

# 乳化処方設計へのアプローチ



日本エマルジョン株式会社

# 1 効率的な処方開発のために

はじめに

今日、あらゆる業界でユーザーニーズに対する素早い対応が求められています。化粧品業界においても処方研究の効率化が、近年、さらに重要な課題となってきていることはここに述べるまでもありません。

このような中、弊社では1950年の創業後まもなくこの小冊子にある「有機概念図による乳化処方設計」を考案し、多くの化粧品原料、そして乳化処方を開発してきました。

この処方設計法にはエマルションの性状（乳白・可溶化状、粘性、親油・親水性、撥水、水への分散性、消泡・起泡性）予測の他に、温度安定性に関する情報とその修正法等も含まれており、これらを上手に利用すれば、少ない乳化試験で効率よく目的の処方を開発することができます。

この小冊子は、弊社独自の「有機概念図による乳化処方設計」についてその概要を述べたものです。ぜひ内容をご一読いただき、処方研究者の方々にお役立ていただければと思います。



## より効率的な処方開発のために...



- 1. 効率的な処方開発のために ..... 1
- 2. 有機概念図について ..... 1
- 3. 乳化処方と有機概念図 ..... 3
  - 3.1 有機概念図の利用分野 ..... 3
  - 3.2 語句の説明 ..... 3
  - 3.3 既知処方の性状予測 ..... 3
  - 3.4 新規処方の開発 ..... 7
- 4. 実用例 ..... 8
  - 4.1 既知処方の有機概念図による判定 ..... 8
  - 4.2 製品仕様による処方設計 ..... 8
- 5. おわりに ..... 9

# 2 有機概念図について

## 2.1 有機概念図

弊社が独自に行ってきた「有機概念図による乳化処方設計」は、有機化合物の化学構造から「有機性値」、「無機性値」という二つの値を求め、処方に含まれる各原料を有機概念図と呼ばれる二次元平面上の点として表現する（図1）ことによってエマルションの物性、性状を視覚的にわかりやすくしたものです。有機性値は親油性（非極性）の程度、無機性値は親水性（極性）の強さと考えれば理解しやすいでしょう。この方法では乳化処方に含まれる各原料は有機概念図の平面上に表現され、各原料の位置、及び量の相互関係から処方の性質について色々な予測を得ることができます。実際の乳化処方についての性状予測方法等については3章以降に述べますので、まずは有機概念図の基本的な内容を説明します。

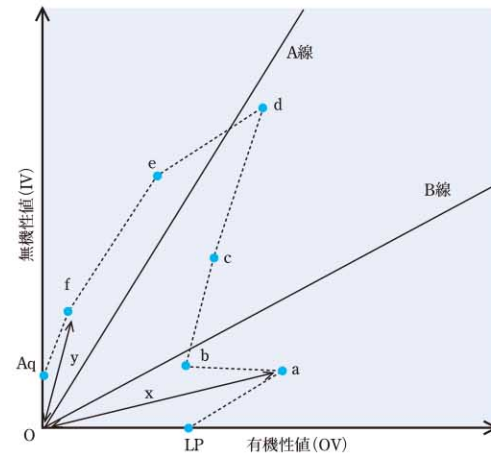


図1 有機概念図上における処方

## 有機性値・無機性値とは

### 2.2 有機性値、無機性値

有機概念図では、一つの化合物を有機性値（Organic Value=OV）、無機性値（Inorganic Value=IV）という二つの特性値の組み合わせで表現します。ある化合物の有機性値、無機性値は、化合物の基（部位）ごとにあらかじめ決められた値（付表1）を、それぞれ分子全体について合計することによって求めます。図2に計算の例を示しますが、求値方法の詳細は弊社解説冊子「有機概念図による乳化処方設計」をご覧ください。また、その都度計算を行わなくても、弊社「有機概念図用原料集」には約3000種の各種原料について有機性値、無機性値が収載されていますので、そちらもご利用ください。

表1 有機性値無機性値表

無機性基	数値	有機性基有 無機性基	数値	
	無機性値		有機性値	無機性値
軽金属	500<	R <sub>3</sub> P-OH	20	250
重金属、アミンおよびNH <sub>2</sub> 塩	400<	-O-SO <sub>3</sub> H	20	220
-SO <sub>2</sub> -NH-CO-, -N=N-NH <sub>2</sub>	260	>SO <sub>2</sub>	40	170
		二重結合	2	0

## HLB方式との相関

### 2.3 有機概念図とHLB

界面活性剤の性質を表現する方法として一般に用いられているHLB（Hydrophile-Lipophile Balance）値は、界面活性剤の親水基と親油基との性質の相対的な強さの比を表すものです。HLB方式において、原料の性質はHLB値の大小によって表現されますが、処方に数種以上の化合物が含まれる場合、数値の大小だけで処方の性質予測することは困難です。有機概念図では、界面活性剤に限らず、あらゆる化合物を二次元の有機概念図上に展開して表示することができるので、数種以上の混合物についてもそれぞれの化合物の占める点の位置関係（絶対位置、相対距離、相対位置など）から、生成する混合物の性状の予測をよりの確に得ることができます。

また、有機概念図における有機性値、無機性値の概念は、HLB方式における親水性、親油性の概念と相関が高く、式1のように有機性値と無機性値の比から求めた値をHLB値として用いることができます。

POE (10) Monostearate (EMALEX 810)  
C17H35CO2OCH2CH2(OCH2CH2)10OH  
 有機性値=38×20=760  
 無機性値=60(-COOR)+75×9+100(-OH)=835  
 (高級脂肪酸の場合、1モル目はエステル結合となる)

