ガスを導入して水分を吸収させ、カールフィッシュャー試薬で滴定して水分を求める。

(3) 純 度 100 % から不純物の含有量を差し引いて求める。

10.2 検 知 方 法

ジメチルエーテルの蒸気濃度は、白金-パラジウム合金線の抵抗変化を測定する原理の接触燃焼式ガス検知器、あるいは金属酸化物半導体への可燃性ガスの化学吸着による電気伝導度の変化を利用した半導体式ガス検知器、または検知管式ガス測定器の使用によって求められる。

11. 出 荷 容 器

11.1 出荷容器および包装方法

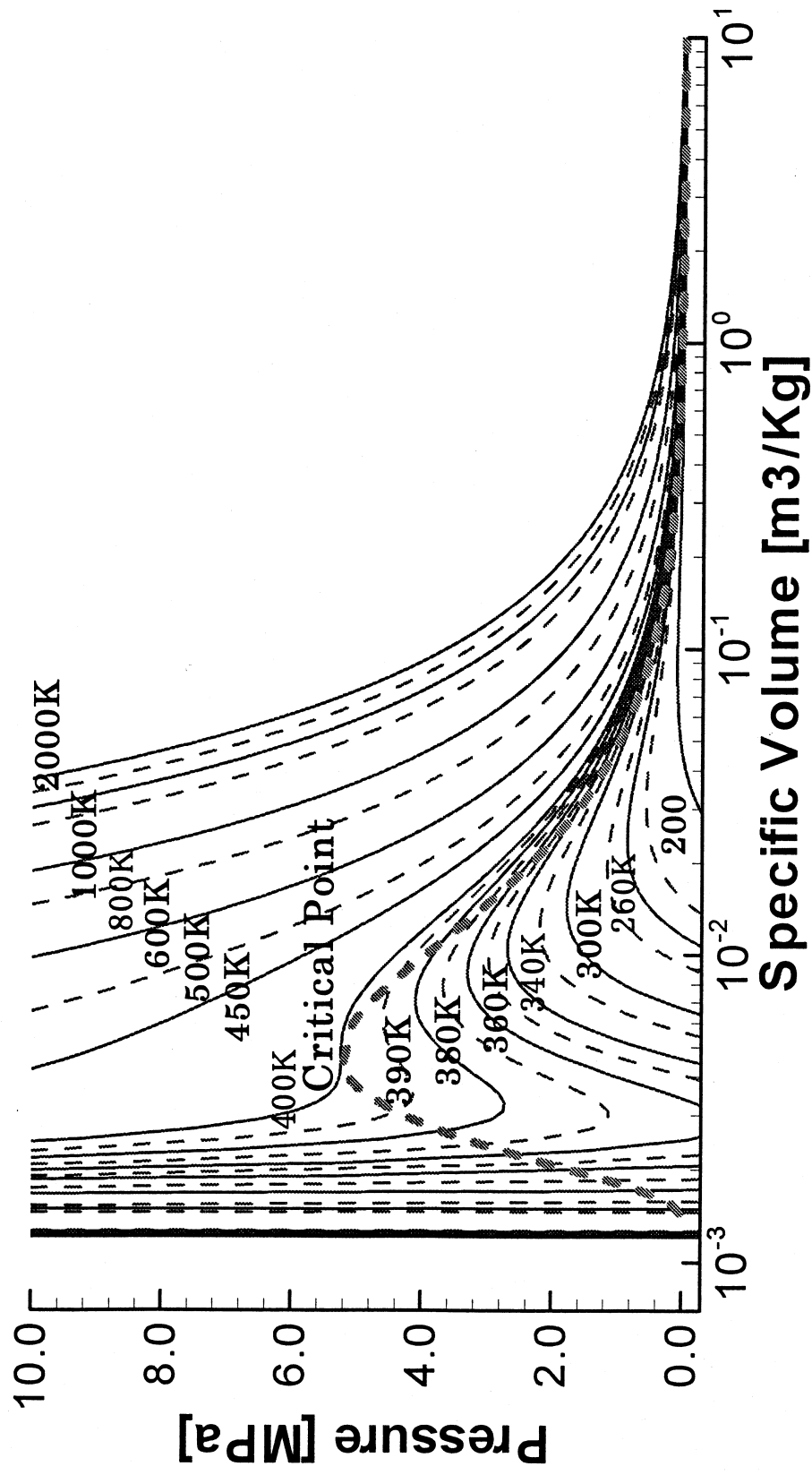
- (1) 可搬容器(ボンベ) 700 kg
- (2) 運搬車 9 t

11.2 表 示 事 項

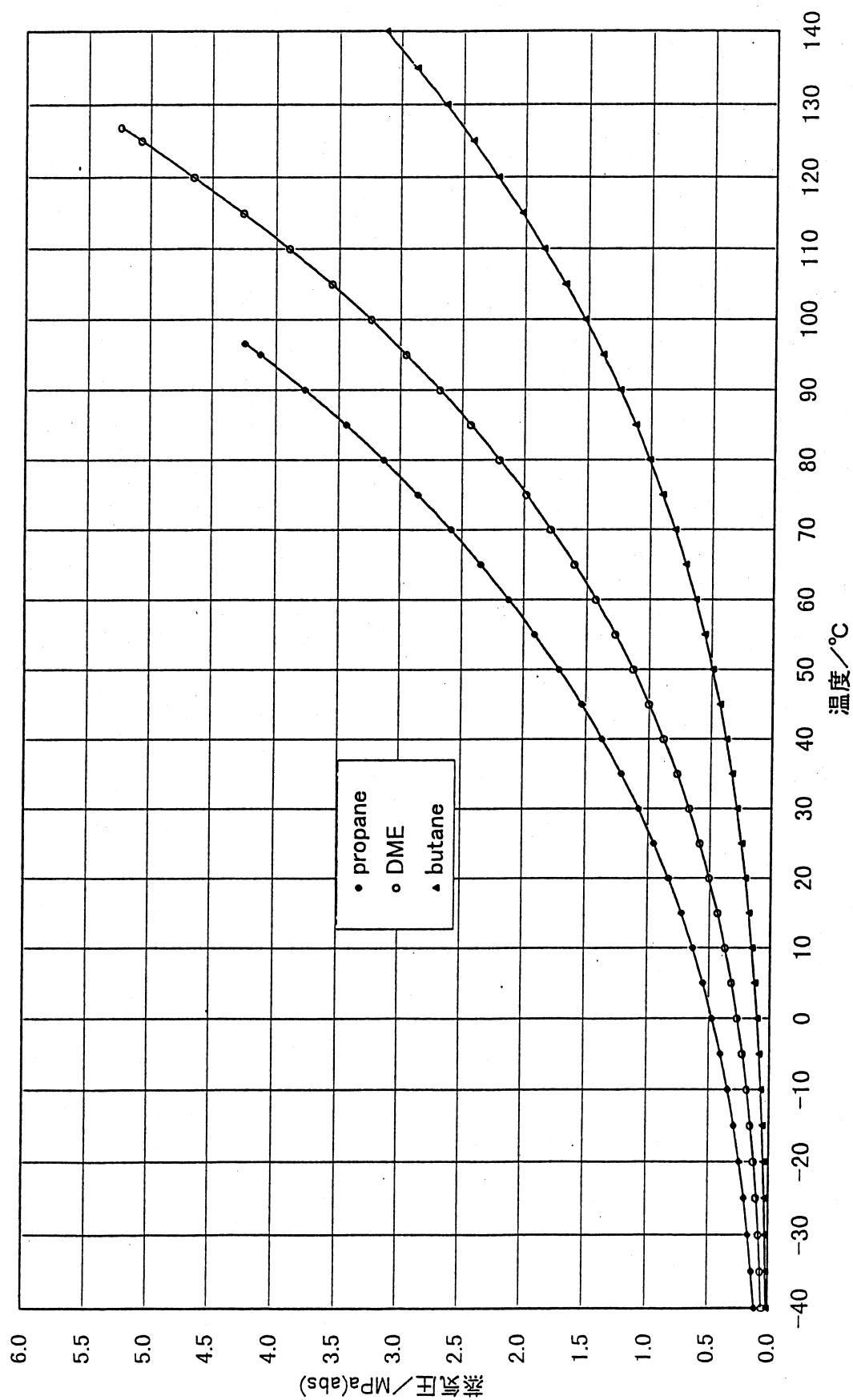
巻末共通項目 B 11 による。

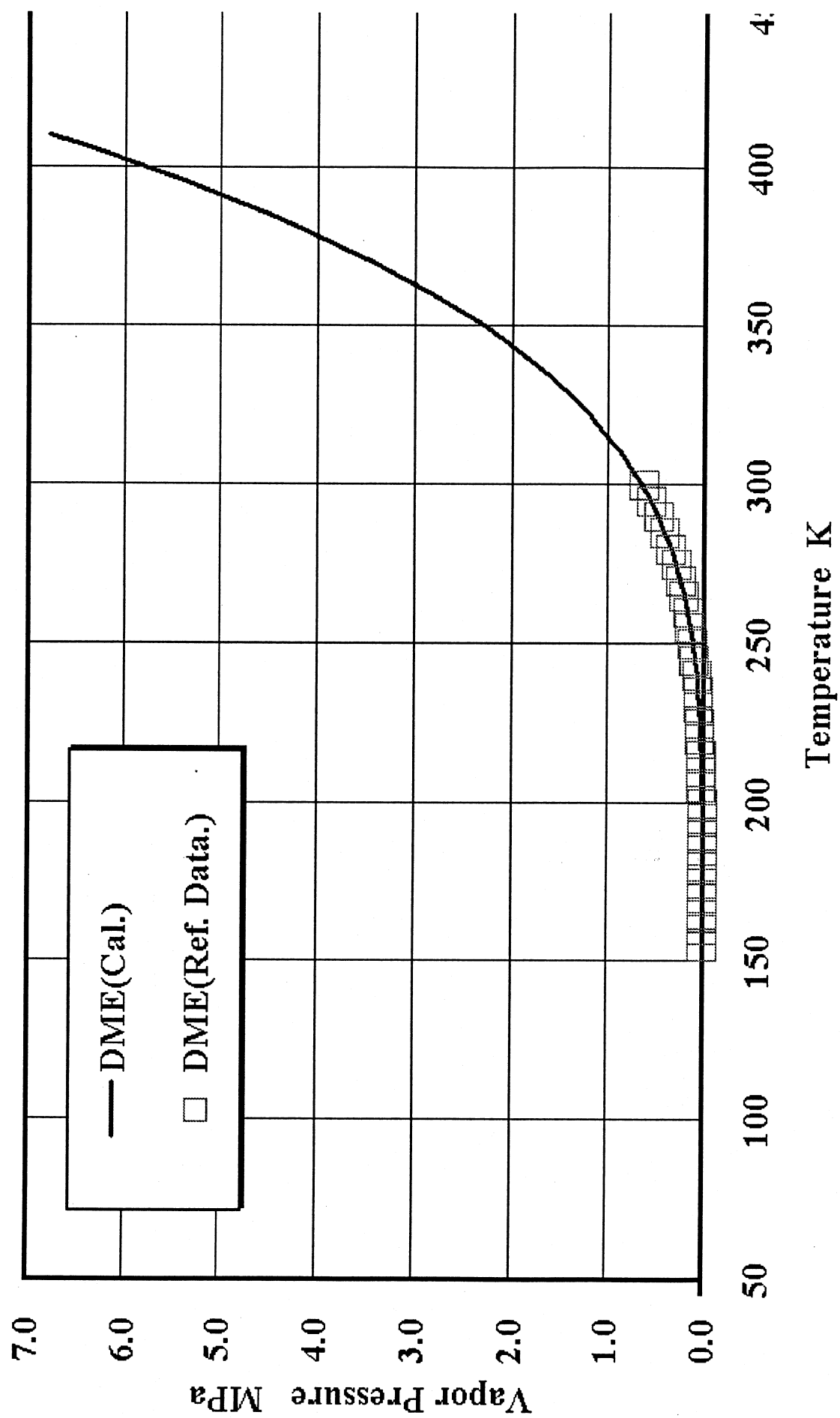
クリーンエネルギーの基礎物性・特性一覧 (抜粋)

