

Hansen溶解度パラメータを用いた有機化合物の吸着検討

①環境保全・資源再生
村田章*1、山本秀樹*2

(*1学部生) (*2環境都市工学部 エネルギー・環境工学科 教授)

研究概要・成果

1. Introduction

近年、廃水中の有機汚染物質を処理する方法として吸着処理方法が広く用いられている。吸着処理方法では、吸着剤が再利用可能であることから環境負荷低減に期待されている。吸着剤の特徴として吸着剤の表面官能基を変化させることで、特有の吸着能を発現させることが可能である。そのため多種多様な吸着剤の開発が試みられているが、目的に応じた吸着剤の設計および選定するための指標が未だ確立されていない。そこで、吸着挙動の要因の一つである物質同士の親和性に着目し、**Hansen溶解度パラメータ(以下 HSP)**を用いて親和性を定量化することで、吸着剤の設計および選定が可能であるか試みた。本研究では、水溶液中の有機化合物の吸着試験を行い吸着量とHSPの間に関係性があるか検討した。

2. Theory

2.1 Hansen Solubility Parameter^[1]

J. H. Hildebrandによって定義された溶解度パラメータ δ [(MPa)^{1/2}]を、C. M. Hansenは分散力項、双極子間力項および水素結合力項に分割した。

$$\delta_t = \left(\frac{\Delta E}{V} \right)^{1/2}$$

$$\delta_t^2 = \frac{\Delta E_d}{V} + \frac{\Delta E_p}{V} + \frac{\Delta E_h}{V} = \delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2$$

分散力項 双極子間力項 水素結合力項

[1] C.M.Hansen Hansen solubility parameters:user's handbook,2nd edn.(2007)

2.2 Hansen solubility sphere method^[2]

HSPが既知の溶媒と目的物質の親和性を評価

3Dグラフ($\delta_d, \delta_p, \delta_h$)上にプロット

球の内側が良溶媒(●)、外側が貧溶媒(■)になるような最小の球を描く

描いた球の中心座標(○)が目的物質のHSP

Hansen溶解度パラメータの距離

$$R_a = \left[4(\delta_{d1} - \delta_{d2})^2 + (\delta_{p1} - \delta_{p2})^2 + (\delta_{h1} - \delta_{h2})^2 \right]^{1/2}$$

R_a : HSPの距離 [(MPa)^{1/2}]
添え字1, 2 : 成分1・2

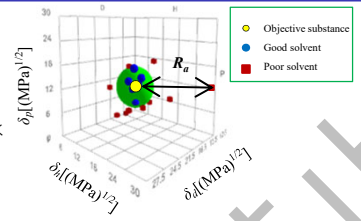


Fig. 1 Hansen solubility sphere in 3D diagram

R_a が小さい溶媒同士は親和性が高い

[2] C. M. Hansen et al.:Carbon, 42, 1591-1597, (2004)

3. Solubility test

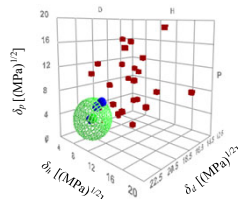
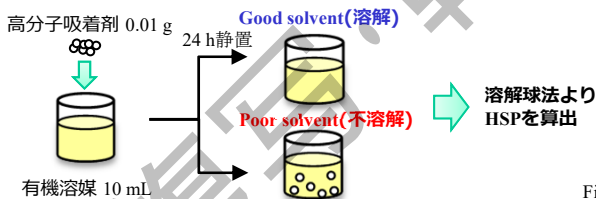
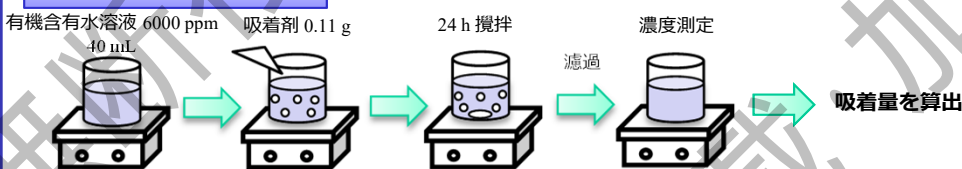


Fig. 2 Hansen solubility sphere of adsorbent

Table 1 Result of HSP of polymer adsorbent

Substance	δ_d [(MPa) ^{1/2}]	δ_p [(MPa) ^{1/2}]	δ_h [(MPa) ^{1/2}]
Polymer adsorbent	21.6	4.6	6.3

4. Experimental method



吸着量の算出式

$$q = \frac{(C_0 - C_1)V_1}{W}$$

Nomenclature

q : 吸着量 [mmol/g]
C₀ : 吸着前濃度 [mol/L]
C₁ : 吸着後濃度 [mol/L]
V₁ : 混合溶媒の体積 [L]
W : 吸着剤の重量 [g]

5. Result and discussion

Table 2 Result of adsorption test

No.	Solutes	R_a [(MPa) ^{1/2}]	q [mmol/g]
1	Quinoline	2.5	38.4
2	2-Toluidine	5.5	25.0
3	Pyridine	6.7	17.5
4	Chloroform	7.8	12.6
5	Phenylhydrazine	8.3	6.35
6	1,4-Dioxane	9.1	2.91
7	Tetrahydrofuran	9.8	5.25
8	Benzyl Alcohol	9.9	0.00
9	NMP	10.6	2.97

(R_a : 吸着剤-吸着質間のHSPの距離)

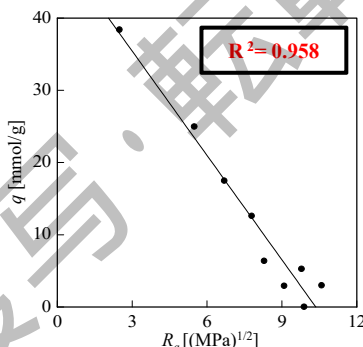


Fig. 3 Relationship between R_a and q

水溶液中の有機化合物の吸着において、吸着量 q [mmol/g]と吸着剤-吸着質間のHSP距離 R_a [(MPa)^{1/2}]には高い相関関係があることが確認できた。

6. Conclusion

- 吸着量 q と HSP 距離 R_a の間には、高い相関関係があることが確認された。
- HSP を用いることで、吸着剤の選定が可能であると示唆された。

応用分野、実用化可能分野

- 固気吸着による親和性評価
- VOC (揮発性有機化合物) の除去
- 吸着剤の選定

問合せ先: 関西大学 環境都市工学部 山本秀樹 E-mail: yhideki@kansai-u.ac.jp

関大ORDIST

先端科学技術推進機構

社会連携部 産学官連携センター、知財センター、イノベーション創生センター