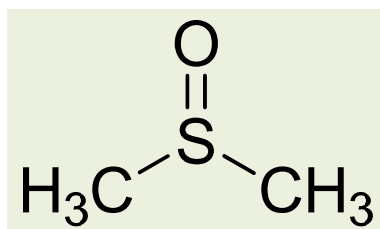




**REACH規制、溶解性、有害性などで  
お困りではありませんか？**

東レ・ファインケミカルではHansen溶解パラメータ(HSP)の理論計算と実測を組み合わせて**混合溶媒系**のご提案が可能です。

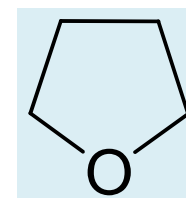


**DMSO**

[Dimethyl Sulfoxide]

CAS RN® : 67-68-5

EC Number : 200-664-3



**THF**

[Tetrahydrofuran]

CAS RN® : 109-99-9

EC Number : 203-726-8

# HSP (Hansen Solubility Parameter)

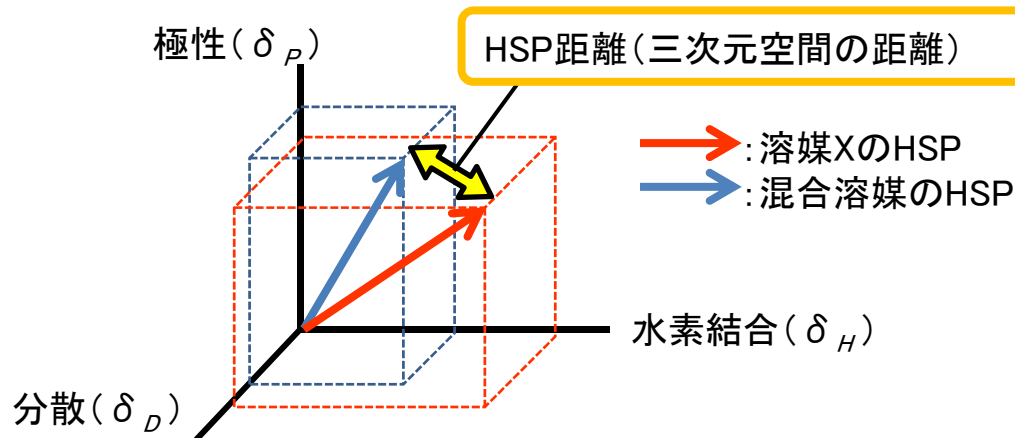
東レ・ファインケミカル株式会社

Hildebrandの溶解パラメータ( $\delta$ =凝集エネルギー密度)を  
 $\delta_D$ :分散、 $\delta_P$ :極性、 $\delta_H$ :水素結合の3成分相互作用に分割して、  
三次元空間の座標として考える方法。

- Hildebrand  $\delta = (\Delta E^V/V)^{1/2}$

$E^V$  : 凝集エネルギー  
 $V$  : モル体積

- Hansen  $\delta = (\Delta E_D^V/V)^{1/2} + (\Delta E_P^V/V)^{1/2} + (\Delta E_H^V/V)^{1/2}$   
 $= (\delta_D + \delta_P + \delta_H)^{1/2}$