HLB=10×IOB ..... 式1  
 IOB=無機性値/有機性値  
 IOB: Inorganic Organic Balance

図2 計算方法例

### 2.4 有機概念図に見られる特性

有機概念図上にプロットされた各化合物の位置から分かる代表的な性質の項目を表2にまとめます。有機概念図は、乳化処方研究に必要な性質の多くを整理した形で表現できることが分かります。また、表2にある性質のほかにも、有機概念図からは様々な性質を読み取ることが出来ますので、その一例を図3、図4に示します。

表2 有機概念図から読み取れる性質

親水性 親油性	縦軸（無機性軸）に近い化合物ほど親水性が大きく、横軸（有機性軸）に近い化合物ほど親油性が大きい
分子量	同系列の化合物であれば原点からの距離が大きいほど分子量も大きくなる
溶解性	同一比率線上の化合物どうしはよく溶解し、角度が離れるにつれてお互いに溶解しにくくなる
性質	位置の近い化合物どうしは化合物としての性質に類似性がある

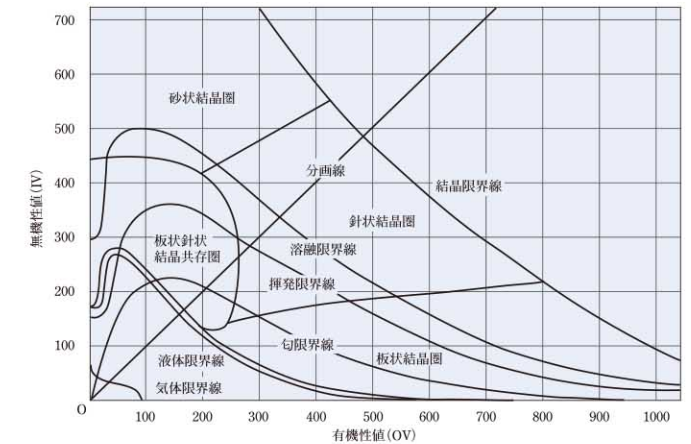
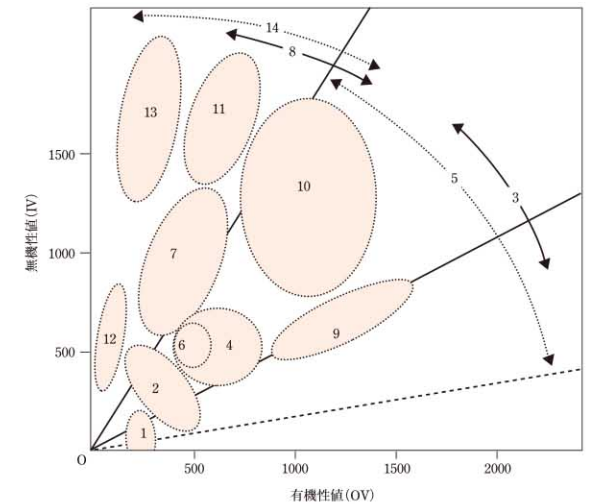


図3 有機概念図に見られる特性



No	a (約)	界面活性剤, 他	No	a (約)	染料, 他
1	0°~40°	油性溶剤	9	25°~35°	油溶性染料, 分散染料
2	10°~75°	可塑剤	10	35°~65°	有機顔料
3	23°~45°	W/O SAA (HLB3~6)	11	65°~75°	アルコール溶性染料
4	25°~55°	陽イオンSAA	12	75°~85°	浸透剤, 湿潤剤NMF
5	10°~60°	非イオンSAA	13	75°~85°	水溶性染料
6	40°~55°	起泡剤	14	55°~85°	水溶性高分子, (保護コロイド)
7	55°~75°	陰イオンSAA, 洗浄剤			
8	55°~75°	O/W SAA (HLB8~18)			

図4 有機概念図上の類似化合物

### 3 乳化処方と有機概念図

#### 3.1 有機概念図の利用分野

有機概念図では乳化処方を、油、乳化剤、水等の多成分から構成される系として、整理して理解することができます。有機概念図の乳化処方研究における利用分野はさまざま多岐にわたりますので、全てをこの小冊子に紹介することはできませんが、この小冊子ではその代表的な利用方法である「既知処方の性状予測」、「新規処方開発」、及び「既知処方の改良」について説明することにします。また、この小冊子に含まれる以上の、更に詳しい内容については、弊社の解説冊子「有機概念図による乳化処方設計」をご覧ください。

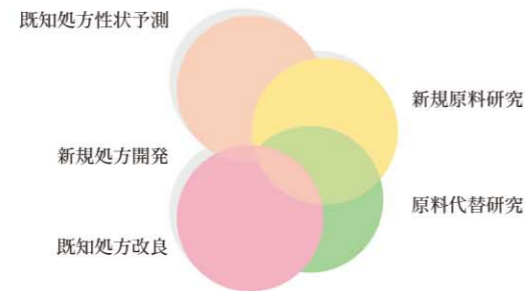


図5 利用分野

#### 3.2 語句の定義

「有機概念図による乳化処方設計」では、独自の用語が多く使われますので、予め表4に語句の定義を行います。一般の概念と少々違う部分もありますので、注意が必要です。特に、この設計法において「乳化剤」という語句は、実際のその成分の性質とは関係なく、処方中で最も極性小 ( $\alpha$ ) であるOil、及び最も極性大となる ( $\alpha = 90^\circ$ ) Aq以外の全ての成分を表します。

表4 使われる語句の説明

長い	有機概念図上、原点から特定の成分までの距離が長い
短い	有機概念図上、原点から特定の成分までの距離が短い
同一比率線	同一角度線上
A型	A線付近に乳化剤が多い乳化型
B型	B線付近に乳化剤が多い乳化型
ℓA (ロングA)	配合原料中で最も原点からの距離が長い乳化剤がA線付近にある
ℓB (ロングB)	配合原料中で最も原点からの距離が長い乳化剤がB線付近にある
O	油相 (Oil+OsAA)
W	水相 (WsAA+Aq)
SAA	乳化剤
OsAA	油相側乳化剤
WsAA	水相側乳化剤

