

# 銅の吸着量を用いた 毛髪Hansen溶解度パラメータの算出

⑧自然科学一般  
神野七海<sup>\*1</sup>、山本秀樹<sup>\*2</sup>

(<sup>\*1</sup>学部生) (<sup>\*2</sup>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

シャンプーやヘアオイルなどの毛髪製剤の開発において、毛髪表面の物性値を把握できれば効率的かつ低コストでの製剤開発が可能となる。そこで物質間の親和性の定量評価が可能なHansen溶解度パラメータ(HSP)に注目した。現在、毛髪表面のHSPの測定には走査電子顕微鏡(SEM)を用いた目視評価が行われている。しかし、評価の際毛髪表面のキューティクルの損傷度を目視にて評価するため、観測者によってHSPに差がでることが課題であった。本研究では、毛髪表面の損傷度と銅の吸着量に相関関係があるという報告<sup>[1]</sup>から、毛髪に対する銅の吸着量からHSPの測定を行った。また、銅の吸着量から得られた毛髪HSPと過去の測定値との比較検討を行った。

[1] R. Weber, *SIV Fachorgan Textilveredl.*, 7, 15 (1952) [2] W. W. Edman and E. M. Marti, *J. Soc. Cosmetic Chemists*, 12, 133 (1961)

### 2. Theory

#### ・溶解度パラメータ

Hildebrand溶解度パラメータ  
(凝集エネルギー密度)<sup>[3]</sup>

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

#### Nomenclature

$\delta_i$  : 溶解度パラメータ [(MPa)<sup>1/2</sup>]  
 $\Delta E^V$  : 凝集エネルギー (蒸発潜熱) [J/mol]  
 $V$  : モル体積 [cm<sup>3</sup>/mol]

[3] J. Hildebrand et al., *The Solubility of Nonelectrolytes*, 3rd Edition, (1950)

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

Hansen溶解度パラメータ<sup>[4]</sup>

$$\delta_t = (\delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2)^{1/2}$$

#### Nomenclature

$\delta_d$  : ロンドン分散力項 [(MPa)<sup>1/2</sup>]  
 $\delta_p$  : 双極子間力項 [(MPa)<sup>1/2</sup>]  
 $\delta_h$  : 水素結合力項 [(MPa)<sup>1/2</sup>]

#### ・溶解球法<sup>[5]</sup>による溶解度パラメータの算出方法

HSPが既知である

溶媒と目的物質の親和性を評価

親和性を評価した溶媒のHSPを  
三次元グラフ ( $\delta_d, \delta_p, \delta_h$ ) 上にプロット

親和性の良い溶媒：良溶媒が**内側**(●)  
親和性が悪い溶媒：貧溶媒が**外側**(■)  
となる半径が最小の球(Hansen溶解球)を作成

球の中心の座標(●)が  
目的物質のHSPとなる

$$R_s = \left[ 4(\delta_d - \delta_{d2})^2 + (\delta_p - \delta_{p2})^2 + (\delta_h - \delta_{h2})^2 \right]^{1/2}$$

