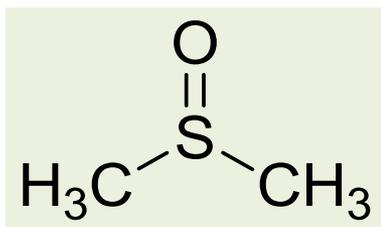




混合溶媒による溶解性改善や環境対応のご提案

東レ・ファインケミカルではハンセン溶解パラメータ（HSP）理論と実測を組み合わせた混合溶媒のご提案が可能です

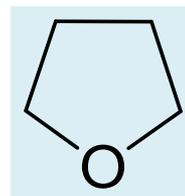


DMSO

[Dimethyl Sulfoxide]

CAS RN[®] : 67-68-5

EC Number : 200-664-3



THF

[Tetrahydrofuran]

CAS RN[®] : 109-99-9

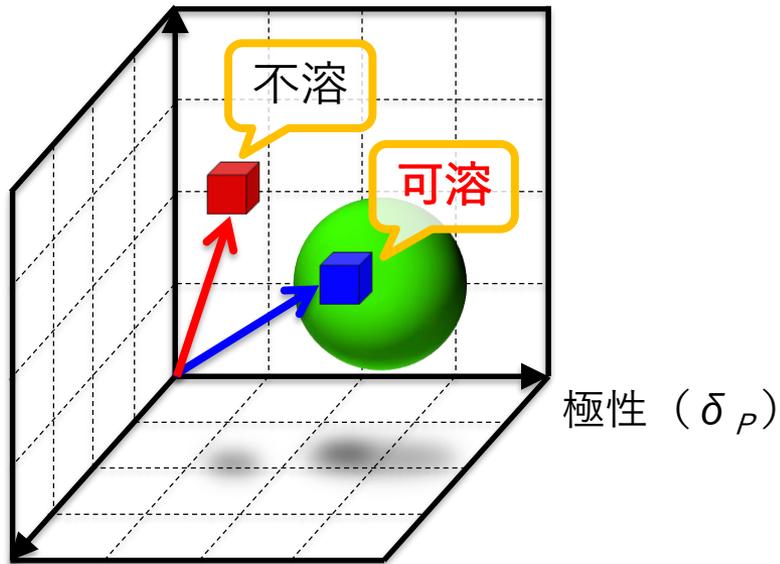
EC Number : 203-726-8

HSP (Hansen Solubility Parameter)

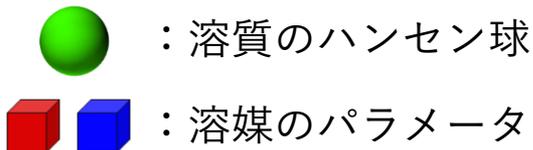
HSPはHildebrandの溶解パラメータ（いわゆるSP値）を δ_D :分散、 δ_P :極性、 δ_H :水素結合の3成分に分割し、ベクトルの長さに加えてその向きも考慮する方法です。

HSPイメージ図

水素結合 (δ_H)



分散 (δ_D)



➤ Hildebrand $\delta = (\Delta E^V/V)^{1/2}$
→ 矢印の長さに相当 (一次元)