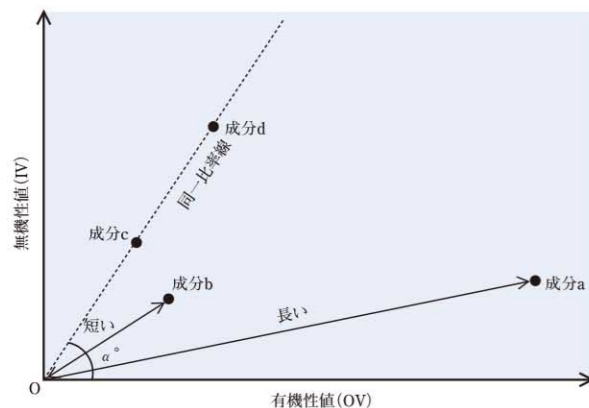


図6 有機概念図と用語

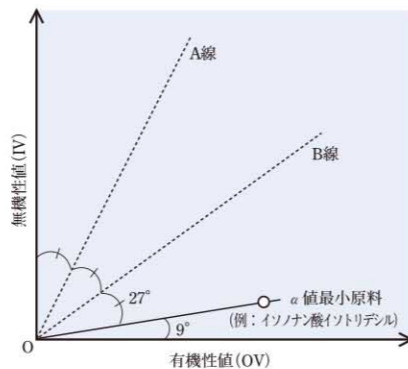


図7 三等分線

#### 既知処方の性状予測

#### 3.3 既知処方の性状予測

有機概念図による乳化処方設計では、有機概念図上にプロットされた各配合原料の位置関係や乳化剤の配合量傾向を、下に述べる一連の手順に沿って視覚的に整理してゆくことによって、既知処方があるタイプのものなのか、性状、使用感などの予測を得ることができます。性状の予測は、それぞれの処方について「乳化型」「成分配合量の傾向」「乳化剤量の傾向」「乳化剤物性の傾向」を整理し、「質と量の傾向表」にあてはめることによって行います。

##### 手順1 配合原料のプロット

配合原料の有機性値、無機性値を求め、有機概念図上にプロットします。有機性、無機性値は弊社「有機概念図用原料集」をご利用ください。

##### 手順2 三等分線 (A線、B線) の記入

乳化剤のバランスを視覚的に分かりやすくするため、処方成分中でα最小の原料と無機性軸のなす角を三等分する2本の線を記入します。また、これらの線を、それぞれA線、B線と呼びます。(図7)

#### 処方の分類

##### 手順3 成分量による乳化型の分類

乳化剤の配合量が有機概念図上のどの位置に多く、また、その配合量がどのように分布しているのかによって乳化型の分類を行います。

##### A型

A線付近に乳化剤が多く、A線付近に向かって乳化剤の配合量が多くなるエマルジョン

(図8): シャンプー等の洗い流し製品に多い

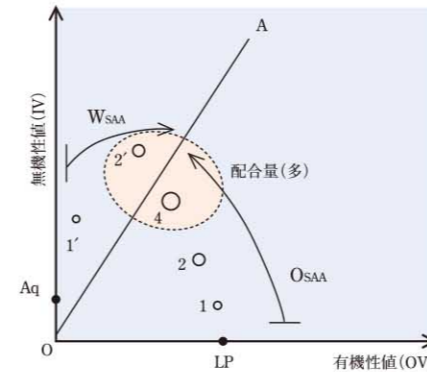


図8 A型SAA量配分傾向

##### B型

B線付近に乳化剤が多く、B線付近に向かって乳化剤の配合量が多くなるエマルジョン

(図9): クリーム等の塗布製品に多い

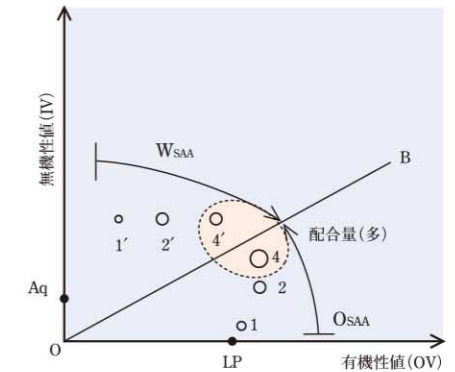


図9 B型SAA量配分傾向

##### (AC型) ... (特例)

A線付近から有機性軸、無機性軸に向かって乳化剤の配合量が多くなるエマルジョン (図10)

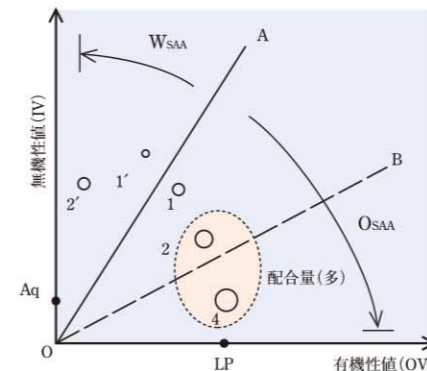


図10 AC型SAA量配分傾向

##### (BC型) ... (特例)

B線付近から有機性軸、無機性軸に向かって乳化剤の配合量が多くなるエマルジョン (図11)