物質名		DME	プロパン	n-ブタン
化学式		CH ₃ OCH ₃	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀
分子量	[g/mol]	46.08, 46.07, 46.069	44.096, 44.1	58.123, 58.14
液密度	[g/cm ³]	0.661, 0.668, 0.67 (293 K)	0.49, 0.5005, 0.53, 0.5852(293/277K)	0.5788, 0.599, 0.60 (293/277K)
ガス密度(計算値=分子量/22.4)	[kg/m ³]	2.057	1.969	2.595
ガス比重(対空気)		1.59, 1.6, 1.617, 1.621	1.52, 1.547, 1.551, 1.56, 1.6	2.01, 2.046, 2.07
凝固点	[K]	131.66*	85.46*	134.86*
融点	[°C]	-138.5, -138.65, -141, -141.49, -141.5	-187, -187.69, -189.69	-138, -138.29, -138.35
沸点	[°C]	-23.65, -23.7, -24, -24.8, -24.84, -25, -25.1, -31.35	-42.0, -42.04, -42.07, -42.1, -45	-11.7, -0.5, 1
臨界温度	[°C]	126.85, 126.9, 126.95	96.67	152.03
臨界圧力	[MPa]	5.37	4.25	3.797
臨界容積	[cm ³ /mol]	170	202.9	254.9
臨界点密度	[g/cm ³]	0.271	0.2174	0.228
臨界圧縮率補正		0.274	0.280	0.274
Acentric Factor		0.204	0.152	0.199
蒸気圧	[MPa] @ 293 K	0.51, 0.530, 0.531, 0.537	0.9119, 0.830	0.21, 0.21
蒸発潜熱	[kJ/mol]	21.5, 21.53 (-23.8°C)	16.405	20.8
液粘度	[10 ⁻⁶ Pa·s]	0.149 (298 K)*	0.099 (298 K)*	0.168 (298 K)*
ガス粘度	[10 ⁻⁶ Pa·s]	9.160 (298 K)*	7.99, 8 (290 K)	7.36, 7.4 (290 K)
液動粘度(計算値=液粘度/液密度)	[m ² /s]	2.231E-04	—	—
ガス動粘度(計算値=ガス粘度/ガス密度)	[m ² /s]	1.398E-01	—	—
液膨張率	[10 ⁻³ /K]	2.5030 (298 K)*	3.2060 (298 K)*	2.074 (298 K)*
ガス膨張率(定容)	[10 ⁻³ /K]			
ガス拡散係数				
液モル熱容量	[J/mol K]	56.57 (定圧100 K)	84.98 (定圧100 K)	66.69 (定圧100 K)
ガスモル熱容量(定圧、定容)	[J/mol K]	137.75	73.51 (定圧25 K) //73.647	98.78 (定圧25 K) //97.608
露点	[°C]			
水に対する溶解度	[g/100ml] (291 K)	7, 7.6	none	none
液熱伝導度	[10 ⁻⁴ W/m K]	1453 (298 K)*	1588 (298 K)*	1060 (300 K)
ガス熱伝導度	[10 ⁻⁴ W/m K]	134.4 (298 K)*	183 (300 K)	160 (300 K)
比熱比(γ=C _p /C _v)		1.11	1.13	1.06
標準生成エンタルピー	[kJ/mol]	-184.1	-104.5 (G)	-147.5 (L) -126.5 (G)
融解熱	[kJ/mol]	4.94 (-141.5°C)	3.5828	4.504
フラッシュ率			0.364	0.124
弾性係数	[N/m ²]	6.37E+08*		
表面張力	[10 ⁻³ N/m]	11.36 (298 K)*	7.02 (298 K)*	11.87 (298 K)*
表面張力(推算式計算値)	[10 ⁻³ N/m]	18.665 (-25°C)	8.346 (283 K)	12.458 (293 K)
爆発範囲(空気中)	[vol%]	3~17, 3~18.6, 3.4~17, 3.4~18, 3.4~26.7, 3.4~27	2.1~9.4, 2.1~9.5, 2.2~9.5, 2.3~9.5, 2.37~9.5	1.86~8.41, 1.9~8.5
爆発範囲(酸素中)	[vol%]	3.9~61	3.2~37	2.8~31
セタン価		55~60, >>55	5	
オクタン価(RON)			112.11	91.8, 93.8
オクタン価(MON)			96, 97.10	89.6, 90
ウオツベ指数	[MJ/m ³]	47(計算), 50, 51.7, 52	73.0(計算)	170.7(計算)
理論酸素比	[kg/kg]	2.1	3.6	3.6
理論空気比	[kg/kg]	9.0	15.7, 15.88	15.5
引火点	[°C]	-41, -41.1	-104, -104.44	-60
発火点(空気中)	[°C]	350	450, 466, 470, 481, 504	365, 405, 441
発火点(酸素中)	[°C]	234.85, 235, 250		
高位発熱量	[MJ/kg]		50.35	49.52
低位発熱量	[MJ/kg]	28.9	46.4 (L)	48 (L)
最小発火エネルギー	[mJ]	0.29, 0.45	0.25	0.25
断熱火炎温度	[°C]	1954	1977	1982
消炎距離(火炎逸走限界)	[mm]	0.84	1.7	1.8
デトネーション速度(対空気)	[m/s]		1795	1796
デトネーション速度(対酸素)	[m/s]		2360	2353
最大燃焼速度(CP)	[cm/s]	50	39, 41	37.9, 38
火炎伝播速度	[m/s]		70	
爆発熱	[kJ/mol]	57.7		