$R_s$  [(MPa)<sup>1/2</sup>] : 2成分間のHSPの距離

$R_s$ が小さい物質同士は親和性が高い

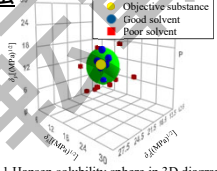


Fig. 1 Hansen solubility sphere in 3D diagram

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

### 3. Experiment method

スクリー管に先端を出した毛髪を添加

溶媒を入れ、3日間静置

溶媒を除き毛髪を1日乾燥

スクリー管に毛髪と硫酸銅水溶液をいれ

オイルバス(40°C)で5時間静置

毛髪を除去し

誘導結合プラズマ(ICP)を用いて

毛髪を添加する前後の水溶液中の銅を定量

毛髪に対する銅の吸着量の違いから

毛髪表面の貧、良溶媒を決定し

溶解球法を用いてHSPを算出

結果と過去の測定値を比較



Photo. 1 Actual condition of experiment

Table 1 Copper adsorption amount and evaluation criteria

Cu/hair [mg/g]	HSP Score
< 40.0	0
40.0 ≤	1

Score 0 貧溶媒 Score 1 良溶媒

### 4. Result and Discussion

#### 銅の吸着量を用いた毛髪HSP測定結果

Table 2 HSP of solvent and evaluation of hair using copper adsorption

Solvents	$\delta_d$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_p$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_h$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	Cu/hair [mg/g]	Score
Toluene	18.0	1.4	2.0	41.2	1
N-Methyl-2-Pyrrolidone	21.0	7.0	8.2	40.9	1
Ethanol	15.8	8.8	19.4	40.4	1
N-Methyl Formamide (NMF)	17.4	18.8	15.9	40.4	1
Nitrobenzene	20.0	10.6	3.1	40.2	1
Quinoline	20.5	5.6	5.7	39.6	0
Benzyl Alcohol	18.4	6.3	13.7	38.2	0
1-Propanol	16.0	6.8	17.4	38.1	0
1-Methyl Imidazole	19.7	15.6	11.2	37.3	0
Dimethyl Formamide (DMF)	17.4	13.7	11.3	37.1	0
Tetrahydrofuran (THF)	16.8	5.7	8.0	37.1	0
Hexane	14.9	0.0	0.0	34.8	0
1,4-Dioxane	17.5	1.8	9.0	34.6	0

Score 0 貧溶媒 Score 1 良溶媒

Table 3 HSP of hair

Substances	$\delta_d$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_p$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_h$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	Fitting
Hair(1)	17.7	8.8	1.0	1.000
Hair(2)	16.4	16.1	19.4	1.000

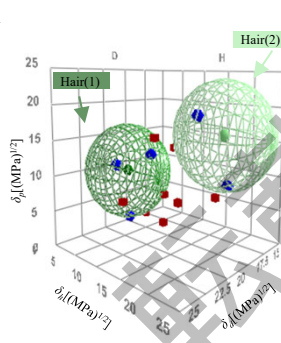
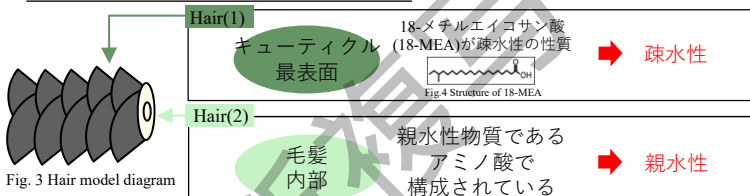


Fig. 2 Hansen solubility spheres of hair



✓ 銅の吸着量を用いた定量的評価により、毛髪表面のHSPだけではなく目視評価では確認できなかった内部のHSPも確認することができた。

#### 比較検討による考察

Table 4 Hair HSPs comparison

Substances	$\delta_d$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_p$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$\delta_h$ [(MPa) <sup>1/2</sup> ]	$R_a$ [°]
● Hair(SEM) <sup>※1</sup>	18.5	7.6	2.9	-
● Hair(1)	17.7	8.8	1.0	2.8
● Hair(内部) <sup>※2</sup>	17.1	18.1	22.1	-
● Hair(2)	16.4	16.1	19.4	3.6

※1 Hair(SEM)SEMを用いた毛髪目視評価による測定値

※2 Hair(内部)毛髪内部に関するアミノ酸組成比による推算値

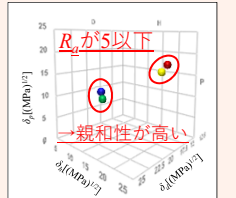


Fig. 5 HSPs of hair

✓ Hair(1)とHair(SEM)を $R_a$ で比較すると毛髪表面のHSP同士がHair(2)とHair(内部)を比較すると毛髪内部のHSP同士が近いことが確認できた。

➡ 銅の吸着量の差異から毛髪HSP算出が可能であることが確認された

### 5. Conclusion and Future prospects

- 毛髪HSP算出において銅の吸着量から観測者に依存しない評価が可能であることを示唆した。
- 今後は試験溶媒数の増加および最適な実験条件の設定を行い毛髪表面のみを測定するために高精度な評価検討を実施する。

応用分野、実用化可能分野

毛髪製剤開発

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