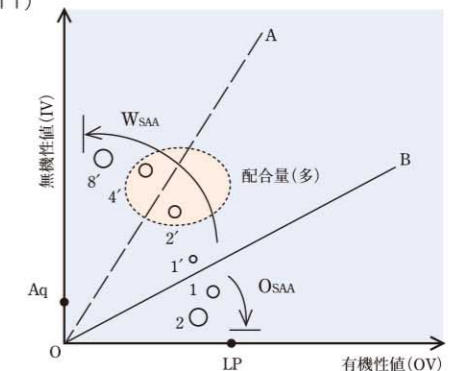


図11 BC型SAA量配分傾向

##### 手順4 配合成分の分類

手順③で行われた乳化型の判定から、下のよう油相量: 水相量 (O:W)、油相側乳化剤量: 水相側乳化剤量 (OsAA:WsAA) をwt%で求めます。

##### A型

A線付近に乳化剤が多く存在するA型処方の場合、全成分中でα値最小である油の次にα値の小さい乳化剤からA線までの領域に存在する全ての成分を油相乳化剤 (OsAA) とします。A線を越えて無機性軸 (Aq) 手前までの領域に存在する成分を水相側乳化剤 (WsAA) とします。(図10)

O相=Oil+OsAA (0°~A線)

W相=WsAA (A線~<90°)+Aq

##### B型

A型処方と同様、α値最小である成分の次のα値を有する成分からB線までに存在する成分を (OsAA) とします。B線を越えて無機性軸 (Aq) より手前までの領域に存在する成分を (WsAA) とします。(図9)

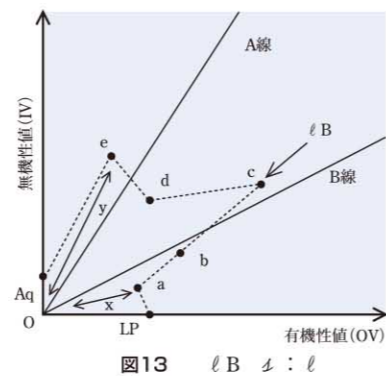
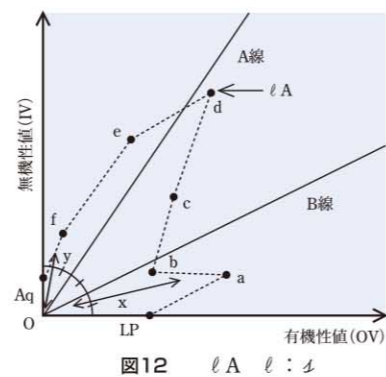
O相=Oil+OsAA (0°~B線)

W相=WsAA (B線~<90°)+Aq



手順5 成分位置による分類

- (i)  $lA$ 、 $lB$   
 原点からの距離が最も長い乳化剤の位置により、成分位置による分類を行います。処方中、最も原点から距離の長い乳化剤がA線付近にあれば「 $lA$ 」(図12)、B線付近にあれば「 $lB$ 」(図13)と分類します。(一般にA線、B線どちらか一方の付近に距離の長い乳化剤が存在するエマルションは安定になる傾向があります)
- (ii)  $d:l$ 、 $l:d$   
 油相側乳化剤 (OSAA)、水相側乳化剤 (WSAA) の中で、最も無機性軸、有機性軸に近い成分について、それぞれの原点からの距離を比較し、「 $d:l$ 」、「 $l:d$ 」の分類を行います。 $\alpha$ 最小であるOSAAの原点からの距離をx、 $\alpha$ 最大であるWSAAの原点からの距離をyとしたときに、  
 $x > y$  であれば  $l:d$  (図12)  
 $x < y$  であれば  $d:l$  (図13) と分類します。



処方の性状・使用感予測

手順6 性状・使用感の予測  
 以上、手順③~⑤で処方タイプ、及び配合成分の分類を行いました。有機概念図による乳化処方設計ではこれらの分類により、乳化物の性状・温度安定性・使用感などの予測を行います。使用感の予測は「乳化型」「成分位置による分類」、温度安定性・性状の予測は「乳化型」「成分位置による分類」「配合成分の分類とその量」から、それぞれ当社の「質と量の傾向表」によって行います。

- (i) 使用感の予測  
 使用感の予測は乳化型の分類 (A型-B型)、成分位置による分類 ( $lA-lB$ 、 $d:l-l:d$ ) の組み合わせより下の表によって行います。乳化処方一般に、下記のいずれかに分類することができます。

表5 乳化処方タイプとその特徴

乳化型	成分位置	特徴	用途	
A	$lA$	$l:d$	$lA$ のため親水性が強くと水によく分散し、起泡性がある。	洗顔料、シャンプー、化粧水
		$d:l$	全てのタイプの中で親水性、起泡性一番強い。 $d:l$ のため脱脂力が強くつっぱり、キシミ感が生じる。	洗濯洗剤、シャンプー
	$lB$	$l:d$	親水性、水に対する分散性及び起泡性等が最も弱い。一般に粘度が高く、洗顔料、シャンプー等の洗浄剤においてはエモリエント性が最も強い。	洗顔料、シャンプー、化粧水
		$d:l$	A型、 $lB$ 、 $l:d$ のタイプより親水性、起泡性等が優れている。シャンプー、洗顔料等の洗浄剤に最も良く使われている。	リンスインプンシャンプー
B	$lA$	$l:d$	基礎化粧品として一番良く使われている。 $lA$ のため温度安定性も良い。 $l:d$ のため塗布時白くならない。	乳液、クリーム
		$d:l$	基礎化粧品として汎用されている。一番温度安定性が良い。 $d:l$ のため皮膚への吸収性が良くつっぱり、塗布時白くなる。	さっぱり感ある基礎化粧品
	$lB$	$l:d$	油分感、撥水性が最も強いタイプ。	サンケア製品、W/Oエマルション
		$d:l$	B型、 $lB$ 、 $l:d$ のタイプより温度安定性が良く、使用感的に油分感はあるが撥水性は同様に強い。	サンケア製品、W/Oエマルション