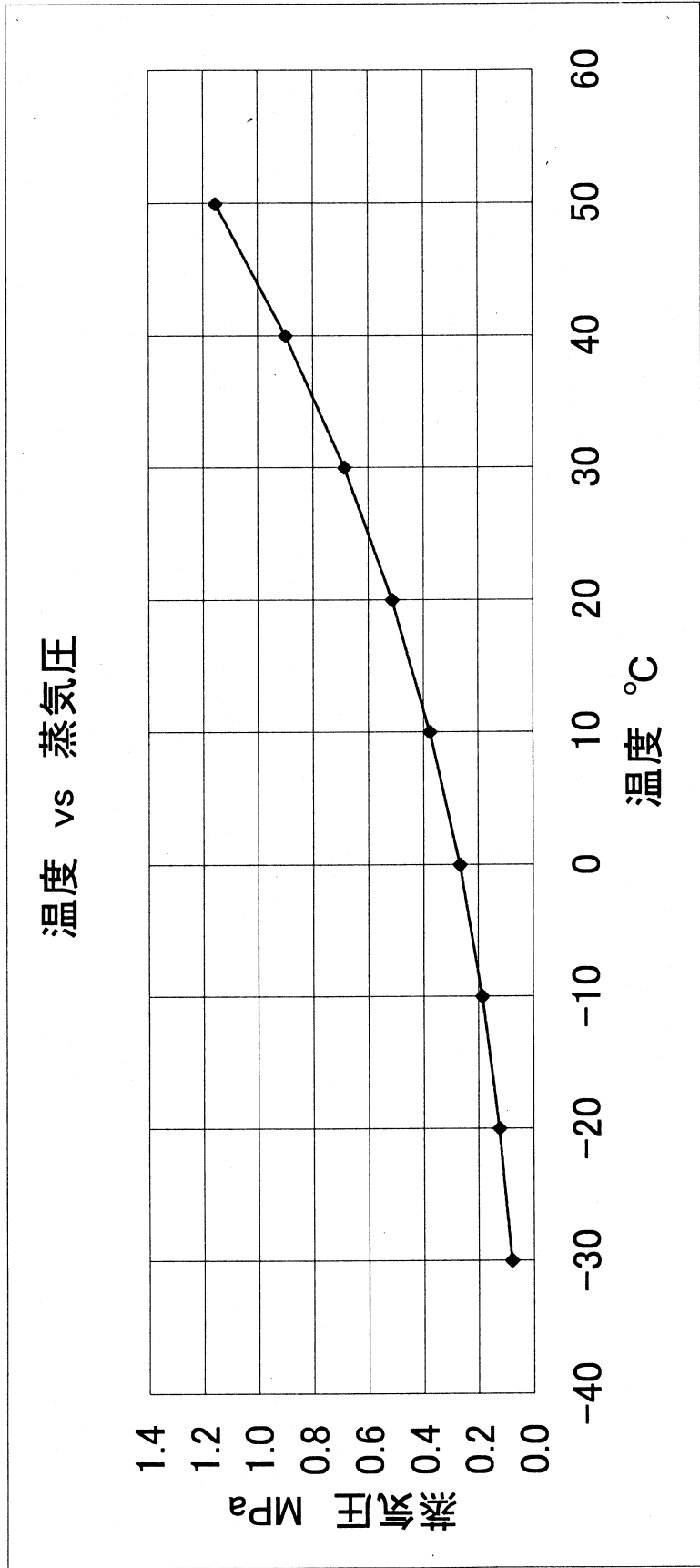


飽和蒸気圧計算値(wagner法)

