

堀 雅仁、佐藤 純、古澤裕之、森本勝之 (日産化学工業株式会社 物質科学研究所)

1. はじめに

農薬乳剤の処方確立のためには、①農薬原体を十分に溶解させ、②作業員、作物および環境に対して安全であり、③引火点が高い等の基準を満たす適切な溶媒を選択することが重要である。今回、従来手法では見出せなかった溶解力の高い溶媒の組み合わせを見つけるため、高分子、化粧品や医薬品等の分野で用いられる Hansen の溶解度パラメータ (Hansen Solubility Parameters: HSP) の概念¹⁾⁻³⁾を利用して検討を行った。

HSP とは、分子間力の強さを表す物性値であり、分散項 δD 、分極項 δP 、水素結合項 δH の3つの項からなる3次元のベクトルとして表される (Fig. 1)。

溶質の溶媒への溶解性は、それぞれの物質のベクトル間距離が短いほど良好である。ベクトル間の距離 R_a は以下の式から求められる (Eq. 1)。

$$R_a = \{4(\delta D_A - \delta D_B)^2 + (\delta P_A - \delta P_B)^2 + (\delta H_A - \delta H_B)^2\}^{1/2} \quad (\text{Eq. 1})$$

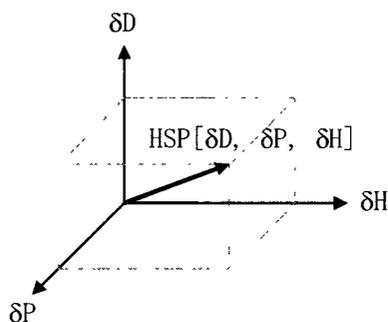


Fig.1 Hansen Solubility Parameter

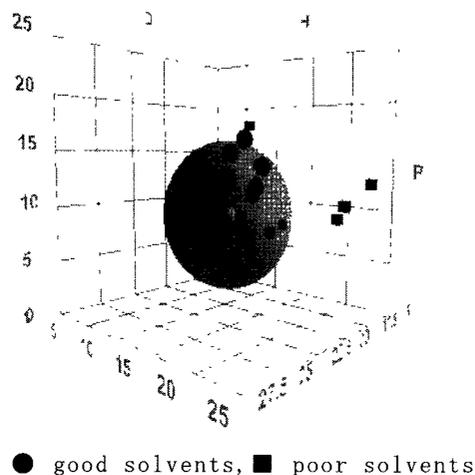


Fig.2 HSP of an Active Ingredient A and Several Solvents

Solubility Prediction of Pesticide Active Ingredients by Hansen Solubility Parameters

○Masahito Hori, Jun Satow, Hiroyuki Furusawa and Katsushi Morimoto

(Chemical Research Laboratories, Nissan Chemical Industries, Ltd.)

By using Hansen Solubility Parameters (HSP), we predicted solubility of pesticide active ingredients in a variety of mixed solvent systems. Based on the prediction by HSP, it was found that several solvent systems which were composed of poor solvents had good solubility of the active ingredients.

2. 試験と結果

農薬原体 A に関して、HSP が既知である種々の溶媒に対する溶解度を測定し、それぞれを良溶媒と貧溶媒に分類した。次に Hansen が作成したプログラム HSPiP¹⁾ を使用し、原体 A の HSP を求めた。その結果を Fig. 2 に示す。中央の大きな球の中心が原体 A の HSP を表し、球内のプロット (●) は良溶媒、球外のプロット (■) は貧溶媒の HSP を表す (Fig. 2)。

計算した原体 A の HSP に対してベクトル間距離が短くなるように、組み合わせる溶媒の種類や比率を検討した。Fig. 3 に示すように、単独では貧溶媒であっても、混合することで原体 A とのベクトル間距離が減少し、溶解力の向上が期待できる。計算結果をもとに実測したところ、何種類かの混合溶媒で溶解度が向上する結果が得られた。その一部を Table 1 に示す。

このように、農薬原体の HSP を求めることで、その値から溶解力の高い溶媒を探索することは可能であった。溶解力が乏しく、検討の候補に入らない溶媒でも、組み合わせることで良溶媒になるため、溶媒選択の幅が大きく広がることが期待される。

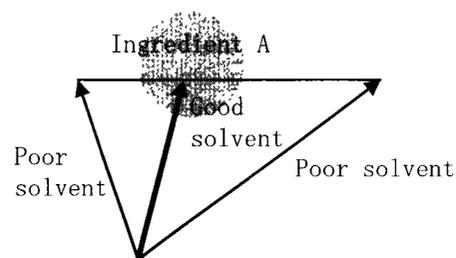


Fig. 3 HSP of Mixed Solvent

Table 1. Solubility of Active Ingredient A in Single and Mixed Solvents

Solvent	Single Solvent		Mixed Solvent		
	HSP Distance	Solubility (%)	Mixed Ratio (vol. %)	HSP Distance	Solubility (%)
butyl benzoate	4.9	3.2	64	2.5	18.5
dimethylsulfoxide	7.9	12.2	36		
acetonitrile	8.5	1.2	40	5.9	5.7
ethanol	12.3	1.6	30		
toluene	12.5	0.4	30		

参考文献

- 1) Charles M. Hansen, Hansen Solubility Parameters: A user's handbook, Second Edition, CRC Press (2007)
- 2) 山本博志, 化学工業 Vol. 61, No. 3, 67-71 (2010)
- 3) 山本秀樹, Material Stage Vol. 9, No. 5, 17-20 (2009)