質と量の傾向表について

効率の良い処方開発のためには、乳化剤、及びその量というパラメータの設定に何らかの規則性を与えることが必要です。規則性の無い実験から目的物を得るためには膨大な数の実験を行わなければなりません。そこで、当社ではミネラルオイル、ノニオン界面活性剤、及び水から成る典型的な処方において、種々のパラメータを与えて乳化試験を行い、この結果を「質と量の傾向表」としてまとめました。限定された処方における評価にも関わらず、この表は一般的な処方の性質、傾向とも非常に一致を見ることが実績として明らかになっています。

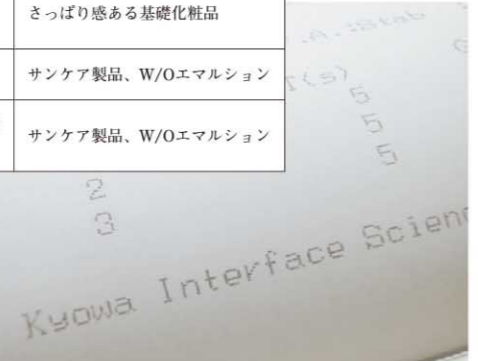
- (ii) 性状の予測  
 性状の予測は、処方の各分類 (A型-B型、 $lA-lB$ 、 $d:l-l:d$ ) に量のパラメータを加えて「質と量の傾向表」(表6)を読み取ることで行います。表において、量のパラメータとしてはO:W、OSAA:WSAA (WSAA/OSAA) を用い、それぞれの値の組み合わせが、予測を行う処方ともっとも近い欄の性状を読み取ります。「質と量の傾向表」からは処方の温度安定性傾向、粘度、性状、及び、油または水に対する希釈の傾向を読み取ることが出来ます。ここには表の抜粋と、各項目から読み取れる内容を示します。また、質と量の傾向表の全体は冊子末尾に付します。(付表2)

表6 質と量の傾向表 (抜粋)

相量	処方No.	乳化型	乳化剤の選択傾向	処方の温度安定傾向	温度安定性と長さの傾向 B-A線 (Nonion)	O:W		希釈傾向			
						85:15 (OSAA:WSAA)	80:20 (OSAA:WSAA)	Rp SAA	SAA増量		
						Oil	Aq	Oil	Aq		
O>W	1	A	$lA$ $l:d$	↑	↓ ↓	8.5:0.8 (0.1) ⑦	8.0:0.1 (0.1)	E	/	E	E
			$lB$ $l:d$	↑	↓ ↓			E	/	E	E
		B	$lA$ $l:d$	↓	↑ ↑			E	/	E	E
			$lB$ $l:d$	↓	↑ ↑	⑧ 3	5				
	2	A	$lA$ $l:d$	↑	↓ ↓	8.5:7.1 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	E	/	E	E
			$lB$ $l:d$	↑	↓ ↓			E	/	E	E
		B	$lA$ $l:d$	↓	↑ ↑			S	/	S	E
			$lB$ $l:d$	↓	↑ ↑	14	12				
	3	A	$lA$ $l:d$	↑	↓ ↓	7.1:8.5 (1.2)	6.3:8.0 (1.3)	E	/	E	E
			$lB$ $l:d$	↑	↓ ↓			E	/	E	E
		B	$lA$ $l:d$	↓	↑ ↑	12	15	S	/	S	E
			$lB$ $l:d$	↓	↑ ↑						
4	A	$lA$ $l:d$	↑	↓ ↓	0.8:8.5 (10.6)	1.0:8.0 (8.0)	E	/	E	E	
		$lB$ $l:d$	↑	↓ ↓			E	/	E	E	
	B	$lA$ $l:d$	↓	↑ ↑	5	10	E	/	E	E	
		$lB$ $l:d$	↓	↑ ↑							

- ①処方No.  
 処方No.はO:W、OSAA:WSAAの量比による処方の分類です。OSAA:WSAA量に差の大きい処方No.1、4、6、7は乳化傾向を示して乳白エマルションとなり、OSAA:WSAA量に差の少ない処方No.2、3、5、8は半可溶性傾向を示して青味のあるエマルションとなります。(一般に同じ長さの油では、 $\alpha$ が大きいほど可溶化し易く、乳化剤が長い方が可溶化効率は良くなります)
- ②乳化型  
 乳化剤配合量の最多分布位置による分類です。(3.3.手順③)
- ③乳化剤の選択傾向  
 配合乳化剤の有機概念図上に占める位置による分類です。(3.3.手順⑤)
- ④処方の温度安定傾向  
 ①~③の分類から、処方の一般的な温度安定傾向を示します。  
 ↑は高温に安定、↓は低温に安定な傾向を示します。  
 例: O:W (85:15~70:30) 処方NO.1、A型、 $lA$ の乳化物は高温に安定な傾向
- ⑤温度安定性と長さの傾向  
 A線~B線までの範囲において乳化剤の長さを変化させた場合の温度安定傾向を示します。  
 例: O:W (85:15~70:30) 処方NO.1、A型、 $lA$ の乳化物は、A線~B線間の乳化剤をより長い乳化剤にすることによって低温に安定な乳化物が得られる。(3.4.手順⑤「処方修正」参照)
- ⑥各量比  
 OSAA:WSAAは自由に設定できる量です。そこで弊社ではOSAA、WSAAのどちらか一方を油相量、あるいは水相量の

