

# 界面活性剤の構造解析

洗剤や分散剤に配合される界面活性剤はイオン化されやすいため、LC/MSにより感度良く分析できます。詳細な化学構造情報を得ることにより、材料設計へのフィードバックや、工程改善などに活用できます。

## 技術のポイント

- 構造解析技術
- 微量成分定量分析技術

## 【技術内容】

### ■ 界面活性剤の分析

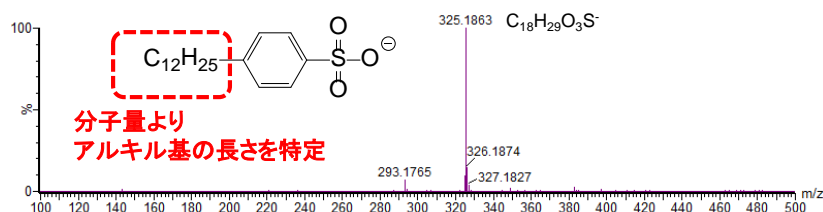
界面活性剤は分子内に疎水基と親水基を持っているため、極性物質と非極性物質を均一に混合させたり、表面張力を弱めたりする働きをします。LC/MS(液体クロマト質量)分析は、このような水溶性の高分子化合物の分析を得意としている他、精密質量分析が可能のため、アルキル基(R)やオキシエチレン基(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)の長さまで把握することが可能です。

### 界面活性剤の種類

分類	化合物例	構造
アニオン性	アルキル硫酸エステル塩	R-OSO <sub>3</sub> <sup>-</sup> Na <sup>+</sup>
	高級脂肪酸塩	R-COO <sup>-</sup> Na <sup>+</sup>
カチオン性	アルキルトリメチルアンモニウム塩	R-N <sup>+</sup> (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> Cl <sup>-</sup>
非イオン性	ポリオキシエチレンアルキルエーテル	R-(OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> H

■ 疎水基      ■ 親水基

### アルキルベンゼンスルホン酸のMSスペクトル(ESI-negative)

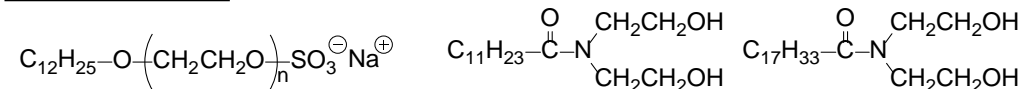


## 【応用展開】

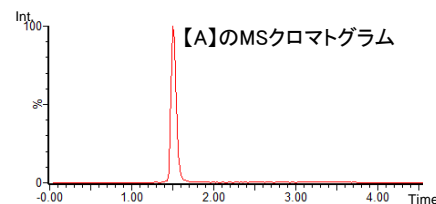
### ■ 家庭用洗剤に含まれる界面活性剤の分析

成分表には界面活性剤の詳細までは記載されていませんでしたが、LC/MS分析のイオン化手法をpositiveあるいはnegativeと切り替えることで3種類の界面活性剤が含有されていることが明らかになりました。

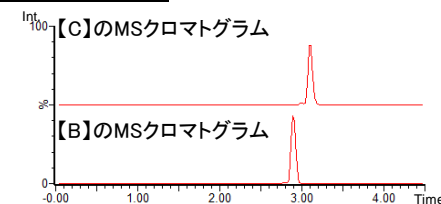
### LC/MS分析結果



### (ESI-negative)



### (ESI-positive)



検出ピーク	界面活性剤	定量値
【A】	ポリ(オキシエチレン)ドデシルエーテル硫酸エステルナトリウム	6.4 wt%
【B】	ラウリン酸ジエタノールアミド	3.1 wt%
【C】	オレイン酸ジエタノールアミド	2.5 wt%

NMR(核磁気共鳴)分析と組み合わせることで、各成分の定量も可能です。

【適用例】 洗剤、分散剤、乳化剤、帯電防止剤など