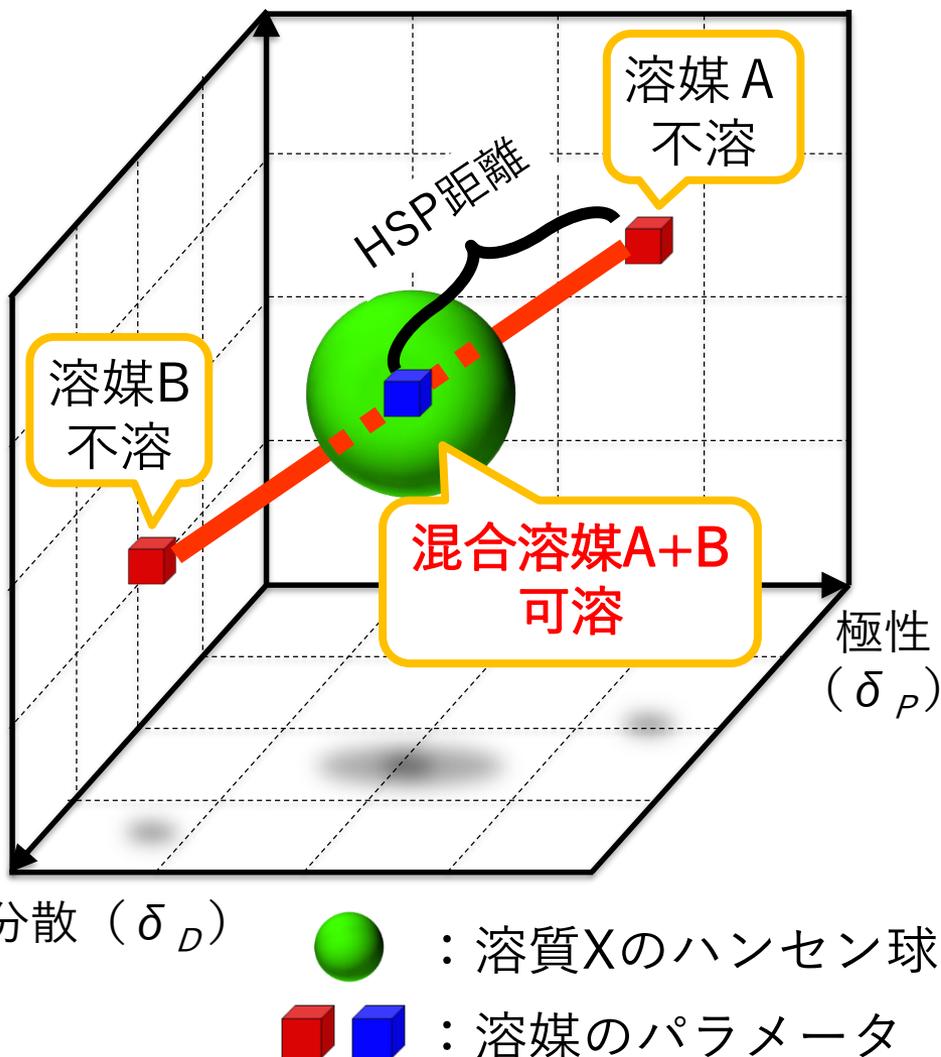
➤ Hansen δ
 $= (\Delta E_D^V/V)^{1/2} + (\Delta E_P^V/V)^{1/2} + (\Delta E_H^V/V)^{1/2}$
 $= (\delta_D + \delta_P + \delta_H)^{1/2}$
→ 三次元空間の座標に相当

E^V : 凝集エネルギー
 V : モル体積

溶質のハンセン球の中に溶媒のパラメータが入っていれば、溶質はその溶媒に**可溶**と考えます。

混合溶媒調製のイメージ

水素結合 (δ_H)



溶質と溶媒のハンセン溶解パラメータ

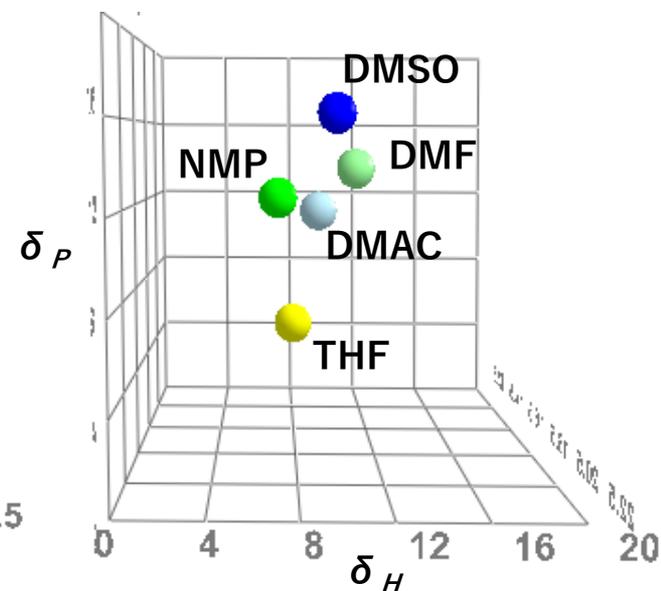
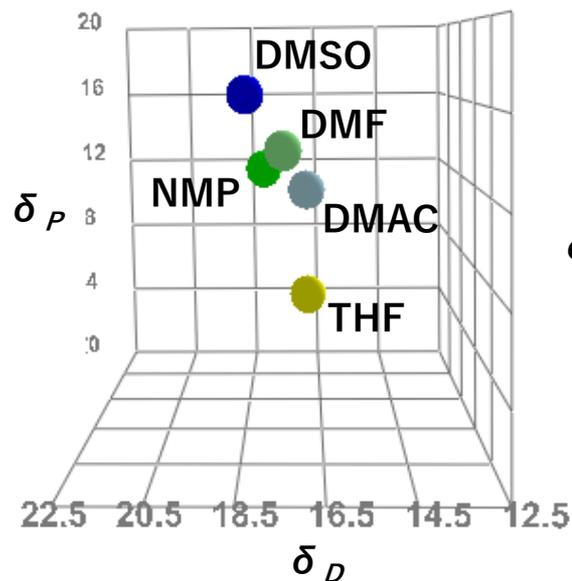
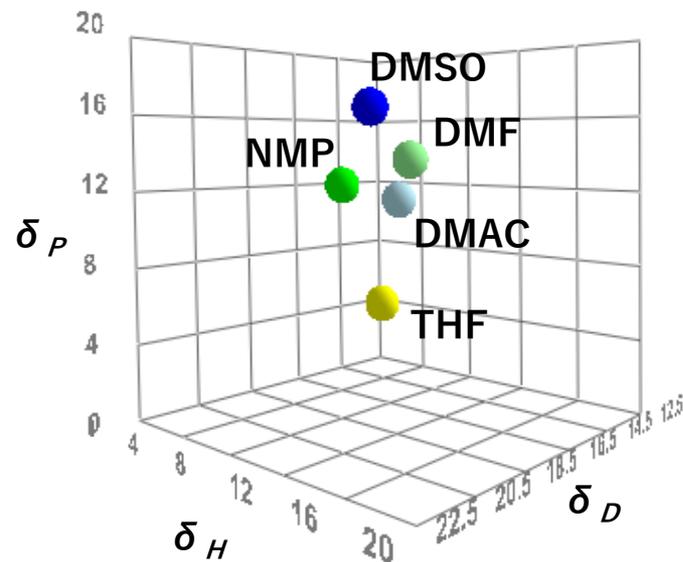
溶質	δ_D	δ_P	δ_H
溶質X	14.5	4.0	7.5