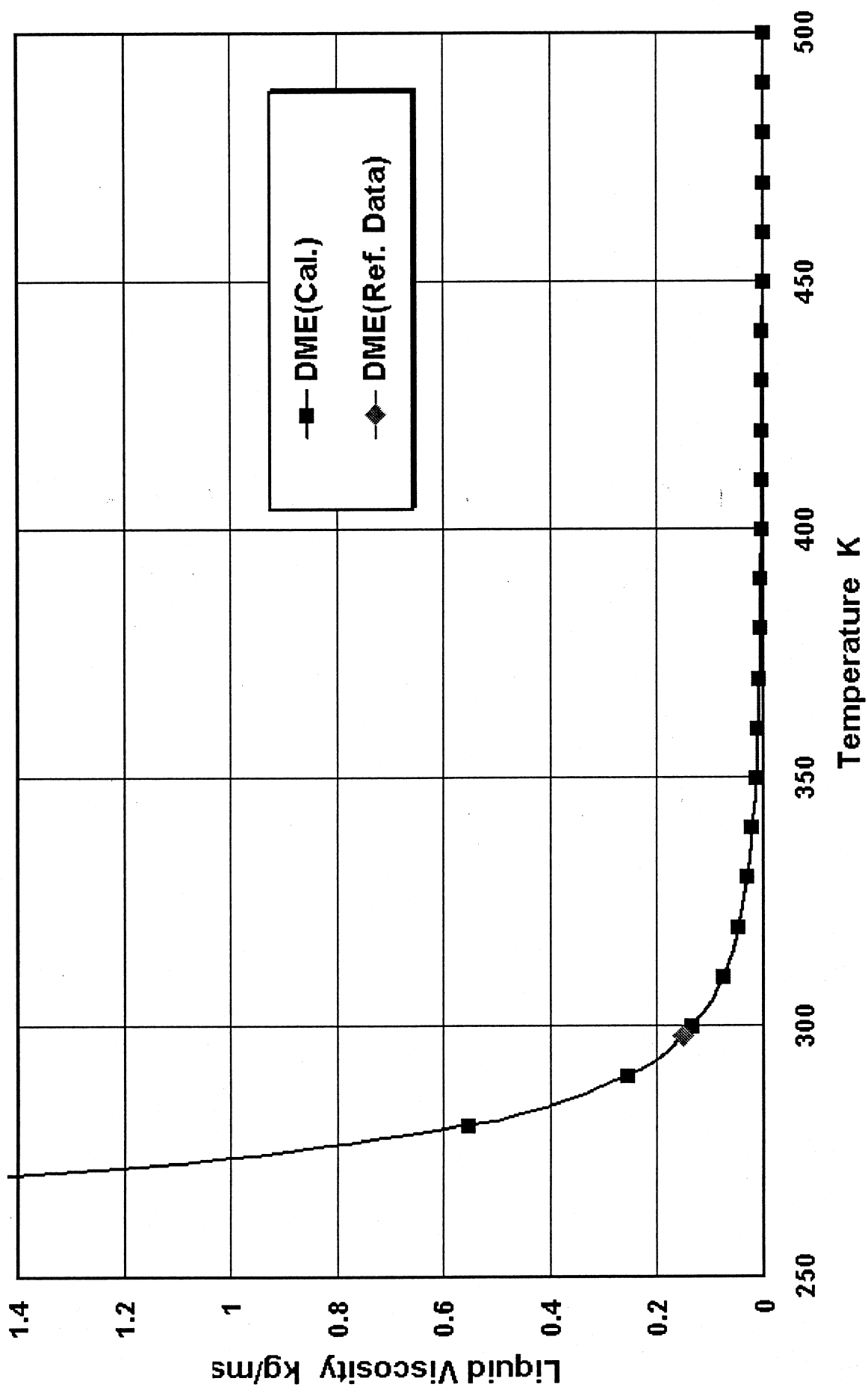




蒸気圧

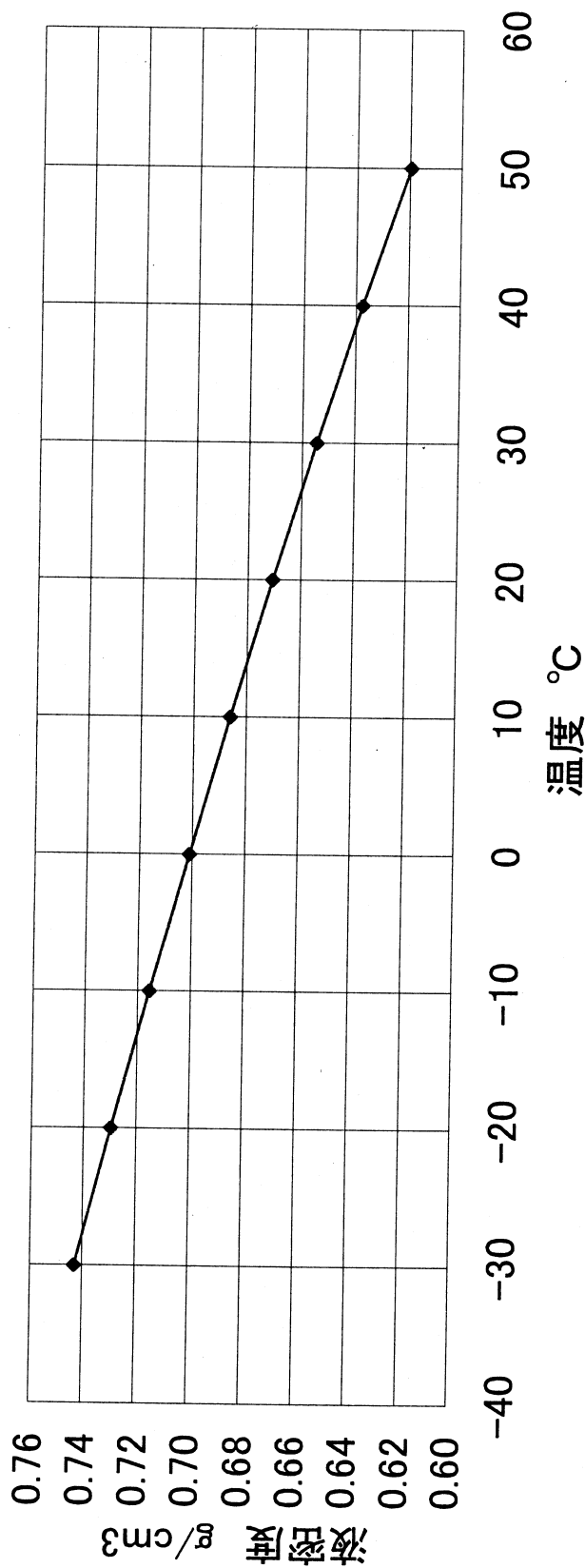


Temp °C	-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
蒸気圧 Pa	79954	123857	184878	267077	374813	512674	685419	897928	1155185
MPa	0.080	0.124	0.185	0.267	0.375	0.513	0.685	0.898	1.155



