

## 近赤外分光法による毛髪中の自由水、結合水の非破壊構造分析

尾崎 幸洋

関西学院大学理工学部

### 【概要】

毛髪は、主としてケラチンタンパクからなる非常に複雑な構造を持った複合素材である。通常環境下において、毛髪は吸着水として水を保持しており、含まれる水の量は毛髪の物理的性質を大きく変化させ、毛髪の感触や外観、ヘアスタイル維持などに影響を与える。

これまで、毛髪の水分率を測定する方法としては、カール・フィッシャー法、重量法が多用されてきた。また、毛髪水分の非破壊測定法については、高周波容量式、電気伝導度法などが提案されている。しかしながら(1)水分率の絶対値評価、(2)非破壊計測、(3)他の化粧品成分に影響されない、(4)広範囲の水分測定が可能、といった条件を全て満足する毛髪水分率測定法は、これまで見当たらない。本研究の目的は、近赤外分光法を用いて非破壊的に毛髪の水分率を測定する方法を開発するとともに、毛髪中の自由水、結合水の区別あるいは構造について研究することにある。

ケラチン粉末の近赤外拡散反射スペクトルの測定を行い自由水と結合水によるバンド帰属並びに乾燥にともなう強度変化を調べた。本研究は毛髪中の自由水と結合水を非破壊的に調べるための基礎研究である。近赤外スペクトルは水分を含んだケラチン粉末を用意し、それを50真空オープン中でどんどん乾燥させることによって行った。自由水と結合水によるバンドは、7500-6100と5700-4850  $\text{cm}^{-1}$ の領域に観測された。後者の領域では、5200  $\text{cm}^{-1}$ に弱い水素結合した自由水のバンド、5030  $\text{cm}^{-1}$ 付近に強い水素結合した自由水と結合水のバンドが重なったものが観測された。

筆者は水の近赤外スペクトルについて水のスペクトルの温度変化測定からバンドの帰属を試みた。帰属には二次微分、差スペクトル、二次元相関分光法、ケモメトリックス法など非常に多くの手法を用いて徹底して解明を試みた。その結果、水(自由水)の構造はわずか2種類で、強い水素結合したものと弱い水素結合をした2種類のものである。ここではそれらをSHB(strongly hydrogen-bonded)水とWHB(weakly hydrogen-bonded)水と呼ぶことにする。WHBとSHBはそれぞれ7080と6700  $\text{cm}^{-1}$ 付近にバンドを与える。

この水のスペクトルとケラチンのスペクトルを比較するといくつかの興味深いことがわかる。水のスペクトルに比べケラチンのスペクトルは~6900  $\text{cm}^{-1}$ にもう1本余分のバンドが現れる(普通の水でも現れるがその強度は弱い)。そして重要な

ことは、 $\sim 7080$  と  $\sim 6900 \text{ cm}^{-1}$  のバンドがともに水分の蒸発とともに平行して弱くなっていくということである。したがってこれら2本のバンドはともに自由水のバンドに帰属される。おそらく  $\sim 7080 \text{ cm}^{-1}$  のバンドは自由水の WHB によるものである。 $\sim 6900 \text{ cm}^{-1}$  は普通の水では非常に弱いバンドとして観測されるものでその強度がここではかなり強くなっている点が注目される。おそらくこのバンドは自由水の SHB と WHB の中間的なもので、この相対強度が時間的に  $\sim 7080 \text{ cm}^{-1}$  バンドに比べ弱くなっていることから、二次結合水的なものではないかと考えられる。 $\sim 6580 \text{ cm}^{-1}$  のバンドは自由水の SHB と結合水のバンドが重なったものである。時間とともにこのバンドはいくぶん弱くなる。おそらく自由水がなくなる分だけ弱くなるのであろう。ただこの領域にはタンパク質によるバンドも観測されるので、結合水についてこの領域から知見を得るのはややむずかしいことがわかった。つぎに  $5350\text{-}4890 \text{ cm}^{-1}$  の領域について検討した。この領域のスペクトル変化も毛髪の水分含量変化にともなうスペクトル変化ときわめてよく似ている。この領域で  $4880 \text{ cm}^{-1}$  付近に観測されるバンドはケラチンによるものである。 $5350\text{-}4900 \text{ cm}^{-1}$  には2つのバンドが観測される。 $\sim 5190 \text{ cm}^{-1}$  付近のバンドは自由水の WHB によるもの、 $\sim 5060 \text{ cm}^{-1}$  のバンドは自由水の SHB と結合水の重なり合ったものであろう。この領域の場合も自由水と結合水を完全に分けることはできなかった。しかしこの2本のバンドの強度比をとれば自由水と結合水の含量の比を見積もることができるであろう。

$5350\text{-}4890 \text{ cm}^{-1}$  の領域の変化は、同じ領域の毛髪の変化と非常によく似ている。したがって毛髪の場合も同じ方法で自由水と結合水の相対含量を見積もることができるであろう。