- 1/10として、1つのO:W量に対して4通りのOSAA:WSAAの変数を与え傾向をみました。  
 処方のO:W、OSAA:WSAA量により処方を分類します。  
 (詳細は「有機概念図による処方設計」をご参照下さい。)
- ⑦乳化剤量比 (OSAA/WSAA)  
 エマルション処方No.に属するかを決定する要因の一つになります。  
 また欄中のOSAA、WSAA量は基準量であり、一般に処方中のOSAA、WSAA量はこの比を保ったまま増減しています。
- ⑧量比と粘度傾向  
 O:W、OSAA:WSAAの各比率と、乳化物粘度との関係を示します。粘度度の表示は下記の目安によります。  
 O:水状 5:溶液状 10:油状  
 15:ソフト乳液状 20:乳液状  
 25:ソフトクリーム状 30:クリーム状  
 (B型において、処方の粘度は付表2 (P.10) の中央二重線に向かって高くなる傾向がある)
- ⑨希釈傾向  
 Eは乳化、Sは可溶性、/は分離を示します。この表では、各型の乳化物を水 (Aq)、またはOilで希釈したときの傾向を示しており、Rp SAA-Oil欄は乳化物をその処方に用いたOilで希釈したときの傾向、Rp SAA-Aq欄は水 (Aq) で希釈したときの傾向を示しています。SAA増量欄はSAA量をおよそ2~4倍としたときに、各型の乳化物を水 (Aq)、またはOilで希釈したときの傾向を示しています。



## 新規処方の開発

### 3.4 新規処方の開発

新規処方の開発においても、有機概念図による乳化処方設計は有用です。目的とする乳化物の性質と、商品企画から求められた既定の原料が分かっている場合は、有機概念図、及び質と量の傾向表を用いることにより、効率的に目的の乳化物を得ることが出来ます。原料を選定した後の配合実験では、油相：水相に対する $O_{SAA}:W_{SAA}$ 量比を、まずは質と量の傾向表にある量比として、乳化物の傾向を把握します。これによって、SAA量比による変化と乳化剤の選択傾向との組み合わせによる乳化状態の変化の傾向を確認しながら処方の調整を行えば、目的とする乳化物を短期間で開発することができます。下に有機概念図を用いた新規処方開発の手順を簡単に紹介します。

#### 手順1 製品仕様による乳化型の設定

一般にA型乳化物は親水性が強く、強い脱脂力と膨潤浸透作用を持っています。このため、洗浄を主目的とする乳化物にはA型が選定される傾向があります。また、A型乳化物の膨潤浸透作用は、皮膚障害や皮膚刺激の原因ともなるため、一般的に基礎化粧品には安全面を考慮してB型を選定する傾向があります。

#### 手順2 油相：水相量比、乳化剤量選定

製品の要求仕様から、質と量の傾向表を参照し、各量を仮設定します。

表7 当社推薦タイプと処方No.

洗顔フォーム	A型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.5, 7, 8)
クレンジングオイル	B型	ℓB	ℓ : ㉔	(処方No.2)
クレンジングクリーム	B型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.2, 3)
クレンジングジェル (水相量多)	A型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.5, 8)
クレンジングジェル (油相量多)	B型		ℓ : ㉔	(処方No.2, 3)
化粧水	A型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.7)
乳液	B型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.5, 6)
コールドクリーム	B型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.1, 2)
サンスクリーン	B型	ℓB	㉔ : ℓ	(処方No.6)
ボディソープ	A型	ℓA		(処方No.7)
シャンプー	A型	ℓB		(処方No.7)
リンス	B型	ℓA	ℓ : ㉔	(処方No.6)

#### 手順3 乳化剤の選択

量の仮設定と同様に、処方の特徴づける因子 ( $ℓA-ℓB$ ,  $㉔ : ℓ-ℓ : ㉔$  表5参照) に十分注意して有機概念図上に乳化剤を選択します。また、多くの処方において複数の乳化剤の併用はエマルションの安定性に影響を与えますが、その量比の設定は新たなパラメータとなって乳化試験を増やします。そこで有機概念図上による乳化処方設計では、任意の各乳化剤について、その配合比を、OilとAqから、最も配合量の多い(多くしたい)乳化剤に向かって公比2の等比数列で配分して実験を行います。(図8、9、10、11) また、同一比率線(同一 $\alpha$ )に近いものは等しい量を配分します。これは前述のとおり、ある規則性をもった処方から乳化傾向を知るためですが、エマルションの性質に大きな影響を与えるのは、むしろ乳化剤の長さ(原点からの距離)ですので、有機概念図上での乳化剤選定には長さの選定を慎重に行う必要があります。

#### 手順4 配合実験

設定された各パラメータに従い、乳化実験と評価を行います。

#### 手順5 処方の修正

一度の乳化試験と評価で目的とする乳化物が得られることは極めて稀でしょう。再試験のために処方を変更する際にも、有機概念図上にある乳化剤の位置関係と、質と量の傾向表は良い予測を与えます。特に問題となる乳化安定性と温度変化に対する安定性については、有機概念図上で下のような乳化剤の再選定を行うことで改良することができます。

##### (i) 乳化安定性

- 処方中のいずれかの乳化剤を同一比率線上(図6)で長さの違う乳化剤(～長、～短)に変更し、再試験を行います。(図14)
- A線B線どちらか一方に近い乳化剤の長さを長くします。

##### (ii) 温度安定性

質と量の傾向表を参考に、A～B線間に使用した乳化剤の長さを同一比率線上で変化させます。これにより、乳化剤の長さごと、その処方における-5～40℃の温度安定傾向の関係がわかります。(図15：この図はアニオン界面活性剤(A線～90°)の場合を示しており、ノニオン界面活性剤の場合は長さの傾向が逆転します。(長=高温安定、短=低温安定)) この手順を繰り返すことにより、効率良く乳化物を開発することができます。