液密度

温度 vs DME液密度



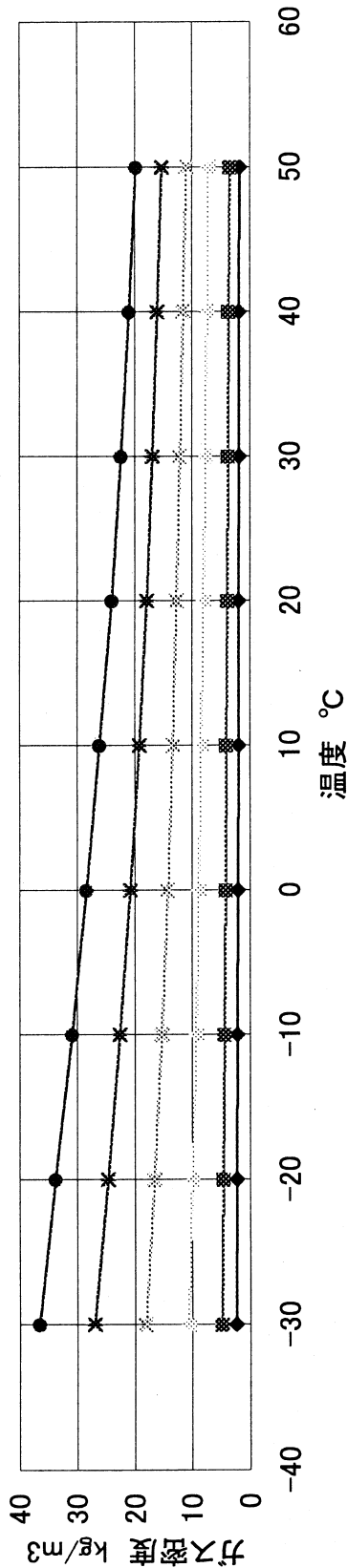
(MW: 46.069)

Temp	°C		-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
Density	mol/m3		16132	15835	15530	15215	14890	14553	14202	13835	13448
	g/cm3		0.743	0.730	0.715	0.701	0.686	0.670	0.654	0.637	0.620

ガス密度

温度 vs ガス密度

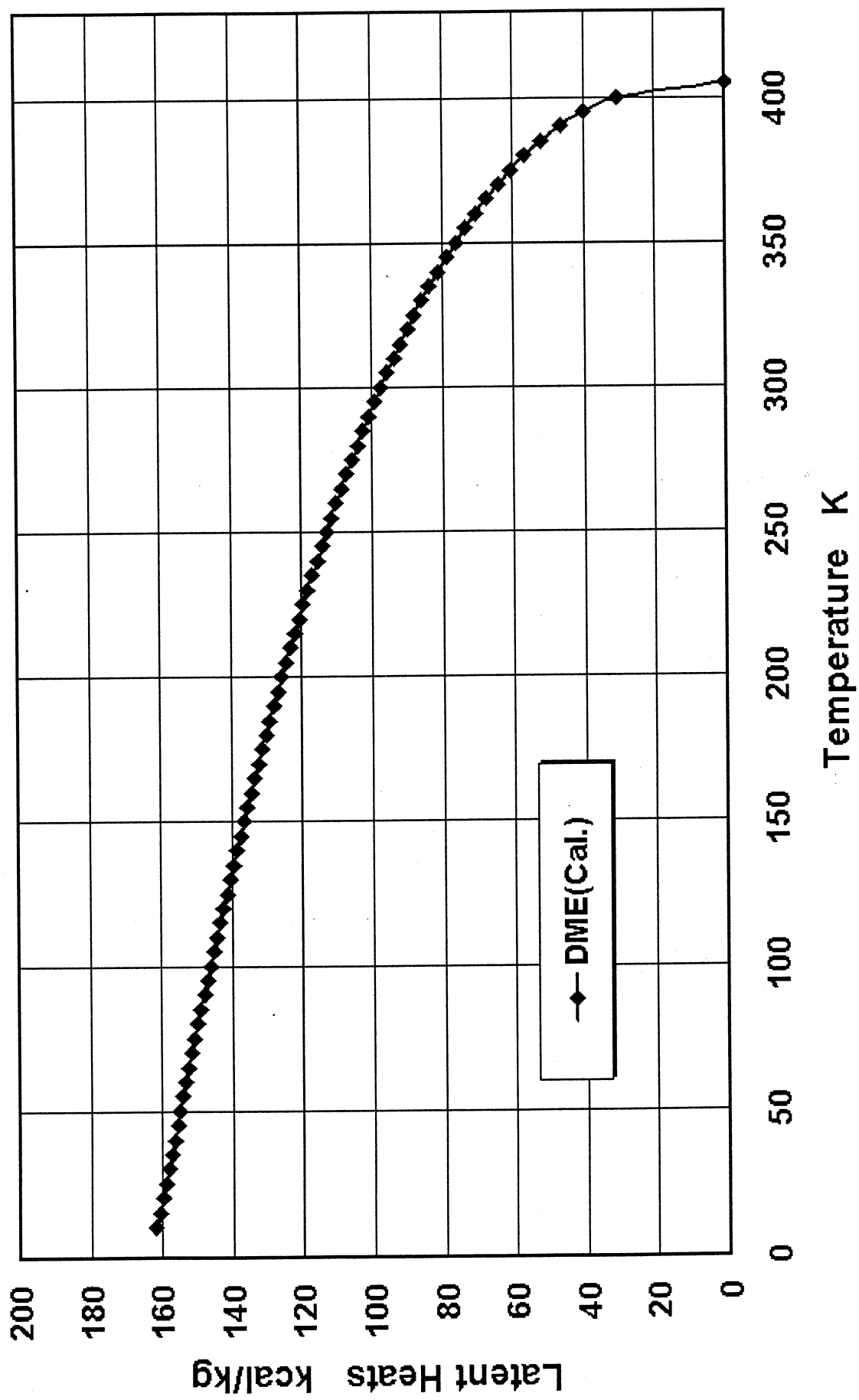
—●— 1Kg/cm² —■— 2Kg/cm² —◆— 4Kg/cm² —※— 6Kg/cm² —*— 8Kg/cm² —●— 10Kg/cm²



(MW: 46.069)