溶媒	δ_D	δ_P	δ_H	HSP距離
溶媒A	15.0	8.0	5.0	4.7
溶媒B	14.0	2.0	10.0	4.7
混合溶媒A+B	14.5	4.0	7.5	0.0

溶質と溶媒の距離(HSP距離)は種々の溶媒を混合することで近づけることが可能です。

各種溶媒のHSP

溶媒	δ_D	δ_P	δ_H	Hansen δ	DMSOとのHSP距離
DMSO	18.4	16.4	10.2	26.7	—
THF	16.8	5.7	8.0	19.5	11.4
NMP	18.0	12.3	7.2	23.0	5.1
DMF	17.4	13.7	11.3	24.9	3.5
DMAC	16.8	11.5	9.4	22.4	5.9



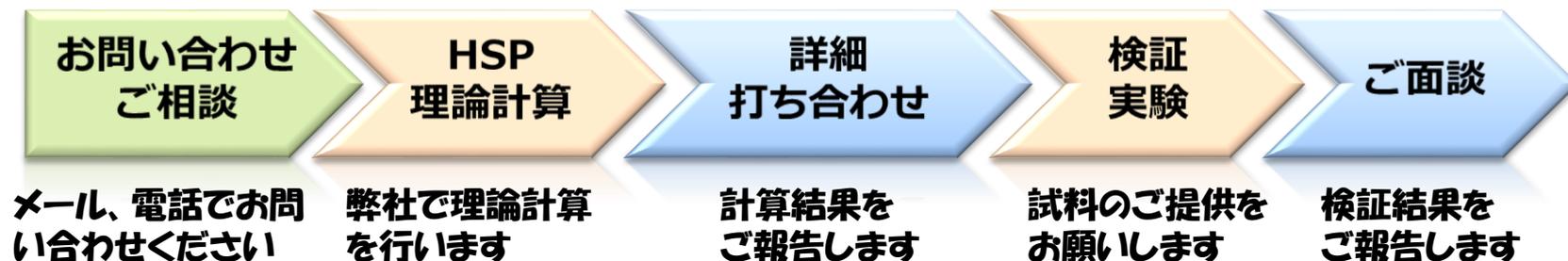
代替溶媒探索

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.%	δ_D	δ_P	δ_H	HSP 距離
NMP	DMSO 46	溶媒A 54	—	18.1	12.1	7.4	0.4
NMP	DMSO 50	溶媒B 36	溶媒C 14	18.0	12.3	7.2	0
NMP	DMSO 41	THF 11	溶媒D 48	17.7	12.2	7.6	0.7
DMF	DMSO 74	溶媒G 26	—	17.6	13.5	11.4	0.4
DMF	DMSO 62	溶媒H 27	溶媒I 11	17.4	13.7	11.3	0
DMF	DMSO 65	THF 21	溶媒J 14	17.5	13.6	11.4	0.3
DMAC	DMSO 40	溶媒K 60	—	16.8	11.5	10.6	0.4
DMAC	THF 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 (= 性質が似ている) 混合溶媒を調整可能です。

基本的な混合溶媒提案の流れ



※秘密保持契約の締結も可能です

お問い合わせ先

DMSO販売課

〒101-0041 東京都千代田区神田須田町二丁目3番地1

TEL (03)6859-1205 FAX (03)6859-1140

<https://security.toray-system.co.jp/torayfinechemicals/contact/index.html>