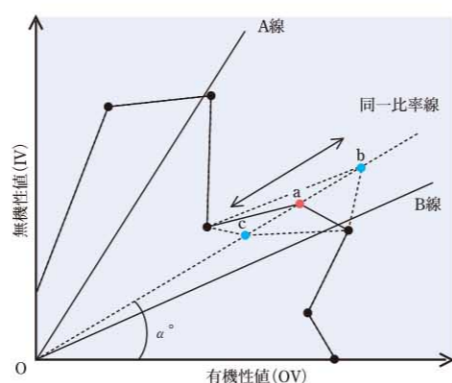


図14 同一比率線上の乳化剤選定

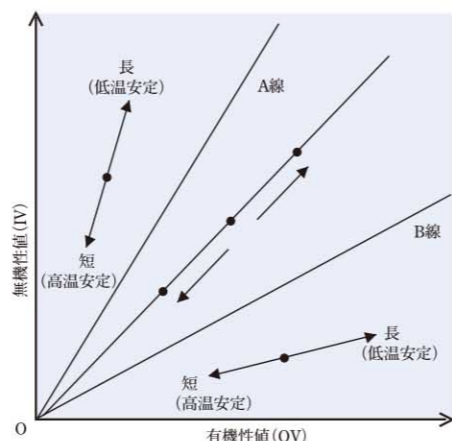


図15 乳化剤長さや温度安定性の関係

## 4 実施例

### 4.1 既知処方の有機概念図による判定

表8 既知処方

成分	wt%	OV	IV	備考
① Liquid Paraffin	28.55	300	0	Oil=28.55 O=35 OsAA=6.45
② Cetyl Octanoate	0.9	470	60	
③ Cetanol	1.85	320	100	
④ POE(2) Stearyl ether (EMALEX 602)	3.7	440	195	
⑤ POE(8) Distearate (EMALEX 400di-S)	0.85	1040	645	B線
⑥ POE(11) Stearyl ether (EMALEX 611)	0.4	800	870	
⑦ POE(20) Lauryl ether (EMALEX 720)	0.2	1040	1545	A線
⑧ PEG-600	0.1	480	1025	
⑨ Sodium-stearoyl-glutamate	0.05	460	1000	W=65 WSAA=1.6
⑩ Purified Water	63.4	0	100	
	100.0			

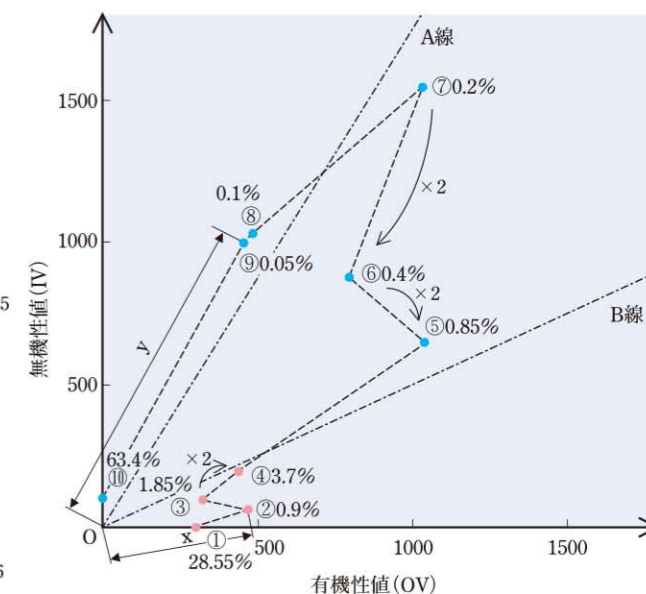


図16 処方物の概念図

表9 タイプ判別結果 (処方No.6, B型, ℓA, ㉔ : ℓ)

判定項目	結果	理由
A or B 型	B型	B線付近に乳化剤が多い
ℓA or ℓB	ℓA	処方成分中原点からの距離の最長の成分はA線付近のPOE(20) Lauryl ether (EMALEX 720) である
㉔ : ℓ or ℓ : ㉔	㉔ : ℓ	油相成分中で $\alpha$ 最小の成分②の原点からの距離が水相成分中で $\alpha$ 値最大の成分⑨の距離より短い
O : W	O=35%	0°よりB線以内①～④の4成分の和
	W=65%	B線以上より水まで⑤～⑩の6成分の和
Osaa : Wsaa	OsAA=6.45%	流動パラフィンを除いた油相の3成分の和
	WsAA=1.6%	水を除いた水相の5成分の和
処方No.	6	付表2 / OsAA : WsAA=6.45 : 1.6 (0.248) → 処方No.6 B 35 : 65 (WsAA/OsAA 1.6 : 6.45) OsAA : WsAA=6.5 : 1.6 (0.246) に近似より

以上から塗布時や白く残るソフトクリーム状のさっぱり感ある高温に安定なクリームと予想される

### 4.2 製品仕様による処方設計

マッサージクリームを例として、有機概念図による乳化処方設計の流れを紹介します。

製品要求仕様：マッサージ感が良く、マッサージ後洗い流しても、後感がしっとりとしたマッサージクリーム

#### ① 乳化型の設定 ⇒ B型処方とする

理由：肌に塗布したままの基礎化粧品であるので、皮膚に対する安全性と油により皮膚を保護するため

#### ② 油相量：水相量比 ⇒ O : W=65 : 35

理由：油が多いので (P.10 付表2) 処方No.1～4。  
O:W=85 : 15～50 : 50の範囲では、一般に70 : 30～65 : 35において粘度が高くなる。マッサージ感が良く、油分感もよくするためにO:W=65 : 35を選択。

#### ③ 乳化剤量の検討

「質と量の傾向表」(付表2) から $O_{SAA} : W_{SAA}$ を選択  
処方No.の選定 ⇒ 処方No.2 B型とする。(OsAA : 6.5%、WsAA : 3.9%)  
理由：マッサージ後洗い流しても、後感がしっとりとした製品としたいため。