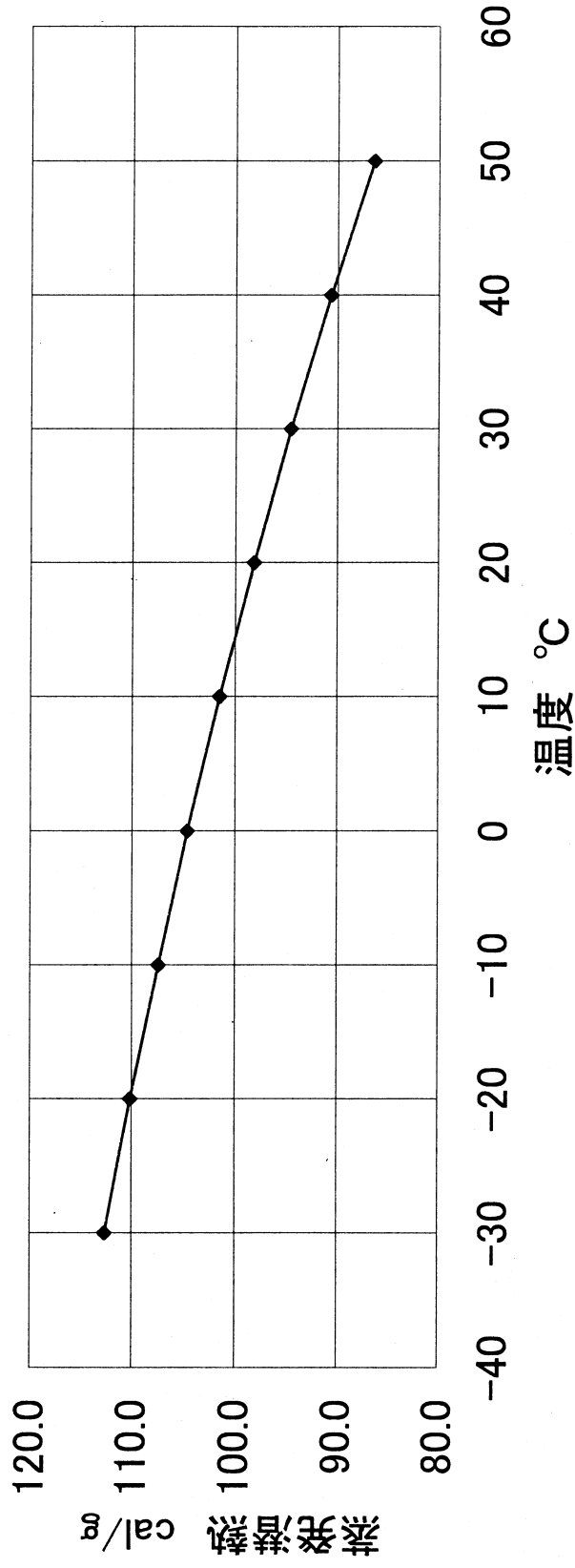
	Temp °C	-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
mol/m ³	Kg/cm ²									
	1	50.25	48.04	46.04	44.21	42.53	40.99	39.56	38.23	36.99
	2	104.51	99.36	94.78	90.68	86.97	83.60	80.50	77.65	75.02
	4	230.13	215.08	202.59	191.93	182.66	174.46	167.13	160.52	154.50
	6	391.97	359.38	330.50	308.25	290.05	274.67	261.37	249.68	239.26
	8	583.50	532.24	488.68	448.66	414.51	387.56	365.42	346.64	330.35
kg/m ³	10	792.67	732.76	670.17	614.18	564.68	519.24	482.81	453.62	429.26
	1	2.315	2.213	2.121	2.037	1.960	1.888	1.822	1.761	1.704
	2	4.815	4.577	4.367	4.178	4.007	3.851	3.709	3.577	3.456
	4	10.602	9.908	9.333	8.842	8.415	8.037	7.700	7.395	7.118
	6	18.058	16.556	15.226	14.201	13.362	12.654	12.041	11.503	11.023
	8	26.881	24.520	22.513	20.669	19.096	17.855	16.834	15.969	15.219
	10	36.518	33.758	30.874	28.295	26.014	23.921	22.243	20.898	19.776