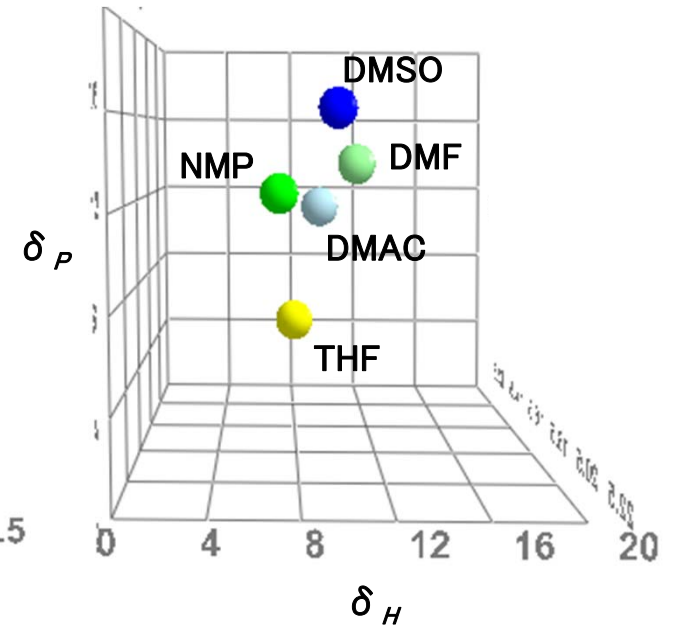
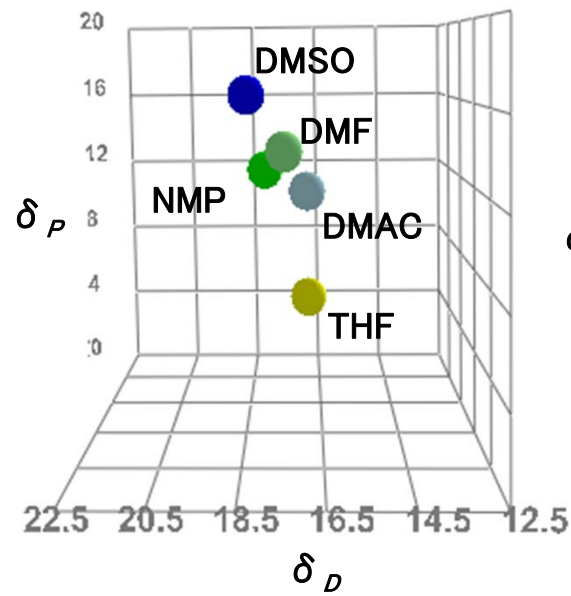
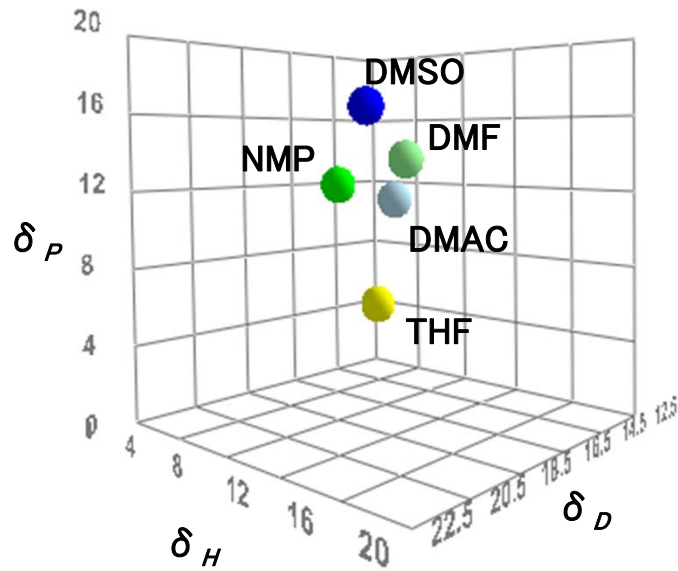
溶媒Xと混合溶媒のHSP距離が近い

↓  
溶解性が似ている

参考: The TRC News No.120 (Feb. 2015)

# 溶媒のHSP

溶媒	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	HSP
DMSO	18.4	16.4	10.2	26.7
THF	16.8	5.7	8.0	19.5
NMP	18.0	12.3	7.2	23.0
DMF	17.4	13.7	11.3	24.9
DMAC	16.8	11.5	9.4	22.4



# 代替溶媒探索

## HSP専用ソフトウェアによる理論計算結果

対象溶媒	溶媒1 Vol.%	溶媒2 Vol.%	溶媒3 Vol.%	$\delta_D$	$\delta_P$	$\delta_H$	HSP 距離
NMP	<b>DMSO</b> 46	溶媒A 54	—	18.1	12.1	7.4	0.4
NMP	<b>DMSO</b> 50	溶媒B 36	溶媒C 14	18.0	12.3	7.2	0
NMP	<b>DMSO</b> 41	<b>THF</b> 11	溶媒D 48	17.7	12.2	7.6	0.7
DMF	<b>DMSO</b> 74	溶媒G 26	—	17.6	13.5	11.4	0.4
DMF	<b>DMSO</b> 62	溶媒H 27	溶媒I 11	17.4	13.7	11.3	0
DMF	<b>DMSO</b> 65	<b>THF</b> 21	溶媒J 14	17.5	13.6	11.4	0.3
DMAC	<b>DMSO</b> 40	溶媒K 60	—	16.8	11.5	10.6	0.4
DMAC	<b>THF</b> 49	溶媒L 40	溶媒M 11	17.0	11.3	10.3	0.5

DMSOやTHFと他の溶媒を混合することで、NMP, DMF, DMACのHSPに近い混合溶媒を調整可能です。

# **'TORAY'**

## **Innovation by Chemistry**

**東レ・ファインケミカル株式会社  
機能ケミカル営業1部 DMSO販売課**

TEL           :   03-6859-1205  
FAX           :   03-6859-1140  
HP             :   <http://www.torayfinechemicals.com/>