(処方No.1 B (OsAA : 6.5%、WsAA : 1.6%) では洗い流し時再乳化せず、後感には油分が残りにすぎる。3B (OsAA : 3.9%、WsAA : 6.5%)、4B (OsAA : 1.6%、WsAA : 6.5%) では洗い流しが良く後感がさっぱりしてしまう。)

#### ④ 乳化剤の選択

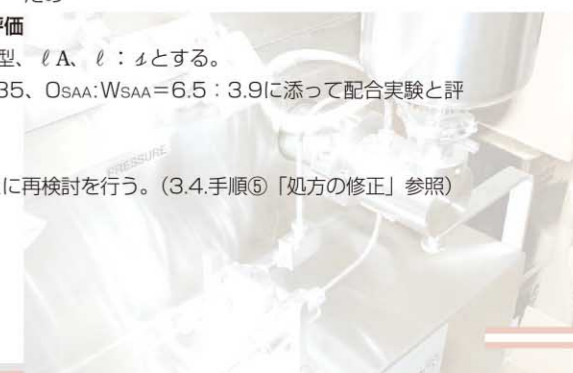
処方No.2 B型、ℓA、ℓ : ㉔とする。  
理由：ℓA 使用時の肌へのなじみをよくして、マッサージ後の流水でも落としやすくするため  
ℓ : ㉔ 洗い流し後、エモリエント性のある使用感にするため

#### ⑤ 配合実験・評価

処方No.2 B型、ℓA、ℓ : ㉔とする。  
O:W=65 : 35、OsAA:WsAA=6.5 : 3.9に添って配合実験と評価を行う。

#### ⑥ 処方修正

傾向表をもとに再検討を行う。(3.4.手順⑤「処方の修正」参照)



# 5 おわりに

この小冊子には有機概念図による乳化処方設計の概要を紹介しました。設定条件を明確にすること、そして「質と量の傾向表」を正しく理解することによって効率的な処方研究が進められることが理解されたでしょう。「有機概念図による乳化処方設計」は厳密な科学ではありません。しかしながら、多くの乳化処方開発において、実用的な実績を重ねた手法であることは、化粧品業界においても広く知られているところです。この小冊子には「有機概念図による乳化処方設計」の導入部分を紹介するにとどまりましたが、処方研究において悩んでいる研究者の方々に少しでもお役に立てたと思います。今後も弊社では「有機概念図による乳化処方設計」の発展を目指し、更なる研究を日々、重ねていきたいと考えています。

付表1 無機性基、有機性兼有無機性基表

無機性基	数値 無機性	有機性兼有無機性基	数値	
			有機性	無機性
軽金属	500<	R4P-OH	20	250
重金属, アミンおよびNH4塩	400<	-O-SO3H	20	220
-SO2-NH-CO-, -N=N-NH2	260	>SO2	40	170
=N+-OH-, -SO3H-, -NHSO2-NH	250	>SO	40	140
=S-OH-, -CONH-CONH-COMH-, SO2NH-	240	-CSOH-, -COSH	80	80
-CONH-	200	-NO2	70	70
-N=O	170	-As<, -CN	40	70
-COOH	150	-P<	20	70
ラクトン環	120	-NO	50	50
-CO-O-CO-	110	-O-NO2	60	40
-OH	100	-NC	40	40
-NH-NH-, -O-CO-O-	80	-P=P-, -NCO	30	30
-N<(-NH2, -NHφ, -Nφ2)アミン性	70	-O-NO-, -SH-, -S-	40	20
>CO	65	-I	80	10
-COOR, ナフタレン核, キノリン核*	60	-Br	60	10
>C=NH	50	=S	50	10
-O-O-	40	-Cl	40	10
-N=N-	30	-F	5	5
-O-	20	Iso分枝 →	-10	0
ベンゼン核(一般芳香単環), ピリジン核*	15	Tert分枝 →	-20	0
環(一般非芳香族単環, 角不閉)	10	>C<	20	0
-(OCH2CH2)-, 糖環-O-, 但し(常温) Cloud point以下の場合(以上のとき)	75(20)			
三重結合	3			
二重結合	2			

付表2 質と量の傾向表

〔O相は液状となる流動パラフィンと出来るだけ分布の狭いPOE-エーテル系SAAを用いた試験〕

相量	処方 No.	乳化 型	乳化剤 選択傾向	安定性 傾向	温度安定性と長さの傾向										相量		
					B-A線 (Notion)		O:W 65:35		O:W 60:40		O:W 55:45		O:W 50:50				
O>W	1	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	6.5:1.6 (0.2)	6.0:1.8 (0.3)	5.5:2.0 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	26 30										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	2	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	6.5:3.9 (0.6)	6.0:3.2 (0.5)	5.5:2.6 (0.5)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	5.0:2.1 (0.4)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	23 30 28										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	3	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	3.9:6.5 (1.7)	3.2:6.0 (1.9)	2.6:5.5 (2.1)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	17 24 28										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	4	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	1.6:6.5 (4.1)	1.8:6.0 (3.3)	2.0:5.5 (2.8)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	2.1:5.0 (2.4)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	14 20 29										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
O<W	5	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	8.5:7.1 (0.8)	8.0:7.0 (1.5)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	3 5										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	6	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	7.5:5.4 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.5:5.4 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	18 20										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	7	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	8.5:7.1 (0.8)	8.0:7.0 (1.5)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	8.0:6.3 (0.8)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	0 5										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
	8	A	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	7.1:8.5 (1.2)	7.0:4.6 (0.7)	7.5:5.4 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	7.0:4.6 (0.7)	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ
		B	ℓ:ℓ:ℓ	ℓ	OSAA:WSAA	21 25										ℓ:ℓ:ℓ	ℓ

ℓ:ℓ:ℓ(短イ)傾向に導き低温安定とする。  
ℓ:ℓ:ℓ(長イ)傾向に導き低温安定とする。