注)赤字の部分は、実際は液相となっている。



蒸発潜熱

温度 vs 蒸発潜熱

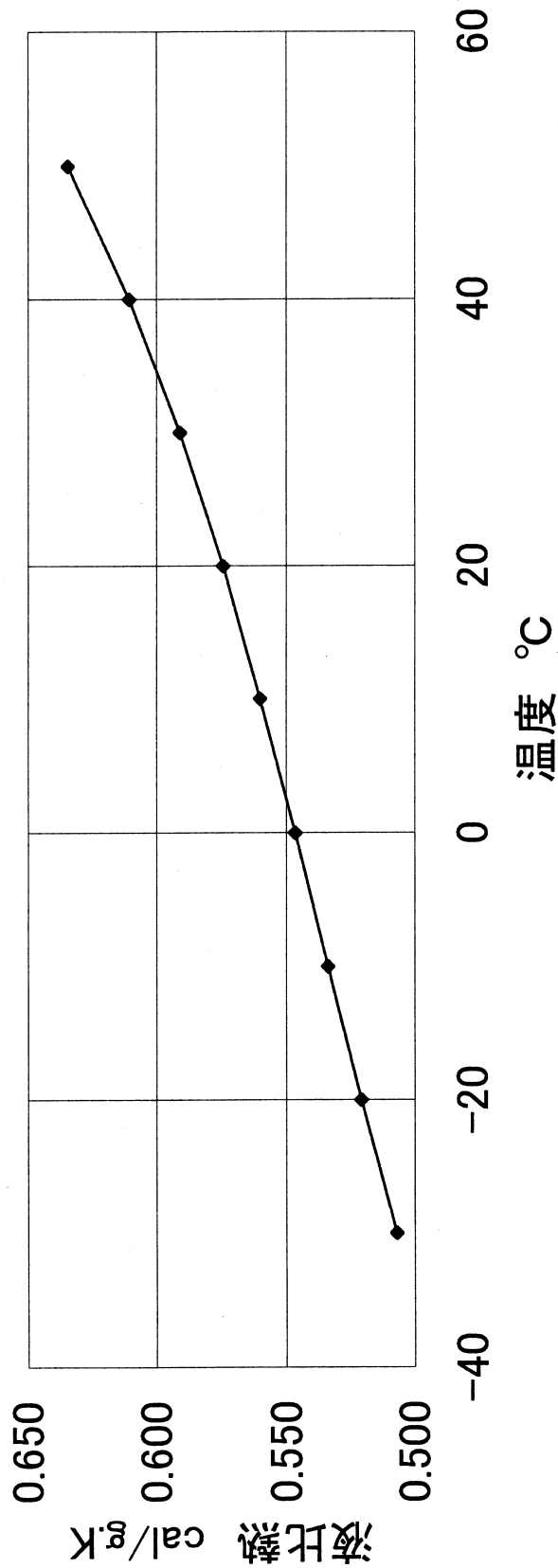


(MW: 46.069)

Temp °C	-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
Latent J/mol	21722	21240	20723	20167	19570	18926	18231	17475	16650
Heat J/g	471.5	461.0	449.8	437.8	424.8	410.8	395.7	379.3	361.4
cal/g	112.6	110.1	107.4	104.6	101.5	98.1	94.5	90.6	86.3

液-熱容量

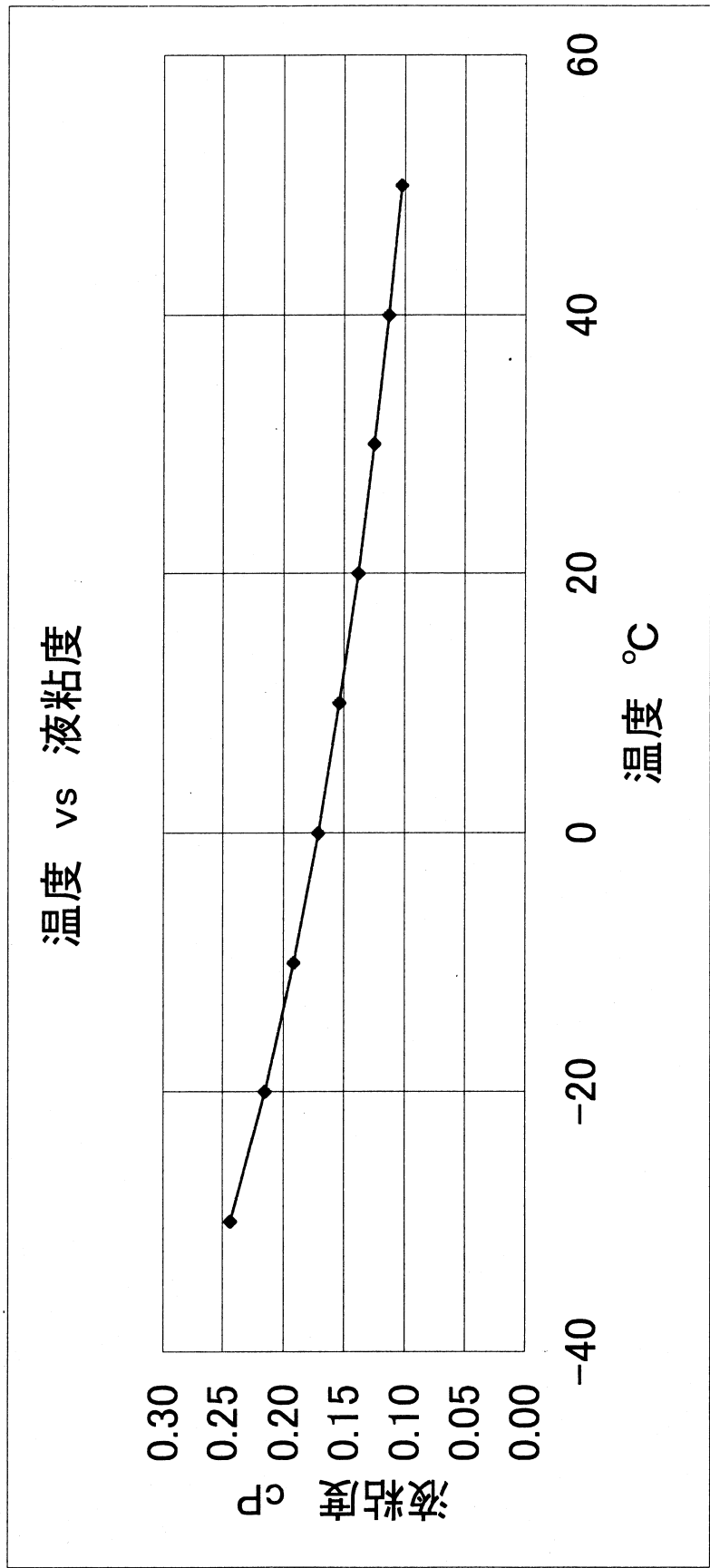
温度 vs 液-熱容量



(MW: 46.069)

Temp °C	-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
Heat J/mol.K	97.77	100.41	102.92	105.41	107.98	110.77	113.96	117.74	122.36
Capacity J/g.K	2.12	2.18	2.23	2.29	2.34	2.40	2.47	2.56	2.66
cal/g.K	0.507	0.521	0.534	0.546	0.560	0.574	0.591	0.610	0.634

液粘度



Temp	°C	-30	-20	-10	0	10	20	30	40	50
Viscosity	cP	0.244	0.215	0.191	0.171	0.154	0.138	0.125	0.113	0.103

